

Обратные задачи теории малых колебаний.

В.А. Марченко, В.В. Славин.

Харьков-2014

Оглавление

Введение	1
§ 1. Прямая задача теории колебаний нагруженных струн и ее решение	5
§ 2. Собственные векторы трехдиагональных эрмитовых матриц	19
§ 3. Спектральная функция трехдиагональной матрицы	31
§ 4. Процесс ортогонализации Шмидта–Сони́на	39
§ 5. Построение трехдиагональной матрицы с заданной спектральной функцией	51
§ 6. Построение трехдиагональных матриц по двум спектрам	62
§ 7. Методы решения обратных задач	77
§ 8. Малые колебания, матрица потенциальной энергии и \mathbf{L} -матрица, прямая и обратная задачи теории малых колебаний	91
§ 9. Наблюдаемые величины и вычисляемые величины. Сведение обратных задач теории малых колебаний к обратной задаче спектрального анализа эрмитовых матриц	99
§ 10. Общее решение обратной задачи спектрального анализа эрмитовых матриц	106

§ 11.	Взаимодействия частиц и системы с парным взаимодействием	112
§ 12.	Неразложимые системы, \mathbf{M} -продолжение и граф взаимодействий	118
§ 13.	Главная лемма	125
§ 14.	Построение эрмитовой матрицы $\mathbf{M} \in \mathfrak{M}(m)$ по сужению ее спектральных данных на вполне \mathbf{M} -продолжимое множество	131
§ 15.	Свойства вполне \mathbf{M} -продолжимых множеств .	138
§ 16.	Вычисление масс частиц по известной \mathbf{L} -матрице системы	147
§ 17.	Обратная задача рассеяния	157
§ 18.	Примеры вполне \mathbf{L} -продолжимых подмножеств	179
§ 19.	Численное решение обратной задачи теории малых колебаний	187
§ 20.	Анализ спектров дискретного Фурье-преобразования	189
§ 21.	Вычисление координат собственных векторов \mathbf{L} -матрицы, соответствующих наблюдаемым частицам	202
§ 22.	Численный метод ортогонализации набора векторов	207
§ 23.	Рекуррентный метод вычисления координат собственных векторов \mathbf{L} -матрицы	210
§ 24.	Примеры численного решения обратной задачи теории малых колебаний	215

Введение

Как известно, обратными задачами спектрального анализа называются задачи, в которых требуется восстановить оператор данного вида по тем или иным его спектральным характеристикам. Интерес к этим задачам в первую очередь инициирован квантовой механикой, и в настоящее время основные обратные задачи спектрального анализа решены для операторов Шредингера и их конечноразностных аналогов – матриц Якоби (В.А. Амбарцумян [10], G.Borg [11], N.Levinson [13], В.А. Марченко [1], М.Г. Крейн [6], И.М. Гельфанд, Б.М. Левитан [3], Б.М. Левитан, М.Г. Гасымов [7], Л.Д. Фадеев [9], R.Newton [15], Н.И. Ахиезер [2], А.Р. Итс, В.Б. Матвеев [5], В.Е. Захаров, А.Б. Шабат [4], Р. Deift, X. Zhou [12], Юрко [16] и др.). Об обратных задачах для операторов более широкого класса, например, для произвольных эрмитовых матриц, известно мало.

В книге рассматриваются обратные задачи теории малых колебаний систем с конечным числом степеней свободы. В этих задачах требуется из доступных наблюдений за колебаниями системы вычислить ее потенциальную энергию. При малых колебаниях потенциальная энергия является положительно определенной квадратичной формой, матрица которой называется матрицей потенциальной энергии. Таким образом, из доступных наблюдений нужно вычислить матрицу, принадлежащую очень широкому классу – множеству всех положительно определенных матриц. В этом состоит основное отличие рассматриваемых задач от обратных задач для дискретных аналогов оператора Шредингера, в которых рассматриваются только трехдиагональные эрмитовы матрицы. Без ограничения общности можно считать, что рассматриваемые системы состоят из конечного множества материальных точек (частиц) α, β, \dots с массами m_α, m_β, \dots , взаимодействующих друг с другом и с внешним полем (например, молекулы). Предполагается, что для наблюдений доступны не все частицы, а только их небольшая часть. Из наблюдений за колебаниями этой части частиц нужно вычислить приведенную матрицу потенциальной энергии (\mathbf{L} -

матрицу системы), элементы которой $\mathbf{L}(\alpha, \beta)$ связаны с элементами матрицы потенциальной энергии $\mathbf{U}(\alpha, \beta)$ формулой $\mathbf{L}(\alpha, \beta) = \mathbf{U}(\alpha, \beta)(m_\alpha m_\beta)^{-1/2}$ и, по возможности, массы частиц.

Для удобства читателей в первых семи параграфах подробно изложены хорошо известные результаты обратных задач для трехдиагональных матриц – матриц Якоби. В последующих десяти параграфах (8-17) найдены необходимые и достаточные условия, которым должно удовлетворять подмножество наблюдаемых частиц для того, чтобы из наблюдений за частицами этого подмножества можно было однозначно вычислить \mathbf{L} -матрицу системы, и дан метод ее вычисления. Приведены характерные примеры и дано полное описание класса матриц, которые можно найти из наблюдений за колебаниями частиц данного подмножества, содержащего q -частиц. Например, если подмножество состоит из одной частицы ($q = 1$), то можно вычислить только трехдиагональные матрицы. Рассмотрен также вопрос о вычислении масс частиц. В § 17. дано решение обратной задачи рассеяния. Частично результаты этих параграфов были ранее опубликованы в работе [14]. Последние шесть параграфов посвящены численным методам решения обратной задачи теории малых колебаний. Чтобы сделать их доступными для возможно более широкого круга читателей, материал, относящийся к численным аспектам решения, изложен достаточно подробно. Материал включает также ряд моментов, которые, по нашему мнению, могут представлять интерес и для специалистов в области вычислительной математики. Рассмотрены конкретные примеры, позволяющие детально разобрать особенности применения описываемого численного метода.

Авторы выражают искреннюю благодарность К.В. Маслову, Т.В. Овсянниковой, В.И. Белану, Э.В. Обрядовой и А.А. Кривчикову за оказанную ими большую помощь при подготовке книги к печати.

§ 1. Прямая задача теории колебаний нагруженных струн и ее решение

Рассмотрим механическую систему, состоящую из N точечных масс m_1, m_2, \dots, m_N , вертикально подвешенных между двумя опорами так, что каждая масса m_i соединена с ближайшими соседями m_{i-1}, m_{i+1} невесомыми пружинами с жесткостями k_{i-1} и k_i , а верхняя (m_1) и нижняя (m_N) массы прикреплены к пружинам с жесткостями k_0, k_N , концы которых неподвижно закреплены на опорах (рис. 1).

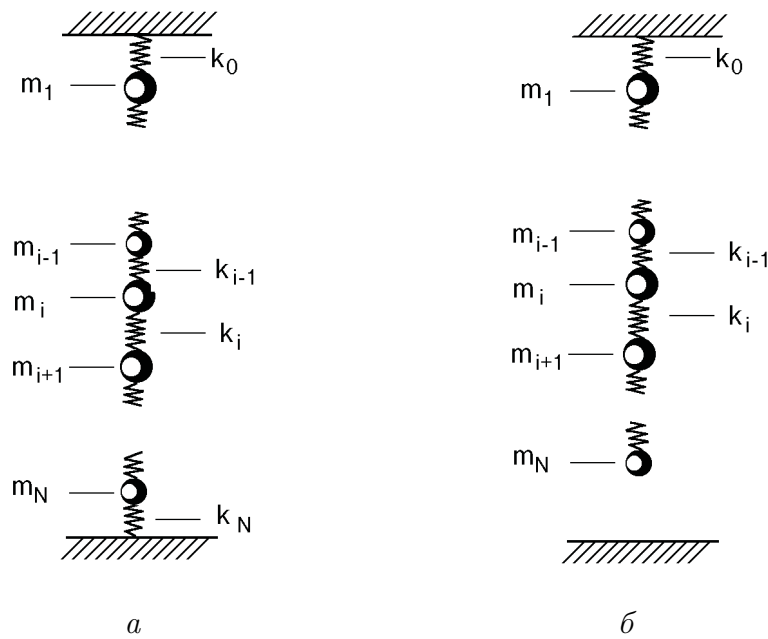


Рис. 1:

Следуя Лагранжу будем называть такую систему струной, на-

груженной массами m_i . Для описания продольных колебаний этой струны введем прямоугольную систему координат, направив ось z вертикально вверх через обе точки закрепления, координаты которых (т.е. координаты опор) обозначим через $Z(0)$ и $Z(N + 1)$. При продольных колебаниях в любой момент времени t состояние струны полностью описывается координатами $Z(i) = Z(i, t)$ и скоростями $\dot{Z}(i) = \frac{d}{dt}Z(i, t)$ масс m_i , $i = 1, 2, \dots, N$. Найдем силы, действующие на массы при любом их расположении. На массу m_i действуют силы упругости прикрепленных к ней пружин и силы гравитации $m_i g$, равнодействующая которых в состоянии равновесия равна нулю. Обозначим через $Z^0(i)$ координаты масс и опор в состоянии равновесия и через $z(i) = z(i, t) = Z(i, t) - Z^0(i)$ их отклонения от равновесного состояния. Изменение длины пружины, соединяющей массы m_i и m_{i+1} , по сравнению с ее длиной в равновесном состоянии равно

$$Z(i, t) - Z(i + 1, t) - (Z^0(i) - Z^0(i + 1)) = z(i, t) - z(i + 1, t),$$

а, согласно закону Гука, изменение силы упругости, действующей на массы m_i и m_{i+1} , соответственно равно $-k_i(z(i, t) - z(i + 1, t))$ и $k_i(z(i, t) - z(i + 1, t))$. Поэтому равнодействующая всех сил, действующих на массу m_i , равна

$$\begin{aligned} F_i &= k_{i-1}(z(i - 1, t) - z(i, t)) - k_i(z(i, t) - z(i + 1, t)) \\ &= k_{i-1}z(i - 1, t) - (k_{i-1} + k_i)z(i, t) + k_i z(i + 1, t). \end{aligned}$$

Если массы колеблются в среде, оказывающей сопротивление движению, пропорциональное их скоростям, то суммарная сила, действующая на массу m_i , равна $F_i - r_i \dot{Z}(i)$ ($r_i \geq 0$), и, согласно второму закону Ньютона, ее уравнение движения имеет вид $m_i \ddot{Z}(i) = F_i - r_i \dot{Z}(i)$. Поскольку

$$\dot{Z}(i) = \frac{d}{dt}(Z^0(i) + z(i)) = \frac{d}{dt}z(i) = \dot{z}(i),$$

эти уравнениям эквивалентны такой системе дифференциальных уравнений относительно функций $z(i) = z(i, t)$ ($i = 1, 2, \dots, N$):

$$\begin{aligned}
 m_1 \ddot{z}(1) + (k_0 + k_1)z(1) - k_1 z(2) + r_1 \dot{z}(1) &= k_0 z(0), \\
 \vdots \\
 m_i \ddot{z}(i) - k_{i-1} z(i-1) + (k_{i-1} + k_i)z(i) - k_i z(i+1) + r_i \dot{z}(i) &= 0, \\
 \vdots \\
 m_N \ddot{z}(N) - k_{N-1} z(N-1) + (k_{N-1} + k_N)z(N) + r_N \dot{z}(N) &= k_N z(N+1),
 \end{aligned} \tag{1.1}$$

где $i = 2, 3, \dots, N-1$.

Прямой задачей теории колебаний нагруженных струн называется задача, в которой требуется, зная механические характеристики струны (т.е. массы m_i и коэффициенты жесткости k_i) найти ее колебания, вызванные отклонением

$$z(i, 0) = \alpha_i, \quad \dot{z}(i, 0) = \beta_i \tag{1.1'}$$

от положения равновесия в начальный момент времени, известными внешними силами и силами сопротивления.

Очевидно, что эта задача сводится к интегрированию системы линейных дифференциальных уравнений (1.1) при начальных данных (1.1').

В правых частях этих уравнений стоят внешние силы, $k_0 z(0, t)$ и $k_N z(N+1, t)$, возникающие вследствие движения опор.

Колебания называются вынужденными, если эти внешние силы отличны от нуля. Если внешние силы отсутствуют (опоры неподвижны), то колебания называются свободными. Свободные колебания, происходящие в среде не оказывающей сопротивления движению масс ($r_k = 0$, $k = 1, 2, \dots, N$) называются собственными.

В широком смысле слова обратными задачами колебаний называются задачи, в которых требуется извлечь максимальную информацию о механических характеристиках струны, то есть о массах

m_i и коэффициентах жесткости k_i , из доступных наблюдений за ее колебаниями (желательно из минимального объема доступных наблюдений).

Из уравнений (1.1) видно, что собственные колебания ($z(0, t) = z(N + 1, t) \equiv 0$, $r_i = 0$, $i = 1, 2, \dots, N$) зависят только от механических характеристик струны и начальных данных. Следовательно любые наблюдения за собственными колебаниями содержат в неявном виде некоторую информацию о механических характеристиках струны, не искажаемую внешними силами и силами сопротивления среды. Поэтому при решении обратных задач основную роль играют наблюдения за собственными колебаниями, и в дальнейшем рассматриваются только они.

Перепишем систему уравнений (1.1) в более удобном виде, используя такие обозначения:

$H(D)$ — гильбертово пространство функций $\mathbf{f} = f(d)$, заданных на конечном множестве D , с обычным скалярным произведением

$$(\mathbf{f}, \mathbf{g}) = \sum_{d \in D} f(d) \overline{g(d)}$$

и каноническим базисом

$$\mathbf{e}_p = e_p(d) = \delta_d^p = \begin{cases} 1, & d = p, \\ 0, & d \neq p, \end{cases}$$

занумерованным точками p множества D .

Функции $\mathbf{f} = f(d)$ называются также векторами $\mathbf{f} = \sum_{p \in D} f(p) \mathbf{e}_p$ пространства $H(D)$.

Действующие в пространстве операторы и их матрицы в каноническом базисе обозначаются одинаковыми буквами.

Отрезок последовательности целых чисел от 1 до N обозначается через $[N]$, то есть $[N] = 1, 2, \dots, N$.

Гильбертово пространство $H([N])$ используется при рассмотрении колебаний N точечных масс, занумерованных числами множества $[N]$, например, колебаний нагруженных струн.

Обозначим через \mathbf{K} оператор с трехдиагональной матрицей

$$\mathbf{K} = \begin{pmatrix} k_0 + k_1 & -k_1 & \cdots & 0 \\ -k_1 & k_1 + k_2 & -k_2 & \\ & & \ddots & -k_{N-1} \\ 0 & \cdots & -k_{N-1} & k_{N-1} + k_N \end{pmatrix}, \quad (1.2)$$

через \mathbf{M} , \mathbf{R} – операторы с диагональными матрицами

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} m_1 & \cdots & 0 \\ & m_2 & \\ & & \ddots \\ 0 & \cdots & & m_N \end{pmatrix}, \quad \mathbf{R} = \begin{pmatrix} r_1 & \cdots & 0 \\ & r_2 & \\ & & \ddots \\ 0 & \cdots & & r_N \end{pmatrix} \quad (1.2')$$

и через $\mathbf{z}(t)$ – вектор-функцию

$$\mathbf{z}(t) = \sum_{i \in [N]} z(i, t) \mathbf{e}_i. \quad (1.2'')$$

В этих обозначениях система (1.1) и начальные данные переписутся так:

$$\mathbf{M}\dot{\mathbf{z}}(t) + \mathbf{K}\mathbf{z}(t) + \mathbf{R}\dot{\mathbf{z}}(t) = \mathbf{f}(t), \quad (1.3)$$

$$\mathbf{z}(0) = \boldsymbol{\alpha} = \sum_{i \in [N]} \alpha_i \mathbf{e}_i; \quad \dot{\mathbf{z}}(0) = \boldsymbol{\beta} = \sum_{i \in [N]} \beta_i \mathbf{e}_i,$$

где

$$\mathbf{f}(t) = k_0 z(0, t) \mathbf{e}_1 + k_N z(N+1, t) \mathbf{e}_N. \quad (1.3')$$

Умножив обе части уравнения (1.3) слева на $\mathbf{M}^{-1/2}$

$$\mathbf{M}^{1/2}\ddot{\mathbf{z}}(t) + \mathbf{M}^{-1/2}\mathbf{K}\mathbf{z}(t) + \mathbf{M}^{-1/2}\mathbf{R}\dot{\mathbf{z}}(t) = \mathbf{M}^{-1/2}\mathbf{f}(t),$$

и положив

$$\boldsymbol{\xi}(t) = \mathbf{M}^{1/2}\mathbf{z}(t), \quad \mathbf{L} = \mathbf{M}^{-1/2}\mathbf{K}\mathbf{M}^{-1/2}, \quad \mathbf{Q} = \mathbf{M}^{-1/2}\mathbf{R}\mathbf{M}^{-1/2} \quad (1.4)$$

получим эквивалентное ему уравнение

$$\ddot{\boldsymbol{\xi}}(t) + \mathbf{L}\boldsymbol{\xi}(t) + \mathbf{Q}\dot{\boldsymbol{\xi}}(t) = \mathbf{M}^{-1/2}\mathbf{f}(t) \quad (1.5)$$

относительно вектор-функции $\boldsymbol{\xi}(t) = \sum_{i \in [N]} \xi(i, t)\mathbf{e}_i$, $\xi(i, t) = m_i^{1/2}z(i, t)$ с начальными данными

$$\boldsymbol{\xi}(0) = \mathbf{M}^{1/2}\mathbf{z}(0) = \sum_{i \in [N]} m_i^{1/2}\alpha_i\mathbf{e}_i, \quad \dot{\boldsymbol{\xi}}(0) = \mathbf{M}^{1/2}\dot{\mathbf{z}}(0) = \sum_{i \in [N]} m_i^{1/2}\beta_i\mathbf{e}_i, \quad (1.5')$$

где

$$\mathbf{M}^{-1/2}\mathbf{f}(t) = \frac{k_0}{\sqrt{m_1}}z(0, t)\mathbf{e}_1 + \frac{k_1}{\sqrt{m_n}}z(N+1, t)\mathbf{e}_N. \quad (1.5'')$$

Таким образом, вектор-функция $\mathbf{z}(t) = \mathbf{M}^{-1/2}\boldsymbol{\xi}(t)$ описывает вынужденные колебания струны, если $\boldsymbol{\xi}(t)$ является решением уравнения (1.5) при начальных данных (1.5'), и собственные колебания этой струны, если $\boldsymbol{\xi}(t)$ является решением однородного уравнения

$$\ddot{\boldsymbol{\xi}}(t) + \mathbf{L}\boldsymbol{\xi}(t) = 0 \quad (1.6)$$

при тех же начальных данных.

Решения уравнений (1.5) и (1.6) находятся методами линейной алгебры, становление которой в значительной степени обязано именно задачам о малых колебаниях вблизи положения равновесия механических систем с конечным числом степеней свободы.

Согласно (1.2), (1.2') и (1.4)

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} a_1 & -b_1 & \cdots & 0 \\ -b_1 & a_2 & -b_2 & \\ & -b_1 & \ddots & -b_{N-1} \\ 0 & \cdots & -b_{N_1} & a_N \end{pmatrix}, \quad \mathbf{Q} = \begin{pmatrix} q_1 & \cdots & & 0 \\ & q_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & \cdots & & q_N \end{pmatrix}, \quad (1.7)$$

где

$$a_i = \frac{k_{i-1} + k_i}{m_i} > 0, \quad b_i = \frac{k_i}{\sqrt{m_i m_{i+1}}} > 0, \quad q_i = \frac{r_i}{m_i} \geq 0. \quad (1.7')$$

Матрицы \mathbf{L} и \mathbf{Q} эрмитовы и вещественны, причем матрица \mathbf{Q} неотрицательна, то есть $(\mathbf{Q}\mathbf{f}, \mathbf{f}) = \sum_{i \in [N]} q_i f_i \overline{f(i)} \geq 0$ при всех $\mathbf{f} \neq 0$, а матрица \mathbf{L} трехдиагональна и строго положительна, то есть $(\mathbf{L}\mathbf{f}, \mathbf{f}) > 0$ при всех $\mathbf{f} \neq 0$.

Действительно, согласно (1.2)

$$\begin{aligned} (\mathbf{K}\mathbf{f}, \mathbf{f}) &= [(k_0 + k_1)f(1) - k_1 f(2)] \overline{f(1)} \\ &\quad + [-k_1 f(1) + (k_1 + k_2)f(2) - k_2 f(3)] \overline{f(2)} + \dots \\ &\quad + [-k_{N-2} f(N-2) + (k_{N-2} + k_{N-1})f(N-1) - \\ &\quad k_{N-1} f(N)] \overline{f(N-1)} \\ &\quad + [-k_{N-1} f(N-1) + (k_{N-1} + k_N)f(N)] \overline{f(N)} \\ &= k_0 |f(1)|^2 + \sum_{j=1}^{N-1} k_j |f(j) - f(j+1)|^2 + k_N |f(N)|^2, \quad (1.8) \end{aligned}$$

откуда следует, что скалярное произведение $(\mathbf{K}\mathbf{f}, \mathbf{f})$ неотрицательно при всех $\mathbf{f} \in \mathbb{H}([N])$ и обращается в ноль только когда $f(1) = f(2) = \dots = f(N) = 0$, то есть $(\mathbf{K}\mathbf{f}, \mathbf{f}) > 0$ при всех $\mathbf{f} \neq 0$.

Так как $(\mathbf{L}\mathbf{f}, \mathbf{f}) = (\mathbf{M}^{-1/2} \mathbf{K} \mathbf{M}^{1/2} \mathbf{f}, \mathbf{f}) = (\mathbf{K} \mathbf{M}^{-1/2} \mathbf{f}, \mathbf{M}^{-1/2} \mathbf{f}) > 0$ если \mathbf{f} , а значит и $\mathbf{M}^{-1/2} \mathbf{f}$ отличны от нуля, то матрица \mathbf{L} одновременно с \mathbf{K} строго положительные.

Из формул (1.7), (1.7') видно, что изменение жесткости k_0 верхней пружины влечет за собой изменение только верхнего левого элемента a_1 матрицы \mathbf{L} , а изменение жесткости k_N нижней пружины влечет за собой изменение только нижнего правого элемента a_N . В частности, если убрать нижнюю пружину, т.е. положить $k_N = 0$ (рис. 1б), то колебание полученной системы будет описываться тем же уравнением (1.4) с матрицей $\tilde{\mathbf{L}}$, отличающейся от матрицы (1.5)

только величиной элемента a_N . При этом согласно (1.8) оператор $\tilde{\mathbf{L}}$ остается положительно определенным.

Каждый самосопряженный оператор, действующий в пространстве $\mathbf{H}([N])$, имеет N собственных векторов, которые образуют ортогональный базис этого пространства. Обозначим через

$$\mathbf{p}(\lambda_j) = (p(1, \lambda_j), p(2, \lambda_j), \dots, p(N, \lambda_j)), \quad j = 1, 2, \dots, N$$

ортогональный базис, состоящий из собственных векторов оператора \mathbf{L} :

$$(\mathbf{p}(\lambda_j), \mathbf{p}(\lambda_k)) = \begin{cases} 0 & j \neq k \\ \|\mathbf{p}(\lambda_k)\|^2 & j = k \end{cases}; \quad L\mathbf{p}(\lambda_j) = \lambda_j\mathbf{p}(\lambda_j),$$

и разложим искомое решение уравнения (1.6) по этому базису:

$$\boldsymbol{\xi}(t) = \sum_{j=1}^N u_j(t)\mathbf{p}(\lambda_j); \quad u_j(t) = \|\mathbf{p}(\lambda_j)\|^{-2}(\boldsymbol{\xi}(t), \mathbf{p}(\lambda_j)).$$

Подставляя полученные выражения в уравнение (1.6) находим, что:

$$-\ddot{\boldsymbol{\xi}}(t) = -\sum_{j=1}^N \ddot{u}_j(t)\mathbf{p}(\lambda_j) = \sum_{j=1}^N u_j(t)L\mathbf{p}(\lambda_j) = \sum_{j=1}^N \lambda_j u_j(t)\mathbf{p}(\lambda_j),$$

откуда следует, что коэффициенты $c_j(t)$ являются решениями уравнений $\ddot{c}_j(t) = -\lambda(j)c_j(t)$ при начальных данных

$$c_j(0) = \|\mathbf{p}(\lambda_j)\|^{-2}(\boldsymbol{\xi}(0), \mathbf{p}(\lambda_j)), \quad \dot{c}_j(0) = \|\mathbf{p}(\lambda_j)\|^{-2}(\dot{\boldsymbol{\xi}}(0), \mathbf{p}(\lambda_j)),$$

то есть

$$c_j(t) = \|\mathbf{p}(\lambda_j)\|^{-2} \left\{ (\boldsymbol{\xi}(0), \mathbf{p}(\lambda_j)) \cos \sqrt{\lambda_j}t + (\dot{\boldsymbol{\xi}}(0), \mathbf{p}(\lambda_j)) \frac{\sin \sqrt{\lambda_j}t}{\sqrt{\lambda_j}} \right\}.$$

Поэтому решения уравнения (1.6) выражаются через собственные значения λ_j и ортонормированные собственные векторы $\|\mathbf{p}(\lambda_j)\|^{-1} \mathbf{p}(\lambda_j)$ матрицы \mathbf{L} формулой

$$\boldsymbol{\xi}(t) = \sum_{j=1}^N \left\{ (\boldsymbol{\xi}(0), \mathbf{p}(\lambda_j)) \cos \sqrt{\lambda_j} t + (\dot{\boldsymbol{\xi}}(0), \mathbf{p}(\lambda_j)) \frac{\sin \sqrt{\lambda_j} t}{\sqrt{\lambda_j}} \right\} \frac{\mathbf{p}(\lambda_j)}{\|\mathbf{p}(\lambda_j)\|^2}. \quad (1.9)$$

Следовательно собственные колебания струны описывают вектор-функции

$$\begin{aligned} \mathbf{z}(t) = \mathbf{M}^{-1/2} \boldsymbol{\xi}(t) = \sum_{j=1}^N \left\{ (\mathbf{M}^{1/2} \mathbf{z}(0), \mathbf{p}(\lambda_j)) \cos \sqrt{\lambda_j} t \right. \\ \left. + (\mathbf{M}^{1/2} \dot{\mathbf{z}}(0), \mathbf{p}(\lambda_j)) \frac{\sin \sqrt{\lambda_j} t}{\sqrt{\lambda_j}} \right\} \frac{\mathbf{M}^{-1/2} \mathbf{p}(\lambda_j)}{\|\mathbf{p}(\lambda_j)\|^2}. \end{aligned} \quad (1.10)$$

В частности, если в начальный момент струна была выведена из равновесия ударом по массе m_1 , сообщившим ей скорость v (т.е. $\mathbf{z}(0) = 0$, $\dot{\mathbf{z}}(0) = v \mathbf{e}_1$), то

$$\mathbf{z}(t) = v \sum_{j=1}^N m_1^{1/2} \frac{p(1, \lambda_j)}{p(1, \lambda_j)} \frac{\sin \sqrt{\lambda_j} t}{\sqrt{\lambda_j}} \frac{\mathbf{M}^{-1/2} \mathbf{p}(\lambda_j)}{\|\mathbf{p}(\lambda_j)\|}$$

и колебания этой массы описывает функция

$$z(1, t) = v \sum_{j=1}^N \frac{|p(1, \lambda_j)|^2}{\|\mathbf{p}(\lambda_j)\|^2} \frac{\sin \sqrt{\lambda_j} t}{\sqrt{\lambda_j}} = v \sum_{j=1}^N |\varphi(1, \lambda_j)|^2 \frac{\sin \sqrt{\lambda_j} t}{\sqrt{\lambda_j}},$$

где $\varphi(i, \lambda_j) = \frac{p(i, \lambda_j)}{\|\mathbf{p}(\lambda_j)\|}$, то есть векторы

$$\sum_{i \in [N]} \varphi(i, \lambda_j) \mathbf{e}_i, \quad j = 1, 2, \dots, N$$

образуют полный набор ортонормированных собственных векторов матрицы \mathbf{L} .

Таким образом, если экспериментировать можно только с массой m_1 , то есть выводить струну из равновесия можно только ударом по этой массе, а затем наблюдать колебания только этой уже массы m_1 , то наблюдаемой является только функция

$$z(1, t) = v \sum_{j=1}^N |\varphi(1, \lambda_j)|^2 \frac{\sin \sqrt{\lambda_j} t}{\sqrt{\lambda_j}},$$

однозначно (с точностью до несущественного множителя v) определяется матрицей \mathbf{L} .

В этом случае обратная задача теории колебаний состоит в отыскании матрицы \mathbf{L} по известной функции $z(1, t)$.

В дальнейшем эту матрицу мы будем называть \mathbf{L} -матрицей.

Физические характеристики струны связаны с элементами \mathbf{L} -матрицы равенствами (1.7'), но однозначно не могут быть найдены.

Заметим, что у собственных векторов \mathbf{L} -матрицы первая координата отлична от нуля. Действительно, если $\mathbf{L}\mathbf{f} = \lambda\mathbf{f}$, то согласно (1.7)

$$\begin{aligned} a_1 f(1) - b_1 f(2) &= \lambda f(1), \\ -b_1 f(1) + a_2 f(2) - b_2 f(3) &= \lambda f(2), \\ &\vdots \\ -b_{i-1} f(i-1) + a_i f(i) - b_i f(i+1) &= \lambda f(i), \\ &\vdots \end{aligned}$$

где $b_i \neq 0$. Поэтому, если $f(1) = 0$, то из первого равенства следует, что $f(2) = 0$, затем из второго следует, что $f(3) = 0$ и т.д., то есть вектор $\mathbf{f} = 0$ и не может быть собственным.

Отсюда следует, что у \mathbf{L} -матрицы все собственные значения различны, так как в противном случае существует два ортогональных друг к другу собственных вектора с одним и тем же собственным значением λ , из которых можно составить ненулевую линейную

комбинацию с нулевой первой координатой. Эта линейная комбинация, очевидно, является собственным вектором с тем же собственным значением λ и нулевой первой координатой, что невозможно.

Кроме того, из положительности \mathbf{L} -матрицы следует, что все ее собственные значения положительны. Следовательно числа $\omega_j = \sqrt{\lambda_j}$ тоже положительны и различны. Это позволяет наблюдаемую функцию переписать в таком виде

$$z(1, t) = v \sum_{j=1}^N |\varphi(1, \lambda_j)|^2 \frac{\sin \omega_j t}{\omega_j}, \quad (1.11)$$

где $|\varphi(1, \lambda_j)|^2 > 0$, $\omega_j = \sqrt{\lambda_j} > 0$, $j = 1, 2, \dots, N$. Числа

$$0 < \omega_1 < \omega_2 < \dots < \omega_N$$

называются частотами собственных колебаний.

Определение 1. *Спектральными данными \mathbf{L} -матрицы называется множество ее собственных значений $0 < \lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_N < \infty$ (спектр) и множество соответствующих ортонормированных собственных функций $\varphi(\lambda_j) = \sum_{i=1}^N \varphi(i, \lambda(j)) \mathbf{e}_i$, точнее множество их координат $\varphi(i, \lambda(j))$ в каноническом базисе.*

Иными словами, спектральные данные \mathbf{L} -матрицы состоят из диагональной матрицы $\mathbf{\Lambda} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & \dots & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & \dots & \lambda_N \end{pmatrix}$, составленной из ее собственных значений, и унитарной матрицы $\mathbf{U} = (u(i, k))$, $u(i, k) = \varphi(i, \lambda(k))$, составленной из координат ее ортонормированных собственных векторов.

Заметим, что спектр, а значит и диагональная матрица $\mathbf{\Lambda}$, определяются \mathbf{L} -матрицей однозначно, а ортонормированные собственные векторы определяются с точностью до произвольных множителей по модулю равных единице, так что унитарная матрица \mathbf{U}

определяется с точностью до произвольной диагональной унитарной матрицы, на которую матрицу \mathbf{U} можно умножать справа.

Поэтому спектральные данные не определяются однозначно \mathbf{L} -матрицей, но сама \mathbf{L} -матрица и ее элементы $L(i, k)$ однозначно определяются любыми ее спектральными данными по формулам

$$\mathbf{L} = \mathbf{U}\Lambda\mathbf{U}^*; \quad L(i, k) = \sum_{j=1}^N \lambda(j) \varphi(i, \lambda(j)) \overline{\varphi(k, \lambda(j))}.$$

Следовательно обратная задача о нахождении \mathbf{L} -матрицы по наблюдаемой функции $z(1, t)$ равносильна нахождению ее спектральных данных по этой функции.

Условимся все величины, получаемые из наблюдаемой функции $z(1, t)$, $0 < t < \infty$ явно описанными математическими операциями называть вычислимыми. Например, производная $\dot{z}(1, 0)$ вычислима, а так как согласно (1.11)

$$\dot{z}(1, 0) = v \sum_{j=1}^N |\varphi(1, \lambda(j))|^2 \cos \omega_j t|_{t=0} = v \sum_{j=1}^N |\varphi(1, \lambda(j))|^2,$$

где в силу унитарности матрицы $(\varphi(i, \lambda(j)))$, $i, j \in [N]$,

$$\sum_{j=1}^N |\varphi(i, \lambda(j))|^2 = 1,$$

то скорость $v = \dot{z}(1, 0)$ и вычислима.

Лемма 1. *Собственные значения $\lambda(j)$ и первая координата $\varphi(1, \lambda(j))$ ортонормированных собственных функций \mathbf{L} -матрицы вычислимы.*

Д о к а з а т е л ь с т в о. Согласно (1.11)

$$\begin{aligned}
 S_T(\omega) &= \frac{2}{T} \int_0^T \frac{z(1,t)}{\dot{z}(1,0)} \omega \sin \omega t dt = \\
 &= \sum_{j=1}^N |\varphi(1, \lambda(j))|^2 \frac{\omega}{\omega_j T} \int_0^T 2 \sin \omega t \sin \omega_j t dt = \\
 &= \sum_{j=1}^N |\varphi(1, \lambda(j))|^2 \frac{\omega}{\omega_j} \left\{ \frac{\sin(\omega - \omega_j)T}{(\omega - \omega_j)T} - \frac{\sin(\omega + \omega_j)T}{(\omega + \omega_j)T} \right\}
 \end{aligned}$$

откуда при $\omega > 0$ и $T \rightarrow \infty$ следует:

$$\lim_{T \rightarrow \infty} S_T(\omega) = \begin{cases} 0, & \omega \notin \{\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_N\}, \\ |\varphi(1, \lambda(j))|^2, & \omega = \omega_j. \end{cases}$$

Поэтому частоты ω_j , а, значит, и собственные значения $\lambda(j) = \omega_j^2$, вычислимы, так как они равны тем значениям ω , при которых вычисляемая функция

$$S(\omega) = \lim_{T \rightarrow \infty} S_T(\omega)$$

принимает ненулевые значения $S(\omega_j) = |\varphi(1, \lambda(j))|^2$.

Первые координаты $\varphi(1, \lambda(j))$ тоже вычислимы, так как они выражаются через вычисляемые величины $S(\omega_j)$ и произвольные числовые множители Θ_j по модулю равные единице:

$$\varphi(1, \lambda(j)) = \Theta_j \sqrt{S(\omega_j)}, \quad |\Theta_j| = 1.$$

В дальнейшем мы полагаем $\Theta_j = 1$, то есть выбираем полный набор ортонормированных собственных векторов \mathbf{L} -матрицы с положительной первой координатой.

Согласно Лемме 1 рассматриваемая нами обратная задача теории малых колебаний сводится к обратной задаче спектрального анализа, в которой считаются известными все собственные

значения и первые координаты всех ортонормированных собственных векторов \mathbf{L} -матрицы, и нужно по этим данным вычислить все другие координаты собственных векторов, то есть вычислить спектральные данные \mathbf{L} -матрицы, а, значит, и саму \mathbf{L} -матрицу.

З а м е ч а н и е. В Лемме 1 предполагалось, что функция $z(1, t)$ известна при всех значениях $t \in (0, \infty)$, то есть предполагалось, что наблюдение ведется бесконечно долго. Если время T конечно, то частоты ω_j и первые координаты $\varphi(1, \lambda(j))$ можно найти только приближенно с погрешностью не превышающей $\frac{\Delta}{\sqrt{\Delta T}}$ для частот ω_j и $\frac{1}{\sqrt{\Delta T}}$ для квадратов первых координат $|\varphi(1, \lambda(j))|^2$, где

$$\Delta = \min_{j \in [N]} (\omega_j - \omega_{j-1}), \quad \omega_0 = 0,$$

и безразмерная величина $\sqrt{\Delta T}$ определяет точность приближения.

§ 2. Собственные векторы трехдиагональных эрмитовых матриц

Множеством собственных значений эрмитовых матриц N -го порядка может быть любое множество N вещественных чисел, а множеством собственных векторов может быть любой ортогональный базис пространства $\mathbb{H}([N])$. В общем случае ничего нельзя сказать о структуре собственных векторов таких матриц. Однако, в нашем случае матрицы \mathbf{L} трехдиагональные. Благодаря этому их собственные векторы в каноническом базисе имеют весьма простую структуру.

Действительно, согласно (1.7) вектор $\mathbf{Lx} - \lambda\mathbf{x}$, (число λ и вектор $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_N)$ произвольны) имеет в каноническом базисе такие координаты:

$$\begin{aligned} (\mathbf{Lx} - \lambda\mathbf{x}, \mathbf{e}_1) &= (a_1 - \lambda)x_1 - b_1x_2 \\ (\mathbf{Lx} - \lambda\mathbf{x}, \mathbf{e}_j) &= -b_{j-1}x_{j-1} + (a_j - \lambda)x_j - b_jx_{j+1} \quad j = 2, \dots, N-1 \\ (\mathbf{Lx} - \lambda\mathbf{x}, \mathbf{e}_N) &= -b_{N-1}x_{N-1} + (a_N - \lambda)x_N. \end{aligned} \tag{2.1}$$

Следовательно, вектор \mathbf{x} удовлетворяет уравнению $\mathbf{Lx} - \lambda\mathbf{x} = 0$ тогда и только тогда, когда его координаты удовлетворяют такой системе линейных однородных уравнений:

$$\begin{aligned} (a_1 - \lambda)x_1 - b_1x_2 &= 0 \\ -b_1x_1 + (a_2 - \lambda)x_2 - b_2x_3 &= 0 \\ \vdots & \\ -b_{N-2}x_{N-2} + (a_{N-1} - \lambda)x_{N-1} - b_{N-1}x_N &= 0 \\ -b_{N-1}x_{N-1} + (a_N - \lambda)x_N &= 0 \end{aligned} \tag{2.2}$$

Найдем сначала общее решение первых $N-1$ уравнений, т.е. общий вид векторов, удовлетворяющих равенствам $(\mathbf{Lx} - \lambda\mathbf{x}, \mathbf{e}_j) =$

$0, j = 1, 2, \dots, N - 1$. Поскольку $b_j \neq 0$ эту систему можно привести к виду

$$\begin{aligned}
 x_2 &= \frac{a_1 - \lambda}{b_1} x_1 \\
 x_3 &= \frac{a_2 - \lambda}{b_2} x_2 - \frac{b_1}{b_2} x_1 \\
 x_j &= \frac{a_{j-1} - \lambda}{b_{j-1}} x_{j-1} - \frac{b_{j-2}}{b_{j-1}} x_{j-2} \\
 &\vdots \\
 x_N &= \frac{a_{N-1} - \lambda}{b_{N-1}} x_{N-1} - \frac{b_{N-2}}{b_{N-1}} x_{N-2},
 \end{aligned} \tag{2.3}$$

позволяющему выразить все координаты через первую. Последовательно находя по формулам (2.3) x_2, x_3, \dots, x_N , приходим к равенствам $x_j = x_1 P(j, \lambda)$, где $P(j, \lambda)$ — полиномы от λ степени $j - 1$, определенные такими рекуррентными формулами:

$$\begin{aligned}
 P(1, \lambda) &= 1, \quad P(2, \lambda) = \frac{a_1 - \lambda}{b_1}, \\
 P(j, \lambda) &= \frac{a_{j-1} - \lambda}{b_{j-1}} P(j-1, \lambda) - \frac{b_{j-2}}{b_{j-1}} P(j-2, \lambda), \quad j = 3, 4, \dots, N.
 \end{aligned}$$

Следовательно, все векторы \mathbf{x} , удовлетворяющие уравнениям

$$(\mathbf{L}\mathbf{x} - \lambda\mathbf{x}, \mathbf{e}_j) = 0, \quad j = 1, 2, \dots, N - 1, \tag{2.4}$$

представимы в виде $\mathbf{x} = x_1 \mathbf{P}(\lambda)$, где

$$\mathbf{P}(\lambda) = (P(1, \lambda), P(2, \lambda), \dots, P(N, \lambda)).$$

Иными словами: при всех λ система уравнений (2.4) имеет единственное линейно независимое решение $\mathbf{P}(\lambda)$. Так как равенства (2.1) выполняются для любых векторов, то

$$(\mathbf{L}\mathbf{P}(\lambda) - \lambda\mathbf{P}(\lambda), \mathbf{e}_N) = -b_{N-1}P(N-1, \lambda) + (a_N - \lambda)P(N, \lambda),$$

§ 2. Собственные векторы трехдиагональных эрмитовых матриц

откуда согласно (2.4) следует, что

$$\mathbf{L}\mathbf{P}(\lambda) - \lambda\mathbf{P}(\lambda) = D_N(\lambda)\mathbf{e}_N, \quad (2.5)$$

где $D_N(\lambda)$ — полином N -ой степени, равный

$$D_N(\lambda) = -b_{N-1}P(N-1, \lambda) + (a_N - \lambda)P(N, \lambda). \quad (2.6)$$

Собственными векторами оператора \mathbf{L} называются нетривиальные ($\mathbf{x} \neq 0$) решения уравнений

$$\mathbf{L}\mathbf{x} - \lambda_j\mathbf{x} = 0, \quad (2.7)$$

где λ_j — собственные значения этого оператора. Поэтому каждый собственный вектор удовлетворяет уравнениям (2.4) при $\lambda = \lambda_j$, откуда согласно предыдущему следует, что $\mathbf{x} = c_j\mathbf{P}(\lambda_j)$, где $c_j \neq 0$ — произвольная константа. Далее, согласно (2.5)

$$\mathbf{L}\mathbf{x} - \lambda_j\mathbf{x} = c_j(\mathbf{L}\mathbf{P}(\lambda_j) - \lambda_j\mathbf{P}(\lambda_j)) = c_jD_N(\lambda_j)\mathbf{e}_N$$

и, т.к. $c_j \neq 0$, то уравнение (2.7) выполняется тогда и только тогда, когда $D_N(\lambda_j) = 0$, т.е. собственными значениями оператора \mathbf{L} являются корни многочлена $D_N(\lambda)$.

Зафиксируем для удобства вышеизложенные результаты в следующей лемме.

Лемма 2. Пусть действующий в пространстве $\mathbf{H}([N])$ линейный оператор \mathbf{L} имеет в каноническом базисе вещественную трехдиагональную матрицу

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} a_1 & -b_1 & & \cdots & 0 \\ -b_1 & a_2 & -b_2 & & \\ & -b_2 & a_3 & -b_3 & \vdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \\ 0 & & & -b_{N-1} & a_N \end{pmatrix}$$

и $b_j \neq 0$ при всех $j = 1, 2, \dots, N - 1$. Тогда

1. Оператор \mathbf{L} самосопряжен: $(\mathbf{L}\mathbf{x}, \mathbf{y}) = (\mathbf{x}, \mathbf{L}\mathbf{y})$.
2. При всех λ система уравнений

$$(\mathbf{L}\mathbf{x} - \lambda\mathbf{x}, \mathbf{e}_j) = 0, \quad j = 1, 2, \dots, N - 1$$

имеет единственное линейно независимое решение

$$\mathbf{P}(\lambda) = (P(1, \lambda), P(2, \lambda), \dots, P(N, \lambda)),$$

где полиномы

$$P(j, \lambda) = \sum_{i=1}^j k(i, j) \lambda^{i-1} \quad (2.8)$$

степени $j - 1$ определены такими рекуррентными формулами:

$$\begin{aligned} P(1, \lambda) &= 1, \quad P(2, \lambda) = \frac{a_1 - \lambda}{b_1}, \\ P(j, \lambda) &= \frac{a_{j-1} - \lambda}{b_{j-1}} P(j-1, \lambda) - \frac{b_{j-2}}{b_{j-1}} P(j-2, \lambda). \end{aligned} \quad (2.9)$$

3. При всех λ вектор $\mathbf{P}(\lambda)$ удовлетворяет равенству

$$\mathbf{L}\mathbf{P}(\lambda) - \lambda\mathbf{P}(\lambda) = D_N(\lambda)\mathbf{e}_N,$$

где $D_N(\lambda) = -b_{N-1}P(N-1, \lambda) + (a_N - \lambda)P(N, \lambda)$.

4. Собственные значения $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N$ оператора \mathbf{L} являются корнями полинома $D_N(\lambda)$: $D_N(\lambda_j) = 0$.

5. Собственные векторы оператора \mathbf{L} с собственными значениями λ_j равны $c_j\mathbf{P}(\lambda_j)$, где $c_j \neq 0$ — произвольные константы.

Константы c_j выбираются в зависимости от того, каким дополнительным условиям мы хотим подчинить собственные векторы. Например, полагая $c_j = 1$, получим собственные векторы $\mathbf{P}(\lambda_j)$, у

которых первая координата в каноническом базисе равна 1, а полагая

$$c_j = \|\mathbf{P}(\lambda_j)\|^{-1} = \left\{ \sum_{k=1}^N |P(k, \lambda_j)|^2 \right\}^{-\frac{1}{2}},$$

получим ортонормированные собственные векторы

$$\varphi(\lambda(j)) = \|\mathbf{P}(\lambda_j)\|^{-1} \mathbf{P}(\lambda_j).$$

Отметим некоторые элементарные свойства полиномов $P(j, \lambda)$. Из рекуррентных формул (2.9) следует, что их коэффициенты вещественны и выражаются только через $a_1, a_2, \dots, a_{j-1}, b_1, b_2, \dots, b_{j-1}$, в частности коэффициенты при старших степенях λ равны

$$k(1, 1) = 1, \quad k(j, j) = (-1)^{j-1} (b_1 \cdot b_2 \cdots b_{j-1})^{-1}, \quad j = 2, 3, \dots, N. \quad (2.8')$$

Поэтому все эти полиномы, а значит и вектор $\mathbf{P}(\lambda)$ не зависит от a_N . Заметим, что вещественность коэффициентов эквивалентна равенствам

$$\overline{P(j, \lambda)} = P(j, \bar{\lambda}).$$

Подставив в рекуррентные соотношения (2.9) правые части формул (2.8) и приравняв в полученных выражениях коэффициенты при λ^j и λ^{j-1} , получим равенства

$$k(j+1, j+1) = -\frac{k(j, j)}{b_j}; \quad k(j+1, j) = \frac{a_j}{b_j} k(j, j) - \frac{k(j, j-1)}{b_j},$$

из которых вытекает такое следствие.

Следствие. Элементы матрицы L выражаются через коэффициенты полиномов $P(j, \lambda)$ формулами:

$$b_j = -\frac{k(j, j)}{k(j+1, j+1)}; \quad a_j = \frac{k(j, j-1)}{k(j, j)} - \frac{k(j+1, j)}{k(j+1, j+1)}; \\ j = 1, 2, \dots, N-1,$$

(коэффициенты $k(1, 0)$ считаются равными нулю.)

Формулу для элемента a_N можно вывести из равенства (2.6). В самом деле, из этого равенства следует, что у полинома $D_N(\lambda)$ коэффициент при λ^N равен $-k(N, N)$, а т.к. его корни равны собственным значениям $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N$ матрицы \mathbf{L} , то $D_N(\lambda) = -k(N, N) \prod_{j=1}^N (\lambda - \lambda_j)$ и согласно (2.6)

$$-k(N, N) \prod_{j=1}^N (\lambda - \lambda_j) = -b_{N-1}P(N-1, \lambda) + (a_N - \lambda)P(N, \lambda)$$

Сравнивая коэффициенты при λ^{N-1} , получим:

$$k(N, N) \sum_{j=1}^N \lambda_j = a_N k(N, N) - k(N, N-1),$$

откуда вытекает такая формула для элемента a_N :

$$a_N = \frac{k(N, N-1)}{k(N, N)} + \sum_{j=1}^N \lambda_j.$$

Следующая простая лемма позволяет выразить норму $\|\mathbf{P}(\lambda)\|$ вектора $\mathbf{P}(\lambda)$ через полиномы $D_N(\lambda)$ и $P(N, \lambda)$.

Лемма 3. *При всех вещественных значениях μ и λ справедливы равенства*

$$\begin{aligned} (\mu - \lambda) (\mathbf{P}(\lambda), \mathbf{P}(\mu)) &= D_N(\lambda)P(N, \mu) - P(N, \lambda)D_N(\mu) \\ \|\mathbf{P}(\lambda)\|^2 = (\mathbf{P}(\lambda), \mathbf{P}(\lambda)) &= D_N(\lambda)P'(N, \lambda) - P(N, \lambda)D'_N(\lambda). \end{aligned} \quad (2.10)$$

В частности

$$\|\mathbf{P}(\lambda_j)\|^2 = -D'_N(\lambda_j)P_N(\lambda_j). \quad (2.10')$$

Д о к а з а т е л ь с т в о. Согласно (2.5)

$$\mathbf{LP}(\lambda) - \lambda\mathbf{P}(\lambda) = D_N(\lambda)\mathbf{e}_N; \quad \mathbf{LP}(\mu) - \mu\mathbf{P}(\mu) = D_N(\mu)\mathbf{e}_N.$$

Умножая первое равенство справа скалярно на $\mathbf{P}(\mu)$, второе — слева на $\mathbf{P}(\lambda)$ и вычитая полученные результаты, получим:

$$\begin{aligned} & (\mathbf{LP}(\lambda), \mathbf{P}(\mu)) - (\mathbf{P}(\lambda), \mathbf{LP}(\mu)) + (\mu - \lambda) (\mathbf{P}(\lambda), \mathbf{P}(\mu)) \\ & = D_N(\lambda)P(N, \mu) - P(N, \lambda)D_N(\mu), \end{aligned}$$

а, т.к. $(\mathbf{LP}(\lambda), \mathbf{P}(\mu)) = (\mathbf{P}(\lambda), \mathbf{LP}(\mu))$ в силу самосопряженности оператора \mathbf{L} , то

$$(\mu - \lambda) (\mathbf{P}(\lambda), \mathbf{P}(\mu)) = D_N(\lambda)P(N, \mu) - P(N, \lambda)D_N(\mu)$$

и

$$(\mathbf{P}(\lambda), \mathbf{P}(\mu)) = \frac{D_N(\lambda)P(N, \mu) - P(N, \lambda)D_N(\mu)}{\mu - \lambda}$$

Формулы (2.10), (2.10') получаются из последнего равенства при $\mu \rightarrow \lambda$ после раскрытия неопределенности в его правой части.

Следствие. Все корни полинома $D_N(\lambda)$ положительные и простые.

Действительно, т.к. корни полинома $D_N(\lambda)$ являются собственными значениями самосопряженного положительного оператора \mathbf{L} , то все они положительны. Далее, если $D_N(\lambda_j) = 0$, то согласно (2.10)

$$\|\mathbf{P}(\lambda_j)\|^2 = -P(N, \lambda_j)D'_N(\lambda_j)$$

и, т.к. $\|\mathbf{P}(\lambda_j)\|^2 \geq 1$, то $D'_N(\lambda_j) \neq 0$.

Таким образом, оператор \mathbf{L} имеет N различных собственных значений

$$0 < \lambda_1 < \lambda_1 < \dots < \lambda_N,$$

откуда следует, что соответствующие собственные векторы $\mathbf{P}(\lambda_1)$, $\mathbf{P}(\lambda_2)$, \dots , $\mathbf{P}(\lambda_N)$ образуют ортогональный базис пространства

$H([N])$, а векторы $\varphi(\lambda_j) = \|\mathbf{P}(\lambda_j)\|^{-1}\mathbf{P}(\lambda_j)$ образуют ортогональный нормированный базис. Разложения векторов $\mathbf{f} = (f(1), f(2), \dots, f(N))$ по этому базису имеют вид

$$\mathbf{f} = \sum_{j=1}^N (\mathbf{f}, \varphi(\lambda_j)) \varphi(\lambda_j) = \sum_{j=1}^N (\mathbf{f}, \mathbf{P}(\lambda_j)) \|\mathbf{P}(\lambda_j)\|^{-2} \mathbf{P}(\lambda_j), \quad (2.11)$$

откуда вытекает такая формула для скалярных произведений:

$$\begin{aligned} (\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2) &= \sum_{j=1}^N (\mathbf{f}_1, \varphi(\lambda_j)) \overline{(\mathbf{f}_2, \varphi(\lambda_j))} = \\ &= \sum_{j=1}^N (\mathbf{f}_1, \mathbf{P}(\lambda_j)) \overline{(\mathbf{f}_2, \mathbf{P}(\lambda_j))} \|\mathbf{P}(\lambda_j)\|^{-2}. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Мы видели, что спектральный анализ оператора \mathbf{L} (т.е. отыскание его собственных значений и собственных векторов) сводится к отысканию ненулевых решений системы (2.1). Для решения последней мы сначала нашли общее решение системы, состоящей из *первых* $N - 1$ уравнений, а затем нашли те значения параметра λ , при которых это решение удовлетворяет также последнему уравнению. Ясно, что можно сначала найти общее решение системы, состоящей из *последних* $N - 1$ уравнений, а затем найти те значения λ , при которых удовлетворяется и первое уравнение. При этом получится аналог Леммы 2, в котором пункты 2 и 3 заменяются следующими:

2. При всех λ система уравнений

$$(\mathbf{L}\mathbf{x} - \lambda\mathbf{x}, \mathbf{e}_j) = 0; \quad j = 2, 3, \dots, N$$

имеет единственное линейно независимое решение

$$\mathbf{Q}(\lambda) = (Q(1, \lambda), Q(2, \lambda), \dots, Q(N, \lambda)),$$

§ 2. Собственные векторы трехдиагональных эрмитовых матриц

где $Q(j, \lambda)$ — полиномы от λ степени $N - j$, определенные рекуррентными формулами

$$\begin{aligned} Q(N, \lambda) &= 1, \quad Q(N-1, \lambda) = \frac{a_N - \lambda}{b_{N-1}}, \\ Q(j, \lambda) &= \frac{a_{j+1} - \lambda}{b_j} Q(j+1, \lambda) - \frac{b_{j+1}}{b_j} Q(j+2, \lambda), \\ j &= N-2, \dots, 1. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Коэффициенты полиномов $Q(j, \lambda)$ вещественны, выражаются через $a_N, a_{N-1}, \dots, a_{j+1}, b_{N-1}, b_{N-2}, \dots, b_j$ и коэффициенты при старшей степени равны $(-1)^{N-j} (b_{N-1}, b_{N-2} \dots b_j)^{-1}$.

3. При всех λ вектор $\mathbf{Q}(\lambda)$ удовлетворяет равенству

$$\mathbf{L}\mathbf{Q}(\lambda) - \lambda\mathbf{Q}(\lambda) = C_N(\lambda)\mathbf{e}_1,$$

где $C_N(\lambda) = (a_1 - \lambda)Q(1, \lambda) - b_1Q(2, \lambda)$.

А в пунктах 4 и 5 следует заменить $D_N(\lambda)$ на $C_N(\lambda)$ и $\mathbf{P}(\lambda)$ на $\mathbf{Q}(\lambda)$. Следовательно собственные значения оператора \mathbf{L} являются корнями одновременно двух полиномов $D_N(\lambda)$ и $C_N(\lambda)$, а, т.к. из рекуррентных формул следует, что у этих полиномов коэффициенты при старшей степени λ равны, то $D_N(\lambda) \equiv C_N(\lambda)$. Собственные векторы $\mathbf{P}(\lambda_j)$ и $\mathbf{Q}(\lambda_j)$, конечно, линейно зависимы:

$$\mathbf{Q}(\lambda_j) = Q(1, \lambda_j)\mathbf{P}(\lambda_j); \quad \mathbf{P}(\lambda_j) = P(N, \lambda_j)\mathbf{Q}(\lambda_j), \quad (2.14)$$

откуда, в частности, следует, что при всех $k = 2, 3, \dots, N$

$$P(k, \lambda_j) = P(N, \lambda_j)Q(k, \lambda_j), \quad P(k-1, \lambda_j) = P(N, \lambda_j)Q(k-1, \lambda_j)$$

и

$$P(k, \lambda_j)Q(k-1, \lambda_j) - P(k-1, \lambda_j)Q(k, \lambda_j) = 0.$$

Таким образом, полиномы $D_N(\lambda)$ и $P(k, \lambda)Q(k-1, \lambda) - P(k-1, \lambda)Q(k, \lambda)$ N -ой степени имеют одинаковые корни, а поскольку

коэффициенты при λ^N у этих полиномов соответственно равны $(-1)^N(b_1 \cdots b_{N-1})^{-1}$ и $(-1)^N(b_1 \cdots b_{N-1})^{-1}b_{k-1}^{-1}$, то

$$b_{k-1}(P(k, \lambda)Q(k-1, \lambda) - P(k-1, \lambda)Q(k, \lambda)) = D_N(\lambda). \quad (2.15)$$

Изложим в заключение стандартный метод решения систем уравнений, аналогичных системе (2.2). Отбросив в этой системе первое и последнее уравнения, мы можем оставшуюся укороченную систему записать в виде одного линейного конечноразностного уравнения

$$-\Delta [p(k)\Delta[y(k)]] + q(k-1)y(k-1) = \lambda y(k-1), \quad k = 3, \dots, N \quad (2.16)$$

относительно функции $y(k) = x_k$ дискретного переменного k . Здесь $p(k) = b_{k-1}$, $q(k) = a(k) - (b(k) + b(k-1))$ и через Δ обозначен конечноразностный оператор $\Delta[f(k)] = f(k) - f(k-1)$. Отброшенные уравнения записываются в виде

$$(a_1 - \lambda)y(1) - b_1y(2) = 0; \quad -b_{N-1}y(N-1) + (a_N - \lambda)y(N) = 0$$

и играют роль краевых условий.

Теория конечноразностных уравнений (2.16) аналогична теории обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка вида

$$-\frac{d}{dx} \left(p(x) \frac{d}{dx} y(x) \right) + q(x)y(x) = \lambda y(x).$$

Легко видеть что конечноразностное уравнение (2.16) при любых начальных данных $y(k_0) = a$, $y(k_0 + 1) = b$ имеет единственное решение, откуда следует, что число линейно независимых решений этого уравнения равно двум, и его общее решение образуют всевозможные линейные комбинации любых двух линейно независимых решений. Обозначим через $f(k, \lambda)$, $g(k, \lambda)$ любую пару линейно независимых решений уравнения (2.16). Очевидно, что решение всей системы (2.2) должно иметь вид $x_k = c_1 f(k, \lambda) + c_2 g(k, \lambda)$, где независимые от k коэффициенты c_1 и c_2 нужно выбрать так, чтобы

§ 2. Собственные векторы трехдиагональных эрмитовых матриц

удовлетворялись первое и последнее уравнения системы (2.2), т.е. их нужно найти из уравнений:

$$\begin{aligned} & c_1 \{(a_1 - \lambda)f(1, \lambda) - b_2f(2, \lambda)\} \\ & + c_2 \{(a_1 - \lambda)g(1, \lambda) - b_2g(2, \lambda)\} = 0, \\ & c_1 \{(a_N - \lambda)f(N, \lambda) - b_{N-1}f(N - 1, \lambda)\} \\ & + c_2 \{(a_N - \lambda)g(N, \lambda) - b_{N-1}g(N - 1, \lambda)\} = 0. \end{aligned}$$

Эта система имеет ненулевое решение тогда и только тогда, когда ее определитель равен нулю. Следовательно, собственные значения λ_j оператора \mathbf{L} совпадают с корнями уравнения

$$\begin{vmatrix} (a_1 - \lambda)f(1, \lambda) - b_2f(2, \lambda) & (a_1 - \lambda)g(1, \lambda) - b_2g(2, \lambda) \\ (a_N - \lambda)f(N, \lambda) - b_{N-1}f(N-1, \lambda) & (a_N - \lambda)g(N, \lambda) - b_{N-1}g(N-1, \lambda) \end{vmatrix} = 0 \quad (2.17)$$

и координаты соответствующих собственных векторов равны

$$x_k = c_1 f(k, \lambda_j) + c_2 g(k, \lambda_j), \quad (2.18)$$

где

$$\begin{aligned} c_1 &= (a_1 - \lambda_j)g(1, \lambda_j) - b_1g(2, \lambda_j); \\ c_2 &= -(a_1 - \lambda_j)f(1, \lambda_j) + b_1f(2, \lambda_j). \end{aligned}$$

Рассмотрим в качестве примера струну, у которой $m_1 = m_2 = \dots = m_N = 1$ и $k_0 = k_1 = \dots = k_N = 1$. В этом случае матрица \mathbf{L} имеет элементы $a_j = 2$, $b_j = 1$, а конечноразностное уравнение (2.16) имеет вид

$$-y(k + 1) + 2y(k) - y(k - 1) = \lambda y(k), \quad (2.19)$$

то есть является уравнением с постоянными коэффициентами. Будем искать его решение в виде $y(k) = \theta^k$, где $\theta = \theta(\lambda)$ подлежит определению. Подставляя это выражение в уравнение (2.19), получим

$$-\theta^{k+1} + 2\theta^k - \theta^{k-1} = \lambda\theta^k$$

или

$$-\theta + 2 - \theta^{-1} = \lambda, \quad (2.20)$$

откуда следует, что в качестве θ нужно взять любой корень квадратного уравнения $\theta^2 - 2\theta\left(1 - \frac{\lambda}{2}\right) + 1 = 0$. При λ отличном от 0 и 4 это уравнение имеет два различных корня

$$\theta = \left(1 - \frac{\lambda}{2}\right) + i\sqrt{1 - \left(1 - \frac{\lambda}{2}\right)^2}, \quad \theta^{-1} = \left(1 - \frac{\lambda}{2}\right) - i\sqrt{1 - \left(1 - \frac{\lambda}{2}\right)^2}$$

и конечноразностные уравнения (2.19) имеют такие линейно независимые решения: $f(k, \lambda) = \theta^k$, $g(k, \lambda) = \theta^{-k}$. Подставляя эти решения в (2.17) и замечая, что в рассматриваемом случае $a_1 = a_N = 2$, а $2 - \lambda = \theta + \theta^{-1}$ согласно (2.20), приходим к уравнению $\theta^{-N-1} - \theta^{N+1} = 0$. Следовательно, краевые условия удовлетворяются, когда $\theta^{2(N+1)} = 1$, т.е. при $\theta = \exp\left(i\frac{\pi j}{N+1}\right)$, а собственные значения равны

$$\begin{aligned} \lambda_j &= -\exp\left(i\frac{\pi j}{N+1}\right) + 2 - \exp\left(-i\frac{\pi j}{N+1}\right) = \\ &= 2\left(1 - \cos\frac{\pi j}{N+1}\right) = 4\sin^2\frac{\pi j}{2(N+1)}, \end{aligned}$$

где $j = 1, 2, \dots, N$. Найденные по формулам (2.18) координаты собственных векторов равны $x_k = \theta^k - \theta^{-k} = 2i\sin\left(\frac{\pi j}{N+1}k\right)$, а нормированные условием $x_1 = 1$ собственные векторы равны

$$\mathbf{P}(\lambda_j) = \sum_{k=1}^N \frac{\sin\left(\frac{\pi j}{N+1}k\right)}{\sin\frac{\pi j}{N+1}} \mathbf{e}_k.$$

§ 3. Спектральная функция трехдиагональной матрицы

Мы видели (лемма 2), что каждая трехдиагональная матрица порождает вектор-функцию $\mathbf{P}(\lambda) = (P(1, \lambda), P(2, \lambda), \dots, P(N, \lambda))$ с полиномиальными координатами $P(k, \lambda)$, определенными рекуррентными формулами (2.9). Ее собственные векторы получаются из этой вектор-функции при подстановке в нее вместо λ соответствующих собственных значений λ_j . Эти собственные векторы $\mathbf{P}(\lambda_j)$ образуют ортогональный (но не нормированный) базис пространства $\mathbf{H}([N])$, и разложение векторов $\mathbf{f} = (f(1), f(2), \dots, f(N))$ по этому базису дается формулой (2.11). Посмотрим на формулу (2.11) с несколько иной точки зрения. Назовем преобразованием Фурье вектора $\mathbf{f} \in \mathbf{H}([N])$ функцию

$$F(\lambda) = (\mathbf{f}, \mathbf{P}(\lambda)) = \sum_{k=1}^N f(k)P(k, \lambda), \quad (3.1)$$

которая, очевидно, является полиномом степени $\leq N - 1$. Очевидно также, что переход $\mathbf{f} \rightarrow F(\lambda)$ от векторов $\mathbf{f} \in \mathbf{H}([N])$ к их преобразованиям Фурье является линейным отображением векторного пространства $\mathbf{H}([N])$ в векторное пространство \mathbb{P}_N , образованное множеством всех полиномов степени $\leq N - 1$ с обычными арифметическими операциями. Естественный базис пространства \mathbb{P}_N состоит из степеней $\lambda: 1, \lambda, \dots, \lambda^{N-1}$. Поскольку полиномы

$$P(1, \lambda), P(2, \lambda), \dots, P(N, \lambda) \quad (3.2)$$

линейно независимы, они тоже образуют базис пространства \mathbb{P}_N , причем согласно (3.1) отображение $\mathbf{f} \rightarrow F(\lambda)$ переводит канонический базис $\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_N$ пространства $\mathbf{H}([N])$ в базис пространства \mathbb{P}_N , образованный этими полиномами: $\mathbf{e}_k \rightarrow P(k, \lambda)$. Следовательно переход от векторов $\mathbf{f} \in \mathbf{H}([N])$ к их преобразованиям Фурье является изоморфным отображением векторного пространства $\mathbf{H}([N])$ в

векторное пространство \mathbb{P}_N . Далее, из формул (2.11), (2.12) и определения преобразования Фурье вытекают следующие формулы обращения

$$F(\lambda) = \sum_{k=1}^N f(k)P(k, \lambda); \quad f(k) = \sum_{j=1}^N F(\lambda_j)P(k, \lambda_j)\|\mathbf{P}(\lambda_j)\|^{-2} \quad (3.3)$$

и равенство Парсеваля

$$\langle \mathbf{f}, \mathbf{g} \rangle = \sum_{j=1}^N F(\lambda_j)\overline{G(\lambda_j)}\|\mathbf{P}(\lambda_j)\|^{-2}. \quad (3.4)$$

Заметим теперь, что формула

$$\langle F, G \rangle = \sum F(\lambda_j)\overline{G(\lambda_j)}\|\mathbf{P}(\lambda_j)\|^{-2} \quad (3.5)$$

определяет в пространстве \mathbb{P}_N скалярное произведение $\langle F, G \rangle$, превращая его в N -мерное гильбертово пространство. Из равенства Парсеваля (3.4) следует, что отображение $\mathbf{f} \rightarrow F(\lambda)$ является изоморфным отображением гильбертова пространства $\mathbb{H}([N])$ на гильбертово пространство \mathbb{P}_N , причем полиномы (3.2) образуют ортонормированный базис в пространстве \mathbb{P}_N . Полагая в формуле (3.4) $\mathbf{f} = \mathbf{g} = \mathbf{e}_1$ и замечая, что $\mathbf{e}_1 \rightarrow P(1, \lambda)$, приходим к равенству

$$1 = \sum_{j=1}^N \|\mathbf{P}(\lambda_j)\|^{-2}.$$

Сформулируем полученные результаты в виде следующего предложения.

Лемма 4. *1) Каждая вещественная симметрическая трехдиагональная матрица L порождает в векторном пространстве \mathbb{P}_N скалярное произведение $\langle F, G \rangle$, определенное равенством*

(3.5), где λ_j — собственные значения матрицы L , $\|\mathbf{P}(\lambda_j)\|^2 = \sum_{k=1}^N P(k, \lambda_j)^2$ и

$$\sum_{j=1}^N \|\mathbf{P}(\lambda_j)\|^{-2} = 1. \quad (3.6)$$

2) Полиномы (3.2) образуют ортонормированный базис относительно этого скалярного произведения.

Числа $\|\mathbf{P}(\lambda_j)\|^{-2}$ называются нормировочными коэффициентами и являются теми дополнительными спектральными характеристиками матрицы \mathbf{L} , которые вместе с собственными значениями однозначно ее определяют. Они равны квадрату первой координаты (в каноническом базисе) нормированных ($\|\varphi(\lambda_j)\| = 1$) собственных векторов $\varphi(\lambda_j) = \|\mathbf{P}(\lambda_j)\|^{-1} \mathbf{P}(\lambda_j)$ оператора \mathbf{L} :

$$\|\mathbf{P}(\lambda_j)\|^{-1} = (\varphi(\lambda_j), \mathbf{e}_1)$$

Перепишем для удобства основные равенства (3.3)–(3.5) в виде интегралов Стильтьеса. Напомним определение интеграла Стильтьеса. Пусть на всей вещественной оси $-\infty < \lambda < \infty$ задана неубывающая непрерывная слева ($\sigma(\lambda - 0) = \sigma(\lambda)$) функция $\sigma(\lambda)$ и произвольная непрерывная функция $F(\lambda)$. Разобьем полусегмент $[a, b)$ на непересекающиеся полусегменты $[a_0, a_1), [a_1, a_2), \dots, [a_n, a_{n+1})$ ($-\infty < a = a_0 < b = a_{n+1} < \infty$) и составим интегральную сумму Римана–Стильтьеса

$$\sum_{j=0}^N F(\tilde{a}_j) (\sigma(a_{j+1}) - \sigma(a_j)),$$

где \tilde{a}_j — произвольная точка полусегмента $[a_j, a_{j+1})$.

Дословно так же, как и для обычных сумм Римана доказывається, что, когда $\max_j (a_{j+1} - a_j) \rightarrow 0$, эти суммы стремятся к пределу, который обозначается через $\int_a^{b-0} F(\lambda) d\sigma(\lambda)$ и называется интегралом Стильтьеса от функции $F(\lambda)$ по мере $d\sigma(\lambda)$, сосредоточенной

на полусегменте $[a, b)$. Если эти интегралы имеют конечный предел при $a \rightarrow -\infty$, $b \rightarrow +\infty$, то он обозначается через

$$\int F(\lambda) d\sigma(\lambda) = \lim_{\substack{a \rightarrow -\infty \\ b \rightarrow +\infty}} \int_a^{b-0} F(\lambda) d\sigma(\lambda)$$

и называется интегралом Стильтьеса от функции $F(\lambda)$ по всей вещественной оси. Если функция $\sigma(\lambda)$ кусочно постоянная, имеет конечное число точек разрыва $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N$ и ее скачки в этих точках равны $\Delta_j = \sigma(\lambda_j + 0) - \sigma(\lambda_j)$, то

$$\int F(\lambda) d\sigma(\lambda) = \sum_{j=1}^N F(\lambda_j) \Delta_j \quad (3.7)$$

В этом случае интеграл Стильтьеса является просто удобной формой записи суммы, стоящей в правой части этого равенства.

Определение. *Функция*

$$\sigma(\lambda) = \sum_{\lambda_j < \lambda} \|\mathbf{P}(\lambda_j)\|^{-2} \quad (3.8)$$

называется спектральной функцией матрицы \mathbf{L} .

Очевидно, что спектральная функция кусочно постоянна, непрерывна слева и имеет ровно N скачков $\sigma(\lambda_j + 0) - \sigma(\lambda_j) = \|\mathbf{P}(\lambda_j)\|^{-2}$, расположенных в собственных значениях матрицы \mathbf{L} и равных соответствующим нормировочным коэффициентам. Согласно (3.6) сумма всех ее скачков равна 1, откуда следует, что $\sigma(-\infty) = 0$, $\sigma(+\infty) = 1$.

Типичный график спектральной функции изображен на рис. 2. Из равенства (3.7) следует, что правые части формул (3.3)–(3.5) можно записать в виде интегралов Стильтьеса по мере $d\sigma(\lambda)$, порожденной спектральной функцией матрицы \mathbf{L} :

$$F(\lambda) = \sum_{k=1}^N f(k) \overline{P(k, \lambda)}; \quad f(k) = \int F(\lambda) P(k, \lambda) d\sigma(\lambda), \quad (3.3')$$

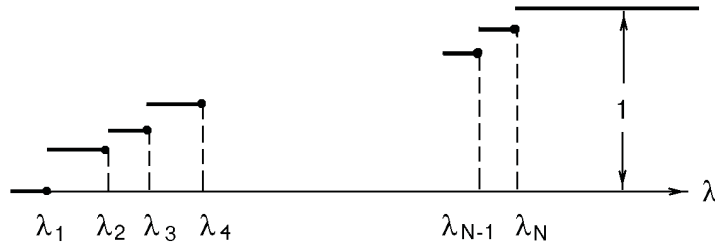


Рис. 2:

$$(\mathbf{f}, \mathbf{g}) = \int F(\lambda) \overline{G(\lambda)} d\sigma(\lambda), \quad (3.4')$$

$$\langle F, G \rangle = \int F(\lambda) \overline{G(\lambda)} d\sigma(\lambda). \quad (3.5')$$

Используя понятие спектральной функции, лемме 4 можно дать следующую эквивалентную формулировку.

Лемма 4'. 1) Каждой самосопряженной трехдиагональной матрице L порядка N однозначно соответствует кусочно-постоянная неубывающая функция $\sigma(\lambda)$, имеющая ровно N скачков, сумма которых равна единице.

2) Векторное пространство \mathbb{P}_N , наделенное скалярным произведением (3.5'), является N -мерным гильбертовым пространством, в котором полиномы (3.2) образуют ортонормированный базис.

Конечно, здесь под $\sigma(\lambda)$ понимается определенная формулой (3.8) спектральная функция матрицы \mathbf{L} . Мы умышленно не использовали при формулировке леммы этот термин, чтобы подчеркнуть только свойства функции $\sigma(\lambda)$, а не ее конкретный вид (3.8).

Заметим, что формулу (1.10) можно переписать в виде интеграла Стильтьеса

$$z(1, t) = v \int \frac{\sin \sqrt{\lambda} t}{\sqrt{\lambda}} d\sigma(\lambda), \quad (3.9)$$

что, как мы видели, позволяет найти спектральную функцию, наблюдая движение только одной (первой) массы.

Спектральная функция выражается также через частоты собственных колебаний и энергии, необходимые для их возбуждения. По закону Гука для изменения длины упругой пружины на ξ к ней нужно приложить силу $k\xi$, где k — коэффициент жесткости. Следовательно работа, совершаемая при изменении длины пружины на x равна

$$\int_0^x k\xi d\xi = \frac{1}{2}x^2.$$

Она называется потенциальной энергией пружины, выведенной из покоящегося состояния, т.е. растянутой или сжатой на x . Потенциальная энергия U струны равна сумме потенциальных энергий содержащихся в ней пружин, т.е.

$$U = \frac{1}{2} \{ k_0 z(1)^2 + k_1 (z(2) - z(1))^2 + \dots \\ + k_{N-1} (z(N) - z(N-1))^2 + k_N z(N)^2 \},$$

где через $z(j)$ обозначены отклонения концов пружин, равные отклонениям масс m_j от положения равновесия. Согласно (1.8) эту формулу можно переписать так:

$$U = \frac{1}{2}(\mathbf{K}\mathbf{z}, \mathbf{z})$$

где $\mathbf{z} = (z(1), z(2), \dots, z(N))$ — вектор отклонения, координаты которого равны отклонениям масс от положения равновесия. Из (1.10) следует, что при собственном колебании с частотой ω_j вектор отклонений равен

$$\mathbf{z}(t) = c_j \cos(\omega_j t + \alpha_j) \left(\frac{P(1, \lambda_j)}{\sqrt{m_1}}, \frac{P(2, \lambda_j)}{\sqrt{m_2}}, \dots, \frac{P(N, \lambda_j)}{\sqrt{m_N}} \right) \\ = c_j \cos(\omega_j t + \alpha_j) M^{-\frac{1}{2}} \mathbf{P}(\lambda_j),$$

а амплитуда колебаний первой массы равна

$$A_j = \frac{c_j P(1, \lambda_j)}{\sqrt{m_1}} = \frac{c_j}{\sqrt{m_1}},$$

где $\lambda_j = \omega_j^2$ и c_j, α_j — произвольные константы. Поэтому при собственных колебаниях потенциальная энергия струны равна

$$U(t) = \frac{1}{2}(\mathbf{K}\mathbf{z}(t), \mathbf{z}(t)) = \frac{c_j^2 \cos^2(\omega_j t + \alpha_j)}{2} (\mathbf{K}M^{-\frac{1}{2}}\mathbf{P}(\lambda_j), M^{-\frac{1}{2}}\mathbf{P}(\lambda_j))$$

и так как

$$\begin{aligned} (KM^{-\frac{1}{2}}\mathbf{P}(\lambda_j), M^{-\frac{1}{2}}\mathbf{P}(\lambda_j)) &= (M^{-\frac{1}{2}}\mathbf{K}M^{-\frac{1}{2}}\mathbf{P}(\lambda_j), \mathbf{P}(\lambda_j)) \\ &= (\mathbf{L}\mathbf{P}(\lambda_j), \mathbf{P}(\lambda_j)) = \lambda_j \|\mathbf{P}(\lambda_j)\|^2, \end{aligned}$$

то

$$U(t) = \frac{c_j^2 \cos^2(\omega_j t + \alpha_j)}{2} \|\mathbf{P}(\lambda_j)\|^2 = \frac{m_1 A_j^2 \omega_j^2 \cos^2(\omega_j t + \alpha_j)}{2} \|\mathbf{P}(\lambda_j)\|^2.$$

Кинетическая энергия колеблющейся струны равна

$$\begin{aligned} T(t) &= \frac{1}{2} \sum_{s=1}^N m_s \dot{z}(s, t)^2 = \frac{c_j^2 \omega_j^2 \sin^2(\omega_j t + \alpha_j)}{2} \sum_{s=1}^N m_s \frac{P(s, \lambda_j)^2}{m_s} \\ &= \frac{m_1 A_j^2 \omega_j^2 \sin^2(\omega_j t + \alpha_j)}{2} \|\mathbf{P}(\lambda_j)\|^2. \end{aligned}$$

Поэтому при собственном колебании с частотой ω_j полная энергия струны равна

$$\mathcal{E}(\omega_j, A_j) = U(t) + T(t) = \frac{m_1 A_j^2 \omega_j^2 \|\mathbf{P}(\lambda_j)\|^2}{2}.$$

Скачки спектральной функции связаны с этими энергиями равенствами

$$\sigma(\lambda_j + 0) - \sigma(\lambda_j) = \|\mathbf{P}(\lambda_j)\|^{-2} = \frac{m_1 A_j^2 \omega_j^2}{2\mathcal{E}(\omega_j, A_j)},$$

а, так как сумма скачков равна единице, то

$$\sigma(\lambda_j + 0) - \sigma(\lambda_j) = \frac{A_j^2 \omega_j^2}{\mathcal{E}(\omega_j, A_j)} \left(\sum_{s=1}^N \frac{A_s^2 \omega_s^2}{\mathcal{E}(\omega_s, A_s)} \right)^{-1}.$$

Следовательно спектральную функцию можно также найти, измерив частоты собственных колебаний, амплитуды колебаний первой массы и энергии, потраченные на возбуждение таких колебаний.

§ 4. Процесс ортогонализации Шмидта–Сонина

Напомним, что множество всевозможных линейных комбинаций векторов $\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots, \mathbf{f}_l$ называется их линейной оболочкой и обозначается через $\{\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots, \mathbf{f}_l\}$. Линейная оболочка $\{\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots, \mathbf{f}_l\}$ является линейным пространством, размерность которого $\leq l$ и равна в точности l , если векторы $\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots, \mathbf{f}_l$ линейно независимы, причем в этом случае они образуют базис своей линейной оболочки. Две конечные или бесконечные последовательности векторов $\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots$ и $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \dots$ называются *эквивалентными*, если при всех $j = 1, 2, \dots$

$$\{\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \dots, \mathbf{g}_j\} = \{\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots, \mathbf{f}_j\},$$

т.е., если векторы каждой из них выражаются через векторы другой формулами

$$\mathbf{g}_j = \sum_{i=1}^j k(j, i) \mathbf{f}_i, \quad \mathbf{f}_j = \sum_{i=1}^j m(j, i) \mathbf{g}_i, \quad j = 1, 2, \dots \quad (4.1)$$

Для эквивалентности достаточно, чтобы выполнялась только первая или вторая половина равенств (4.1) и диагональные коэффициенты в этой половине равенств (т.е. $k(j, j)$ или $m(j, j)$, $j = 1, 2, \dots$) были отличны от нуля.

Действительно, пусть, например,

$$\mathbf{g}_j = \sum_{i=1}^j k(j, i) \mathbf{f}_i, \quad k(j, j) \neq 0, \quad j = 1, 2, \dots \quad (4.2)$$

Нужно доказать, что тогда векторы \mathbf{f}_j выражаются через векторы $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \dots, \mathbf{g}_j$ формулами

$$\mathbf{f}_j = \sum_{i=1}^j m(j, i) \mathbf{g}_i, \quad m(j, j) \neq 0, \quad j = 1, 2, \dots \quad (4.3)$$

Доказательство проведем по индукции. Согласно (4.2)

$$\mathbf{g}_1 = k(1, 1)\mathbf{f}_1, \quad k(1, 1) \neq 0,$$

откуда следует, что

$$\mathbf{f}_1 = m(1, 1)\mathbf{g}_1, \quad \text{г } m(1, 1) = \frac{1}{k(1, 1)},$$

т.е. для вектора \mathbf{f}_1 формула (4.3) верна. Предположим, что формула (4.3) верна для векторов $\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots, \mathbf{f}_{p-1}$. Тогда, подставив в равенства (4.2) вместо $\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots, \mathbf{f}_{p-1}$ правые части формул (4.3), получим равенство

$$\mathbf{g}_p = \sum_{i=1}^{p-1} k(p, i) \sum_{s=1}^i m(i, s)\mathbf{g}_s + k(p, p)\mathbf{f}_p,$$

в котором $k(p, p) \neq 0$. Поделив обе части этого равенства на $k(p, p)$, убеждаемся, что вектор \mathbf{f}_p равен линейной комбинации векторов $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \dots, \mathbf{g}_p$, в которой коэффициент при \mathbf{g}_p равен $\frac{1}{k(p, p)}$, т.е. для него формула (4.3) тоже верна. Отсюда по индукции следует, что формулы (4.3) верны для всех векторов \mathbf{f}_j и рассматриваемые последовательности эквивалентны.

Например, в пространстве \mathbb{P}_N любая последовательность полиномов $R_1(\lambda), R_2(\lambda), \dots, R_N(\lambda)$, где $R_k(\lambda)$ — полином в точности $k-1$ степени, эквивалентна последовательности степеней $\lambda: 1, \lambda, \dots, \lambda^{N-1}$.

Это достаточное условие эквивалентности является также необходимым в наиболее важном случае, когда одна из последовательностей состоит из линейно независимых векторов.

Заметим прежде всего, что векторы последовательности $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \dots$, эквивалентной последовательности линейно независимых векторов $\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots$, тоже линейно независимы. В самом деле из линейной независимости векторов $\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots$ следует, что размерности линейных оболочек $\{\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots, \mathbf{f}_j\}$ равны j , и, т.к. $\{\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \dots, \mathbf{g}_j\} = \{\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots, \mathbf{f}_j\}$, размерности линейных оболочек

$\{\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \dots, \mathbf{g}_j\}$ тоже равны j , что возможно только при линейной независимости векторов $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \dots, \mathbf{g}_j$.

Далее, из формул (4.1) следует:

$$\mathbf{f}_j = \sum_{i=1}^j m(j, i) \sum_{s=1}^i k(i, s) \mathbf{f}_s = \sum_{s=1}^j \left(\sum_{i=s}^j m(j, i) k(i, s) \right) \mathbf{f}_s,$$

т.е.

$$0 = \sum_{s=1}^j \left(\sum_{i=s}^j m(j, i) k(i, s) - \delta_{js} \right) \mathbf{f}_s$$

и, в силу линейной независимости векторов $\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots, \mathbf{f}_j$,

$$\sum_{i=s}^j m(j, i) k(i, s) = \delta_{js}, \quad s = 1, 2, \dots, j.$$

(Через δ_{js} обозначается символ Кронекера: $\delta_{js} = 1$ и $\delta_{js} = 0$, если $j \neq s$). Полагая в этих равенствах $s = j$, находим, что

$$m(j, j)k(j, j) = 1 \quad \text{и} \quad m(j, j) \neq 0, \quad k(j, j) \neq 0.$$

Объединим полученные результаты в следующую лемму.

Лемма 5. *Если векторы одной из двух последовательностей линейно независимы, то эти последовательности эквивалентны тогда и только тогда, когда векторы какой-нибудь одной из них выражаются через векторы другой формулами (4.1), причем в этом случае обе последовательности состоят из линейно независимых векторов.*

Таким образом, в рассматриваемом случае как векторы $\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots, \mathbf{f}_e$, так и векторы $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \dots, \mathbf{g}_e$ образуют базисы в их общих линейных оболочках, и переход от одного базиса к другому задается взаимно обратными треугольными матрицами

$$\left(\begin{array}{cccc} k(1,1) & 0 & 0 & \\ k(2,1) & k(2,2) & 0 & \vdots \\ \dots & \dots & \dots & 0 \\ k(l,1) & k(l,2) & & k(l,l) \end{array} \right); \left(\begin{array}{cccc} m(1,1) & 0 & 0 & \\ m(2,1) & m(2,2) & 0 & \vdots \\ \dots & \dots & \dots & 0 \\ m(l,1) & m(l,2) & & m(l,l) \end{array} \right),$$

$$l = 1, 2, \dots$$

Пусть в произвольном гильбертовом пространстве со скалярным произведением $\langle \mathbf{f}, \mathbf{g} \rangle$ задана конечная или бесконечная последовательность линейно независимых векторов $\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots$.

Процесс ортогонализации Шмидта–Сони́на позволяет построить эквивалентную последовательность $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \dots$ ортонормированных векторов, т.е. перейти от заданных базисов $\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots, \mathbf{f}_e$ подпространств $\{\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots, \mathbf{f}_e\}$ к их ортонормированным базисам *треугольными* преобразованиями. Этот процесс удобно провести в два этапа. Сначала построить последовательность попарно ортогональных векторов $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \dots$, эквивалентную заданной, а затем перейти к последовательности ортонормированных векторов $\mathbf{e}_1 = \|\mathbf{g}_1\|^{-1}\mathbf{g}_1$, $\mathbf{e}_2 = \|\mathbf{g}_2\|^{-1}\mathbf{g}_2$, которая, очевидно, тоже будет эквивалентна заданной.

Согласно лемме 5, последовательность векторов $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \dots$, удовлетворяющая равенствам

$$\mathbf{f}_j = \mathbf{g}_j + \sum_{i=1}^{j-1} m(j,i)\mathbf{g}_i, \quad j = 1, 2, \dots, \quad (4.4)$$

эквивалентна последовательности линейно независимых векторов $\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots$, каковы бы ни были коэффициенты $m(j,i)$ ($i < j$). Следовательно, нам достаточно найти такие векторы $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \dots$, и коэффициенты $m(j,i)$ ($i < j$), чтобы, кроме равенств (4.4), выполнялись также условия ортогональности:

$$\langle \mathbf{g}_j, \mathbf{g}_i \rangle = 0, \quad j > i. \quad (4.5)$$

Этими требованиями векторы \mathbf{g}_j и коэффициенты $m(j, i)$ определяются однозначно, и метод ортогонализации Шмидта–Сонина позволяет последовательно найти их. Действительно, полагая в равенствах (4.4) $j = 1$, находим, что $\mathbf{g}_1 = \mathbf{f}_1$, а полагая $j = 2$, находим, что $\mathbf{g}_2 = \mathbf{f}_2 - m(2, 1)\mathbf{g}_1$, откуда в силу (4.5) следует, что коэффициент $m(2, 1)$ нужно найти из уравнения

$$0 = \langle \mathbf{f}_2, \mathbf{g}_1 \rangle - m(2, 1)\|\mathbf{g}_1\|^2,$$

т.е. $m(2, 1) = \|\mathbf{g}_1\|^{-2}\langle \mathbf{f}_2, \mathbf{g}_1 \rangle$

Таким образом, последовательность двух ортогональных векторов $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2$, эквивалентная последовательности $\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2$, построена.

Предположим, что коэффициенты $m(j, i)$, $j > i$, $2 \leq j \leq k - 1$ и попарно ортогональные векторы $\mathbf{g}_1, \dots, \mathbf{g}_{k-1}$ уже построены. Тогда согласно лемме 5 векторы $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \dots, \mathbf{g}_{k-1}$ тоже линейно независимы и $\|\mathbf{g}_i\| \neq 0$, $i = 1, 2, \dots, k - 1$. Коэффициенты $m(k, i)$, $k > i$ и вектор \mathbf{g}_k находим из уравнения

$$\mathbf{g}_k = \mathbf{f}_k - \sum_{i=1}^{k-1} m(k, i)\mathbf{g}_i$$

и условий ортогональности

$$\langle \mathbf{g}_k, \mathbf{g}_s \rangle = \left\langle \mathbf{f}_k - \sum_{i=1}^{k-1} m(k, i)\mathbf{g}_i, \mathbf{g}_s \right\rangle = 0, \quad s < k,$$

которые, в силу ортогональности уже построенных векторов, сводятся к уравнениям

$$0 = \langle \mathbf{f}_k, \mathbf{g}_s \rangle - m(k, s)\|\mathbf{g}_s\|^2,$$

из которых коэффициенты $m(k, s)$ однозначно определяются:

$$m(k, s) = \|\mathbf{g}_s\|^{-2}\langle \mathbf{f}_k, \mathbf{g}_s \rangle.$$

Продолжая этот процесс, мы построим последовательность попарно ортогональных векторов $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \dots$, эквивалентную заданной последовательности линейно независимых векторов $\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots$, нормируя которую, получим искомую ортонормированную последовательность $\mathbf{e}_1 = \|\mathbf{g}_1\|^{-1}\mathbf{g}_1, \mathbf{e}_2 = \|\mathbf{g}_2\|^{-1}\mathbf{g}_2, \dots$, тоже эквивалентную последовательности $\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots$.

Задачу построения последовательности ортонормированных векторов $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \dots$, эквивалентной данной последовательности линейно независимых векторов $\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots$, можно решить и другим способом. Как мы видели, из линейной независимости векторов $\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots$ следует, что равенства

$$\{\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \dots, \mathbf{g}_s\} = \{\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots, \mathbf{f}_s\} \quad s = 1, 2, \dots \quad (4.6)$$

(то есть эквивалентность последовательностей $\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots$ и $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \dots$) выполняется тогда и только тогда, когда

$$\mathbf{g}_j = \sum_{i=1}^j k(j, i)\mathbf{f}_i, \quad k(j, j) \neq 0 \quad j = 1, 2, \dots \quad (4.7)$$

Следовательно, для решения поставленной задачи нужно только так подобрать коэффициенты $k(j, i)$, чтобы выполнялись условия ортогональности

$$\langle \mathbf{g}_j, \mathbf{g}_s \rangle = 0 \quad 1 \leq s \leq j - 1 \quad (4.8)$$

и нормировки

$$\langle \mathbf{g}_s, \mathbf{g}_s \rangle = 1. \quad (4.9)$$

Условия ортогональности означают, что векторы \mathbf{g}_j должны быть ортогональны векторам \mathbf{g}_s с меньшими номерами и не накладывают ограничений на вектор $\mathbf{g}_1 = k(1, 1)\mathbf{f}_1$. Коэффициент $k(1, 1)$ находится из условия нормировки

$$1 = \langle \mathbf{g}_1, \mathbf{g}_1 \rangle = k(1, 1)\overline{k(1, 1)}\langle \mathbf{f}_1, \mathbf{f}_1 \rangle,$$

в силу которого $k(1, 1) = \theta_1 \|\mathbf{f}_1\|^{-1}$, где θ_1 — произвольное число с модулем равным единице. Поэтому

$$\mathbf{g}_1 = \frac{\theta_1}{\sqrt{\langle \mathbf{f}_1, \mathbf{f}_1 \rangle}} \mathbf{f}_1, \quad |\theta_1| = 1, \quad (4.10)$$

и в дальнейшем можем считать $j \geq 2$.

Из (4.6) следует, что равенства (4.8) выполняются тогда и только тогда, когда

$$\langle \mathbf{g}_j, \mathbf{f}_s \rangle = 0, \quad s = 1, 2, \dots, j-1, \quad (4.8')$$

то есть условия ортогональности равносильны равенствам

$$0 = \sum_{i=1}^j k(j, i) \langle \mathbf{f}_i, \mathbf{f}_s \rangle = k(j, j) \langle \mathbf{f}_j, \mathbf{f}_s \rangle + \sum_{i=1}^{j-1} k(j, i) \langle \mathbf{f}_i, \mathbf{f}_s \rangle,$$

которые после деления на $k(j, j)$ приводят к таким системам линейных уравнений

$$0 = \langle \mathbf{f}_j, \mathbf{f}_s \rangle + \sum_{i=1}^{j-1} p(j-1, i) \langle \mathbf{f}_i, \mathbf{f}_s \rangle, \quad s = 1, 2, \dots, j-1, \quad (4.11)$$

относительно неизвестных

$$p(j-1, i) = \frac{k(j, i)}{k(j, j)}, \quad i = 1, 2, \dots, j-1, \quad (4.12)$$

Матрицы этих систем, равные

$$\begin{pmatrix} \langle \mathbf{f}_1, \mathbf{f}_1 \rangle & \langle \mathbf{f}_2, \mathbf{f}_1 \rangle & \cdots & \langle \mathbf{f}_{j-1}, \mathbf{f}_1 \rangle \\ \langle \mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2 \rangle & \langle \mathbf{f}_2, \mathbf{f}_2 \rangle & \cdots & \langle \mathbf{f}_{j-1}, \mathbf{f}_2 \rangle \\ \vdots & & & \\ \langle \mathbf{f}_1, \mathbf{f}_{j-1} \rangle & \langle \mathbf{f}_2, \mathbf{f}_{j-1} \rangle & \cdots & \langle \mathbf{f}_{j-1}, \mathbf{f}_{j-1} \rangle \end{pmatrix} \quad (4.13)$$

называются матрицами Грамма векторов $\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots, \mathbf{f}_{j-1}$.

Определители матрицы Грамма называются определителями Грамма и обозначаются через $\Gamma(\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots, \mathbf{f}_{j-1})$. Определители Грамма линейно независимых векторов строго больше нуля, откуда следует, что при любом $j = 1, 2, \dots$ системы уравнений (4.11) однозначно разрешимы. Действительно, обозначим через $\mathbf{\Gamma}_{j-1}$ линейный оператор, действующий в пространстве $\mathbf{H}([j-1])$, матрица которого в каноническом базисе равна матрице Грамма (4.13). Так как $\langle \mathbf{f}_i, \mathbf{f}_s \rangle = \overline{\langle \mathbf{f}_s, \mathbf{f}_i \rangle}$, то оператор $\mathbf{\Gamma}_{j-1}$ самосопряжен, имеет вещественные собственные значения, произведение которых (с учетом кратности) равно определителю $\Gamma(\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots, \mathbf{f}_{j-1})$.

Обозначим через μ наименьшее собственное значение оператора $\mathbf{\Gamma}_{j-1}$ и через $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_{j-1}) \in \mathbf{H}([j-1])$ соответствующий собственный вектор. Тогда

$$(\mathbf{\Gamma}_{j-1}\mathbf{x}, \mathbf{x}) = \mu(\mathbf{x}, \mathbf{x}),$$

а согласно (4.13)

$$(\mathbf{\Gamma}_{j-1}\mathbf{x}, \mathbf{x}) = \sum_{s=1}^{j-1} \left(\sum_{i=1}^{j-1} \langle \mathbf{f}_i, \mathbf{f}_s \rangle x_i \right) \bar{x}_s = \left\langle \sum_{i=1}^{j-1} x_i \mathbf{f}_i, \sum_{s=1}^{j-1} x_s \mathbf{f}_s \right\rangle.$$

Поэтому

$$\mu(\mathbf{x}, \mathbf{x}) = \left\| \sum_{i=1}^{j-1} x_i \mathbf{f}_i \right\|^2$$

и, если векторы $\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots, \mathbf{f}_{j-1}$ линейно независимы, то $\mu > 0$. Следовательно, у матрицы (4.13) все собственные значения положительны, а, значит, ее определитель $\Gamma(\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots, \mathbf{f}_{j-1})$ тоже положителен, и система уравнений (4.11) однозначно разрешима. Решив эти уравнения (например по правилу Крамера) мы получим, согласно (4.7), (4.12), такие формулы для всех ортогональных последовательностей $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \dots$, эквивалентных данной последовательности линейно независимых векторов $\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots$:

$$\mathbf{g}_j = k(j, j) \left\{ \mathbf{f}_j + \sum_{i=1}^{j-1} p(j-1, i) \mathbf{f}_i \right\}, \quad k(j, j) \neq 0. \quad (4.14)$$

Остается произвольные коэффициенты $k(j, j) \neq 0$ подобрать так, чтобы выполнялись условия нормировки (4.9). Умножив обе части последнего равенства скалярно на произвольный вектор \mathbf{h} , после элементарных преобразований получим равенство

$$0 = \langle \mathbf{f}_j, \mathbf{h} \rangle - \frac{1}{k(j, j)} \langle \mathbf{g}_j, \mathbf{h} \rangle + \sum_{i=1}^{j-1} p(j-1, i) \langle \mathbf{f}_i, \mathbf{h} \rangle,$$

присоединив которое к равенствам (4.11), убеждаемся, что система однородных уравнений

$$\begin{aligned} y_1 \langle \mathbf{f}_1, \mathbf{f}_1 \rangle + y_2 \langle \mathbf{f}_2, \mathbf{f}_1 \rangle + \dots + y_{j-1} \langle \mathbf{f}_{j-1}, \mathbf{f}_1 \rangle + y_j \langle \mathbf{f}_j, \mathbf{f}_1 \rangle &= 0 \\ \vdots & \\ y_1 \langle \mathbf{f}_1, \mathbf{f}_{j-1} \rangle + y_2 \langle \mathbf{f}_2, \mathbf{f}_{j-1} \rangle + \dots + y_{j-1} \langle \mathbf{f}_{j-1}, \mathbf{f}_{j-1} \rangle + y_j \langle \mathbf{f}_j, \mathbf{f}_{j-1} \rangle &= 0 \\ y_1 \langle \mathbf{f}_1, \mathbf{h} \rangle + y_2 \langle \mathbf{f}_2, \mathbf{h} \rangle + \dots + y_{j-1} \langle \mathbf{f}_{j-1}, \mathbf{h} \rangle + y_j \left(\langle \mathbf{f}_j, \mathbf{h} \rangle - \frac{1}{k(j, j)} \langle \mathbf{g}_j, \mathbf{h} \rangle \right) &= 0 \end{aligned}$$

имеет ненулевое решение

$$y_1 = p(j-1, 1), \quad y_2 = p(j-1, 2), \dots, \quad y_{j-1} = p(j-1, j-1), \quad y_j = 1.$$

Следовательно определитель матрицы коэффициентов системы равен нулю. Представив этот определитель в виде суммы двух определителей, у которых последние столбцы соответственно равны $0, 0, \dots, 0, -\frac{1}{k(j, j)} \langle \mathbf{g}_j, \mathbf{h} \rangle$ и $\langle \mathbf{f}_j, \mathbf{f}_1 \rangle, \langle \mathbf{f}_j, \mathbf{f}_2 \rangle \dots \langle \mathbf{f}_j, \mathbf{h} \rangle$, получим равенство

$$0 = -\frac{\Gamma(\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots, \mathbf{f}_{j-1})}{k(j, j)} \langle \mathbf{g}_j, \mathbf{h} \rangle + \begin{vmatrix} \langle \mathbf{f}_1, \mathbf{f}_1 \rangle & \langle \mathbf{f}_2, \mathbf{f}_1 \rangle & \dots & \langle \mathbf{f}_j, \mathbf{f}_1 \rangle \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \langle \mathbf{f}_1, \mathbf{f}_{j-1} \rangle & \langle \mathbf{f}_2, \mathbf{f}_{j-1} \rangle & \dots & \langle \mathbf{f}_j, \mathbf{f}_{j-1} \rangle \\ \langle \mathbf{f}_1, \mathbf{h} \rangle & \langle \mathbf{f}_2, \mathbf{h} \rangle & \dots & \langle \mathbf{f}_j, \mathbf{h} \rangle \end{vmatrix}, \quad (4.15)$$

из которого, ввиду произвольности вектора \mathbf{h} , следует, что

$$\mathbf{g}_j = \frac{k(j, j)}{\Gamma(\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots, \mathbf{f}_{j-1})} \begin{vmatrix} \langle \mathbf{f}_1, \mathbf{f}_1 \rangle & \langle \mathbf{f}_2, \mathbf{f}_1 \rangle & \cdots & \langle \mathbf{f}_j, \mathbf{f}_1 \rangle \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \langle \mathbf{f}_1, \mathbf{f}_{j-1} \rangle & \langle \mathbf{f}_2, \mathbf{f}_{j-1} \rangle & \cdots & \langle \mathbf{f}_j, \mathbf{f}_{j-1} \rangle \\ \mathbf{f}_1 & \mathbf{f}_2 & \cdots & \mathbf{f}_j \end{vmatrix}, \quad (4.16)$$

где стоящий справа определитель нужно раскрыть по обычным правилам (т.е. считается, что в нижней строчке стоят не векторы, а числа). Конечно, эта формула есть не что иное, как формула (4.14), в которую вместо $p(j-1, i)$ подставлены решения системы (4.11). Наконец, полагая в (4.15) $\mathbf{h} = \mathbf{g}_j$ и замечая, что согласно (4.8') $\langle \mathbf{f}_s, \mathbf{g}_j \rangle = \overline{\langle \mathbf{g}_j, \mathbf{f}_s \rangle} = 0$ при всех $s = 1, 2, \dots, j-1$, получим

$$\langle \mathbf{g}_j, \mathbf{g}_j \rangle = \frac{k(j, j)}{\Gamma(\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots, \mathbf{f}_{j-1})} \cdot \Gamma(\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots, \mathbf{f}_{j-1}) \cdot \langle \mathbf{f}_j, \mathbf{g}_j \rangle = k(j, j) \langle \mathbf{f}_j, \mathbf{g}_j \rangle,$$

а полагая $\mathbf{h} = \mathbf{f}_j$, получим:

$$\langle \mathbf{g}_j, \mathbf{f}_j \rangle = \frac{k(j, j)}{\Gamma(\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots, \mathbf{f}_{j-1})} \cdot \Gamma(\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots, \mathbf{f}_j)$$

Следовательно

$$\langle \mathbf{g}_j, \mathbf{g}_j \rangle = k(j, j) \overline{k(j, j)} \frac{\Gamma(\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots, \mathbf{f}_j)}{\Gamma(\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots, \mathbf{f}_{j-1})},$$

и для того, чтобы удовлетворить условиям нормировки (4.9) нужно положить

$$k(j, j) = \theta_j \sqrt{\frac{\Gamma(\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots, \mathbf{f}_{j-1})}{\Gamma(\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots, \mathbf{f}_j)}}, \quad |\theta_j| = 1.$$

Отсюда согласно (4.15) и (4.10) следует

Лемма 6. Все последовательности ортонормированных векторов, эквивалентные данной последовательности линейно независимых векторов $\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots$, определяются формулами

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_1 &= \frac{\theta_1}{\sqrt{\Gamma(\mathbf{f}_1)}} \mathbf{f}_1, \\ \mathbf{e}_j &= \frac{\theta_j}{\sqrt{\Gamma_{j-1}\Gamma_j}} \begin{vmatrix} \langle \mathbf{f}_1, \mathbf{f}_1 \rangle & \langle \mathbf{f}_2, \mathbf{f}_1 \rangle & \cdots & \langle \mathbf{f}_j, \mathbf{f}_1 \rangle \\ \vdots & & & \\ \langle \mathbf{f}_1, \mathbf{f}_{j-1} \rangle & \langle \mathbf{f}_2, \mathbf{f}_{j-1} \rangle & \cdots & \langle \mathbf{f}_j, \mathbf{f}_{j-1} \rangle \\ \mathbf{f}_1 & \mathbf{f}_2 & \cdots & \mathbf{f}_j \end{vmatrix}, \end{aligned} \quad (4.17)$$

где через θ_j обозначены произвольные числа, модули которых равны единице $|\theta_j| = 1$ и $\Gamma_j = \Gamma(\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots, \mathbf{f}_j)$.

В дальнейшем нам понадобится только частный случай этой леммы, когда гильбертовым пространством служит линейное многообразие \mathbb{P}_N полиномов степени $\leq N - 1$, в котором скалярное произведение определено формулой

$$\langle R, G \rangle = \int R(\lambda) \overline{G(\lambda)} d\sigma(\lambda), \quad (4.18)$$

где $\sigma(\lambda)$ — произвольная неубывающая кусочно-постоянная функция, имеющая N точек разрыва непрерывности, сумма скачков в которых равна единице. Такое гильбертово пространство мы будем обозначать через $\mathbb{P}_N(\sigma)$. Естественным базисом этого пространства является последовательность степеней $1, \lambda, \dots, \lambda^{N-1}$. Введем стандартные обозначения

$$s(k) = \int \lambda^k d\sigma(\lambda)$$

для степенных моментов меры $d\sigma(\lambda)$, и условимся, ради краткости, определители Грамма $\Gamma(1, \dots, \lambda^{j-1})$ ($j \geq 1$) обозначать через D_j ,

полагая $D_0 = 1$ для удобства. Тогда согласно (4.18) $\langle \lambda^i, \lambda^j \rangle = s(i+j)$ и

$$D_j = \Gamma(1, \lambda, \dots, \lambda^{j-1}) = \begin{vmatrix} s(0) & \cdots & s(j-1) \\ s(1) & \cdots & s(j-1) \\ \vdots & & \\ s(j-1) & \cdots & s(2j-2) \end{vmatrix}, \quad j \geq 1, D_0 = 1.$$

Перепишем лемму 6 для пространства $\mathbb{P}_N(\sigma)$, используя введенные обозначения.

Лемма 6'. *Все ортонормированные базисы пространства $\mathbb{P}_N(\sigma)$, эквивалентные естественному базису, образуются полиномами*

$$p(j, \lambda) = \frac{\theta_j}{\sqrt{D_{j-1}D_j}} \begin{vmatrix} s(0) & \cdots & s(j-1) \\ \vdots & & \\ s(j-2) & \cdots & s(2j-3) \\ 1 & \cdots & \lambda^{j-1} \end{vmatrix} \quad (4.19)$$

где θ_j — произвольные числа по модулю равные единице.

Следовательно ортонормированный базис, эквивалентный естественному, определяется мерой $d\sigma(\lambda)$ однозначно, с точностью до произвольных множителей θ_j , $|\theta_j| = 1$.

§ 5. Построение трехдиагональной матрицы с заданной спектральной функцией

В предыдущих параграфах было показано, что с каждой вещественной самосопряженной трехдиагональной матрицей N -го порядка связаны:

а) последовательность полиномов

$$P(j, \lambda) = \sum_{i=1}^j k(j, i) \lambda^{i-1}, \quad j = 1, 2, \dots, N, \quad (5.1)$$

определяемых рекуррентными формулами (2.9);

в) спектральная функция $\sigma(\lambda)$ и гильбертово пространство $\mathbb{P}_N(\sigma)$ с скалярным произведением (3.5'), в котором полиномы (5.1) образуют ортонормированный базис, эквивалентный естественному базису $1, \lambda, \dots, \lambda^{N-1}$.

При этом элементы матрицы выражаются через коэффициенты полиномов $P(j, \lambda)$ формулами

$$b_j = -\frac{k(j, j)}{k(j+1, j+1)}; \quad a_j = \frac{k(j, j-1)}{k(j, j)} - \frac{k(j+1, j)}{k(j+1, j+1)}; \\ j = 1, 2, \dots, N-1, \quad (5.2) \\ a_N = \frac{k(N, N-1)}{k(N, N)} + \sum_{j=1}^N \lambda_j,$$

где $k(1, 0) = 0$, а $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N$ — собственные значения матрицы.

В § 4, ортогонализуя последовательность степеней $1, \lambda, \dots, \lambda^{N-1}$, мы нашли все ортонормированные базисы пространства $\mathbb{P}_N(\sigma)$, эквивалентные его естественному базису. Полиномы, образующие эти базисы, находятся однозначно, с точностью до произвольных множителей θ_j , по модулю равных единице, и явно выражаются через степенные моменты меры $d\sigma(\lambda)$ формулами (4.19). В частности, полиномы (5.1) тоже выражаются этими формулами при соответствующих значениях множителей θ_j , которые, конечно, нельзя

найти, зная только спектральную функцию. Однако, из рекуррентных формул (2.9) следует, что полиномы (5.1) вещественны, знаки их старших коэффициентов чередуются и $k(1, 1) = 1$. Поэтому мы получим эти полиномы, если в формулах (4.19) положим $\theta_j = (-1)^{j-1}$. Раскрыв стоящие в этих формулах определители по элементам нижней строки, получим следующие окончательные выражения для полиномов (5.1):

$$P(j, \lambda) = \frac{(-1)^{j-1}}{\sqrt{D_j D_{j-1}}} \left\{ \Delta_{j-1}^j \lambda^{j-1} + \Delta_{j-2}^j \lambda^{j-2} + \dots + \Delta_0^j \right\}, \quad (5.3)$$

где $D_0 = \Delta_0^1 = 1$, $D_{j-1} = \Delta_{j-1}^j$ и через Δ_p^j ($p = 0, 1, \dots, j-1$) обозначены алгебраические дополнения к элементам λ^p в определителе

$$\begin{vmatrix} s(0) & \dots & s(p) & \dots & s(j-1) \\ \vdots & & & & \\ s(j-2) & \dots & s(p+j-2) & \dots & s(2j-3) \\ 1 & \dots & \lambda^p & \dots & \lambda^{j-1} \end{vmatrix}$$

Следовательно у полиномов (5.1) два старших коэффициента равны

$$k(j, j) = (-1)^{j-1} \sqrt{\frac{D_{j-1}}{D_j}}; \quad k(j, j-1) = (-1)^{j-1} \frac{\Delta_{j-2}^j}{\sqrt{D_j D_{j-1}}}$$

и согласно (5.2)

$$b_j = \frac{\sqrt{D_{j-1} D_{j+1}}}{D_j}; \quad a_j = \frac{\Delta_{j-2}^j}{D_{j-1}} - \frac{\Delta_{j-1}^{j+1}}{D_j}; \quad j = 1, 2, \dots, N-1, \quad (5.4)$$

$$a_N = \frac{\Delta_{N-2}^N}{D_{N-1}} + \sum_{j=1}^N \lambda_j. \quad (5.5)$$

§ 5. Построение трехдиагональной матрицы по спектральной функции

Мы видим, что рассматриваемые нами трехдиагональные матрицы однозначно определяются своими спектральными функциями, и решение обратной задачи о восстановлении трехдиагональной матрицы по ее спектральной функции дается формулами (5.4), (5.5).

В теории обратных задач полученный результат часто называют условным решением обратной задачи, т.к. оно получено при условии, что заданная функция $\sigma(\lambda)$ является спектральной функцией некоторой трехдиагональной матрицы, и задача состоит только в восстановлении этой матрицы. Для полного решения обратной задачи нужно еще найти необходимые и достаточные условия, которым должна удовлетворять функция $\sigma(\lambda)$ для того, чтобы она была спектральной функцией некоторой трехдиагональной матрицы.

Мы знаем (лемма 4'), что спектральные функции неубывают, кусочно постоянны, имеют ровно N скачков, сумма которых равна единице. Докажем теперь, что любая функция, обладающая этими свойствами, является спектральной функцией некоторой самосопряженной трехдиагональной матрицы N -го порядка.

Рассмотрим сначала произвольную неубывающую функцию $\rho(\lambda)$, удовлетворяющую условиям

- 1) $\int \lambda^{2N} d\rho(\lambda) < \infty$,
- 2) если $Q(\lambda) \in \mathbb{P}_N$ и $\int Q(\lambda)\overline{Q(\lambda)} d\rho(\lambda) = 0$, то $Q(\lambda) = 0$,
- 3) $\int d\rho(\lambda) = 1$, $\rho(-\infty) = 0$.

Очевидно, что первые два условия достаточны для того, чтобы билинейный функционал

$$\langle R, Q \rangle_\rho = \int R(\lambda)\overline{Q(\lambda)} d\rho(\lambda) \quad (5.6)$$

можно было взять в качестве скалярного произведения в линейном пространстве \mathbb{P}_N и превратить его в гильбертово пространство $\mathbb{P}_N(\rho)$. Ортогонализуя естественный базис $1, \lambda, \dots, \lambda^{N-1}$ этого пространства, мы получим ортонормированный базис, эквивалентный

естественному. Согласно лемме 6' он состоит из полиномов, определенных формулами (4.19), в которых через $s(p)$ обозначены степенные моменты меры $d\rho(\lambda)$, а числа θ_j ($|\theta_j| = 1$) — произвольны. Полагая $\theta_j = (-1)^{j-1}$, получим последовательность вещественных полиномов $P(1, \lambda) = 1, P(2, \lambda), \dots, P(N, \lambda)$, определенных теми же формулами (5.3), в которых через $s(p)$ обозначены степенные моменты меры $d\rho(\lambda)$. Так как эти полиномы образуют ортонормированный базис пространства $\mathbb{P}_N(\rho)$, эквивалентный естественному, то

$$\{1, \lambda, \dots, \lambda^j\} = \{P(1, \lambda), P(2, \lambda), \dots, P(j+1, \lambda)\}, \quad j = 0, 1, \dots, N-1,$$

откуда следует, что каждый полином $P(k, \lambda)$ ортогонален всем полиномам степени $\leq k-2$.

Так как степень полинома $\lambda P(j, \lambda)$ равна j , то при $j \leq N-1$ он принадлежит пространству $\mathbb{P}_N(\rho)$ и разлагается по этому ортонормированному базису:

$$\lambda P(j, \lambda) = \sum_{k=1}^N \langle \lambda P(j, \lambda), P(k, \lambda) \rangle_{\rho} P(k, \lambda). \quad (5.7)$$

Согласно вышесказанному $\langle \lambda P(j, \lambda), P(k, \lambda) \rangle_{\rho} = 0$, если $j \leq k-2$, а т.к. из определения скалярного произведения (5.6) и вещественности полиномов $P(j, \lambda)$ следует, что

$$\langle \lambda P(j, \lambda), P(k, \lambda) \rangle_{\rho} = \langle P(j, \lambda), \lambda P(k, \lambda) \rangle_{\rho} = \langle \lambda P(k, \lambda), P(j, \lambda) \rangle_{\rho}, \quad (5.8)$$

то $\langle \lambda P(j, \lambda), P(k, \lambda) \rangle_{\rho} = 0$, если $j \leq k-2$, или $j \geq k+2$.

Поэтому в разложении (5.7) отличны от нуля только три коэффициента при k равном $j-1$, j и $j+1$. Полагая

$$b_{j-1} = -\langle \lambda P(j, \lambda), P(j-1, \lambda) \rangle_{\rho}, \quad a_j = \langle \lambda P(j, \lambda), P(j, \lambda) \rangle_{\rho} \quad (5.9)$$

и замечая, что согласно (5.8)

$$\langle \lambda P(j, \lambda), P(j+1, \lambda) \rangle_{\rho} = \langle \lambda P(j+1, \lambda), P(j, \lambda) \rangle_{\rho} = -b_j,$$

§ 5. Построение трехдиагональной матрицы по спектральной функции

мы видим, что разложение (5.7) имеет такой вид:

$$\lambda P(j, \lambda) = -b_{j-1}P(j-1, \lambda) + a_j P(j, \lambda) - b_j P(j+1, \lambda),$$

где $b_0 = 0$ и $j = 1, 2, \dots, N-1$. Из формул (5.3) следует, что у полиномов j -й степени $\lambda P(j, \lambda)$ и $P(j+1, \lambda)$ коэффициенты при λ^j соответственно равны

$$(-1)^{j-1} \sqrt{\frac{D_{j-1}}{D_j}} \quad \text{и} \quad (-1)^j \sqrt{\frac{D_j}{D_{j+1}}}.$$

Следовательно степень полинома

$$Q(\lambda) = \lambda P(j, \lambda) + \frac{\sqrt{D_{j+1}D_{j-1}}}{D_j} P(j+1, \lambda)$$

не превосходит $j-1$, и согласно вышесказанному $\langle Q(\lambda), P(j+1, \lambda) \rangle_\rho = 0$, откуда следует, что

$$\langle \lambda P(j, \lambda), P(j+1, \lambda) \rangle_\rho + \frac{\sqrt{D_{j+1}D_{j-1}}}{D_j} \langle P(j+1, \lambda), P(j+1, \lambda) \rangle_\rho = 0,$$

и т.к. $\langle P(j+1, \lambda), P(j+1, \lambda) \rangle_\rho = 1$, то

$$b_j = -\langle \lambda P(j, \lambda), P(j+1, \lambda) \rangle_\rho = \frac{\sqrt{D_{j+1}D_{j-1}}}{D_j} > 0.$$

Таким образом, полиномы $P(1, \lambda), P(2, \lambda), \dots, P(N, \lambda)$ порождаются вещественной трехдиагональной матрицей

$$\begin{pmatrix} a_1 & -b & & \dots & 0 \\ -b_1 & a_2 & -b_2 & & \\ & & \ddots & & \vdots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \\ 0 & & & a_{N-1} & -b_{N-1} \\ & & & -b_{N-1} & a_N \end{pmatrix}, \quad b_j > 0 \quad (5.10)$$

рассматриваемого нами вида, элементы которой $a_j, b_j, j = 1, 2, \dots, N - 1$ определены формулами (5.9), а в качестве a_N можно взять любое вещественное число. Следовательно полиномы $P(1, \lambda), P(2, \lambda), \dots, P(N, \lambda)$ образуют ортонормированный базис в пространстве $\mathbb{P}_N(\sigma)$, где $\sigma(\lambda)$ — спектральная функция матрицы (5.10). По построению эти же полиномы образуют ортонормированный базис и в пространстве $\mathbb{P}_N(\rho)$, откуда следует, что функции $\rho(\lambda)$ и $\sigma(\lambda)$ порождают в линейном многообразии \mathbb{P}_N одно и то же скалярное произведение, т.е.

$$\int Q(\lambda)\overline{R(\lambda)} d\rho(\lambda) = \int Q(\lambda)\overline{R(\lambda)} d\sigma(\lambda) \quad (5.11)$$

для всех полиномов $Q(\lambda), R(\lambda)$ степени $\leq N - 1$.

Неубывающая, кусочно постоянная функция $\rho(\lambda)$, имеющая ровно N скачков, сумма которых равна единице, удовлетворяет, конечно, условиям 1), 2), 3).

Покажем, что такая функция является спектральной функцией $\sigma(\lambda)$ матрицы (5.10), у которой

$$a_N = \int \lambda P(N, \lambda)P(N, \lambda) d\rho(\lambda). \quad (5.12)$$

Мы знаем, что скачки спектральной функции $\sigma(\lambda)$ расположены в корнях полинома

$$D_N(\lambda) = -b_{N-1}P(N-1, \lambda) + (a_N - \lambda)P(N, \lambda).$$

Умножив обе части этого равенства на $P(j, \lambda)$ и проинтегрировав по мере $d\rho(\lambda)$, получим:

$$\begin{aligned} \int D_N(\lambda)P(j, \lambda) d\rho(\lambda) &= -b_{N-1}\langle P(N-1, \lambda), P(j, \lambda) \rangle_\rho \\ &+ a_N\langle P(N, \lambda), P(j, \lambda) \rangle_\rho - \int P(N, \lambda)\lambda P(j, \lambda) d\rho(\lambda). \end{aligned} \quad (5.13)$$

§ 5. Построение трехдиагональной матрицы по спектральной функции

Так как степень полинома $\lambda P(j, \lambda)$ равна j , то при $j \leq N - 2$ все три слагаемые в правой части этого равенства равны нулю. При $j = N - 1$ правая часть равна $-b_{N-1} - \langle \lambda P(N - 1, \lambda), P(N, \lambda) \rangle_\rho$ и согласно (5.9) тоже обращается в нуль. Наконец, при $j = N$ правая часть равна

$$a_N - \int \lambda P(N, \lambda) P(N, \lambda) d\rho(\lambda)$$

и в силу (5.12) она обращается в нуль.

Таким образом, правая часть равенства (5.13) обращается в нуль при всех $j = 1, \dots, N$, и, т.к. полиномы $P(j, \lambda)$ образуют базис линейного пространства \mathbb{P}_N , то

$$\int D_N(\lambda) Q(\lambda) d\rho(\lambda) = 0 \quad (5.14)$$

при всех $Q(\lambda) \in \mathbb{P}_N$. Пусть разрывы функции $\rho(\lambda)$ расположены в точках $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N$ и ее скачки в этих точках равны $\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_N$. Полагая в равенстве (5.14) $Q(\lambda) = \prod_{j \neq k} (\lambda - \lambda_j)$, находим, что

$$\int D_N(\lambda) \prod_{j \neq k} (\lambda - \lambda_j) d\rho(\lambda) = D_N(\lambda_k) \prod_{j \neq k} (\lambda_k - \lambda_j) \rho_k = 0$$

и т.к. $\prod_{j \neq k} (\lambda_k - \lambda_j) \rho_k \neq 0$, то $D_N(\lambda_k) = 0$.

Следовательно точки разрыва функции $\rho(\lambda)$ лежат в корнях полинома $D_N(\lambda)$, т.е. совпадает с точками разрыва спектральной функции $\sigma(\lambda)$. Наконец, полагая в (5.11) $Q(\lambda) = R(\lambda) = \prod_{j \neq k} (\lambda - \lambda_j)$, получим равенство

$$\prod_{j \neq k} (\lambda_k - \lambda_j)^2 \rho_k = \prod_{j \neq k} (\lambda_k - \lambda_j)^2 \sigma_k,$$

и вытекающее из него равенство $\rho_k = \sigma_k$, где через σ_k обозначены скачки спектральной функции $\sigma(\lambda)$ в точках λ_k .

Таким образом, функции $\rho(\lambda)$ и $\sigma(\lambda)$ имеют одинаковые точки разрыва и одинаковые скачки в этих точках, откуда следует,

что $\rho(\lambda) = \sigma(\lambda)$ (в силу принятой нами нормировки $\sigma(-\infty) = 0$, $\rho(-\infty) = 0$).

Суммируя все результаты настоящего параграфа, приходим к следующей теореме.

Теорема 1. 1) *Вещественные трехдиагональные матрицы L вида*

$$\begin{pmatrix} a_1 & -b & & \cdots & 0 \\ -b_1 & a_2 & -b_2 & & \\ 0 & & \ddots & & \vdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \\ & & & a_{N-1} & -b_{N-1} \\ & & & -b_{N-1} & a_N \end{pmatrix}, \quad b_j > 0 \quad (5.15)$$

однозначно определяются своими спектральными функциями, и для того чтобы функция $\sigma(\lambda)$ была спектральной функцией некоторой матрицы N -го порядка вида (5.15) необходимо и достаточно, чтобы она неубывала, была кусочно-постоянной и имела ровно N точек разрыва непрерывности, сумма скачков в которых равна единице.

2) *Порождаемые матрицей (5.15) ортогональные полиномы выражаются следующими формулами*

$$P(j, \lambda) = \frac{(-1)^{j-1}}{\sqrt{\Delta_j^{j+1} \Delta_{j-1}^j}} \sum_{p=0}^{j-1} \Delta_p^j \lambda^p, \quad j = 1, 2, \dots, N \quad (5.16)$$

через степенные моменты $s(p) = \int \lambda^p d\sigma(\lambda)$ ее спектральной функции. Здесь $\Delta_0^1 = 1$ и при $j > 1$ через Δ_p^j обозначены алгебраические дополнения к элементам λ^p определителя

$$\begin{vmatrix} s(0) & \cdots & s(p) & \cdots & s(j-1) \\ \vdots & & & & \\ s(j-2) & \cdots & s(p+j-2) & \cdots & s(2j-3) \\ 1 & \cdots & \lambda^p & \cdots & \lambda^{j-1} \end{vmatrix}. \quad (5.17)$$

§ 5. Построение трехдиагональной матрицы по спектральной функции

3) Элементы матрицы (5.15) выражаются через ее спектральную функцию формулами

$$\begin{aligned} -b_j &= \int \lambda P(j, \lambda) P(j-1, \lambda) d\sigma(\lambda) \quad j = 1, 2, \dots, N-1; \\ a_j &= \int \lambda P(j, \lambda) P(j, \lambda) d\sigma(\lambda) \quad j = 1, 2, \dots, N, \end{aligned} \quad (5.18)$$

а также эквивалентными им формулами

$$\begin{aligned} b_j &= \frac{\sqrt{\Delta_{j+1}^{j+2} \Delta_{j-1}^j}}{\Delta_j^{j+1}}, \quad a_j = \frac{\Delta_{j-2}^j}{\Delta_{j-1}^j} - \frac{\Delta_{j-1}^{j+1}}{\Delta_j^j}; \\ a_N &= \frac{\Delta_{N-2}^N}{\Delta_{N-1}^N} + \sum_{j=1}^N \lambda_j, \end{aligned} \quad (5.19)$$

где через λ_j ($j = 1, 2, \dots, N-1$) обозначены точки разрыва непрерывности спектральной функции, которые совпадают с собственными значениями матрицы.

Ключевым моментом доказательства этой теоремы был процесс ортогонализации последовательности степеней $1, \lambda, \dots, \lambda^{N-1}$, позволяющий найти все ортонормированные базисы пространства \mathbb{P}_N , эквивалентные его естественному базису. Те же ортонормированные базисы получатся, если провести ортогонализацию последовательности $Q(1, \lambda), Q(2, \lambda), \dots, Q(N, \lambda)$ любых полиномов $Q(j, \lambda)$ степени $j-1$. При этом сохраняются и все формулы теоремы 1, если элементы определителя (5.17) заменить на $\int Q(i, \lambda) \overline{Q(j, \lambda)} d\rho(\lambda)$, а λ^p — на $Q(p+1, \lambda)$.

Из теоремы 1 следует, что для отыскания всех матриц вида (5.15) с заданными собственными значениями $\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_N$ нужно взять произвольные положительные числа $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N$, сумма которых равна единице, определить спектральную функцию равенством

$$\sigma(\lambda) = \sum_{\lambda_j < \lambda} \sigma_j$$

и восстановить по ней указанным выше способом матрицу.

Следовательно семейство матриц вида (5.15), имеющих заданные собственные значения, зависит от $N - 1$ независимых положительных параметров $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{N-1}$, через которые скачки σ_j спектральных функций выражаются формулами

$$\sigma_j = \frac{\alpha_j}{1 + \sum_{j=1}^{N-1} \alpha_j}, \quad j = 1, 2, \dots, N-1, \quad \sigma_N = \frac{1}{1 + \sum_{j=1}^{N-1} \alpha_j}.$$

Решая обратную задачу спектрального анализа, мы ограничились рассмотрением вещественных симметрических матриц вида (5.15), у которых элементы, стоящие на побочных диагоналях строго отрицательны. Это связано с тем, что именно такой вид имеют матрицы \mathbf{L} в уравнениях (1.6), описывающих собственные колебания нагруженных струн. Кроме того, матрицы \mathbf{L} положительно определенные и их диагональные элементы a_j строго положительны. Из формул (5.18) следует, что матрицы (5.15) обладают этими свойствами тогда и только тогда, когда точки разрыва их спектральных функций лежат на положительной полуоси.

Рассмотрим в заключение произвольную трехдиагональную самосопряженную матрицу $\tilde{\mathbf{L}}$. Такую матрицу можно представить в виде $\tilde{\mathbf{L}} = \mathbf{U}\mathbf{L}\mathbf{U}^*$, где \mathbf{L} — трехдиагональная матрица вида (5.15), а \mathbf{U} — диагональная унитарная матрица вида

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} 1 & & & 0 \\ & e^{i\alpha_2} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & e^{i\alpha_N} \end{pmatrix}$$

Поэтому, применяя к вектор-функции

$$\mathbf{P}(\lambda) = (1, P(2, \lambda), \dots, P(N, \lambda)),$$

порождаемой матрицей \mathbf{L} , оператор \mathbf{U} мы получим вектор-функцию $\mathbf{U}\mathbf{P}(\lambda) = (1, e^{i\alpha_2} P(2, \lambda), \dots, e^{i\alpha_N} P(N, \lambda))$, удовлетворяю-

§ 5. Построение трехдиагональной матрицы по спектральной функции

щую уравнению

$$\tilde{\mathbf{L}}\mathbf{U}\mathbf{P}(\lambda) - \lambda\mathbf{U}\mathbf{P}(\lambda) = D_N(\lambda)e^{i\alpha_N}\mathbf{e}_N,$$

аналогичному уравнению (2.5). Легко видеть, что формулы (3.3'), (3.4') сохраняют свой вид, если вектор-функцию $\mathbf{P}(\lambda)$ заменить на $\mathbf{U}\mathbf{P}(\lambda)$, откуда следует, что спектральная функция $\sigma(\lambda)$ матрицы $\tilde{\mathbf{L}}$ играет ту же роль и для матрицы $\tilde{\mathbf{L}}$, а роль ортонормированного базиса $P(1, \lambda) = 1, P(2, \lambda), \dots, P(N, \lambda)$ пространства \mathbb{P}_N играют полиномы $1, e^{i\alpha_2}P(2, \lambda), \dots, e^{i\alpha_N}P(N, \lambda)$. Поэтому по спектральной функции матрицы $\tilde{\mathbf{L}}$ можно однозначно восстановить связанную с ней матрицу вида (5.15). Элементы унитарной матрицы \mathbf{U} выражаются через аргументы ϕ_k элементов матрицы $\tilde{\mathbf{L}}$, стоящих на нижней диагонали, формулами

$$e^{i\alpha_j} = \exp\left(i\sum_{k=1}^{j-1}(\phi_k - \pi)\right), \quad j = 2, 3, \dots, N.$$

следовательно для однозначного восстановления произвольной самосопряженной трехдиагональной матрицы нужно кроме ее спектральной функции знать эти аргументы. Матрицы вида (5.15) однозначно восстанавливаются только по спектральной функции потому что эти аргументы известны (они равны π).

§ 6. Построение трехдиагональных матриц по двум спектрам

Решенная в предыдущем параграфе задача о построении трехдиагональной матрицы, с заданной спектральной функцией, является наиболее общей обратной задачей спектрального анализа, имеющей далеко идущие обобщения. В этой задаче кроме собственных значений матрицы задаются еще параметры иного рода — нормировочные коэффициенты. Собственные значения рассматриваемых матриц равны квадратам частот свободных колебаний соответствующих нагруженных струн. А частоты являются главной характеристикой колеблющейся струны и могут быть измерены (или услышаны наблюдателем), когда сама струна недоступна для наблюдателя. Поэтому с физической точки зрения в постановке обратной задачи желательно исключить нормировочные коэффициенты, заменив их подходящими частотными характеристиками нагруженных струн.

С этой целью наряду с колебаниями всей струны рассмотрим колебания укороченных струн, получающихся из нее после удаления всех масс и соединяющих их пружин, начиная с $(M + 1)$ -ой массы. Условимся струну, нагруженную N массами, и связанную с ней трехдиагональную матрицу обозначать одной и той же буквой \mathbf{L}_N ; соответственно укороченную струну и связанную с ней трехдиагональную матрицу будем обозначать через \mathbf{L}_M . Из формул (1.7) видно, что собственные колебания укороченной струны \mathbf{L}_M , состоящей из масс m_1, m_2, \dots, m_M и пружин с жесткостями k_0, k_1, \dots, k_M (крайние пружины закреплены), описываются уравнением (1.6), в котором роль \mathbf{L} -матрицы играет матрица

$$\mathbf{L}_M = \begin{pmatrix} a_1 & -b_1 & & 0 \\ -b_1 & a_2 & -b_2 & \\ & \ddots & \ddots & b_{M-1} \\ 0 & & -b_{M-1} & a_M \end{pmatrix},$$

образованная первыми M строками и столбцами матрицы \mathbf{L}_N .

Поэтому порождаемые матрицей \mathbf{L}_M полиномы совпадают с первыми M полиномами $P(1, \lambda), P(2, \lambda), \dots, P(M, \lambda)$, порождаемыми полной матрицей \mathbf{L}_N . Собственные значения матрицы \mathbf{L}_M совпадают с корнями ее характеристического полинома

$$D_M(\lambda) = -b_{M-1}P(M-1, \lambda) + (a_M - \lambda)P(M, \lambda)$$

и равны квадратам частот колебаний укороченной струны \mathbf{L}_M . С другой стороны, т.к. полиномы $P(j, \lambda)$, порожденные матрицей \mathbf{L}_N , удовлетворяют уравнениям

$$-b_{j-1}P(j-1, \lambda) + (a_j - \lambda)P(j, \lambda) - (b_j - \lambda)P(j+1, \lambda) = 0, \quad j = 2, \dots, N-1,$$

то $D_M(\lambda) = b_M P(M+1, \lambda)$, откуда следует, что собственные значения матрицы \mathbf{L}_M совпадают с корнями полинома $P(M+1, \lambda)$.

Рассмотрим струну \mathbf{L}_N и получающуюся из нее после удаления последней массы m_N укороченную струну \mathbf{L}_{N-1} . По частотам собственных колебаний $\omega_k(N)$, $k = 1, 2, \dots, N$ всей струны \mathbf{L}_N находятся собственные значения $\lambda_k = \omega_k(N)^2$ матрицы \mathbf{L}_N , т.е. корни полинома $D_N(\lambda)$, а по частотам собственных колебаний $\omega_p(N-1)$, $p = 1, 2, \dots, N-1$ укороченной струны \mathbf{L}_{N-1} находятся собственные значения $\mu_p = \omega_p(N-1)^2$ матрицы \mathbf{L}_{N-1} , равные корням полинома $P(N, \lambda)$. Каждый полином определяется своими корнями однозначно с точностью до числового множителя, равного коэффициенту при старшей степени λ . Из равенства (2.6) видно, что у полиномов $D_N(\lambda)$ и $P(N, \lambda)$ старшие коэффициенты отличаются только знаком, откуда согласно вышеизложенному следует, что

$$D_N(\lambda) = c\Delta(N, \lambda), \quad P(N, \lambda) = -c\pi(N, \lambda), \quad (6.1)$$

где c — некоторое вещественное число и

$$\Delta(N, \lambda) = \prod_{j=1}^N (\lambda - \lambda_j), \quad \pi(N, \lambda) = \prod_{p=1}^{N-1} (\lambda - \mu_p). \quad (6.2)$$

Эти формулы позволяют выразить нормировочные коэффициенты через спектры двух матриц: \mathbf{L}_N и \mathbf{L}_{N-1} . Действительно, из формул (2.10') и (6.1) следует, что

$$\|\mathbf{P}(\lambda_j)\|^2 = c^2 \Delta'(N, \lambda_j) \pi(N, \lambda_j), \quad (6.3)$$

а так как $\sum_{j=1}^N \|\mathbf{P}(\lambda_j)\|^{-2} = 1$, то

$$c^2 = \sum_{j=1}^N [\Delta'(N, \lambda_j) \pi(N, \lambda_j)]^{-1}, \quad (6.4)$$

откуда вытекает такая формула для нормировочных коэффициентов

$$\|\mathbf{P}(\lambda_k)\|^{-2} = \left\{ \Delta'(N, \lambda_k) \pi(N, \lambda_k) \sum_{j=1}^N [\Delta'(N, \lambda_j) \pi(N, \lambda_j)]^{-1} \right\}^{-1}. \quad (6.5)$$

Следовательно по спектрам всей матрицы \mathbf{L}_N и укороченной матрицы \mathbf{L}_{N-1} (или, что то же самое, по частотам колебаний всей струны \mathbf{L}_N и ее укороченной части \mathbf{L}_{N-1}) однозначно восстанавливается спектральная функция, а, значит, и матрица \mathbf{L}_N .

Выясним, каким условиям должны удовлетворять последовательности вещественных чисел $\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_N$ и $\mu_1 < \mu_2 < \dots < \mu_{N-1}$ для того, чтобы они были спектрами некоторой трехдиагональной матрицы \mathbf{L}_N и ее укороченной части \mathbf{L}_{N-1} .

Полином $\Delta(N, \lambda)$ имеет простые корни $\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_N$ и стремится к $+\infty$ при $\lambda \rightarrow +\infty$. Следовательно его график имеет вид, схематически изображенный на рис. 3. Этот рисунок наглядно показывает, что производная $\Delta'(N, \lambda)$ полинома $\Delta(N, \lambda)$ принимает в его корнях значения чередующихся знаков

$$\Delta'(N, \lambda_N) > 0, (-1)\Delta'(N, \lambda_{N-1}) > 0, \dots, (-1)^k \Delta'(N, \lambda_{N-k}) > 0, \dots \quad (6.6)$$

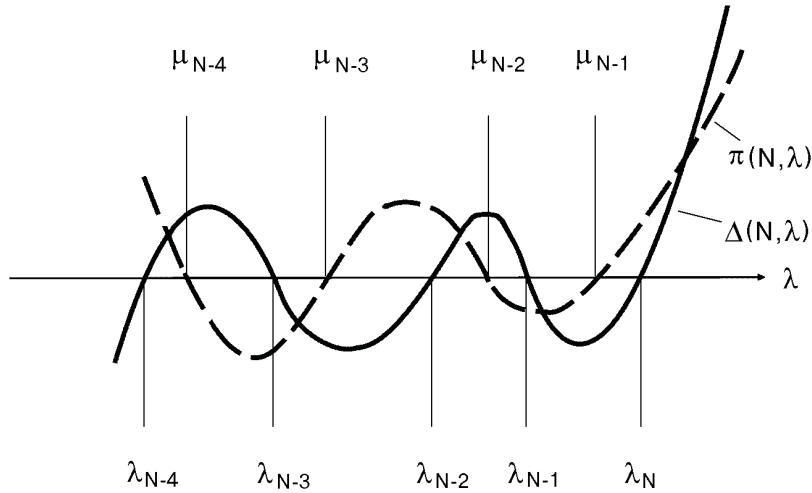


Рис. 3:

Отсюда и из неравенства $\Delta'(N, \lambda_j)\pi(N, \lambda_j) > 0$, вытекающего из формулы (6.3), следует, что полином $\pi(N, \lambda)$ в точках λ_j тоже принимает значения чередующихся знаков:

$$\pi(N, \lambda_N) > 0, (-1)\pi(N, \lambda_{N-1}) > 0, \dots, (-1)^k \pi(N, \lambda_{N-k}) > 0, \dots \quad (6.7)$$

Следовательно в каждом интервале $(\lambda_j, \lambda_{j+1})$, $j = 1, 2, \dots, N-1$ лежит корень полинома $\pi(N, \lambda)$, а т.к. его степень равна $N-1$, то каждый интервал содержит ровно один корень μ_j этого полинома. Таким образом, собственные значения матриц \mathbf{L}_N и \mathbf{L}_{N-1} перемежаются:

$$\lambda_1 < \mu_1 < \lambda_2 < \mu_2 < \lambda_3 < \dots < \lambda_{N-1} < \mu_{N-1} < \lambda_N. \quad (6.8)$$

Наоборот, пусть заданы произвольные перемежающиеся последовательности (6.8). Построим из них по формулам (6.2) полиномы

$\Delta(N, \lambda)$ и $\pi(N, \lambda)$. Полином $\pi(N, \lambda)$ стремится к $+\infty$ при $\lambda \rightarrow +\infty$ и меняет знак при переходе через точки μ_k , являющиеся его простыми корнями. Следовательно он принимает положительные значения на интервале $(\mu_{N-1}, +\infty)$, отрицательные — на интервале (μ_{N-2}, μ_{N-1}) и т.д., то есть этот полином удовлетворяет неравенствам

$$(-1)^k \pi(N, \lambda) > 0, \quad \lambda \in (\mu_{N-k-1}, \mu_{N-k}), \quad k = 0, 1, \dots, N-1,$$

где для удобства $-\infty$ обозначена через μ_0 , а $+\infty$ — через μ_N . Так как из перемежаемости последовательности (6.8) следует, что $\lambda_{N-k} \in (\mu_{N-k-1}, \mu_{N-k})$, то

$$(-1)^k \pi(N, \lambda_{N-k}) > 0.$$

Согласно (6.6) производная $\Delta'(N, \lambda)$ полинома $\Delta(N, \lambda)$ удовлетворяет аналогичным неравенствам

$$(-1)^k \Delta'(N, \lambda_{N-k}) > 0.$$

Следовательно *перемежаемость корней полиномов $\pi(N, \lambda_N)$ и $\Delta(N, \lambda)$ влечет за собой неравенства*

$$\Delta'(N, \lambda_k) \pi(N, \lambda_k) > 0, \quad k = 1, 2, \dots, N,$$

позволяющие определить N положительных чисел

$$\sigma_k = \frac{\sigma}{\Delta'(N, \lambda_k) \pi(N, \lambda_k)}, \quad \text{где } \sigma = \sum_{j=1}^N \frac{1}{\Delta'(N, \lambda_j) \pi(N, \lambda_j)},$$

сумма которых равна единице, и построить кусочно постоянную неубывающую функцию

$$\sigma(\lambda) = \sum_{\lambda_j < \lambda} \sigma_j, \tag{6.9}$$

имеющую ровно N точек разрыва непрерывности, сумма скачков в которых равна единице.

Согласно теореме 1 существует единственная трехдиагональная матрица \mathbf{L}_N вида (5.15), спектральная функция которой равна построенной нами функции (6.9). Спектр этой матрицы, очевидно, состоит из чисел $\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_N$, откуда следует, что ее характеристический полином $D_N(\lambda)$ отличается от полинома $\Delta(N, \lambda)$ лишь числовым множителем:

$$D_N(\lambda) = c\Delta(N, \lambda)$$

Покажем, что спектр полученной из \mathbf{L}_N укороченной матрицы \mathbf{L}_{N-1} состоит из чисел $\mu_1 < \mu_2 < \dots < \mu_{N-1}$. Так как спектр матрицы \mathbf{L}_{N-1} состоит из корней полинома $P(N, \lambda)$, порожденного матрицей \mathbf{L}_N , то для этого нужно доказать, что полиномы $P(N, \lambda)$ и $\pi(N, \lambda)$ имеют одинаковые корни. По построению скачки функции (6.9) равны

$$\sigma_k = \frac{\sigma}{\Delta'(N, \lambda_k)\pi(N, \lambda_k)},$$

а, так как она является спектральной функцией матрицы \mathbf{L}_N , то согласно (2.10'), (6.1)

$$\sigma_k = \frac{-1}{D'(N, \lambda_k)P(N, \lambda_k)} = \frac{1}{c\Delta'(N, \lambda_k)P(N, \lambda_k)},$$

откуда следует, что

$$P(N, \lambda_k) - (c\sigma)^{-1}\pi(N, \lambda_k) = 0, \quad k = 1, 2, \dots, N.$$

Мы видим, что полином $P(N, \lambda) - (c\sigma)^{-1}\pi(N, \lambda)$, степень которого $\leq N - 1$ имеет N корней, что возможно только когда он тождественно равен нулю. Следовательно $P(N, \lambda) \equiv (c\sigma)^{-1}\pi(N, \lambda)$, и полиномы $P(N, \lambda)$, $\pi(N, \lambda)$ имеют одинаковые корни.

Сформулируем полученные результаты.

Теорема 2. 1) Трехдиагональная матрица \mathbf{L}_N вида (5.15) однозначно определяется двумя спектрами: самой матрицы \mathbf{L}_N и полученной из нее укороченной матрицы \mathbf{L}_{N-1} .

2) Для того, чтобы последовательности $\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_N$ и $\mu_1 < \mu_2 < \dots < \mu_{N-1}$ были спектрами некоторой матрицы \mathbf{L}_N вида (5.15) и полученной из нее укороченной матрицы \mathbf{L}_{N-1} , необходимо и достаточно, чтобы они перемежались:

$$\lambda_1 < \mu_1 < \lambda_2 < \mu_2 < \lambda_3 < \dots < \lambda_{N-1} < \mu_{N-1} < \lambda_N.$$

Рассмотрим теперь две матрицы $\mathbf{L}_N^{(1)}$ и $\mathbf{L}_N^{(2)}$ вида (5.15), отличающиеся только нижним правым элементом $a_N^{(1)} \neq a_N^{(2)}$. Таким образом, полученные из них укороченные матрицы $\mathbf{L}_{N-1}^{(1)}$ и $\mathbf{L}_{N-1}^{(2)}$ совпадают: $\mathbf{L}_{N-1} = \mathbf{L}_{N-1}^{(1)} = \mathbf{L}_{N-1}^{(2)}$.

Такая пара матриц возникает при рассмотрении колебаний одной и той же струны, которую сначала прикрепляют к нижнему основанию пружины с жесткостью $k_N^{(1)}$, а затем пружины с жесткостью $k_N^{(2)}$, в частности, когда просто удаляют нижнюю пружину ($k_N^{(2)} = 0$), как это изображено на рисунках 1а и 1б.

Теорема 3. 1) Две матрицы $\mathbf{L}_N^{(1)}$ и $\mathbf{L}_N^{(2)}$ вида (5.15), отличающиеся только нижним правым элементом, однозначно определяются их спектрами.

2) Для того, чтобы две последовательности вещественных чисел были спектрами двух матриц $\mathbf{L}_N^{(1)}$ и $\mathbf{L}_N^{(2)}$ вида (5.15), отличающихся только нижним правым элементом, необходимо и достаточно, чтобы они перемежались.

Доказательство. Мы знаем, что полиномы, порождаемые трехдиагональной матрицей, не зависят от ее правого нижнего элемента. Следовательно матрицы $\mathbf{L}_N^{(1)}$ и $\mathbf{L}_N^{(2)}$ порождают одинаковые полиномы $P(j, \lambda)$ $k = 1, 2, \dots, N$, и согласно (2.6),

$$D_N^{(\alpha)}(\lambda) = -b_{N-1}P(N-1, \lambda) + (a_N^{(\alpha)} - \lambda)P(N, \lambda), \quad \alpha = 1, 2,$$

где $D_N^{(\alpha)}(\lambda)$ — характеристические полиномы матриц $\mathbf{L}_N^{(\alpha)}$. Поэтому полиномы $D_N^{(\alpha)}(\lambda)$ имеют одинаковые старшие коэффициенты, отличающиеся от старшего коэффициента полинома $P(N, \lambda)$ только знаком, и

$$D_N^{(1)}(\lambda) - D_N^{(2)}(\lambda) = (a_N^{(1)} - a_N^{(2)})P(N, \lambda). \quad (6.10)$$

Обозначим через $\lambda_1^{(\alpha)} < \lambda_2^{(\alpha)} < \dots < \lambda_N^{(\alpha)}$ корни полиномов $D_N^{(\alpha)}(\lambda)$ (т.е. собственные значения матриц $\mathbf{L}_N^{(\alpha)}$) и через μ_k , $k = 1, 2, \dots, N-1$ корни полинома $P(N, \lambda)$ (т.е. собственные значения укороченной матрицы $\mathbf{L}_{N-1} = \mathbf{L}_{N-1}^{(1)} = \mathbf{L}_{N-1}^{(2)}$). Тогда

$$D_N^{(\alpha)}(\lambda) = -c\Delta^{(\alpha)}(N, \lambda), \quad P(N, \lambda) = c\pi(N, \lambda),$$

где

$$\Delta^{(\alpha)}(N, \lambda) = \prod_{j=1}^N (\lambda - \lambda_j^{(\alpha)}), \quad \pi(N, \lambda) = \prod_{k=1}^{N-1} (\lambda - \mu_k)$$

и через c обозначен старший коэффициент полинома $P(N, \lambda)$. Перепишав формулу (6.10) в эквивалентном виде

$$\Delta^{(1)}(N, \lambda) - \Delta^{(2)}(N, \lambda) = -(a_N^{(1)} - a_N^{(2)})\pi(N, \lambda), \quad (6.11)$$

убеждаемся, что левая часть полученного равенства однозначно определяется корнями полиномов $D_N^{(1)}(\lambda)$ и $D_N^{(2)}(\lambda)$ (т.е. спектрами матриц $\mathbf{L}_N^{(1)}$ и $\mathbf{L}_N^{(2)}$), откуда следует, что корни полинома $\pi(N, \lambda)$ (т.е. спектр укороченной матрицы $\mathbf{L}_{N-1} = \mathbf{L}_{N-1}^{(1)} = \mathbf{L}_{N-1}^{(2)}$) тоже однозначно определяются спектрами матриц $\mathbf{L}_N^{(1)}$ и $\mathbf{L}_N^{(2)}$. Первое утверждение доказываемой теоремы является теперь прямым следствием теоремы 2.

Далее, согласно доказанным ранее неравенствам (6.6),

$$(-1)^k \pi(N, \lambda_{N-k}^{(\alpha)}) > 0, \quad k = 1, 2, \dots, N, \quad \alpha = 1, 2,$$

а согласно (6.11),

$$\Delta^{(1)}(N, \lambda_{N-k}^{(2)}) = -h\pi(N, \lambda_{N-k}^{(2)}); \quad \Delta^{(2)}(N, \lambda_{N-k}^{(1)}) = h\pi(N, \lambda_{N-k}^{(1)}),$$

где $h = a_N^{(1)} - a_N^{(2)}$. Поэтому

$$\begin{aligned} -h(-1)^k \Delta^{(1)}(N, \lambda_{N-k}^{(2)}) &= h^2(-1)^k \pi(N, \lambda_{N-k}^{(2)}) > 0, \\ h(-1)^k \Delta^{(2)}(N, \lambda_{N-k}^{(1)}) &= h^2(-1)^k \pi(N, \lambda_{N-k}^{(1)}) > 0, \end{aligned}$$

откуда следует, что между двумя соседними корнями одного полинома лежит корень другого, причем, т.к. эти полиномы стремятся к $+\infty$ при $\lambda \rightarrow +\infty$, то при $h > 0$ наибольший корень $\lambda_N^{(1)}$ полинома $\Delta^{(1)}(N, \lambda)$ лежит в интервале $(\lambda_N^{(2)}, +\infty)$, а при $h < 0$ наибольший корень $\lambda_N^{(2)}$ полинома $\Delta^{(2)}(N, \lambda)$ лежит в интервале $(\lambda_N^{(1)}, +\infty)$.

Таким образом, взаимное расположение корней этих полиномов (т.е. собственных значений матриц $\mathbf{L}_N^{(1)}$ и $\mathbf{L}_N^{(2)}$) таково:

$$\begin{aligned} \lambda_1^{(2)} < \lambda_1^{(1)} < \lambda_2^{(2)} < \lambda_1^{(2)} < \dots < \lambda_N^{(2)} < \lambda_N^{(1)} & (h > 0) \\ \lambda_1^{(1)} < \lambda_1^{(2)} < \lambda_2^{(1)} < \lambda_2^{(2)} < \dots < \lambda_N^{(1)} < \lambda_N^{(2)} & (h < 0) \end{aligned} \quad (6.12)$$

и их перемежаемость доказана.

Наконец, пусть заданы две произвольные перемежающиеся последовательности

$$\lambda_1^{(1)} < \lambda_1^{(2)} < \lambda_2^{(1)} < \dots < \lambda_{N-1}^{(1)} < \lambda_{N-1}^{(2)} < \lambda_N^{(1)} < \lambda_N^{(2)} \quad (6.13)$$

Построим по ним полиномы $\Delta^{(\alpha)}(N, \lambda) = \prod_{j=1}^N (\lambda - \lambda_j^{(\alpha)})$, $\alpha = 1, 2$ и обозначим через $R(N, \lambda)$ их разность

$$\Delta^{(1)}(N, \lambda) - \Delta^{(2)}(N, \lambda) = R(N, \lambda).$$

Очевидно, что степень полинома $R(N, \lambda)$ равна $N-1$, и его старший коэффициент равен $r = \sum_{j=1}^N (\lambda_j^{(2)} - \lambda_j^{(1)})$. Следовательно $R(N, \lambda) = r\pi(N, \lambda)$, т.е.

$$\Delta^{(1)}(N, \lambda) - \Delta^{(2)}(N, \lambda) = r\pi(N, \lambda), \quad (6.14)$$

§ 6. Построение трехдиагональных матриц по двум спектрам

где $\pi(N, \lambda) = \prod_{k=1}^{N-1} (\lambda - \mu_k)$ и через μ_k обозначены корни полинома $R(N, \lambda)$. В силу перемежаемости последовательностей (6.13) в каждом интервале $(\lambda_k^{(1)}, \lambda_{k+1}^{(1)})$ лежит единственный корень $\lambda_k^{(2)}$ полинома $\Delta^{(2)}(N, \lambda)$, откуда следует, что на его концах $\lambda_k^{(1)}, \lambda_{k+1}^{(1)}$ полином $\Delta^{(2)}(N, \lambda)$ принимает значения разных знаков, а поскольку

$$R(N, \lambda_j^{(1)}) = \Delta^{(1)}(N, \lambda_j^{(1)}) - \Delta^{(2)}(N, \lambda_j^{(1)}) = -\Delta^{(2)}(N, \lambda_j^{(1)}),$$

то полином $R(N, \lambda)$ тоже принимает значения разных знаков в точках $\lambda_k^{(1)}$ и $\lambda_{k+1}^{(1)}$. Поэтому между двумя соседними корнями $\lambda_k^{(1)} < \lambda_{k+1}^{(1)}$ полинома $\Delta^{(1)}(N, \lambda)$ лежит корень μ_k полинома $R(N, \lambda)$, т.е.

$$\lambda_1^{(1)} < \mu_1 < \lambda_2^{(1)} < \mu_2 < \lambda_3^{(1)} < \dots < \lambda_{N-1}^{(1)} < \mu_{N-1} < \lambda_N^{(1)},$$

и согласно теореме 2 существует единственная матрица $\mathbf{L}_N^{(1)}$ вида (5.15) с собственными значениями $\lambda_1^{(1)}, \lambda_2^{(1)}, \dots, \lambda_N^{(1)}$ такая, что полученная из нее укороченная матрица $\mathbf{L}_{N-1}^{(1)}$ имеет собственными значениями числа $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_{N-1}$. Обозначим через $a_N^{(1)}$ нижний правый элемент матрицы $\mathbf{L}_N^{(1)}$ и рассмотрим матрицу $\mathbf{L}_N^{(2)}$, отличающуюся от $\mathbf{L}_N^{(1)}$ только нижним правым элементом $a_N^{(2)} = a_N^{(1)} + r$. Согласно (6.11)

$$\Delta^{(1)}(N, \lambda) - \Delta^*(N, \lambda) = r\pi(N, \lambda), \quad (6.15)$$

где $\Delta^*(N, \lambda) = \prod_{j=1}^{N-1} (\lambda - \lambda_j^*)$ и через λ_j^* обозначены собственные значения матрицы $\mathbf{L}_N^{(2)}$. Сопоставляя равенства (6.14) и (6.15), убеждаемся, что $\Delta^*(N, \lambda) = \Delta^{(2)}(N, \lambda)$. Следовательно $\lambda_j^* = \lambda_j^{(2)}$, т.е. собственные значения построенной матрицы $\mathbf{L}_N^{(2)}$ равны $\lambda_1^{(2)}, \lambda_2^{(2)}, \dots, \lambda_N^{(2)}$. Таким образом, любым перемежающимся последовательностям (6.13) соответствуют две матрицы $\mathbf{L}_N^{(1)}$ и $\mathbf{L}_N^{(2)}$ ви-

да (5.15), отличающиеся только нижним правым элементом, собственные значения которых соответственно равны $\lambda_1^{(1)}, \lambda_2^{(1)}, \dots, \lambda_N^{(1)}$ и $\lambda_1^{(2)}, \lambda_2^{(2)}, \dots, \lambda_N^{(2)}$. Теорема полностью доказана.

З а м е ч а н и е. Мы видели (§ 2), что матрицу L_N можно отождествить с оператором, порожденным конечноразностной операцией (2.16) и краевыми условиями

$$(a_1 - \lambda)y(1) - b_1y(2) = 0; \quad -b_{N-1}y(N-1) + (a_n - \lambda)y(N) = 0.$$

В этих терминах теоремы 2, 3 формулируются так: конечноразностная операция (2.16) и два порожденные ею оператора с одинаковым краевым условием на одном конце однозначно определяются спектрами этих операторов. (Матрица \mathbf{L}_{N-1} отождествляется с оператором, у которого во втором краевом условии $b_{N-1} = 0$).

Струна называется симметричной, если она совпадает со струной, полученной из нее поворотом на 180° . На рис. 4 схематически изображены симметричные струны, нагруженные четным (4а) или нечетным (4б) числом масс. Механические характеристики симметричных струн, нагруженных M массами, связаны равенством

$$m_j = m_{M-j+1}, \quad j = 1, 2, \dots, N; \quad k_j = k_{M-j}; \quad j = 0, 1, \dots, M, \quad (6.16)$$

и, согласно (1.7), элементы соответствующих матриц \mathbf{L}_M связаны аналогичными равенствами:

$$\begin{aligned} a_j &= a_{M-j+1}, \quad j = 1, 2, \dots, M; \\ b_j &= b_{M-j}, \quad j = 1, 2, \dots, M-1. \end{aligned} \quad (6.17)$$

Из этих равенств и рекуррентных формул (2.9) и (2.13), определяющих полиномы $P(j, \lambda)$ и $Q(j, \lambda)$, порождаемые матрицами \mathbf{L}_M , следует, что в симметричном случае эти полиномы связаны равенством

$$Q(j, \lambda) = P(M - j + 1, \lambda), \quad j = 1, 2, \dots, M,$$

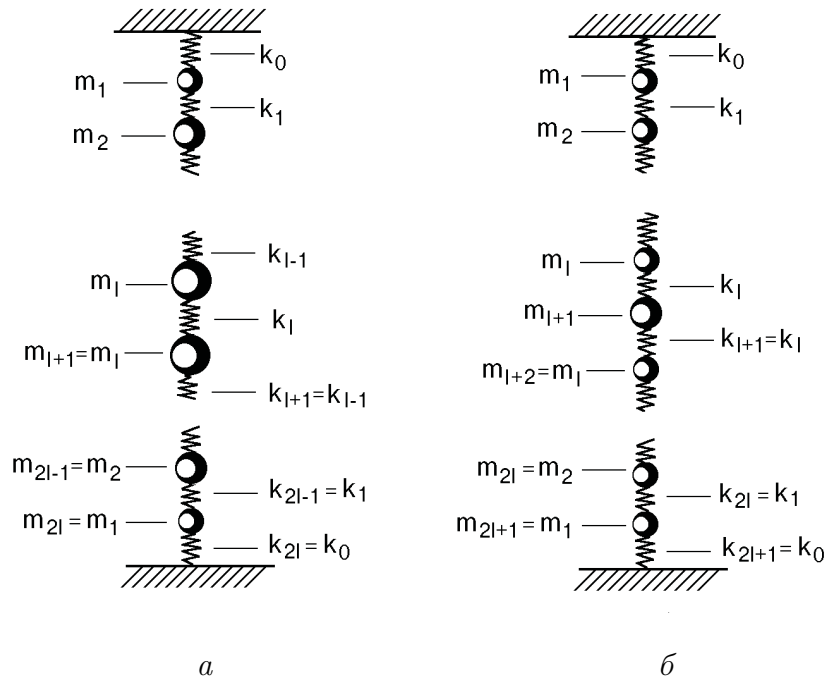


Рис. 4:

позволяющими формулы (2.15) привести к виду

$$D_M = b_{k-1} (P(k)P(M - k + 2) - P(k - 1)P(M - k + 1)),$$

где для краткости приняты такие обозначения: $P(j, \lambda) = P(j)$, $D_M(\lambda) = D_M$. Если струна нагружена четным ($M = 2N$) или нечетным ($M = 2N + 1$) числом масс, то, полагая в последнем равенстве

$k = N + 1$, получим:

$$\begin{aligned}
 D_{2N} &= b_N(P(N+1)^2 - P(N)^2) \\
 &= b_N(P(N+1) + P(N))(P(N+1) - P(N)), \\
 D_{2N+1} &= b_N(P(N+1)P(N+2) - P(N)P(N+2)) \\
 &= b_N P(N+1)(P(N+2) - P(N))
 \end{aligned} \tag{6.18}$$

Согласно рекуррентным формулам (2.9)

$$P(N+1+j) = (b_{N+j})^{-1} \{(a_{N+j} - \lambda)P(N+j) - b_{N+j-1}P(N+j-1)\}$$

откуда следует, что

$$P(N+1) \pm P(N) =$$

$$(b_N)^{-1} \{(a_N \pm b_N - \lambda)P(N) - b_{N-1}P(N-1)\} \stackrel{\text{def}}{=} (b_N)^{-1} D_N^\pm$$

$$P(N+1) = (b_N)^{-1} \{(a_N - \lambda)P(N) - b_{N-1}P(N-1)\} \stackrel{\text{def}}{=} (b_N)^{-1} D_N,$$

$$\begin{aligned}
 P(N+2) - P(N) &= (b_{N+1})^{-1} \{(a_{N+1} - \lambda)P(N+1) - (b_N + b_{N+1})P(N)\} \\
 &= (b_N)^{-1} \{(a_{N+1} - \lambda)P(N+1) - 2b_N P(N)\} \stackrel{\text{def}}{=} (b_N)^{-1} D_{N+1}^*,
 \end{aligned}$$

(Мы здесь учли, что согласно (6.17) $b_N = b_{N+1}$, если $M = 2N + 1$). Полученные формулы позволяют выразить правые части равенств (6.18) через введенные этими равенствами полиномы D_N^\pm и D_N, D_{N+1}^* :

$$D_{2N} = (b_N)^{-1} D_N^+ D_N^-, \quad D_{2N+1} = (b_N)^{-1} D_{N+1}^* D_N. \tag{6.19}$$

Далее, из формул, определяющих введенные нами полиномы, следует, что D_{N+1}^* и D_N являются характеристическими полиномами матрицы

$$\mathbf{L}_{N+1}^* = \begin{pmatrix} a_1 & -b_1 & & & \\ -b_1 & a_2 & & & \\ & \ddots & & & \\ & & -b_{N-1} & a_N & -2b_N \\ & & & -2b_N & a_{N+1} \end{pmatrix},$$

§ 6. Построение трехдиагональных матриц по двум спектрам

и получающейся из нее укороченной матрицы \mathbf{L}_N^* , а D_N^\pm являются характеристическими полиномами матриц

$$\mathbf{L}_N^\pm = \begin{pmatrix} a_1 & -b_1 & & & \\ -b_1 & a_2 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & -b_{N-1} & & \\ & & & a_N \pm b_N & \end{pmatrix},$$

отличающимися только нижними правыми элементами $a_N + b_N$ и $a_N - b_N$.

Согласно (6.8) корни $\mu_1^* < \mu_2^* < \dots < \mu_{N+1}^*$ и $\mu_1 < \mu_2 < \dots < \mu_N$ полиномов D_{N+1}^* и D_N удовлетворяют неравенствам

$$\mu_1^* < \mu_1 < \mu_2^* < \dots < \mu_N^* < \mu_N < \mu_{N+1}^*,$$

а т.к. в силу (6.18) они совпадают с корнями $\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_{2N+1}$ полинома D_{2N+1} , то

$$\mu_1^* = \lambda_1, \mu_2^* = \lambda_3, \dots, \mu_{N+1}^* = \lambda_{2N+1}; \mu_1 = \lambda_2, \mu_2 = \lambda_4, \dots, \mu_N = \lambda_{2N}.$$

Поэтому по спектру матрицы \mathbf{L}_{2N+1} однозначно находятся спектры матриц \mathbf{L}_{N+1}^* и \mathbf{L}_N^* , а по ним согласно теореме 2 однозначно находятся элементы a_1, a_2, \dots, a_{N+1} ; b_1, b_2, \dots, b_N и в силу (6.17) все элементы матрицы \mathbf{L}_{2N+1} . Аналогично, согласно (6.12) корни λ_j^\pm полиномов D_N^\pm удовлетворяют неравенствам

$$\lambda_1^- < \lambda_1^+ < \lambda_2^- < \dots < \lambda_N^- < \lambda_N^+$$

откуда следует, что

$$\lambda_1^- = \lambda_1, \lambda_2^- = \lambda_3, \dots, \lambda_N^- = \lambda_{2N-1};$$

$$\lambda_1^+ = \lambda_2, \lambda_2^+ = \lambda_4, \dots, \lambda_N^+ = \lambda_{2N},$$

где $\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_{2N}$ — корни полинома D_{2N} . Поэтому по спектру матрицы \mathbf{L}_{2N} однозначно находятся спектры матриц

\mathbf{L}_N^\pm , и, в силу теоремы 3, по ним однозначно находятся элементы $a_1, a_2, \dots, a_N; b_1, b_2, \dots, b_N$, а, значит, и все элементы матрицы \mathbf{L}_{2N} . Таким образом, из теорем 2, 3 мы вывели такое следствие.

Теорема 4. *Матрица вида (5.15) соответствующая симметричной струне однозначно определяется своим спектром, т.е. частотами собственных колебаний этой симметричной струны.*

§ 7. Методы решения обратных задач

Обратные задачи спектрального анализа формулируются по-разному, в зависимости от того, по каким *спектральным данным* нужно найти трехдиагональную матрицу. В задачах, рассмотренных в предыдущих параграфах, роль спектральных данных играли:

- 1) спектральная функция;
- 2) спектры всей L_N и укороченной L_{N-1} матриц;
- 3) спектры двух матриц $L_N^{(1)}$ и $L_N^{(2)}$, отличающихся только правым нижним элементом;
- 4) спектр одной матрицы, связанной с симметричной струной.

Формула вида (6.5) позволила все эти задачи свести к первой, т.е., в конечном счете, к процессу ортогонализации степеней $1, \lambda, \dots, \lambda^{N-1}$. Процесс ортогонализации позволяет не только доказать существование и единственность решений обратных задач, но является также конструктивным методом их решения. Этот метод особенно ценен тем, что после надлежащего обобщения его можно использовать для исследования и решения обратных задач, порождаемых как конечноразностными, так и дифференциальными операторами второго порядка.

Однако, построения трехдиагональных матриц по их спектральным данным (т.е. решение условных обратных задач) проще вести другим методом, использующим алгоритм непрерывных дробей. Напомним, как производится разложение рациональных функций в непрерывные дроби с помощью алгоритма Евклида.

Пусть старшие коэффициенты у полиномов F_1 и F_2 равны единице, а их степени m_1 и m_2 удовлетворяют неравенству $m_1 > m_2$. Поделив F_1 на F_2 получим равенство

$$F_1 = Q_1 F_2 + R,$$

в котором полином Q_1 (неполное частное) имеет единичный старший коэффициент, а полином R (остаток) имеет степень m_3 строго

меньшую степени делителя: $m_3 < m_2$. Обозначив через r_1 старший коэффициент полинома R , получим $R = r_1 F_3$ и

$$F_1 = Q_1 F_2 + r_1 F_3,$$

где полином F_3 степени $m_3 < m_2$ имеет единичный старший коэффициент. Прделав аналогичную процедуру с полиномами F_2 и F_3 получим равенство $F_2 = Q_2 F_3 + r_2 F_4$ и т.д. Так как степени полиномов F_k строго убывают этот процесс закончится после конечного числа шагов, и мы получим цепочку равенств

$$\begin{aligned} F_1 &= Q_1 F_2 + r_1 F_3 \\ F_2 &= Q_2 F_3 + r_2 F_4 \\ &\vdots \\ F_{n-1} &= Q_{n-1} F_n + r_{n-1} F_{n+1} \\ F_n &= Q_n F_{n+1}, \end{aligned}$$

в которых все полиномы имеют старшие коэффициенты равные единице. Из этих равенств последовательно находим, что

$$\frac{F_1}{F_2} = Q_1 + \frac{r_1}{\frac{F_2}{F_3}} = Q_1 + \frac{r_1}{Q_2 + \frac{r_2}{\frac{F_3}{F_4}}} = \dots$$

и в конце концов получаем такое разложение рациональной функции F_1/F_2 в непрерывную дробь:

$$\frac{F_1}{F_2} = Q_1 + \frac{r_1}{Q_2 + \frac{r_2}{Q_3 + \dots \frac{r_{n-1}}{Q_{n-1} + \frac{r_n}{Q_n}}}}.$$

В этой непрерывной дроби все числа r_j отличны от нуля, а старшие коэффициенты у всех полиномов Q_j равны единице. Представление

рациональных функций в виде непрерывных дробей, обладающих этими свойствами единственно.

В спектральном анализе непрерывные дроби естественно возникают из рекуррентных формул (2.9) после преобразования их к виду:

$$P(1) = 1; \quad -\frac{b_1 P(2)}{P(1)} = \lambda - a_1;$$

$$-\frac{b_{j-1} P(j)}{P(j-1)} = \lambda - a_{j-1} + \frac{-b_{j-2}^2}{\left(\frac{-b_{j-2} P(j-1)}{P(j-2)}\right)}; \quad j > 2.$$

(Напомним, что для краткости мы пользуемся следующими обозначениями: $P(j) = P(j, \lambda)$, $D_N = D_N(\lambda)$). Из этих равенств последовательно получаем непрерывные дроби:

$$\begin{aligned} -\frac{b_1 P(2)}{P(1)} &= \lambda - a_1; \\ -\frac{b_2 P(3)}{P(2)} &= \lambda - a_2 + \frac{-b_1^2}{\left(\frac{-b_1 P(2)}{P(1)}\right)} = \lambda - a_2 + \frac{-b_1^2}{\lambda - a_1}; \\ -\frac{b_{N-1} P(N)}{P(N-1)} &= \lambda - a_{N-1} + \frac{-b_{N-2}^2}{\lambda - a_{N-2} + \cdots \frac{-b_1^2}{\lambda - a_2 + \frac{-b_1^2}{\lambda - a_1}}}, \end{aligned}$$

и, т.к. согласно (2.6)

$$-\frac{D_N}{P(N)} = \lambda - a_N + \frac{-b_{N-1}^2}{\left(\frac{-b_{N-1} P(N)}{P(N-1)}\right)},$$

а согласно (6.1), (6.2) $D_N = c\Delta(N, \lambda)$, $P(N) = -c\pi(N, \lambda)$, то

$$-\frac{D_N}{P(N)} = \frac{\Delta(N, \lambda)}{\pi(N, \lambda)} = \lambda - a_N + \frac{-b_{N-1}^2}{\lambda - a_{N-1} + \frac{-b_{N-2}^2}{\lambda - a_{N-2} \cdots \frac{-b_1^2}{\lambda - a_2 + \frac{-b_1^2}{\lambda - a_1}}}}, \quad (7.1)$$

где полиномы

$$\Delta(N, \lambda) = \prod_{j=1}^N (\lambda - \lambda_j); \quad \pi(N, \lambda) = \prod_{k=1}^{N-1} (\lambda - \mu_k) \quad (7.2)$$

получаются из полиномов D_N , $P(N, \lambda)$ после деления их на старшие коэффициенты.

Если по спектральным данным удастся восстановить полиномы $\Delta(N, \lambda)$ и $\pi(N, \lambda)$, то, используя алгоритм Евклида, можно будет разложить их отношение Δ/π в непрерывную дробь. Полученная непрерывная дробь совпадет с дробью (7.1), т.к. представление рациональных функций в виде непрерывных дробей рассматриваемого вида единственно. Таким образом, для отыскания элементов $a_1, \dots, a_N, b_1, \dots, b_{N-1}$ искомой матрицы достаточно разложить рациональную функцию Δ/π в непрерывную дробь, используя алгоритм Евклида.

З а м е ч а н и е. В разложение (7.1) входит не b_j , а b_j^2 , но т.к. мы рассматриваем матрицы вида (5.15), то в качестве b_j нужно взять положительный корень из b_j^2 .

Посмотрим, как находятся полиномы $\Delta(N, \lambda)$ и $\pi(N, \lambda)$ в обратных задачах со спектральными данными, приведенными в начале этого параграфа.

Во второй задаче известны спектры матриц $\mathbf{L}_N, \mathbf{L}_{N-1}$, совпадающие с корнями интересующих нас полиномов, и сами полиномы находятся по формулам (7.2).

В третьей задаче известны спектры матриц $\mathbf{L}_N^{(1)}, \mathbf{L}_N^{(2)}$, совпадающие с корнями $\lambda_1^{(1)}, \lambda_2^{(1)}, \dots, \lambda_N^{(1)}$ и $\lambda_1^{(2)}, \lambda_2^{(2)}, \dots, \lambda_N^{(2)}$ полиномов

$\Delta^{(1)}(N, \lambda)$, $\Delta^{(2)}(N, \lambda)$ и эти полиномы находятся по аналогичным формулам. Полином $\pi(N, \lambda) = \pi^{(1)}(N, \lambda) = \pi^{(2)}(N, \lambda)$ находится из равенства (6.11), в котором нужно положить $a_N^{(2)} - a_N^{(1)} = \sum_{j=1}^N (\lambda_j^{(2)} - \lambda_j^{(1)})$, чтобы уравнивать старшие коэффициенты в правой и левой частях этого равенства. Следовательно

$$\pi(N, \lambda) = \frac{\Delta^{(1)}(N, \lambda) - \Delta^{(2)}(N, \lambda)}{\sum_{j=1}^N (\lambda_j^{(2)} - \lambda_j^{(1)})}.$$

Четвертая задача сводится ко второй, в которой роль матриц \mathbf{L}_N , \mathbf{L}_{N-1} играют матрицы \mathbf{L}_{N+1}^* , \mathbf{L}_N^* , или к третьей, в которой роль матриц $\mathbf{L}_N^{(1)}$, $\mathbf{L}_N^{(2)}$ играют матрицы \mathbf{L}_N^+ , \mathbf{L}_N^- .

В первой задаче известна спектральная функция искомой матрицы. Ее точки разрыва совпадают с собственными значениями $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N$ этой матрицы, т.е. с корнями полинома $\Delta(N, \lambda)$. Поэтому $\Delta(N, \lambda) = \prod_{j=1}^N (\lambda - \lambda_j)$. Скачки σ_j тоже известны, и, т.к. $\sigma_j = \|\mathbf{P}(\lambda_j)\|^{-2}$, то согласно (6.3) $\pi(N, \lambda_j) = (c^2 \sigma_j \Delta'(N, \lambda_j))^{-1}$, что позволяет найти полином $\pi(N, \lambda)$ с помощью интерполяционной формулы Лагранжа:

$$\begin{aligned} \pi(N, \lambda) &= \Delta(N, \lambda) \sum_{j=1}^N \frac{\pi(N, \lambda_j)}{\Delta'(N, \lambda_j)(\lambda - \lambda_j)} \\ &= \sum_{j=1}^N \frac{\Delta(N, \lambda)}{c^2 \sigma_j (\Delta'(N, \lambda_j))^2 (\lambda - \lambda_j)} = c^{-2} \sum_{j=1}^N \frac{\Delta_j(\lambda)}{\sigma_j (\Delta'(N, \lambda_j))^2}, \end{aligned}$$

где $\Delta_j(\lambda) = \prod_{k \neq j} (\lambda - \lambda_k)$. Приравнивая старшие коэффициенты, стоящие в обеих частях этого равенства, находим, что $c^2 = \sum_{j=1}^N \frac{1}{\sigma_j (\Delta'(N, \lambda_j))^2}$. Окончательно получаем следующую формулу для полинома $\pi(N, \lambda)$:

$$\pi(N, \lambda) = \left(\sum_{j=1}^N \frac{1}{\sigma_j (\Delta'(N, \lambda_j))^2} \right)^{-1} \left(\sum_{j=1}^N \frac{\Delta_j(\lambda)}{\sigma_j (\Delta'(N, \lambda_j))^2} \right).$$

Алгоритмом непрерывных дробей удобно пользоваться при численном решении конкретных обратных задач, но в более общих вопросах лучше срабатывают методы, основанные на процессе ортогонализации. В качестве примера рассмотрим такой вопрос: как изменится трехдиагональная матрица после удаления из ее спектра одного собственного значения или добавления одного собственного значения.

Обозначим через $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N$ собственные значения матрицы \mathbf{L}_N , через $\sigma(\lambda)$ — ее спектральную функцию, через $P(1, \lambda), \dots, P(N, \lambda)$ — соответствующие ортогональные полиномы и через $D_N(\lambda)$ — ее характеристический полином. Построим новую кусочно-постоянную функцию

$$\rho(\lambda) = (1 + c)^{-1}(\sigma(\lambda) + c\tau(\lambda - \mu)),$$

где c, μ — произвольные вещественные числа, а через

$$\tau(\lambda) = \begin{cases} 0, & \lambda \leq 0 \\ 1, & \lambda > 0 \end{cases}$$

обозначена функция Хэвисайда. Сумма всех скачков функции $\rho(\lambda)$, очевидно, равна единице. При $\mu = \lambda_k$ эта функция неубывает и имеет $N - 1$ скачок, если $c = -(\sigma(\lambda_k + 0) - \sigma(\lambda_k))$, или N скачков, если $c > -(\sigma(\lambda_k + 0) - \sigma(\lambda_k))$. При $\mu \neq \lambda_j$ $j = 1, 2, \dots, N$ функция $\rho(\lambda)$ неубывает и имеет $N + 1$ скачок, если $c > 0$.

Согласно теореме 1 в этих случаях $\rho(\lambda)$ является спектральной функцией некоторой матрицы $\tilde{\mathbf{L}}$ вида (5.15) порядка $N - 1$, N или $N + 1$ в зависимости от числа скачков. При всех других значениях параметров c, μ функция $\rho(\lambda)$ не может быть спектральной.

Для того, чтобы найти матрицу $\tilde{\mathbf{L}}$ нужно в соответствующих гильбертовых пространствах $\mathbb{P}_{N-1}(\rho)$, $\mathbb{P}_N(\rho)$ или $\mathbb{P}_{N+1}(\rho)$ построить ортонормированные базисы, эквивалентные естественному базису. Так как полиномы $P(1, \lambda), \dots, P(N-1, \lambda)$; $P(1, \lambda), \dots, P(N, \lambda)$; $P(1, \lambda), \dots, P(N, \lambda)$ $D_N(\lambda)$ образуют в этих пространствах базисы, эквивалентные естественным, то достаточно найти ортонор-

мированные базисы, эквивалентные этим полиномиальным базисам. Чтобы сохранить единообразие в обозначениях удобно полином $D_N(\lambda)$ обозначить через $P(N+1, \lambda)$:

$$P(N+1, \lambda) = D_N(\lambda) = (a_N - \lambda)P(N, \lambda) - b_{N-1}P(N-1, \lambda).$$

Согласно лемме 6 искомые ортонормированные базисы определяются формулой (4.17), в которой роль векторов $\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots$ играют полиномы $P(1, \lambda), P(2, \lambda), \dots$ и скалярное произведение определено равенством

$$\langle Q, R \rangle = \int Q(\lambda) \overline{R(\lambda)} d\rho(\lambda) = \frac{1}{1+c} \left\{ \int Q(\lambda) \overline{R(\lambda)} d\sigma(\lambda) + c \int Q(\mu) \overline{R(\mu)} d\mu \right\}.$$

Так как полиномы $P(1, \lambda), P(2, \lambda), \dots, P(N, \lambda)$ образуют ортонормированный базис пространства $\mathbb{P}_N(\sigma)$, и скачки функции $\sigma(\lambda)$ лежат в корнях полинома $D_N(\lambda) \equiv P(N+1, \lambda)$, то

$$\begin{aligned} \langle P(i, \lambda), P(j, \lambda) \rangle &= (1+c)^{-1} \{ \delta_{ij} + cP(i, \mu)P(j, \mu) \} \quad j \leq N \\ \langle P(i, \lambda), P(N+1, \lambda) \rangle &= (1+c)^{-1} cP(i, \mu)P(N+1, \mu) \end{aligned}$$

Условимся ради краткости значения полиномов $P(j, \lambda)$ при $\lambda = \mu$ обозначать через $P(j)$. Подставляя в формулы (4.17) найденные выражения для скалярных произведений, получим следующие формулы для полиномов $\tilde{P}(j, \lambda)$, порождаемых матрицей $\tilde{\mathbf{L}}$:

$$\tilde{P}(j, \lambda) = \sqrt{\frac{(1+c)}{\Gamma_{j-1}\Gamma_j}} A_j(\lambda), \quad (7.3)$$

где

$$\Gamma_j = \begin{vmatrix} 1+cP(1) & cP(2)P(1) & \cdots & cP(j-1)P(1) & cP(j)P(1) \\ cP(1)P(2) & 1+cP(2)^2 & \cdots & cP(j-1)P(2) & cP(j)P(2) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ cP(1)P(j) & cP(2)P(j) & \cdots & cP(j-1)P(j) & 1+cP(j)^2 \end{vmatrix} \quad (7.4)$$

и $A_j(\lambda)$ получается из определителя Γ_j , если в нем нижнюю строчку заменить на $P(1, \lambda), P(2, \lambda), \dots, P(j, \lambda)$. (При $j = N + 1$ в определителе (7.4) элемент $1 + cP(j)^2$ нужно заменить на $P(N + 1)^2$.)

Согласно (7.4)

$$\Gamma_j = \Gamma_{j-1} + \begin{vmatrix} 1 + cP(1)^2 & cP(2)P(1) & \cdots & cP(1) \\ cP(1)P(2) & 1 + cP(2)^2 & \cdots & cP(2) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ cP(1)P(j) & cP(2)P(j) & \cdots & cP(j) \end{vmatrix} P(j).$$

Для вычисления полученного определителя вычтем из первых $j-1$ столбцов последний столбец, умноженный на $P(1), P(2), \dots, P(j-1)$. В результате получится определитель, у которого под главной диагональю стоят нули, а на главной диагонали стоят единицы и только ее нижний элемент равен $cP(j)$. Поэтому этот определитель равен $cP(j)$ и $\Gamma_j = \Gamma_{j-1} + cP(j)^2$, откуда следует, что

$$\Gamma_j = 1 + c \sum_{j=1}^j P(j)^2, \quad j \leq N; \quad \Gamma_{N+1} = cP(N+1)^2.$$

Определители $A_j(\lambda)$ вычисляются аналогично:

$$\begin{aligned} & A_j(\lambda) = \Gamma_{j-1} P(j, \lambda) \\ & + \begin{vmatrix} 1 + cP(1)^2 & cP(2)P(1) & \cdots & cP(1) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ cP(1)P(j-1) & \cdots & \cdots & cP(j-1) \\ P(1, \lambda) & \cdots & P(j-1, \lambda) & 0 \end{vmatrix} P(j) = \\ & = \Gamma_{j-1} P(j, \lambda) + \begin{vmatrix} 1 & 0 & \cdots & \cdots & cP(1) \\ 0 & 1 & \cdots & \cdots & \vdots \\ \vdots & \cdots & \ddots & \cdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & cP(j-1) \\ P(1, \lambda) & P(2, \lambda) & \cdots & P(j-1, \lambda) & 0 \end{vmatrix} P(j) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \Gamma_{j-1}P(j, \lambda) + \left| \begin{array}{cccc|c}
 1 & 0 & \cdots & \cdots & cP(1) \\
 0 & 1 & \cdots & \cdots & \vdots \\
 \vdots & \cdots & \ddots & \cdots & \vdots \\
 0 & 0 & \cdots & 1 & cP(j-1) \\
 0 & 0 & \cdots & 0 & -c \sum_{i=1}^{j-1} P(i)P(i, \lambda)
 \end{array} \right| P(j) \\
 &= \Gamma_{j-1}P(j, \lambda) - cP(j) \sum_{i=1}^{j-1} P(i)P(i, \lambda).
 \end{aligned}$$

Следовательно согласно (7.3)

$$\tilde{P}(j, \lambda) = \sqrt{\frac{1+c}{\Gamma_j \Gamma_{j-1}}} \left\{ \Gamma_{j-1}P(j, \lambda) - cP(j) \sum_{i=1}^{j-1} P(i)P(i, \lambda) \right\}$$

и первые два старших коэффициента $\tilde{k}(j, j)$, $\tilde{k}(j, j-1)$ полиномов $\tilde{P}(j, \lambda)$ равны

$$\begin{aligned}
 \tilde{k}(j, j) &= \sqrt{\frac{1+c}{\Gamma_j \Gamma_{j-1}}} \Gamma_{j-1} k(j, j) \\
 \tilde{k}(j, j-1) &= \sqrt{\frac{1+c}{\Gamma_j \Gamma_{j-1}}} \{ \Gamma_{j-1} k(j, j-1) - \\
 &\quad cP(j)P(j-1)k(j-1, j-1) \},
 \end{aligned}$$

где $k(j, j)$, $k(j, j-1)$ — старшие коэффициенты полиномов $P(j, \lambda)$. Подставив полученные выражения для старших коэффициентов полиномов $\tilde{P}(j, \lambda)$ в формулы (5.2), находим, что ненулевые элементы матрицы $\tilde{\mathbf{L}}$ равны

$$\begin{aligned}
 \tilde{b}_j &= \frac{\sqrt{\Gamma_{j-1} \Gamma_{j+1}}}{\Gamma_j} b_j; \quad \tilde{a}_{N+1} = \mu + \frac{P(N+1)P(N)}{\Gamma_N}; \\
 \tilde{a}_j &= a_j + cP(j) \left\{ \frac{P(j-1)}{\Gamma_{j-1}} b_{j-1} - \frac{P(j+1)}{\Gamma_j} b_j \right\},
 \end{aligned}$$

где $b_0 = 0$, $b_N = 1$, $\Gamma_0 = 1$ и

$$P(j) = P(j, \mu), \quad \Gamma_j = 1 + c \sum_{i=1}^j P(i, \mu)^2, \quad \Gamma_{N+1} = cP(N+1, \mu)^2.$$

При этом нужно помнить, что эти формулы верны для $j \leq N-1$, если $\mu = \lambda_k$, $c = -\{\sigma(\lambda_k + 0) - \sigma(\lambda_k)\}$, для $j \leq N$, если $\mu = \lambda_k$, $c > -\{\sigma(\lambda_k + 0) - \sigma(\lambda_k)\}$ и для $j \leq N+1$, если $\prod_{i=1}^N (\mu - \lambda_i) \neq 0$, $c > 0$.

До сих пор мы занимались решением обратных задач спектрального анализа, т.е. восстанавливали трехдиагональные матрицы по тем или иным спектральным данным. Для решения обратной задачи теории колебаний остается еще найти массы и жесткости колеблющейся струны, зная связанную с ней трехдиагональную матрицу \mathbf{L}_N .

Непрерывные дроби можно использовать и для описания механических характеристик (т.е. масс m_s и коэффициентов жесткости k_s) струны по ее \mathbf{L} -матрице.

Согласно (1.7') механические характеристики струны связаны с элементами матрицы \mathbf{L}_N только $2N-1$ уравнением

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{k_0 + k_1}{m_1}, \quad a_2 = \frac{k_1 + k_2}{m_2}, \quad \dots \quad a_N = \frac{k_{N-1} + k_N}{m_N}, \\ b_1 &= \frac{k_1}{\sqrt{m_1 m_2}}, \quad b_2 = \frac{k_2}{\sqrt{m_2 m_3}}, \quad \dots \quad b_{N-1} = \frac{k_{N-1}}{\sqrt{m_{N-1} m_N}}, \end{aligned} \quad (7.5)$$

из которых нельзя найти $2N+1$ неизвестную величину, т.е. все массы m_1, \dots, m_N и все жесткости k_0, k_1, \dots, k_N . Но этих уравнений достаточно, чтобы однозначно выразить массы m_1, \dots, m_{N-1} и жесткости k_0, k_1, \dots, k_{N-1} через крайнюю массу m_N и жесткость k_N крайней пружины. Следовательно для решения обратной задачи теории колебаний нагруженной струны нужно кроме спектральных данных знать величину крайней массы и жесткость крайней пружины. В зависимости от выбора единицы массы численные значения

жесткости k_N и массы m_N меняются, но их отношение

$$\omega^2 = \frac{k_N}{m_N}$$

остаётся неизменным: оно равно квадрату частоты свободных колебаний массы m_N , прикрепленной к неподвижной опоре пружиной с жесткостью k_N .

Для полного решения обратной задачи теории колебаний нагруженной струны нужно все механические характеристики нагруженной струны выразить через параметр ω^2 , массу m_N и элементы матрицы \mathbf{L} .

Из равенств (7.5) следует

$$a_s = \frac{k_{s-1} + k_s}{m_s} = \frac{k_{s-1}}{m_s} + \frac{k_s^2}{k_s m_s} = \frac{k_{s-1}}{m_s} + \frac{b_s^2 m_s m_{s+1}}{k_s m_s} = \frac{k_{s-1}}{m(s)} + \frac{b_s^2}{\left(\frac{k_s}{m(s+1)}\right)},$$

то есть

$$\frac{k_{s-1}}{m_s} = a_s - \frac{b_s^2}{\left(\frac{k_s}{m_{s+1}}\right)} \quad (1 \leq s \leq n-1); \quad \frac{k_{N-1}}{m_N} = a_N - \omega^2.$$

Поэтому величины $\frac{k_{s-1}}{m_s}$ разлагается в такие непрерывные дроби:

$$\frac{k_{s-1}}{m_s} = a_s - \frac{b_s^2}{a_{s+1} - \frac{b_{s+1}^2}{\dots a_{N-1} - \frac{b_{N-1}^2}{a_N - \omega^2}}}$$

Правые части этих равенств являются некоторыми функциями параметра ω^2 . Обозначив эти функции через $\beta_{s-1}(\omega^2)$, находим, что $k_{s-1} = \beta_{s-1}(\omega^2)m_s$, откуда согласно (7.5) следует: $\beta_{s-1}(\omega^2)^2 m_s^2 =$

$$\begin{aligned}
 k_{s-1}^2 &= b_{s-1}^2 m_{s-1} m_s \text{ и } m_{s-1} = \left(\frac{\beta_{s-1}(\omega^2)}{b_{s-1}} \right)^2 m_s. \text{ Поэтому} \\
 m_{s-1} &= \prod_{s \leq j \leq N} \left(\frac{\beta_{j-1}(\omega^2)}{b_{j-1}} \right)^2 m_N; \quad 2 \leq s \leq N, \\
 k_{s-1} &= \beta_{s-1}(\omega^2) \prod_{s+1 \leq j \leq N} \left(\frac{\beta_{j-1}(\omega^2)}{b_{j-1}} \right)^2 m_N; \quad 1 \leq s \leq N-1, \\
 k_{N-1} &= \beta_{N-1}(\omega^2) m_N; \quad k_N = \omega^2 m_N
 \end{aligned} \tag{7.6}$$

Наоборот, если $k_0, k_1, \dots, k_N, m_1, m_2, \dots, m_N$ выражаются по этим формулам через элементы \mathbf{L} -матрицы, то они удовлетворяют равенствам (7.5) при любом значении параметра ω^2 . Жесткости и массы не могут быть отрицательными. Поэтому все возможные значения жесткостей и масс нагруженной струны с заданной \mathbf{L} -матрицей находятся по формулам (7.6), в которых неотрицательный параметр ω^2 может принимать любые значения, обеспечивающие неотрицательность всех дробей $\beta_0(\omega^2), \beta_1(\omega^2), \dots, \beta_{N-1}(\omega^2)$.

Остается найти интервал допустимых значений параметра ω^2 . Согласно рекуррентным формулам (2.9)

$$\frac{b_{i-1}P(i-1, \lambda)}{P(i, \lambda)} = a_i - \lambda - \frac{b_i^2}{\left(\frac{b_i P(i, \lambda)}{P(i+1, \lambda)} \right)},$$

откуда вытекают такие равенства:

$$\frac{b_{i-1}P(i-1, \lambda)}{P(i, \lambda)} = a_i - \lambda - \frac{b_i^2}{a_{i+1} - \lambda - \frac{b_{i+1}^2}{\dots a_{N-1} - \lambda - \frac{b_{N-1}^2}{\left(\frac{b_{N-1}P(N-1, \lambda)}{P(N, \lambda)} \right)}}},$$

где

$$\frac{b_{N-1}P(N-1, \lambda)}{P(N, \lambda)} = a_N - \lambda - \frac{D_N(\lambda)}{P(N, \lambda)}.$$

При $\lambda = 0$ правые части равны значениям функций $\beta_{i-1}(\omega^2)$ в точке

$$\omega_0^2 = \frac{D_N(0)}{P(N, 0)} = \frac{\lambda_1 \lambda_2 \cdots \lambda_N}{\mu_1 \mu_2 \cdots \mu_{N-1}},$$

где через $\lambda_1 < \lambda_2 < \cdots < \lambda_N$ и $\mu_1 < \mu_2 < \cdots < \mu_{N-1}$ обозначены корни полиномов $D_N(\lambda)$ и $P(N, \lambda)$, т.е. собственные значения матриц \mathbf{L}_N и \mathbf{L}_{N-1} . Так как матрица \mathbf{L}_N положительно определенная, то все эти корни строго больше нуля. Таким образом, при всех $i = 2, 3, \dots, N$

$$\frac{b_{i-1}P(i-1, 0)}{P(i, 0)} = \beta_{i-1}(\omega_0^2), \quad \text{где } \omega_0^2 = \frac{\lambda_1 \lambda_2 \cdots \lambda_N}{\mu_1 \mu_2 \cdots \mu_{N-1}},$$

откуда, в частности, следует, что

$$b_1^2 P(1, 0) = \beta_1(\omega_0^2) b_1 P(2, 0) = \beta_1(\omega_0^2) a_1 P(1, 0)$$

и

$$\beta_0(\omega_0^2) = a_1 - \frac{b_1^2}{\beta_1(\omega_0^2)} = 0.$$

Следовательно в точке $\omega^2 = \omega_0^2$ функции $\beta_i(\omega_0^2)$ принимают такие значения:

$$\beta_0(\omega_0^2) = 0, \quad \beta_i(\omega_0^2) = \frac{b_i P(i, 0)}{P(i+1, 0)}, \quad i = 1, 2, \dots, N-1. \quad (7.7)$$

Заметим теперь, что корни соседних полиномов $P(i, \lambda)$ и $P(i+1, \lambda)$ перемежаются. Это доказывается точно так, как в § 6 была доказана перемежаемость корней полиномов $P(N, \lambda)$ и $D_N(\lambda)$. Вследствие перемежаемости корни полинома $P(2, \lambda)$ лежат между наименьшим и наибольшим корнями полинома $P(3, \lambda)$, которые в свою очередь лежат между наименьшим и наибольшим корнями полинома $P(4, \lambda)$ и т.д. Поэтому корни всех полиномов $P(j, \lambda)$ лежат в интервале (λ_1, λ_N) и значит они строго больше нуля. Так как старший коэффициент полинома $P(i, \lambda)$ равен $(-1)^{i-1} (b_1 \cdots b_{i-1})^{-1}$, то

$$P(i, \lambda) = (-1)^{i-1} (b_1 \cdots b_{i-1})^{-1} \prod_{s=1}^{i-1} (\lambda - \nu_s),$$

где $\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_{i-1}$ — корни этого полинома, и, вследствие их положительности,

$$P(i, 0) = (b_1 \cdots b_{i-1})^{-1} \nu_1 \nu_2 \cdots \nu_{i-1} > 0,$$

откуда согласно (7.7) следует, что

$$\beta_0(\omega_0^2) = 0, \quad \beta_1(\omega_0^2) > 0, \dots, \beta_{N-1}(\omega_0^2) > 0. \quad (7.8)$$

Далее, т.к. $\beta_{N-1}(x) = a_N - x$ и

$$\beta_{i-1}(x) = a_i - \frac{b_i^2}{\beta_i(x)},$$

то

$$\begin{aligned} \beta'_{i-1}(x) &= \frac{b_i^2}{\beta_i(x)^2} \beta'_i(x) = \dots \\ &= \prod_{s=i}^{N-1} \left(\frac{b_s^2}{\beta_s(x)} \right)^2 \beta_{N-1}(x)' = - \prod_{s=i}^{N-1} \left(\frac{b_s}{\beta_s(x)} \right)^2 < 0. \end{aligned}$$

Следовательно все функции $\beta_i(x)$ монотонно убывают и, в силу (7.8) они положительны при $x < \omega_0^2$, а при $x > \omega_0^2$ по крайней мере одна из них ($\beta_0(x)$) отрицательна. Таким образом, *параметр ω^2 может принимать любые значения из полуинтервала $[0, \omega_0^2)$, где*

$$\omega_0^2 = \frac{(\lambda_1 \lambda_2 \cdots \lambda_N)}{(\mu_1 \mu_2 \cdots \mu_{N-1})} = \frac{\text{Det}(L_N)}{\text{Det}(L_{N-1})}.$$

§ 8. Малые колебания, матрица потенциальной энергии и L-матрица, прямая и обратная задачи теории малых колебаний

Малые колебания нагруженных струн являются частным случаем малых колебаний произвольных механических систем с конечным числом степеней свободы. Общая теория малых колебаний была развита еще в XVIII веке Лагранжем, и послужила важным примером лагранжевой механики, изложенной в его классической монографии "Аналитическая механика".

Состояние механической системы с N степенями свободы определяется ее обобщенными координатами q_k и обобщенными скоростями \dot{q}_k , $k = 1, 2, \dots, N$. Функция обобщенных координат и скоростей \mathcal{L} , равная разности кинетической T и потенциальной U энергий системы $\mathcal{L} = T - U$, называется функцией Лагранжа. Уравнения движения в форме Лагранжа

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_k} = 0, \quad k = 1, 2, \dots, N. \quad (8.1)$$

сохраняют свой вид при переходе к любым другим обобщенным координатам.

Рассмотрим механическую систему, состоящую из конечного множества \mathfrak{A} ($\#\mathfrak{A} = n$) материальных точек (частиц) α, β, \dots с массами $m(\alpha), m(\beta), \dots$, взаимодействующих между собой и с внешним полем. Введем ортогональную систему координат с осями $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$ и обозначим координаты частиц α через $X_\alpha^1, X_\alpha^2, X_\alpha^3$, а их координаты в положении устойчивого равновесия системы — через $X_\alpha^1(0), X_\alpha^2(0), X_\alpha^3(0)$. Вектор

$$\mathbf{r}_\alpha = q_\alpha^1 \mathbf{e}_1 + q_\alpha^2 \mathbf{e}_2 + q_\alpha^3 \mathbf{e}_3$$

с координатами

$$q_\alpha^i = X_\alpha^i - X_\alpha^i(0), \quad i = 1, 2, 3, \quad (8.2)$$

называется вектором отклонения частицы α от положения устойчивого равновесия. Отклонение всей системы от положения устойчивого равновесия описывается ее обобщенными координатами q_α^i , $\alpha \in \mathfrak{A}$, $i = 1, 2, 3$, число которых (число степеней свободы) равно $N = 3n$.

Степени свободы (т.е. пары (α, i)) можно отождествить с точками x, y, \dots прямого произведения

$$A = \mathfrak{A} \times [3], \quad [3] = \{1, 2, 3\}.$$

Вместо обобщенных координат удобно рассматривать заданные на множестве A функции $q(x)$, связанные с ними равенствами

$$q(x) = q_\alpha^i \quad \text{при } x = (\alpha, i), \quad (8.3)$$

и ввести для удобства функцию

$$m(x) = m(\alpha) \quad \text{при } x = (\alpha, i), \quad i = 1, 2, 3.$$

Согласно (8.2) $\dot{X}_\alpha^i = \dot{q}_\alpha^i = \dot{q}(x)$, откуда следует, что кинетическая энергия системы выражается через обобщенные координаты обычной формулой

$$T = \frac{1}{2} m_\alpha \dot{q}_\alpha^i \dot{q}_\alpha^i = \frac{1}{2} m(x) (\dot{q}(x))^2. \quad (8.4)$$

Здесь и далее точкой обозначается производная по времени, через $[N]$ обозначается множество $\{1, 2, \dots, N\}$, и всюду (если специально не оговорено) подразумевается, что по повторяющимся индексам i, j, \dots ведется суммирование по множеству $[3]$, по повторяющимся индексам α, β — по множеству \mathfrak{A} и по повторяющимся аргументам x, y — по множеству A .

Потенциальная энергия системы зависит только от положения в пространстве всех содержащихся в ней частиц, т.е. от их координат X_α^i , $\alpha \in \mathfrak{A}$, $i \in [3]$. Ее разложение в ряд Тейлора в окрестности точки устойчивого равновесия имеет такой вид:

$$U = U_0 + U_i^\alpha q_\alpha^i + \frac{1}{2} U_{i,j}^{\alpha,\beta} q_\alpha^i q_\beta^j + \dots \quad (8.5)$$

§ 8. Малые колебания. Матрица потенциальной энергии и \mathbf{L} -матрица

где U_0 — величина потенциальной энергии в точке устойчивого равновесия, которую можно считать равной нулю, частные производные

$$U_i^\alpha = \frac{\partial U}{\partial X_\alpha^i}, \quad U_{i,j}^{\alpha,\beta} = U_{j,i}^{\beta,\alpha} = \frac{\partial^2 U}{\partial X_\alpha^i \partial X_\beta^j}$$

берутся в точке устойчивого равновесия, и $q_\alpha^i = X_\alpha^i - X_\alpha^i(0)$ — обобщенные координаты системы.

В точке устойчивого равновесия частные производные первого порядка U_i^α равны нулю, а квадратичная форма $U_{i,j}^{\alpha,\beta} q_\alpha^i q_\beta^j$ положительно определена, т.е. $U_{i,j}^{\alpha,\beta} q_\alpha^i q_\beta^j > 0$, если $q_\gamma^i q_\gamma^j > 0$. При малых колебаниях, т.е. когда величина $q_\alpha^i q_\alpha^i$, характеризующая отклонение всей системы от положения устойчивого равновесия мала, в формуле (8.5) можно отбросить все слагаемые более высокого порядка малости, обозначенные многоточием.

Таким образом, в приближении теории малых колебаний потенциальная энергия полагается равной положительно определенной квадратичной форме обобщенных координат:

$$U = \frac{1}{2} U_{i,j}^{\alpha,\beta} q_\alpha^i q_\beta^j$$

Эту квадратичную форму можно переписать в терминах функции $q(x)$, связанной с обобщенными координатами равенством (8.3), или векторов \mathbf{r}_α , описывающих отклонения частиц от положения устойчивого равновесия. В результате получим три эквивалентные формулы для потенциальной энергии:

$$U = \frac{1}{2} U_{i,j}^{\alpha,\beta} q_\alpha^i q_\beta^j = \frac{1}{2} U(x, y) q(x) q(y) = \frac{1}{2} (\mathbf{U}^{\alpha,\beta} \mathbf{r}_\alpha, \mathbf{r}_\beta), \quad (8.6)$$

где $U(x, y) = U(y, x) = U_{i,j}^{\alpha,\beta}$ при $x = (\alpha, i)$, $y = (\beta, i)$, $\mathbf{U}^{\alpha,\beta} = (\mathbf{U}^{\beta,\alpha})^*$ — действующие в трехмерном евклидовом пространстве линейные операторы с матрицами $\mathbf{U}^{\alpha,\beta} = (U_{i,j}^{\alpha,\beta})$, $i, j \in [3]$ в ортонормированном базисе $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$ и через $(,)$ обозначено обычное скалярное

произведение. Матрица $U = (U(x, y))$, $x, y \in A$ называется матрицей потенциальной энергии. Ее часто удобно записывать в виде блочной матрицы с блоками $U^{\alpha, \beta}$, являющимися матрицами третьего порядка.

Механическими характеристиками систем, совершающих малые колебания, называются их матрицы потенциальной энергии и массы содержащихся в них частиц.

Из (8.4), (8.6) следует, что функции Лагранжа таких систем равны

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \{m(x)(\dot{q}(x))^2 - U(x, y)q(x)q(y)\}$$

и, согласно (8.1), малые колебания описываются решениями $\mathbf{q}(x) = q(x, t)$ системы уравнений

$$m(x)\ddot{q}(x, t) + U(y, x)q(y, t) = 0 \quad (8.7)$$

при произвольных $q(x, 0)$, $\dot{q}(x, 0)$. Здесь и далее суммирование ведется только по $y \in A$. Подстановкой

$$\eta(x, t) = \sqrt{m(x)} q(x, t) \quad (8.8)$$

задача сводится к решению системы

$$\ddot{\eta}(x, t) + L(x, y)\eta(y, t) = 0 \quad (8.9)$$

при начальных данных

$$\eta(x, 0) = \sqrt{m(x)} q(x, 0), \quad \dot{\eta}(x, 0) = \sqrt{m(x)} \dot{q}(x, 0), \quad (8.10)$$

где

$$L(x, y) = \frac{U(x, y)}{\sqrt{m(x)m(y)}}.$$

Введем N -мерное ($N = \sharp A = 3n$) гильбертово пространство $H(A)$ функций $\mathbf{f} = f(x)$, $x \in A$ со скалярным произведением

$$(\mathbf{f}, \mathbf{g}) = \sum_{y \in A} f(y)\overline{g(y)}$$

и ортонормированным каноническим базисом

$$\mathbf{e}_y = e_y(x) = \delta_y^x,$$

занумерованным точками y множества A . Здесь и далее δ_y^x — символ Кронекера: $\delta_y^x = \begin{cases} 0 & x \neq y \\ 1 & x = y \end{cases}$.

Действующие в пространстве $\mathbf{H}(A)$ линейный оператор \mathbf{L} и его матрица

$$\mathbf{L} = (L(x, y)) = \left(\frac{U(x, y)}{\sqrt{m(x)m(y)}} \right) \quad (8.11)$$

называются \mathbf{L} -оператором и приведенной матрицей потенциальной энергии. Везде далее для краткости мы будем называть ее L -матрицей системы.

В этих терминах уравнение (8.9) перепишется так:

$$\ddot{\boldsymbol{\eta}} + \mathbf{L}\boldsymbol{\eta}(t) = 0, \quad \boldsymbol{\eta}(t) = \boldsymbol{\eta}(x, t),$$

и согласно (1.9) его решение при начальных данных $\vec{\boldsymbol{\eta}}(0) = \boldsymbol{\eta}(x, 0)$, $\dot{\vec{\boldsymbol{\eta}}}(0) = \dot{\boldsymbol{\eta}}(x, 0)$ выражается через собственные значения $\lambda(j)$ и соответствующие ортонормированные собственные функции $\boldsymbol{\varphi}(j) = \boldsymbol{\varphi}(x, j)$, $j \in [N]$ \mathbf{L} -матрицы формулой

$$\boldsymbol{\eta}(t) = \sum_{i=1}^N \boldsymbol{\varphi}(j) \left\{ (\boldsymbol{\eta}(0), \boldsymbol{\varphi}(j)) \cos \sqrt{\lambda(j)} t + (\dot{\boldsymbol{\eta}}(0), \boldsymbol{\varphi}(j)) \frac{\sin \sqrt{\lambda(j)} t}{\sqrt{\lambda(j)}} \right\},$$

а в развернутом виде — формулой

$$\eta(x, t) = \sum_{i=1}^N \sum_{y \in A} \varphi(x, j) \overline{\varphi(y, j)} \left\{ \eta(y, 0) \cos \sqrt{\lambda(j)} t + \dot{\eta}(y, 0) \frac{\sin \sqrt{\lambda(j)} t}{\sqrt{\lambda(j)}} \right\} \quad (8.12)$$

Очевидно, что \mathbf{L} -матрица, также как матрица потенциальной энергии, положительно определенная. Поэтому ее собственные значения

положительны, но, в отличие от случая нагруженных струн, могут быть кратными. Их удобно занумеровать так:

$$\begin{aligned} 0 < \lambda(1) = \lambda(2) = \dots = \lambda(p(1)) = \\ \mu(1) < \lambda(p(1) + 1) = \dots = \lambda(p(k-1)) \\ = \mu(k-1) < \lambda(p(k-1) + 1) = \dots = \lambda(p(k)) = \mu(k), \end{aligned}$$

где $p(k) = N$ и через $\mu(1) < \mu(2) < \dots < \mu(k)$ обозначен спектр \mathbf{L} -матрицы. Соответствующие инвариантные подпространства, т.е. ядра операторов $\mathbf{L} - \mu(s)\mathbf{I}$ обозначаются через $\mathbf{H}(\mu(s))$, а их размерности, т.е. кратности собственных значений $\mu(s)$ — через $n(s) = p(s) - p(s-1)$, где $p(0) = 0$. Ортогопроекторы на подпространства $\mathbf{H}(\mu(s))$ и их матрицы обозначаются через \mathbf{E}_s и $\mathbf{E}_s = (E_s(x, y))$, $x, y \in A$, где

$$E_s(x, y) = \sum_{p(s-1) < j \leq p(s)} \varphi(x, j) \overline{\varphi(y, j)}. \quad (8.13)$$

В этих обозначениях формула (8.12) переписется так:

$$\eta(x, t) = \sum_{s=1}^k \sum_{y \in A} E_s(x, y) \left\{ \eta(y, 0) \cos \omega_s t + \dot{\eta}(y, 0) \frac{\sin \omega_s t}{\omega_s} \right\},$$

где $\omega_s = \sqrt{\mu(s)}$. Отсюда и из равенств (8.8), (8.10) вытекает такая формула для решений исходного уравнения (8.7):

$$q(x, t) = \sum_{s=1}^k \sum_{y \in A} E_s(x, y) \sqrt{\frac{m(y)}{m(x)}} \left\{ q(y, 0) \cos \omega_s t + \dot{q}(y, 0) \frac{\sin \omega_s t}{\omega_s} \right\}$$

Эта формула является решением прямой задачи теории малых колебаний, в которой требуется, зная механические характеристики системы, найти ее собственные колебания и их зависимость от состояния системы в начальный момент времени, т.е. от начальных

§ 8. Малые колебания. Матрица потенциальной энергии и \mathbf{L} -матрица

данных. Например, если в начальный момент система была выведена из равновесия ударом по частице β , направленным вдоль орта \mathbf{e}_i и сообщившим ей скорость $\mathbf{v} = v \mathbf{e}_i$, т.е., если

$$q(x, 0) = 0, \quad \dot{q}(x, 0) = v \delta_z^x,$$

где $z = (\beta, i)$, то возбужденные этим ударом собственные колебания описываются функцией

$$q_z(x, t) = v \sum_{s=1}^k \sqrt{\frac{m(z)}{m(x)}} E_s(x, z) \frac{\sin \omega_s t}{\omega_s} \quad (8.14)$$

Основная обратная задача теории малых колебаний состоит в следующем.

Пусть наблюдателю доступны не все частицы исследуемой системы, а только их небольшая часть $\mathfrak{A}_0 \subset \mathfrak{A}$. Это означает, что в начальный момент можно возбуждать колебания системы, выводя из равновесного состояния только частицы множества \mathfrak{A}_0 , и наблюдать затем колебания только тех частиц, которые принадлежат этому же множеству \mathfrak{A}_0 . Следовательно, наблюдаемыми являются не все функции $q_z(x, t)$, $0 < t < \infty$, а только те из них, у которых $x, z \in A(0) = \mathfrak{A}_0 \times [\mathfrak{Z}]$.

В обратной задаче требуется выяснить, какие сведения о механических характеристиках системы, т.е. о матрице потенциальной энергии и массах содержащихся в ней частиц, можно извлечь из наблюдений за колебаниями доступных частиц.

Прежде всего нужно найти условия, при которых по наблюдаемым данным, т.е. по функциям $q_z(x, t)$, $x, z \in A(0)$ можно найти \mathbf{L} -матрицу системы и дать метод ее вычисления

§ 9. Наблюдаемые величины и вычисляемые величины. Сведение обратных задач теории малых колебаний к обратной задаче спектрального анализа эрмитовых матриц

Условимся все величины, которые получаются из наблюдаемых функций $q_z(x, t)$, $x, z \in A(0) = \mathfrak{A}_0 \times [3]$, $0 < t < \infty$ явно описанными математическими операциями называть вычисляемыми.

Лемма 7. *Если \mathbf{L} -матрица не имеет собственных функций тождественно равных нулю на множестве $A(0)$, то ее спектр (т.е. собственные значения $\mu(s)$) и матричные элементы $E_s(x, z)$ ортопроекторов на инвариантные подпространства $H(\mu(s))$ вычислимы при всех $s = 1, 2, \dots, k$ и $x, z \in A(0)$*

Доказательство. Согласно (8.14) вычисляемая при всех $x, z \in A(0)$, $\omega \in (0, \infty)$ функция

$$\begin{aligned} Q(\omega, x, z) &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{2}{T} \int_0^T q_z(x, t) \omega \sin \omega t dt \\ &= v \sqrt{\frac{m(z)}{m(x)}} \lim_{T \rightarrow \infty} \sum_{s=1}^k \frac{\omega}{\omega_s} E_s(x, z) \left\{ \frac{\sin(\omega_s - \omega)T}{(\omega_s - \omega)T} - \frac{\sin(\omega_s + \omega)T}{(\omega_s + \omega)T} \right\} \end{aligned}$$

принимает такие значения

$$Q(\omega, x, z) = v \sqrt{\frac{m(z)}{m(x)}} \sum_{s=1}^k \delta_{\omega_s}^\omega E_s(x, z), \quad (9.1)$$

откуда следует, что

$$\sum_{z \in A(0)} Q(\omega, z, z) = v \sum_{s=1}^k \delta_{\omega_s}^\omega \sum_{z \in A(0)} E_s(z, z)$$

где согласно (8.13)

$$\sum_{z \in A(0)} E_s(z, z) = \sum_{p(s-1) < j \leq p(s)} \sum_{z \in A(0)} |\varphi(z, j)|^2.$$

Если собственные функции \mathbf{L} -матрицы не обращаются тождественно в нуль на множестве $A(0)$, то при всех $s \in [k]$, $\sum_{z \in A(0)} E_s(z, z) > 0$, откуда следует, что функция $\sum_{z \in A(0)} Q(\omega, z, z)$ принимает положительные значения при $\omega = \omega_s$, $s \in [k]$, и равные нулю при всех других значениях ω . Следовательно все частоты ω_s , $s \in [k]$, а, значит, и собственные значения $\mu(s) = \omega_s^2$, вычислимы, т.к. только при этих значениях ω вычисляемая функция $\sum_{z \in A(0)} Q(\omega, z, z)$ отлична от нуля.

Далее, ортопроекторы \mathbf{E}_s образуют разложение единичного оператора и сумма их матриц равна единичной матрице, т.е. $\sum_{s=1}^k E_s(x, z) = \delta_z^x$, откуда согласно (9.1) следует, что при всех $z \in A$

$$\sum_{s=1}^k Q(\omega_s, z, z) = v \sum_{s=1}^k E_s(z, z) = v. \quad (9.2)$$

Наконец, из равенств (9.1) при $\omega = \omega_s$ следует, что

$$\sqrt{\frac{m(z)}{m(x)}} \frac{Q(\omega_s, x, z)}{v} = E_s(x, z) = \overline{E_s(z, x)} = \sqrt{\frac{m(z)}{m(x)}} \frac{Q(\omega_s, z, x)}{v}. \quad (9.3)$$

Поэтому, если $Q(\omega_s, x, z) \neq 0$, то

$$\frac{m(x)}{m(z)} = \frac{\overline{Q(\omega_s, z, x)}}{Q(\omega_s, x, z)}$$

и согласно (9.2), (9.3)

$$E_s(x, z) = \begin{cases} \sqrt{\frac{Q(\omega_s, z, x)}{Q(\omega_s, x, z)}} \cdot \frac{Q(\omega_s, x, z)}{\sum_{s=1}^k Q(\omega_s, z, z)}, & \text{если } Q(\omega_s, x, z) \neq 0, \\ 0, & \text{если } Q(\omega_s, x, z) = 0. \end{cases}$$

Так как правые части этих равенств вычислимы при всех $s \in [k]$, $x, z \in A(0)$, то и матричные элементы $E_s(x, z)$ вычислимы. ■

З а м е ч а н и е. В Лемме 1 предполагалось, что наблюдение за колебаниями частиц множества \mathfrak{A}_0 ведется бесконечно долго ($T \rightarrow \infty$). Если же время наблюдений T конечно, то частоты ω_s и матричные элементы $E_s(x, z)$, $x, z \in A(0)$ находятся с точностью порядка $\frac{\Delta}{\sqrt{\Delta T}}$ и $\frac{M}{m} \frac{1}{\sqrt{\Delta T}}$ соответственно, где

$$\Delta = \min_{s \in [k]} (\omega_s - \omega_{s-1}), \quad M = \max_{\alpha \in \mathfrak{A}_0} m(\alpha), \quad m = \min_{\alpha \in \mathfrak{A}_0} m(\alpha).$$

Обозначим через χ оператор умножения на индикатор $\chi(x)$ множества $A(0)$ и рассмотрим неотрицательные операторы $\chi \mathbf{E}_s \chi$, матрицы которых

$$\chi \mathbf{E}_s \chi = (\chi(x) E_s(x, y) \chi(y)), \quad x, y \in A$$

согласно Лемме 1 вычислимы, если \mathbf{L} -матрица не имеет собственных функций, тождественно равных нулю на множестве $A(0)$. Следовательно ранги m_s этих матриц, их положительные собственные значения

$$0 < \varkappa_s^2(1) \leq \varkappa_s^2(2) \leq \dots \leq \varkappa_s^2(m_s)$$

и соответствующие ортонормированные собственные функции $\theta^s(x, i)$, $i = 1, 2, \dots, m_s$ тоже вычислимы.

Лемма 8. Если \mathbf{L} -матрица не имеет собственных функций тождественно равных нулю на множестве $A(0)$, то

1) размерности n_s собственных подпространств $H(\mu(s))$ вычислимы и равны рангам m_s матриц $\chi \mathbf{E}_s \chi$;

2) существует полный набор ортонормированных собственных функций \mathbf{L} -матрицы $\psi(x, j)$, $x \in A$, $j \in [N]$, принимающих вычисляемые значения на множестве $A(0)$, равные $\varkappa_s(j - p(s - 1)) \theta^s(x, j - p(s - 1))$.

Доказательство. Согласно (8.13)

$$\chi(x)E_s(x, y)\chi(y) = \sum_{p(s-1) < j \leq p(s)} \chi(x)\varphi(x, j)\overline{\varphi(y, j)}\chi(y) \quad (9.4)$$

откуда следует, что область значений оператора $\chi\mathbf{E}_s\chi$ содержится в линейной оболочке функций $\chi(x)\varphi(x, j)$, $p(s-1) < j \leq p(s)$. Эти функции линейно независимы, т.к. в противном случае нашлась бы нетривиальная линейная комбинация $\sum_{p(s-1) < j \leq p(s)} \varphi(x, j)c_j$, тождественно равная нулю на множестве $A(0)$. Но любая такая линейная комбинация является собственной функцией \mathbf{L} -матрицы, принадлежащей подпространству $H(\mu(s))$, и по условиям леммы не может обращаться в нуль на всем множестве $A(0)$. Поэтому существует биортогональная с функциями $\chi(x)\varphi(x, j)$, $p(s-1) < j \leq p(s)$ система функций $g(x, j)$, $p(s-1) < j \leq p(s)$, и согласно (9.4)

$$\begin{aligned} \chi\mathbf{E}_s\chi(g(j')) &= \sum_{p(s-1) < j \leq p(s)} \chi(x)\varphi(x, j) \sum_{y \in A} g(y, j')\overline{\varphi(y, j)}\chi(y) \\ &= \sum_{p(s-1) < j \leq p(s)} \chi(x)\varphi(x, j)\delta_j^{j'} = \chi(x)\varphi(x, j'), \end{aligned}$$

откуда следует, что функция $\chi(x)\varphi(x, j)$, $p(s-1) < j \leq p(s)$, принадлежит области значений оператора $\chi\mathbf{E}_s\chi$, и, т.к. они линейно независимы, образуют ее базис. Следовательно размерность области значений оператора $\chi\mathbf{E}_s\chi$ равна $p_s - p_{s-1} = n_s$. С другой стороны, очевидно, что собственные функции оператора $\chi\mathbf{E}_s\chi$ с положительными собственными значениями, т.е. функции $\theta^s(x, i)$, $i = 1, 2, \dots, m_s$ тоже образуют базис в области его значений. Поэтому $m_s = n_s$.

Собственные функции $\theta^s(x, i)$ операторов $\chi\mathbf{E}_s\chi$ удовлетворяют равенствам

$$\varkappa_s(i)^2\theta^s(x, i) = \sum_{p(s-1) < j \leq p(s)} \chi(x)\varphi(x, j)C_j^i(s), \quad (9.5)$$

где

$$C_j^i(s) = \sum_{y \in A} \chi(y) \overline{\varphi(y, j)} \theta^s(y, i),$$

откуда, вследствие ортонормированности этих функций, следует, что

$$\varkappa_s(i)^2 \delta_i^i = \sum_{p(s-1) < j \leq p(s)} \overline{C_j^{i'}(s)} C_j^i(s). \quad (9.6)$$

Определим функции $\psi(x, l)$, $p(s-1) < l \leq p(s)$, равенствами

$$\psi(x, l) = (\varkappa_s(i))^{-1} \sum_{p(s-1) < j \leq p(s)} \varphi(x, j) C_j^i(s),$$

где $i = l - p(s-1)$. Эти функции, очевидно принадлежат инвариантным подпространствам \mathbf{L} -матрицы $H(\mu(s))$ и согласно (9.5) удовлетворяют равенствам

$$\chi(x) \psi(x, l) = \varkappa_s(i) \theta^s(x, i), \quad (9.7)$$

правые части которых вычислимы и не обращаются тождественно в нуль на множестве $A(0)$. Поэтому функции $\psi(x, l)$ являются собственными функциями \mathbf{L} -матрицы и т.к. $m_s = n_s$, их общее число равно N .

Для завершения доказательства леммы остается только проверить, что эти функции ортонормированы. Так как подпространства $H(\mu(s))$ ортогональны друг другу, то и функции $\psi(x, l)$ при разных s тоже ортогональны.

Если же функции $\psi(l) = \psi(x, l)$ и $\psi(l') = \psi(x, l')$ принадлежат одному и тому же подпространству $H(\mu(s))$, т.е. $l = p(s-1) + i$, $l' = p(s-1) + i'$, $i, i' \in [m_s] = [n_s]$, то

$$\begin{aligned} (\psi(l), \psi(l')) = \\ (\varkappa_s(i) \varkappa_s(i'))^{-1} \sum_{p(s-1) < j \leq p(s)} \sum_{p(s-1) < j' \leq p(s)} (\varphi(j), \varphi(j')) C_j^i(s) \overline{C_{j'}^{i'}(s)} \end{aligned}$$

и т.к. функции $\varphi(j) = \varphi(x, j)$ ортонормированы, то

$$\begin{aligned} (\psi(l), \psi(l')) &= (\varkappa_s(i)\varkappa_s(i'))^{-1} \sum_{p(s-1) < j \leq p(s)} \sum_{p(s-1) < j' \leq p(s)} \delta_j^{j'} C_j^i(s) \overline{C_{j'}^{i'}(s)} \\ &= (\varkappa_s(i)\varkappa_s(i'))^{-1} \sum_{p(s-1) < j \leq p(s)} C_j^i(s) \overline{C_j^{i'}(s)}, \end{aligned}$$

откуда согласно (9.6) следует, что

$$(\psi(l), \psi(l')) = \frac{\varkappa_s(i)}{\varkappa_s(i')} \delta_i^{i'} = \delta_i^{i'}.$$

Следовательно функции $\psi(x, l)$ образуют полный набор ортонормированных собственных функций \mathbf{L} -матрицы и на множестве $A(0)$ согласно (9.7) они принимают вычислимые значения, равные $\varkappa_s(i)\theta^s(x, i)$, $i = l - p(s - 1)$, $p(s - 1) < l \leq p(s)$, $s = 1, 2, \dots, k$. ■

Определение. *Спектральными данными $S(M)$ эрмитовой матрицы $\mathbf{M} = (M(x, y))$, $x, y \in A$ называется множество ее собственных значений $\lambda(j)$, $j \in [N]$ (с учетом кратности) и соответствующих ортонормированных собственных функций (векторов) $\varphi(j)$, точнее их координат $\varphi(x, j)$, $x \in A$, $j \in [N]$ в каноническом базисе пространства $\mathbf{H}(A)$.*

Спектральные данные определены неоднозначно, т.к. в качестве собственных функций $\varphi(j)$, принадлежащих собственному подпространству $H(\mu(s))$, можно взять произвольный ортонормированный базис этого подпространства. Однако, эрмитова матрица определяется любыми своими спектральными данными однозначно формулой

$$M(x, y) = \sum_{j=1}^N \lambda(j) \varphi(x, j) \overline{\varphi(y, j)}. \quad (9.8)$$

Из этой формулы следует также, что любое множество, состоящее из N вещественных чисел (возможно повторяющихся) и лю-

бого ортонормированного базиса пространства $H(A)$ является спектральными данными некоторой эрмитовой матрицы, элементы которой находятся по формуле (9.8)

Сужением $S_B(M)$ спектральных данных на подмножество $B \subset A$ называется множество, получающееся из них заменой собственных функций их сужениями на это подмножество. Следовательно

$$S(M) = \bigcup_{j \in [N]} \bigcup_{x \in A} \{\lambda(j), \varphi(x, j)\}; \quad S_B(M) = \bigcup_{j \in [N]} \bigcup_{x \in B} \{\lambda(j), \varphi(x, j)\}.$$

Обратными задачами спектрального анализа эрмитовых матриц мы будем называть задачи, в которых требуется найти матрицу по сужению ее спектральных данных на то или иное подмножество и выяснить, когда эта задача имеет единственное решение.

К таким обратным задачам относятся, в частности, задача о нахождении трехдиагональной эрмитовой матрицы по ее спектральной функции.

Из лемм 7, 8 следует, что, в случае, когда \mathbf{L} -матрица не имеет собственных функций тождественно равных нулю на множестве $A(0)$, сужение ее спектральных данных на это подмножество вычислимо. Поэтому в этом случае обратная задача теории малых колебаний о вычислении \mathbf{L} -матрицы механической системы по наблюдаемым данным сводится к обратной задаче спектрального анализа эрмитовых матриц.

§ 10. Общее решение обратной задачи спектрального анализа эрмитовых матриц

Спектральные данные и их сужения удобно записывать в матричной форме так:

$$S(M) = \{\Phi, \Lambda\}, \quad S_B(M) = \{\Phi_B, \Lambda\}$$

где $\Phi = (\varphi(x, j))$, $(x, j) \in A \times [N]$ — квадратная, $\Phi_B = (\varphi(x, j))$, $(x, j) \in B \times [N]$ — прямоугольная и Λ — вещественная диагональная матрицы. Строки $\varphi_x = \varphi(x, j)$, $j \in [N]$, матрицы Φ нумеруются точками x множества A и являются векторами пространства $H([N])$, а столбцы $\varphi_j = \varphi(x, j)$, $x \in A$, нумеруются числами j множества $[N]$ и являются векторами пространства $H(A)$. Матрица Φ_B получается из Φ удалением строк, занумерованных точками множества $A \setminus B$.

Множество $\{\Phi, \Lambda\}$ тогда и только тогда является спектральными данными эрмитовой матрицы M , когда столбцы матрицы Φ образуют ортонормированный базис пространства $H(A)$, т.е. когда $\Phi^* \Phi = I$, и в этом случае согласно (9.8)

$$M = \Phi \Lambda \Phi^*.$$

Очевидно, что решение обратной задачи спектрального анализа, т.е. отыскание всех эрмитовых матриц, для которых данное множество $\{\Phi_B, \Lambda\}$ является сужением их спектральных данных на подмножестве $B \subset A$, равносильно отысканию всех продолжений прямоугольной матрицы Φ_B до квадратной Φ , при которых выполняется равенство $\Phi^* \Phi = I$.

Иными словами, обратная задача спектрального анализа эквивалентна решению системы нелинейных уравнений

$$\sum_{x \in A} \overline{\varphi(x, j)} \varphi(x, j') = \delta_{j, j'}^j, \quad (10.1)$$

относительно неизвестных $\varphi(x, j)$, $(x, j) \in (A \setminus B) \times [N]$, в которой величины $\varphi(x, j)$, $(x, j) \in B \times [N]$ (т.е. элементы матрицы Φ_B) известны. В конечномерном случае каждое из равенств $\Phi^* \Phi = I$ и

$\Phi\Phi^* = \mathbf{I}$ является следствием другого. Поэтому функции $\varphi(x, j)$, $(x, j) \in A \times [N]$ удовлетворяют уравнениям (10.1) тогда и только тогда, когда они удовлетворяют уравнениям

$$\sum_{j=[N]} \varphi(x, j) \overline{\varphi(x', j)} = \delta_x^{x'}, \quad (10.2)$$

то есть когда выполняются следующие равенства:

$$\sum_{j=[N]} \varphi(x, j) \overline{\varphi(x', j)} = \delta_x^{x'}, \quad x \in B, \quad x' \in B, \quad (10.3)$$

$$\sum_{j=[N]} \varphi(x, j) \overline{\varphi(x', j)} = 0, \quad x \in A \setminus B, \quad x' \in B, \quad (10.4)$$

$$\sum_{j=[N]} \varphi(x, j) \overline{\varphi(x', j)} = \delta_x^{x'}, \quad x \in A \setminus B, \quad x' \in A \setminus B. \quad (10.5)$$

Равенства (10.3) содержат только известные функции $\varphi(x, j)$, $(x, j) \in B \times [N]$ и являются необходимым условием разрешимости системы (10.2), а, значит, и системы (10.1). Равенства (10.4) означают, что неизвестные функции $\varphi_x = \varphi(x, j)$, $x \in A \setminus B$, т.е. векторы пространства $\mathbb{H}([N])$ лежат в ортогональном дополнении к линейной оболочке известных векторов $\varphi_{x'} = \varphi(x', j)$, $x' \in B$, и согласно (10.5) образуют его ортонормированный базис.

Следовательно обратная задача спектрального анализа эквивалентна отысканию всех ортонормированных базисов подпространства $O(\overline{B}) \subset \mathbb{H}([N])$, которое является ортогональным дополнением к линейной оболочке $O(B)$ известных векторов φ_x , $x \in B$.

Размерность подпространства $O(B)$, очевидно, равна $N(B) = \#B$, а размерность его ортогонального дополнения $O(\overline{B})$ равна $N(\overline{B}) = N - N(B)$.

Ортонормированный базис подпространства $O(\overline{B})$ можно вычислить, например, так. Обозначим через $\mathbf{e}_s = \delta_j^s$ канонический базис пространства $\mathbb{H}([N])$, занумерованный числами s множества $[N]$

и рассмотрим ортогональные проекции ортов \mathbf{e}_s на подпространство $O(\overline{B})$, т.е. векторы

$$\mathbf{f}(s) = \mathbf{e}_s - \sum_{x \in B} \varphi_x(\mathbf{e}_s, \varphi_x). \quad (10.6)$$

Любой вектор \mathbf{g} пространства $\mathbf{H}([N])$ представим в виде $\mathbf{g} = \sum_{s=1}^N (\mathbf{g}, \mathbf{e}_s) \mathbf{e}_s$, откуда согласно (10.6) следует, что

$$\begin{aligned} \mathbf{g} &= \sum_{s=1}^N (\mathbf{g}, \mathbf{e}_s) \left\{ \mathbf{f}(s) + \sum_{x \in B} \varphi_x(\mathbf{e}_s, \varphi_x) \right\} \\ &= \sum_{s=1}^N (\mathbf{g}, \mathbf{e}_s) \mathbf{f}(s) + \sum_{x \in B} \varphi_x \left(\sum_{s=1}^N (\mathbf{g}, \mathbf{e}_s) \mathbf{e}_s, \varphi_x \right) \\ &= \sum_{s=1}^N (\mathbf{g}, \mathbf{e}_s) \mathbf{f}(s) + \sum_{x \in B} \varphi_x(\mathbf{g}, \varphi_x). \end{aligned}$$

Поэтому вектор ортогонального дополнения $O(\overline{B})$ представим в виде

$$\mathbf{g} = \sum_{s=1}^N (\mathbf{g}, \mathbf{e}_s) \mathbf{f}(s),$$

откуда следует, что подпространство $O(\overline{B})$ является линейной оболочкой векторов $\mathbf{f}(s)$, $s \in [N]$. Так как размерность подпространства $O(\overline{B})$ равна $N(\overline{B}) = N - N(B)$, то последовательность векторов $\mathbf{f}(1), \mathbf{f}(2), \dots, \mathbf{f}(N)$ содержит подпоследовательность

$$\mathbf{f}(s(1)), \mathbf{f}(s(2)) \dots, \mathbf{f}(s(N(\overline{B}))) \quad (10.7)$$

линейно независимых векторов, ортогонализуя которую, получим искомым ортонормированный базис подпространства $O(\overline{B})$. Векторы подпоследовательности (10.7) находятся по такому правилу:

$$\Gamma(\mathbf{f}(s(1))) > 0, \quad \text{но при всех } j < s(1) \quad \Gamma(\mathbf{f}(s(j))) = 0,$$

и далее по индукции

$$\Gamma(\mathbf{f}(s(1)), \mathbf{f}(s(2)) \dots, \mathbf{f}(s(k+1))) > 0, \quad \text{но при всех } j < s(k+1)$$

$$\Gamma(\mathbf{f}(s(1)), \mathbf{f}(s(2)) \dots, \mathbf{f}(s(k)), \mathbf{f}(j)) = 0,$$

где через

$$\Gamma(\mathbf{g}(1), \mathbf{g}(2), \dots, \mathbf{g}(k)) = \begin{vmatrix} (\mathbf{g}(1), \mathbf{g}(1)) & (\mathbf{g}(2), \mathbf{g}(1)) & \dots & (\mathbf{g}(k), \mathbf{g}(1)) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (\mathbf{g}(1), \mathbf{g}(k)) & (\mathbf{g}(2), \mathbf{g}(k)) & \dots & (\mathbf{g}(k), \mathbf{g}(k)) \end{vmatrix}$$

обозначен определитель Грамма векторов $\mathbf{g}(1), \mathbf{g}(2), \dots, \mathbf{g}(k)$.

Ортогонализуя последовательность векторов (10.7), получим согласно (4.17) такой ортонормированный базис подпространства $O(\overline{B})$

$$\mathbf{p}(1) = \frac{\mathbf{f}(s(1))}{\sqrt{\Gamma(1)}},$$

$$\vdots$$

$$\mathbf{p}(k) = \frac{1}{\sqrt{\Gamma(k-1)\Gamma(k)}} \begin{vmatrix} (\mathbf{f}(s(1)), \mathbf{f}(s(1))) & \dots & (\mathbf{f}(s(k)), \mathbf{f}(s(1))) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ (\mathbf{f}(s(1)), \mathbf{f}(s(k-1))) & \dots & (\mathbf{f}(s(k)), \mathbf{f}(s(k-1))) \\ \mathbf{f}(s(k)) & \dots & (\mathbf{f}(s(k))) \end{vmatrix},$$

$$\vdots \tag{10.8}$$

где $k = 1, 2, \dots, N(\overline{B})$ и через $\Gamma(k)$ обозначены определители Грамма векторов $\mathbf{f}(s(1)), \mathbf{f}(s(2)), \dots, \mathbf{f}(s(k))$.

Произвольно занумеровав точки множества $A \setminus B$ числами $1, 2, \dots, N(\overline{B})$ и положив

$$\varphi_0(x) = \mathbf{p}(s(k(x))), \quad x \in A \setminus B, \tag{10.9}$$

где $k(x)$ — номер точки $x \in A \setminus B$, получим ортонормированный базис подпространства $O(\overline{B})$, занумерованный точками множества

$A \setminus B$. Согласно (10.6), (10.8) векторы этого базиса явно выражаются через известные векторы $\varphi(x)$, $x \in B$. Все другие ортонормированные базисы $\varphi(x)$, $x \in A \setminus B$, подпространства $O(\overline{B})$ получаются из базиса (10.9) унитарным преобразованием, т.е.

$$\varphi(x) = \sum_{y \in A \setminus B} V(x, y) \varphi_0(y), \quad x \in A \setminus B,$$

где $\mathbf{V} = (V(x, y))$, $x, y \in A \setminus B$ произвольная унитарная матрица.

Зафиксируем полученные результаты в следующей теореме.

Теорема 5. *Множество $\{\Phi, \Lambda\}$ тогда и только тогда является сужением на подмножестве $B \subset A$ спектральных данных некоторой эрмитовой матрицы \mathbf{M} , когда матричные элементы $\varphi(x, j)$, $x \in B$, $j \in [N]$ прямоугольной матрицы Φ_B удовлетворяют равенствам*

$$\sum_{j=1}^N \varphi(x, j) \overline{\varphi(x', j)} = \delta_x^{x'}, \quad x, x' \in B$$

и диагональная матрица N -го порядка Λ вещественна.

При выполнении этих условий матричные элементы $M(x, y)$, $x, y \in A$, искомой эрмитовой матрицы \mathbf{M} вычисляются по формулам

$$M(x, y) = \sum_{j=1}^N \lambda(j) \psi(x, j) \overline{\psi(y, j)},$$

где $\lambda(j)$ — диагональные элементы матрицы Λ ,

$$\psi(x, j) = \begin{cases} \varphi(x, j), & x \in B, \quad j \in [N], \\ \sum_{y \in A \setminus B} V(x, y) \varphi_0(y, j), & x \in A \setminus B, \quad j \in [N], \end{cases}$$

$\mathbf{V} = (V(x, y))$ — произвольная унитарная матрица $N - N(B)$ порядка и $\varphi_0(x, j) = (\varphi_0(x), \mathbf{e}_j)$ — координаты векторов $\varphi_0(x)$, $x \in A \setminus B$,

которые выражаются через известные векторы $\varphi(x)$, $x \in B$ по формулам (10.6), (10.8), (10.9).

Таким образом, решение обратной задачи об отыскании эрмитовой матрицы по сужению ее спектральных данных на подмножество $B \subset A$ не единственно: решения зависят от произвольной унитарной матрицы $N - N(B)$ -го порядка. Для единственности решения необходимо, кроме сужения спектральных данных на подмножество B , иметь дополнительную информацию об искомой матрице.

Полученное в первой части (§ 5, теорема 1) решение задачи о построении \mathbf{L} -матрицы по ее спектральной функции, т.е. по сужению ее спектральных данных на одноточечное множество (первую координату), единственно по трем причинам: искомая \mathbf{L} -матрица трехдиагональна, ее отличные от нуля недиагональные элементы отрицательны и спектральные данные сужались на специально выбранное одноточечное множество, связанное с крайней частицей нагруженной струны. Эта дополнительная информация тесно связана с характером взаимодействия частиц нагруженных струн.

В следующем параграфе мы введем аналогичные понятия для произвольных механических систем. В дальнейшем это позволит найти условия однозначной разрешимости обратных задач спектрального анализа эрмитовых матриц.

§ 11. Взаимодействия частиц и системы с парным взаимодействием

Мы не уточняли, что понимается под взаимодействием. Дадим теперь точные определения, используемые везде в дальнейшем.

В механической системе с потенциальной энергией U и обобщенными координатами q_β^i на частицу α действует сила

$$\mathbf{F}(\alpha) = - \sum_{i=1}^3 \frac{\partial U}{\partial q_\alpha^i} \mathbf{e}_i$$

Согласно (8.6) в приближении теории малых колебаний

$$\mathbf{F}(\alpha) = - \sum_{i=1}^3 \left(\sum_{\beta \in \mathfrak{A}} \sum_{j=1}^3 U_{ij}^{\alpha\beta} q_\beta^j \right) \mathbf{e}_i = - \sum_{\beta \in \mathfrak{A}} \mathbf{U}^{\alpha\beta} \mathbf{r}_\beta,$$

и, если система находится в равновесии (т.е. $\mathbf{r}_\beta = 0$ при всех $\beta \in \mathfrak{A}$), то эта сила равна нулю. Если же из положения равновесия отклонить только одну частицу γ (т.е. $\mathbf{r}_\beta = \mathbf{r} \delta_\beta^\gamma$), то на частицу $\alpha \neq \gamma$ будет действовать сила

$$\mathbf{F}(\alpha) = -\mathbf{U}^{\alpha\gamma} \mathbf{r},$$

являющаяся следствием этого отклонения.

Поэтому при $\alpha \neq \gamma$ операторы $\mathbf{U}^{\alpha\gamma}$ и их матрицы $\mathbf{U}^{\alpha\gamma} = (U_{i,j}^{\alpha\gamma})$, $i, j \in [3]$, т.е. недиагональные блоки матрицы потенциальной энергии, мы будем называть коэффициентами взаимодействия частицы γ с частицей α , и говорить, что γ не взаимодействует с α , если $\mathbf{U}^{\alpha\gamma} = 0$, взаимодействует, если $\mathbf{U}^{\alpha\gamma} \neq 0$, и сильно взаимодействует, если $\text{Det } \mathbf{U}^{\alpha\gamma} \neq 0$.

Если все частицы отклонить от положения равновесия на один и тот же вектор \mathbf{r} , то их взаимное расположение не изменится, но на частицу α будет действовать сила

$$\mathbf{F}(\alpha) = - \left(\sum_{\beta \in \mathfrak{A}} \mathbf{U}^{\alpha\beta} \right) \mathbf{r},$$

§ 11. Взаимодействия частиц и системы с парным взаимодействием

которую мы будем называть силой взаимодействия частицы α с внешним полем. Операторы $\mathcal{E}^\alpha = \sum_{\beta \in \mathfrak{A}} \mathbf{U}^{\alpha\beta}$ и их матрицы будем называть коэффициентами взаимодействия частицы α с внешним полем. Частица α не взаимодействует с внешним полем, если $\mathcal{E}^\alpha = 0$, взаимодействует, если $\mathcal{E}^\alpha \neq 0$, и сильно взаимодействует, если $\text{Det } \mathcal{E}^\alpha \neq 0$

Часто рассматриваются системы, у которых потенциальная энергия равна сумме энергий взаимодействия $E(\alpha, \beta)$ всех пар α, β содержащихся в ней частиц и энергий взаимодействия $E(\gamma)$ всех частиц γ с внешним полем. При этом предполагается, что энергия $E(\alpha, \beta) = E(\beta, \alpha)$ зависит только от взаимного расположения частиц α, β , т.е. от разности их координат $y^i = x_\alpha^i - x_\beta^i$, $i \in [3]$, а энергия $E(\gamma)$ зависит только от координат x_γ^i , $i \in [3]$ частицы γ .

Такие системы называются *системами с парным взаимодействием*.

Разложение в ряд Тейлора энергии $E(\alpha, \beta)$ (соответственно $E(\gamma)$) в окрестности произвольной точки $M = (Y^1(M), Y^2(M), Y^3(M))$ (соответственно $M = (X_\gamma^1(M), X_\gamma^2(M), X_\gamma^3(M))$) имеет такой вид:

$$\begin{cases} E(\alpha, \beta) = \mathcal{E}^{\alpha\beta} + \mathcal{E}_i^{\alpha\beta} (q_\alpha^i - q_\beta^i) + \frac{1}{2} \mathcal{E}_{ij}^{\alpha\beta} (q_\alpha^i - q_\beta^i)(q_\alpha^j - q_\beta^j) + \dots \\ E(\gamma) = \mathcal{E}^\gamma + \mathcal{E}_i^\gamma q_\gamma^i + \frac{1}{2} \mathcal{E}_{ij}^\gamma q_\gamma^i q_\gamma^j + \dots \end{cases} \quad (11.1)$$

где

$$q_\mu^i = X_\mu^i - X_\mu^i(M), \quad i \in [3], \quad \mu \in \mathfrak{A},$$

суммирование ведется только по индексам $i, j \in [3]$ (т.е. частицы α, β, γ фиксированы) и производные

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_i^{\alpha\beta} &= \frac{\partial E(\alpha, \beta)}{\partial Y^i} = -\mathcal{E}_i^{\beta\alpha}, & \mathcal{E}_{ij}^{\alpha\beta} &= \frac{\partial^2 E(\alpha, \beta)}{\partial Y^i \partial Y^j} = \mathcal{E}_{ji}^{\alpha\beta}, \\ \mathcal{E}_i^\gamma &= \frac{\partial E(\gamma)}{\partial X^i}, & \mathcal{E}_{ij}^\gamma &= \frac{\partial^2 E(\gamma)}{\partial X^i \partial X^j} = \mathcal{E}_{ji}^\gamma \end{aligned}$$

берутся в точках M и M_γ соответственно. Суммируя эти энергии и отбрасывая при этом члены высшего порядка малости, обозна-

ченые в равенствах (11.1) многоточиями, получим в приближении теории малых колебаний такую формулу для потенциальной энергии системы с парным взаимодействием в окрестности точки устойчивого равновесия

$$U = \frac{1}{2} \mathcal{E}_{ij}^{\alpha} q_{\alpha}^i q_{\alpha}^j + \frac{1}{4} \mathcal{E}_{ij}^{\alpha\beta} (q_{\alpha}^i - q_{\beta}^i)(q_{\alpha}^j - q_{\beta}^j) \quad (11.2)$$

Здесь суммирование ведется по всем индексам и введенные для удобства матрицы

$$\mathcal{E}^{\alpha\alpha} = (\mathcal{E}_{ij}^{\alpha\alpha}), \quad i, j \in [3]$$

произвольны т.к. правая часть равенства (11.2) от них не зависит. Линейные относительно q_{α}^i слагаемые сократились, т.к. рассматривается окрестность точки равновесия системы, а значение потенциальной энергии в этой точке положено равным нулю. Далее, из равенств $\mathcal{E}^{\alpha} = \mathcal{E}^{\alpha\beta} = (\mathcal{E}^{\alpha\beta})^*$ следует

$$\mathcal{E}_{ij}^{\alpha\beta} (q_{\alpha}^i - q_{\beta}^i)(q_{\alpha}^j - q_{\beta}^j) = 2 \left(\sum_{\beta \in \mathfrak{A}} \mathcal{E}_{ij}^{\alpha\beta} q_{\alpha}^i q_{\alpha}^j \right) - 2 \mathcal{E}_{ij}^{\alpha\beta} q_{\alpha}^i q_{\beta}^j$$

и согласно (11.2)

$$U = \frac{1}{2} \left(\mathcal{E}_{ij}^{\alpha} + \sum_{\beta \in \mathfrak{A}} \mathcal{E}_{ij}^{\alpha\beta} \right) q_{\alpha}^i q_{\alpha}^j - \frac{1}{2} \mathcal{E}_{ij}^{\alpha\beta} q_{\alpha}^i q_{\beta}^j.$$

Выбрав матрицы $\mathcal{E}^{\alpha\alpha}$ так, чтобы выполнялись равенства $\mathcal{E}^{\alpha} + \sum_{\beta \in \mathfrak{A}} \mathcal{E}^{\alpha\beta} = 0$, т.е. полагая

$$\mathcal{E}^{\alpha\alpha} = - \left(\mathcal{E}^{\alpha} + \sum_{\beta \in \mathfrak{A} \setminus \{\alpha\}} \mathcal{E}^{\alpha\beta} \right),$$

получим равенство

$$U = - \frac{1}{2} \mathcal{E}_{ij}^{\alpha\beta} q_{\alpha}^i q_{\beta}^j, \quad (11.3)$$

в котором суммирование ведется по всем индексам.

Сравнение этой формулы с общей формулой (8.6) показывает, что блоки $\mathbf{U}^{\alpha\beta}$ матрицы потенциальной энергии системы с парным взаимодействием связаны с матрицами $\mathcal{E}^{\alpha\beta}$ и \mathcal{E}^α равенствами

$$\mathbf{U}^{\alpha\beta} = -\mathcal{E}^{\alpha\beta}, \quad \sum_{\beta \in \mathfrak{A}} \mathbf{U}^{\alpha\beta} = \mathcal{E}^\alpha, \quad (11.3')$$

из которых, в частности, следует эрмитовость матриц $\mathbf{U}^{\alpha\beta}$.

Поэтому вещественная положительно определенная эрмитова матрица тогда и только тогда будет матрицей потенциальной энергии системы с парным взаимодействием, когда ее блоки $\mathbf{U}^{\alpha\beta}$ удовлетворяют равенствам

$$\mathbf{U}^{\alpha\beta} = (\mathbf{U}^{\beta\alpha})^* = \mathbf{U}^{\beta\alpha}.$$

Из разложений (11.1) видно, что на частицы α , β и γ действуют силы взаимодействия

$$\mathbf{F}(\alpha) = -\mathbf{F}(\beta) = -\sum_{i=1}^3 \mathcal{E}_i^{\alpha\beta} \mathbf{e}_i, \quad \mathbf{F}(\gamma) = -\sum_{i=1}^3 \mathcal{E}_i^\alpha \mathbf{e}_i.$$

Поэтому изолированная пара α , β и изолированная частица γ , как правило, не находятся в состоянии равновесия, и для того, чтобы привести их в состояние равновесия нужно приложить к ним внешние силы $\mathcal{G}(\alpha) = -\mathbf{F}(\alpha)$, $\mathcal{G}(\beta) = -\mathbf{F}(\beta)$ и $\mathcal{G}(\gamma) = -\mathbf{F}(\gamma)$, гасящие силы взаимодействия. Получающиеся при этом равновесия будут устойчивыми тогда и только тогда, когда матрицы $\mathcal{E}^{\alpha\beta}$ и \mathcal{E}^γ положительно определенные.

Системы, у которых все отличные от нуля матрицы $\mathcal{E}^{\alpha\beta}$ и \mathcal{E}^γ положительно определенные, называются *системами с устойчивым парным взаимодействием*.

Согласно (11.3) у таких систем все отличные от нуля коэффициенты взаимодействия $\mathbf{U}^{\alpha\beta}$, $\alpha \neq \beta$ пар частиц являются отрицательно определенными матрицами, а все отличные от нуля коэф-

коэффициенты взаимодействия частиц с внешним полем $\mathcal{E}^\alpha = \sum_{\beta \in \mathfrak{A}} \mathbf{U}^{\alpha\beta}$ являются положительно определенными матрицами.

Важный класс систем с устойчивым парным взаимодействием образуют системы, в которых энергии $E(\alpha, \beta)$ зависят только от расстояний между частицами α, β , и внешнее поле создается множеством неподвижно закрепленных частиц $\tilde{\mathfrak{A}}$. (Множество колеблющихся частиц по-прежнему обозначается через \mathfrak{A}). В таких системах

$$\mathcal{E}_{ij}^{\alpha,\beta} = k(\alpha, \beta)\delta_j^i, \quad k(\alpha, \beta) = k(\beta, \alpha) \geq 0,$$

откуда согласно (11.2) следует, что

$$U = \frac{1}{4} k(\alpha, \beta)(q_\alpha^i - q_\beta^i)(q_\alpha^i - q_\beta^i),$$

где суммирование ведется по всем $\alpha, \beta \in \tilde{\mathfrak{A}} \cup \mathfrak{A}$ и $i \in [3]$. Так как частицы $\gamma \in \mathfrak{A}$ закреплены, то $q_\gamma^i = 0$, что позволяет последнее равенство переписать так:

$$U = \frac{1}{2} k(\alpha)q_\alpha^i q_\alpha^i + \frac{1}{4} k(\alpha, \beta)(q_\alpha^i - q_\beta^i)(q_\alpha^i - q_\beta^i),$$

где $k(\alpha) = \sum_{\beta \in \tilde{\mathfrak{A}}} k(\alpha, \beta) \geq 0$, и суммирование ведется по всем $\alpha, \beta \in \mathfrak{A}$ и $i \in [3]$. Поэтому формула (11.3) принимает такой вид:

$$U = -\frac{1}{2} k(\alpha, \beta)q_\alpha^i q_\beta^i, \quad (11.4)$$

где $k(\alpha, \alpha) = -\left(k(\alpha) + \sum_{\beta \in \mathfrak{A} \setminus \{\alpha\}} k(\alpha, \beta)\right)$, и суммирование ведется по $\alpha, \beta \in \mathfrak{A}$ и $i \in [3]$.

Неотрицательные числа $k(\alpha, \beta)$, $\alpha \neq \beta$ и $k(\alpha)$, $\alpha, \beta \in \mathfrak{A}$ называются скалярными коэффициентами взаимодействия пар α, β и частиц α с внешним полем.

§ 11. Взаимодействия частиц и системы с парным взаимодействием

Из неравенств $k(\alpha, \beta) \geq 0$ и $k(\alpha) \geq 0$ следует, что эти системы принадлежат множеству систем с устойчивым парным взаимодействием, но мы для краткости будем называть их системами со скалярным взаимодействием.

Согласно (11.4) уравнения движения в системах со скалярным взаимодействием

$$m(\alpha)\ddot{q}_\alpha - \sum_{\beta \in \mathfrak{A}} k(\alpha, \beta)q_\beta = 0 \quad (11.5)$$

одинаковы для всех трех координат $q_\alpha^1, q_\alpha^2, q_\alpha^3$ векторов отклонения.

Поэтому теория малых колебаний таких систем сводится к рассмотрению систем, в которых каждая частица имеет только одну степень свободы, и порядок матрицы потенциальной энергии $U = (-k(\alpha, \beta))$, $\alpha, \beta \in \mathfrak{A}$ равен числу колеблющихся частиц.

Например, мы рассмотрели только продольные колебания нагруженных струн, но все полученные результаты верны для любых малых колебаний, т.к. потенциальная энергия идеальной пружины пропорциональна квадрату ее длины, откуда следует, что нагруженные струны являются системами со скалярным взаимодействием.

§ 12. Неразложимые системы, М-продолжение и граф взаимодействий

Механическая система называется неразложимой, если ее нельзя разбить на две не взаимодействующие подсистемы, т.е. такие подсистемы, в которых частицы одной не взаимодействуют с частицами другой.

Матрицу \mathbf{U} потенциальной энергии неразложимой системы будем называть неразложимой.

Две частицы α и β механической системы называются \mathbf{U} -связанными, если либо $\alpha = \beta$, либо существует такая цепочка частиц $\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_p$, что $\gamma_1 = \alpha$, $\gamma_p = \beta$ и каждая частица γ_k взаимодействует со следующей γ_{k+1} , т.е. $\mathbf{U}^{\gamma_k \gamma_{k+1}} \neq 0$.

Отношение связанности обладает всеми свойствами отношения эквивалентности и позволяет поэтому разбить множество всех частиц \mathfrak{A} на непересекающиеся подмножества \mathfrak{A}_j , обладающие такими свойствами: любые две частицы каждого подмножества \mathfrak{A}_j связаны, а любые две частицы, принадлежащие разным подмножествам, не связаны.

Частицы подмножества \mathfrak{A}_j образуют механическую подсистему с матрицей потенциальной энергии $\mathbf{U}_j = (\mathbf{U}^{\alpha\beta})$, $\alpha, \beta \in \mathfrak{A}_j$, которая полностью изолирована от всех других подсистем. Вся система распадается на эти не взаимодействующие друг с другом подсистемы, а гильбертово пространство $H(\mathfrak{A} \times [3])$ разлагается в ортогональную сумму инвариантных подпространств $H(j)$ матрицы $\mathbf{U} = (\mathbf{U}^{\alpha\beta})$, образованных функциями, равными нулю вне множества $\mathfrak{A}_j \times [3]$.

Следовательно, механическая система неразложима тогда и только тогда, когда каждая пара содержащихся в ней частиц \mathbf{U} -связана.

В дальнейшем рассматриваются только неразложимые системы.

До сих пор предполагалось, что частицы имеют три степени свободы. Легко видеть, что все определения и результаты, полученные в предыдущих параграфах, сохраняются, если считать, что частицы

§ 12. Неразложимые системы, \mathbf{M} -продолжение и граф взаимодействий

имеют любое число $m \geq 1$ степеней свободы, и в соответствующих местах заменить цифру 3 на число m .

В дальнейшем, имея в виду это очевидное обобщение, рассматривается множество $\mathfrak{M}(m)$ всех эрмитовых матриц N -го порядка

$$\mathbf{M} = (M(x, y)), \quad x, y \in A = \mathfrak{A} \times [m],$$

где \mathfrak{A} — произвольное конечное ($\#\mathfrak{A} = n$) множество, $m \geq 1$ — произвольное целое число и $N = nm$. Такие матрицы часто удобно записывать в виде блочных матриц $\mathbf{M} = (\mathbf{M}^{\alpha\beta})$, $\alpha, \beta \in \mathfrak{A}$ с блоками $\mathbf{M}^{\alpha\beta} = (M_{ik}^{\alpha\beta})$, $i, k \in [m]$, являющимися матрицами m -го порядка, элементы которых связаны с элементами матрицы \mathbf{M} равенствами

$$M(x, y) = M_{ik}^{\alpha\beta}, \quad x = (\alpha, i), \quad y = (\beta, k). \quad (12.1)$$

Заметим, что блочная матрица эрмитова тогда и только тогда, когда ее блоки $\mathbf{M}^{\alpha\beta}$ удовлетворяют равенствам

$$(\mathbf{M}^{\alpha\beta})^* = \mathbf{M}^{\beta\alpha}, \quad (12.1')$$

которые эквивалентны стандартным $M(x, y) = \overline{M(y, x)}$.

Точки множества \mathfrak{A} по-прежнему будем называть частицами, недиагональные блоки $\mathbf{M}^{\alpha\beta}$ ($\alpha \neq \beta$) — коэффициентами взаимодействия пары частиц α, β , матрицы $\mathbf{E}^\alpha = \sum_{\beta \in \mathfrak{A}} \mathbf{M}^{\alpha\beta}$ — коэффициентами взаимодействия частиц α с внешним полем, взаимодействие будем называть сильным, если $\text{Det } M^{\alpha\beta} \neq 0$ (соответственно $\text{Det } E^\alpha \neq 0$) и т.д. Частицы α, β будем называть \mathbf{M} -связанными, если либо $\alpha = \beta$, либо существует такая цепочка частиц $\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_p$, что $\gamma_1 = \alpha$, $\gamma_p = \beta$ и $\mathbf{M}^{\gamma_k \gamma_{k+1}} \neq 0$ при всех $k = 1, 2, \dots, p$. Матрицу $\mathbf{M} = (\mathbf{M}^{\alpha\beta}) \in \mathfrak{M}(m)$ будем называть неразложимой, если все частицы \mathbf{M} -связаны.

Определение. Подмножества $\mathfrak{B} \subset \mathfrak{A}$ и $B = \mathfrak{B} \times [m] \subset A$ называются \mathbf{M} -продолжимыми, если найдется частица $\alpha \in \mathfrak{B}$, сильно взаимодействующая с частицей $\bar{\alpha}$ дополнительного множества

$\overline{\mathfrak{B}} = \mathfrak{A} \setminus \mathfrak{B}$ (т.е. $\text{Det } M^{\alpha\overline{\alpha}} \neq 0$) и не взаимодействующая со всеми другими частицами дополнительного множества (т.е. $\mathbf{M}^{\alpha\beta} = 0$ при всех $\beta \in \overline{\mathfrak{B}} \setminus \{\overline{\alpha}\}$).

Подчеркнем, что \mathbf{M} -продолжимость подмножеств $\mathfrak{B} \subset \mathfrak{A}$ и $B = \mathfrak{B} \times [m] \subset A$ зависит только от матрицы $\mathbf{M} \in \mathfrak{M}([m])$ и подмножества частиц \mathfrak{B} . Поэтому все обозначения и свойства \mathbf{M} -продолжений подмножеств частиц $\mathfrak{B} \subset \mathfrak{A}$ сохраняются для подмножеств $B = \mathfrak{B} \times [m] \subset A$. Множества $\mathfrak{B}^{(1)} = \mathfrak{B} \cup \{\overline{\alpha}\}$ и $B^{(1)} = \mathfrak{B}^{(1)} \times [m] = B \cup (\{\overline{\alpha}\} \times [m])$ называются \mathbf{M} -продолжениями множеств \mathfrak{B} и $B = \mathfrak{B} \times [m]$. Если множество $\mathfrak{B}^{(1)}$ тоже \mathbf{M} -продолжимо, то его \mathbf{M} -продолжение $(\mathfrak{B}^{(1)})^{(1)}$ обозначается через $\mathfrak{B}^{(2)}$, и далее по индукции $(\mathfrak{B}^{(k)})^{(1)} = \mathfrak{B}^{(k+1)}$. Очевидно, что цепочки

$$\begin{aligned} \mathfrak{B} &= \mathfrak{B}^{(0)} \subset \mathfrak{B}^{(1)} \subset \dots \subset \mathfrak{B}^{(p)} \\ B &= B^{(0)} \subset B^{(1)} \subset \dots \subset B^{(p)} \end{aligned}$$

заканчиваются множествами $\mathfrak{B}^{(p)}$ и $B^{(p)} = \mathfrak{B}^{(p)} \times [m]$, не имеющими \mathbf{M} -продолжений. Такие цепочки называются максимальными цепочками множеств $\mathfrak{B} \subset \mathfrak{A}$ и $B = \mathfrak{B} \times [m] \subset A$. В общем случае данное множество \mathfrak{B} может иметь несколько максимальных цепочек.

Лемма 9. *Все максимальные цепочки подмножеств \mathfrak{B} ($B = \mathfrak{B} \times [m]$) заканчиваются одним и тем же множеством, которое называется максимальным \mathbf{M} -продолжением множества \mathfrak{B} (B) и обозначается через $\mathfrak{B}(\mathbf{M})$ (соответственно через $B(\mathbf{M}) = \mathfrak{B}(\mathbf{M}) \times [m]$).*

Д о к а з а т е л ь с т в о. Достаточно доказать, что множество, которым заканчивается максимальная цепочка подмножества \mathfrak{B} , содержится в множестве, которым заканчивается любая другая максимальная цепочка этого подмножества. Допустим противное. Тогда найдутся такие две максимальные цепочки

$$\mathfrak{B} = \mathfrak{B}_1^{(0)} \subset \mathfrak{B}_1^{(1)} \subset \dots \subset \mathfrak{B}_1^{(P_1)}, \quad \mathfrak{B} = \mathfrak{B}_2^{(0)} \subset \mathfrak{B}_2^{(1)} \subset \dots \subset \mathfrak{B}_2^{(P_2)},$$

§ 12. Неразложимые системы, \mathbf{M} -продолжение и граф взаимодействий

что $\mathfrak{B}_1^{(P_1)} \not\subset \mathfrak{B}_2^{(P_2)}$. Так как $\mathfrak{B} = \mathfrak{B}_1^{(0)} = \mathfrak{B}_2^{(0)}$, в первой цепочке найдется множество $\mathfrak{B}_1^{(m)}$, $1 \leq m \leq p_1$, такое, что

$$\mathfrak{B}_1^{(m)} \not\subset \mathfrak{B}_2^{(P_2)}, \quad \mathfrak{B}_1^{(m-1)} \subset \mathfrak{B}_2^{(P_2)}.$$

Поскольку $\mathfrak{B}_1^{(m)}$ является \mathbf{M} -продолжением множества $\mathfrak{B}_1^{(m-1)}$, существует пара сильно взаимодействующих частиц $\alpha, \bar{\alpha}$, таких, что $\alpha \in \mathfrak{B}_1^{(m-1)} \subset \mathfrak{B}_2^{(P_2)}$, $\bar{\alpha} \in \mathfrak{A} \setminus \mathfrak{B}_1^{(m-1)} \supset \mathfrak{A} \setminus \mathfrak{B}_2^{(P_2)}$ и частица α не взаимодействует со всеми частицами множества $\mathfrak{A} \setminus (\mathfrak{B}_1^{(m-1)} \cup \{\bar{\alpha}\}) \supset \mathfrak{A} \setminus (\mathfrak{B}_2^{(P_2)} \cup \{\bar{\alpha}\})$.

Следовательно множество $\mathfrak{B}_2^{(P_2)}$ можно \mathbf{M} -продолжить до множества $\mathfrak{B}_2^{(P_2)} \cup \{\bar{\alpha}\}$, что противоречит максимальнойности второй цепочки. \blacksquare

Лемма 10. *Собственные функции матрицы $\mathbf{M} \in \mathfrak{M}(m)$, равные нулю на множестве $B = \mathfrak{B} \times [m]$, обращаются в нуль на множестве $B(\mathbf{M}) = \mathfrak{B}(\mathbf{M}) \times [m]$, где $\mathfrak{B}(\mathbf{M})$ — максимальное \mathbf{M} -продолжение множества \mathfrak{B} .*

Д о к а з а т е л ь с т в о. Рассмотрим максимальные цепочки множеств \mathfrak{B} и $B = \mathfrak{B} \times [m]$

$$\begin{aligned} \mathfrak{B} &= \mathfrak{B}^{(0)} \subset \mathfrak{B}^{(1)} \subset \dots \subset \mathfrak{B}^{(p)}, \\ B &= B^{(0)} \subset B^{(1)} \subset \dots \subset B^{(p)}, \end{aligned} \quad (12.2)$$

заканчивающиеся максимальным \mathbf{M} -продолжением этих множеств $\mathfrak{B}^{(P)} = \mathfrak{B}(\mathbf{M})$ и $B^{(p)} = B(\mathbf{M}) = \mathfrak{B}(\mathbf{M}) \times [m]$.

Предположим, что функция $\varphi(x)$, тождественно равная нулю на множестве B , удовлетворяет уравнению

$$\sum_{y \in A} M(x, y) \varphi(y) = \lambda \varphi(x), \quad A = \mathfrak{A} \times [m] \quad (12.3)$$

и не обращается тождественно в нуль на множестве $B(M)$. Тогда в цепочке (12.2) найдется такое множество $B^{(k)} = \mathfrak{B}^{(k)} \times [m]$, на

котором функция $\varphi(x)$ тождественно обращается в нуль, а на множестве $B^{(k+1)} = \mathfrak{B}^{(k+1)} \times [m]$ не обращается тождественно в нуль. Отсюда согласно (12.3) следует, что при всех $x \in B^{(k)}$ выполняются равенства

$$\sum_{y \in \bar{A}} M(x, y) \varphi(y) = 0,$$

где $\bar{A} = A \setminus B^{(k)} = \overline{\mathfrak{B}^{(k)}} \times [m]$ и $\overline{\mathfrak{B}^{(k)}} = \mathfrak{A} \setminus \mathfrak{B}^{(k)}$. В обозначениях (12.4) эти равенства запишутся так

$$\sum_{k=1}^m \sum_{\gamma \in \overline{\mathfrak{B}^{(k)}}} M_{ik}^{\alpha\gamma} \varphi_{\gamma}^k = 0, \quad i \in [m], \quad (12.4)$$

где $M_{ik}^{\alpha\gamma} = M(x, y)$, $M^{\alpha\gamma} = (M_{ij}^{\alpha\gamma})$, $\varphi_{\gamma}^j = \varphi(y)$ и $x = (\alpha, i)$, $y = (\gamma, k)$, $i, k \in [m]$. Поскольку множество $\mathfrak{B}^{(k+1)}$ является \mathbf{M} -продолжением множества $\mathfrak{B}^{(k)}$, существует такая пара частиц $\alpha \in \mathfrak{B}^{(k)}$, $\bar{\alpha} \in \overline{\mathfrak{B}^{(k)}} = \mathfrak{A} \setminus \mathfrak{B}^{(k)}$, что при всех $\gamma \in \overline{\mathfrak{B}^{(k)}}$

$$\mathbf{M}^{\alpha\gamma} = \mathbf{M}^{\alpha\bar{\alpha}} \delta_{\bar{\alpha}}^{\gamma}, \quad \text{Det } \mathbf{M}^{\alpha\bar{\alpha}} \neq 0.$$

Поэтому равенство (12.4) сводится к таким:

$$\sum_{k=1}^m M_{ik}^{\alpha\bar{\alpha}} \varphi_{\bar{\alpha}}^k = 0, \quad i \in [m],$$

и так как $\text{Det } \mathbf{M}^{\alpha\bar{\alpha}} \neq 0$, то $\varphi_{\bar{\alpha}}^k = 0$ при всех $k \in [m]$, т.е. $\varphi(x) = 0$ при всех $x \in \{\bar{\alpha}\} \times [m]$. Отсюда в силу равенства $B^{(k+1)} = \mathfrak{B}^{(k+1)} \times [m] = (\mathfrak{B}^{(k)} \cup \{\bar{\alpha}\}) \times [m] = B^k \cup (\{\bar{\alpha}\} \times [m])$ следует, что функция $\varphi(x)$ тождественно равна нулю на множестве $B^{(k+1)}$, вопреки сделанному предположению. ■

В обратных задачах спектрального анализа эрмитовых матриц ключевую роль играют подмножества $\mathfrak{B} \subset \mathfrak{A}$ и $B = \mathfrak{B} \in A$, максимальные \mathbf{M} -продолжения которых совпадают с множествами \mathfrak{A} и A , т.е. $\mathfrak{B}(\mathbf{M}) = \mathfrak{A}$ и $B(\mathbf{M}) = A$.

Такие множества мы будем называть *вполне \mathbf{M} -продолжимыми*.

Следующее свойство вполне \mathbf{M} -продолжимых множеств является прямым следствием леммы 10.

Следствие. *Если множество \mathfrak{B} вполне \mathbf{M} -продолжимо, то матрица \mathbf{M} не имеет собственных функций, равных нулю на множестве $B = \mathfrak{B} \times [m]$.*

Действительно, согласно лемме 10 собственная функция, равная нулю на множестве $B = \mathfrak{B} \times [m]$, тождественно равна нулю на множестве $B(\mathbf{M}) = \mathfrak{B}(\mathbf{M}) \times [m]$, и, если $\mathfrak{B}(\mathbf{M}) = \mathfrak{A}$, то она тождественно равна нулю на всем множестве $A = \mathfrak{A} \times [m]$, т.е. не является собственной функцией.

В § 9 мы свели обратную задачу теории малых колебаний к обратной задаче спектрального анализа эрмитовых матриц, предполагая, что \mathbf{L} -матрица не имеет собственных функций, равных нулю на множестве $A(0) = \mathfrak{A}_0 \times [m]$.

Согласно вышеизложенному *такое сведение возможно, когда множество наблюдаемых частиц \mathfrak{A}_0 вполне \mathbf{L} -продолжимо.*

Из определения \mathbf{M} -продолжимости видно, что для отыскания максимальных цепочек и вполне \mathbf{M} -продолжимых подмножеств $\mathfrak{B} \subset \mathfrak{A}$ достаточно знать множество Π всех пар (α, β) , взаимодействующих ($M^{\alpha\beta} \neq 0$) частиц и его подмножество Π' , состоящее из всех пар (α', β') сильно взаимодействующих ($\text{Det}(M^{\alpha'\beta'} \neq 0)$) частиц.

Пара множеств \mathfrak{A} , Π называется графом взаимодействия, частицы $\alpha \in \mathfrak{A}$ называются вершинами, пары $(\alpha, \beta) \in \Pi$ называются ребрами и пары $(\alpha', \beta') \in \Pi'$ — отмеченными ребрами графа.

Граф взаимодействия обозначается через $\Gamma\{\mathfrak{A}, \Pi\}$, а граф взаимодействия с отмеченными ребрами — через $\Gamma\{\mathfrak{A}, \Pi, \Pi'\}$.

Число ребер (отмеченных ребер), содержащих частицу α , т.е. число частиц, взаимодействующих (сильно взаимодействующих) с частицей α , называется валентностью $V(\alpha)$ (сильной валентностью $SV(\alpha)$) частицы α .

Наибольшая валентность называется степенью $\text{deg}(\Gamma)$ графа.

Внешней относительно множества $\mathfrak{B} \subset \mathfrak{A}$ валентностью (сильной валентностью) частицы $\alpha \in \mathfrak{B}$ называется число частиц дополнительного к \mathfrak{B} множества $\overline{\mathfrak{B}} = \mathfrak{A} \setminus \mathfrak{B}$, взаимодействующих (сильно взаимодействующих) с частицей α . Внешняя валентность (сильная валентность) обозначается через $V(\alpha|\mathfrak{B})$ ($SV(\alpha|\mathfrak{B})$).

Очевидно, что множество \mathfrak{B} имеет \mathbf{M} -продолжение тогда и только тогда, когда оно содержит частицу α , у которой

$$SV(\alpha|\mathfrak{B}) = V(\alpha|\mathfrak{B}) = 1.$$

При этом \mathbf{M} -продолжение множества \mathfrak{B} равно $\mathfrak{B} \cup \{\bar{\alpha}\}$, где $\bar{\alpha}$ — та единственная (т.к. $V(\alpha|\mathfrak{B}) = 1$) частица множества $\overline{\mathfrak{B}} = \mathfrak{A} \setminus \mathfrak{B}$, которая взаимодействует с частицей α , причем сильно, т.к. $SV(\alpha|\mathfrak{B}) = V(\alpha|\mathfrak{B})$.

Очевидно также, что \mathbf{M} -продолжения совпадают с \mathbf{M}_1 -продолжениями, если эти матрицы имеют одинаковый граф взаимодействий $\Gamma\{\mathfrak{A}, \Pi, \Pi'\}$.

Наглядно граф изображается рисунком, в котором вершины графа \circ произвольно размещают на плоскости или в пространстве (обычно в точках устойчивого равновесия системы), а ребра (α, β) изображают гладкими кривыми (чаще отрезками), соединяющими вершины α и β , причем их проводят так, чтобы их внутренние части не имели общих касательных и не содержали других вершин. Отмеченные ребра (все или только интересующие нас) снабжаются стрелкой.

Например, $\alpha\circ\text{---}\circ\beta$ означает, что $M^{\alpha\beta} \neq 0$, а $\alpha\circ\text{---}\rightarrow\circ\beta$ означает, что $\text{Det}\mathbf{M}^{\alpha\beta} \neq 0$.

Графы взаимодействия неразложимых систем (матриц) связны.

§ 13. Главная лемма

Рассмотрим спектральные данные матрицы $\mathbf{M} \in \mathfrak{M}(m)$

$$S(\mathbf{M}) = \bigcup_{j=1}^N \bigcup_{x \in A} \{\lambda(j), \varphi(x, j)\}$$

и их сужения

$$S_B(\mathbf{M}) = \bigcup_{j=1}^N \bigcup_{x \in B} \{\lambda(j), \varphi(x, j)\}, \quad S_{\overline{B}}(\mathbf{M}) = \bigcup_{j=1}^N \bigcup_{x \in \overline{B}} \{\lambda(j), \varphi(x, j)\}$$

на множестве $B = \mathfrak{B} \times [m]$ и $\overline{B} = A \setminus B = \overline{\mathfrak{B}} \times [m]$, где $\overline{\mathfrak{B}} = \mathfrak{A} \setminus \mathfrak{B}$.

Мы будем пользоваться такими обозначениями. Функция $\varphi(x, j) = \varphi_\alpha^i(j)$, $x = (\alpha, i) \in A$, $j \in [N]$, рассматриваемая как множество функций переменной $j \in [N]$ (соответственно $x \in A$), т.е. как множество векторов пространства $H([N])$ (соответственно $H(A)$), занумерованных точками x множества A (соответственно точками j множества $[N]$) обозначается через $\varphi_x = \varphi_\alpha^i$ (соответственно через φ_j).

Та же функция $\varphi(x, j) = \varphi_\alpha^i(j)$, $x = (\alpha, i)$, рассматриваемая как множество функций переменной $i \in [m]$, т.е. как множество векторов пространства $H([m])$, занумерованных точками (α, j) множества $\mathfrak{A} \times [N]$, обозначается через $\varphi_\alpha(j)$.

Действующий в пространстве $H([N])$ оператор умножения на функцию $\lambda(j)$ обозначается через $\mathbf{\Lambda}$.

Скалярное произведение в пространствах $H(A)$, $H([N])$ и $H([m])$ обозначается соответственно через $(,)$, \langle, \rangle и \langle, \rangle_m .

Векторы $\varphi_x = \varphi(x, j)$, $x \in B$ и $\varphi_y = \varphi(y, j)$, $y \in \overline{B}$ пространства $H([N])$ образуют ортонормированные базисы своих линейных оболочек $O(B)$ и $O(\overline{B})$, и матрицы ортопроекторов \mathbf{P}_B , $\mathbf{P}_{\overline{B}}$ на подпространства $O(B)$ и $O(\overline{B})$ так выражаются через эти векторы:

$$P_B = (P_B(j, j')), \quad P_B(j, j') = \sum_{x \in B} \varphi(x, j) \overline{\varphi(x, j')}$$

$$P_{\overline{B}} = (P_{\overline{B}}(j, j')), \quad P_{\overline{B}}(j, j') = \sum_{x \in \overline{B}} \varphi(y, j) \overline{\varphi(y, j')},$$

где $j, j' \in [N]$.

Так как подпространства $O(B)$ и $O(\overline{B})$ являются ортогональными дополнениями друг друга, то $\mathbf{P}_B + \mathbf{P}_{\overline{B}} = \mathbf{I}$ и

$$P_{\overline{B}}(j, j') = \delta_j^{j'} - P_B(j, j') = \delta_j^{j'} - \sum_{x \in B} \varphi(x, j) \overline{\varphi(x, j')} \quad (13.1)$$

откуда следует, что матрицы ортопроекторов \mathbf{P}_B и $\mathbf{P}_{\overline{B}}$ явно выражаются через сужение спектральных данных $S_B(M)$ матрицы \mathbf{M} на множество $B = \mathfrak{B} \times [m]$.

Лемма 11. Блоки $\mathbf{M}^{\alpha\beta}$ матрицы $\mathbf{M} \in \mathfrak{M}(m)$ удовлетворяют равенствам

$$\sum_{\beta \in \overline{B}} \mathbf{M}^{\alpha\beta} \varphi_\beta(j) = \mathbf{P}_{\overline{B}} \Lambda \varphi_\alpha^i, \quad (13.2)$$

$$\sum_{\beta \in \overline{B}} \mathbf{M}^{\alpha\beta} (\mathbf{M}^{\alpha'\beta})^* = \langle \mathbf{P}_{\overline{B}} \Lambda \varphi_\alpha^i, \mathbf{P}_{\overline{B}} \Lambda \varphi_{\alpha'}^{i'} \rangle. \quad (13.3)$$

Доказательство. Из уравнений

$$\sum_{y \in A} M(x, y) \varphi(y, j) = \lambda(j) \varphi(x, j),$$

которым удовлетворяют собственные векторы матрицы \mathbf{M} и формул

$$M(x, y) = \sum_{j'=1}^N \lambda(j') \varphi(x, j') \overline{\varphi(y, j')} = \langle \Lambda \varphi_x, \varphi_y \rangle \quad (13.4)$$

вытекают равенства

$$\begin{aligned}
 \sum_{y \in \bar{B}} M(x, y) \varphi(y, j) &= \lambda(j) \varphi(x, j) - \sum_{y \in B} M(x, y) \varphi(y, j) \\
 &= \lambda(j) \varphi(x, j) - \sum_{j'=1}^N \left(\sum_{y \in B} \varphi(y, j) \overline{\varphi(y, j')} \right) \lambda(j') \varphi(x, j') \\
 &= \sum_{j'=1}^N \left\{ \delta_j^{j'} - \sum_{y \in B} \varphi(y, j) \overline{\varphi(y, j')} \right\} \lambda(j') \varphi(x, j'),
 \end{aligned}$$

которые согласно (13.1) можно переписать так

$$\sum_{y \in \bar{B}} M(x, y) \varphi_y = \mathbf{P}_{\bar{B}} \mathbf{\Lambda} \varphi_x = \mathbf{P}_{\bar{B}} \mathbf{\Lambda} \varphi_{\alpha}^i. \quad (13.5)$$

Умножим обе части этого равенства скалярно на вектор $\mathbf{\Lambda} \varphi_{x'} \in H([N])$. Из самосопряженности оператора $\mathbf{\Lambda}$ и формулы (13.4) следует, что левая часть получится равной

$$\begin{aligned}
 \left\langle \sum_{y \in \bar{B}} M(x, y) \varphi_y, \mathbf{\Lambda} \varphi_{x'} \right\rangle &= \sum_{y \in \bar{B}} M(x, y) \langle \varphi_y, \mathbf{\Lambda} \varphi_{x'} \rangle \\
 &= \sum_{y \in \bar{B}} M(x, y) \langle \mathbf{\Lambda} \varphi_y, \varphi_{x'} \rangle = \sum_{y \in \bar{B}} M(x, y) M(y, x'),
 \end{aligned}$$

а правая часть в силу равенств $\mathbf{P}_{\bar{B}} = \mathbf{P}_{\bar{B}}^2 = \mathbf{P}_{\bar{B}}^*$, будет равна

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{P}_{\bar{B}} \mathbf{\Lambda} \varphi_x, \mathbf{\Lambda} \varphi_{x'} \rangle &= \langle \mathbf{P}_{\bar{B}}^2 \mathbf{\Lambda} \varphi_x, \mathbf{\Lambda} \varphi_{x'} \rangle \\
 &= \langle \mathbf{P}_{\bar{B}} \mathbf{\Lambda} \varphi_x, \mathbf{P}_{\bar{B}} \mathbf{\Lambda} \varphi_{x'} \rangle = \langle \mathbf{P}_{\bar{B}} \mathbf{\Lambda} \varphi_{\alpha}^i, \mathbf{P}_{\bar{B}} \mathbf{\Lambda} \varphi_{\alpha'}^{i'} \rangle.
 \end{aligned}$$

Следовательно

$$\sum_{y \in \bar{B}} M(x, y) M(y, x') = \langle \mathbf{P}_{\bar{B}} \mathbf{\Lambda} \varphi_{\alpha}^i, \mathbf{P}_{\bar{B}} \mathbf{\Lambda} \varphi_{\alpha'}^{i'} \rangle, \quad (13.6)$$

где $x = (\alpha, i)$, $x' = (\alpha', i')$.

Наконец, переписав левые части равенств (13.5), (13.6), используя формулы (12.4), (12.1')

$$\begin{aligned} \sum_{y \in \overline{B}} M(x, y) \varphi(x, j) &= \sum_{\beta \in \mathfrak{B}} \sum_{k=1}^m M_{ik}^{\alpha\beta} \varphi_{\beta}^k(j) = \sum_{\beta \in \mathfrak{B}} \mathbf{M}^{\alpha\beta} \boldsymbol{\varphi}_{\beta}(j), \\ \sum_{y \in \overline{B}} M(x, y) M(y, x') &= \sum_{\beta \in \mathfrak{B}} \sum_{k=1}^m M_{ik}^{\alpha\beta} M_{ki'}^{\beta\alpha'} \\ &= \sum_{\beta \in \mathfrak{B}} \mathbf{M}^{\alpha\beta} \mathbf{M}^{\beta\alpha'} = \sum_{\beta \in \mathfrak{B}} M^{\alpha\beta} (M^{\alpha'\beta})^*, \end{aligned}$$

мы получим доказываемые равенства (13.2), (13.3). ■

Пусть множество $\mathfrak{B} \subset \mathfrak{A}$ \mathbf{M} -продолжимо и α_1 та его частица, которая сильно взаимодействует с частицей $\overline{\alpha}_1$ дополнительного множества $\overline{\mathfrak{B}} = \mathfrak{A} \setminus \mathfrak{B}$ и не взаимодействует со всеми другими частицами этого множества, т.е. $\text{Det } \mathbf{M}^{\alpha_1 \overline{\alpha}_1} \neq 0$ и $\mathbf{M}^{\alpha_1 \beta} = 0$ при всех $\beta \in \overline{\mathfrak{B}} \setminus \{\overline{\alpha}_1\}$. Тогда, полагая в формулах (13.2), (13.3) $\alpha = \alpha' = \alpha_1$, получим равенства

$$\mathbf{M}^{\alpha \overline{\alpha}_1} \boldsymbol{\varphi}_{\overline{\alpha}_1}(j) = \boldsymbol{\theta}_{\alpha_1}(j), \quad (13.7)$$

$$\mathbf{M}^{\alpha \overline{\alpha}_1} (\mathbf{M}^{\alpha \overline{\alpha}_1})^* = \mathbf{D}_{\alpha_1}, \quad (13.8)$$

в которых векторы пространства $H([m])$

$$\boldsymbol{\theta}_{\alpha_1}(j) = \mathbf{P}_{\overline{B}} \boldsymbol{\Lambda} \boldsymbol{\varphi}_{\alpha_1}^i = \boldsymbol{\theta}_{\alpha_1}^i(j) = \sum_{j'=1}^N \left(\delta_j^{j'} - \sum_{y \in B} \varphi(y, j) \overline{\varphi(y, j')} \right) \lambda(j') \boldsymbol{\varphi}_{\alpha_1}^i(j') \quad (13.9)$$

и матрица m -го порядка $\mathbf{D}_{\alpha_1} = (D_{\alpha_1}(i, i'))$,

$$\begin{aligned} D_{\alpha_1}(i, i') &= \langle \mathbf{P}_{\overline{B}} \mathbf{\Lambda} \varphi_{\alpha_1}^i, \mathbf{P}_{\overline{B}} \mathbf{\Lambda} \varphi_{\alpha_1}^{i'} \rangle \\ &= \sum_{j=1}^N \sum_{j'=1}^N \left(\delta_j^{j'} - \sum_{y \in B} \varphi(y, j) \overline{\varphi(y, j')} \right) \lambda(j') \lambda(j) \varphi_{\alpha_1}^i(j') \overline{\varphi_{\alpha_1}^{i'}(j)}, \end{aligned} \quad (13.10)$$

явно выражаются через сужение спектральных данных матрицы \mathbf{M} на множество $B = \mathfrak{B} \times [m]$.

Как известно, любая невырожденная ($\text{Det } \mathbf{T} \neq 0$) матрица \mathbf{T} представима в виде $\mathbf{T} = |\mathbf{T}| \mathbf{V}$, где $|\mathbf{T}| = \sqrt{\mathbf{T} \mathbf{T}^*}$ — положительно определенная, а \mathbf{V} — унитарная матрицы. (Д о к а з а т е л ь с т в о: если $\mathbf{V} = |\mathbf{T}|^{-1} \mathbf{T}$, то $\mathbf{V}^* = \mathbf{T}^* |\mathbf{T}|^{-1} = \mathbf{T}^{-1} \mathbf{T} \mathbf{T}^* |\mathbf{T}|^{-1} = \mathbf{T}^{-1} |\mathbf{T}| = \mathbf{V}^{-1}$). Отсюда согласно (13.7), (13.8) следует, что

$$\mathbf{M}^{\alpha \bar{\alpha}_1} = \sqrt{\mathbf{D}_{\alpha_1}} \mathbf{V}_{\alpha_1}, \quad (13.11)$$

$$\mathbf{V}_{\alpha_1} \varphi_{\bar{\alpha}_1}(j) = (\sqrt{\mathbf{D}_{\alpha_1}})^{-1} \boldsymbol{\theta}_{\alpha_1}(j), \quad (13.12)$$

$$\mathbf{V}_{\alpha_1} = \left(\sqrt{\mathbf{M}^{\alpha \bar{\alpha}_1} (\mathbf{M}^{\alpha \bar{\alpha}_1})^*} \right)^{-1} \mathbf{M}^{\alpha \bar{\alpha}_1}, \quad (13.13)$$

где \mathbf{V}_{α_1} — некоторая унитарная матрица m -го порядка, а векторы $\boldsymbol{\theta}_{\alpha_1}(j)$ и матрица \mathbf{D}_{α_1} явно выражаются через сужение спектральных данных матрицы \mathbf{M} на множество $B = \mathfrak{B} \times [m]$ по формулам (13.9), (13.10).

В общем случае вычислить унитарную матрицу \mathbf{V}_{α_1} невозможно. Однако, если матрица $\mathbf{M}^{\alpha \bar{\alpha}_1}$ положительно (отрицательно) определенная, то $\mathbf{V}_{\alpha_1} = \mathbf{I}$ ($\mathbf{V}_{\alpha_1} = -\mathbf{I}$), где \mathbf{I} — единичная матрица m -го порядка.

Действительно, пусть $e^{i\varphi}$ любое собственное значение унитарной матрицы \mathbf{V}_{α_1} и $\mathbf{f} = f(i) \in H([m])$ — соответствующий собственный вектор. Тогда согласно (13.11) $\mathbf{M}^{\alpha \bar{\alpha}_1} \mathbf{f} = e^{i\varphi} (\sqrt{\mathbf{D}_{\alpha_1}})^{-1} \mathbf{f}$ и $\langle \mathbf{M}^{\alpha \bar{\alpha}_1} \mathbf{f}, \mathbf{f} \rangle_m = e^{i\varphi} \langle (\sqrt{\mathbf{D}_{\alpha_1}})^{-1} \mathbf{f}, \mathbf{f} \rangle_m$. Откуда, вследствие положительной определенности матрицы $\sqrt{\mathbf{D}_{\alpha_1}}$, а, значит, и матрицы

$(\sqrt{\mathbf{D}_{\alpha_1}})^{-1}$, следует, что

$$e^{i\varphi} = \frac{\langle \mathbf{M}^{\alpha\bar{\alpha}_1} \mathbf{f}, \mathbf{f} \rangle_m}{|\langle \mathbf{M}^{\alpha\bar{\alpha}_1} \mathbf{f}, \mathbf{f} \rangle_m|}.$$

Поэтому, если матрица $\mathbf{M}^{\alpha\bar{\alpha}_1}$ положительно (отрицательно) определенная, то $e^{i\varphi} = 1$ (соответственно $e^{i\varphi} = -1$), т.е. все собственные значения матрицы \mathbf{V}_{α_1} равны 1 (соответственно -1) и $\mathbf{V}_{\alpha_1} = \mathbf{I}$ (соответственно $\mathbf{V}_{\alpha_1} = -\mathbf{I}$).

Таким образом, из формул (13.2), (13.3) вытекает следующая основная

Лемма 12. Пусть множество $\mathfrak{B}^{(1)} = \mathfrak{B} \cup \{\bar{\alpha}_1\}$ является \mathbf{M} -продолжением множества \mathfrak{B} , т.е. $\bar{\alpha}_1 \in \overline{\mathfrak{B}} = \mathfrak{A} \setminus \mathfrak{B}$ и существует такая частица $\alpha_1 \in \mathfrak{B}$, что $\text{Det } \mathbf{M}^{\alpha\bar{\alpha}_1} \neq 0$ и $\mathbf{M}^{\alpha\beta} = 0$ при всех $\beta \in \overline{\mathfrak{B}} \setminus \{\bar{\alpha}_1\}$.

Тогда значения ортонормированных собственных функций $\varphi(x, j) = \varphi_j \in H(A)$ матрицы \mathbf{M} на множестве $\{\bar{\alpha}_1\} \times [m]$, т.е. векторы $\varphi(x, j)|_{x=(\bar{\alpha}_1, i)} = \varphi_{\bar{\alpha}_1}(j) \in H([m])$, вычисляются по формуле

$$\varphi_{\bar{\alpha}_1}(j) = \mathbf{V}_{\alpha_1}^* (\sqrt{\mathbf{D}_{\alpha_1}})^{-1} \boldsymbol{\theta}_{\alpha_1}(j),$$

в которой \mathbf{V}_{α_1} — некоторая унитарная матрица m -го порядка, а вектор $\boldsymbol{\theta}_{\alpha_1}(j)$ и матрица \mathbf{D}_{α_1} вычисляются из сужения спектральных данных матрицы \mathbf{M} на множестве $B = \mathfrak{B} \times [m]$ по формулам (13.9), (13.10). При этом, если матрица $\mathbf{M}^{\alpha\bar{\alpha}_1}$ положительно определенная, то $\mathbf{V}_{\alpha_1} = \mathbf{I}$ и

$$\varphi_{\bar{\alpha}_1}(j) = (\sqrt{\mathbf{D}_{\alpha_1}})^{-1} \boldsymbol{\theta}_{\alpha_1}(j).$$

§ 14. Построение эрмитовой матрицы $\mathbf{M} \in \mathfrak{M}(m)$ по сужению ее спектральных данных на вполне \mathbf{M} -продолжимое множество

Дадим прежде всего более удобную для дальнейшего формулировку Леммы 12.

Условимся блочные матрицы, у которых все недиагональные блоки равны нулю, называть блочно-диагональными.

Обозначим через \mathbf{V}_1 унитарную блочно-диагональную матрицу с такими диагональными блоками

$$\mathbf{V}_1^{\alpha\alpha} = \begin{cases} \mathbf{I}, & \alpha \neq \bar{\alpha}_1, \\ \mathbf{V}_{\alpha_1}, & \alpha = \bar{\alpha}_1, \end{cases} \quad (14.1)$$

где \mathbf{I} — единичная матрица, а унитарная матрица \mathbf{V}_{α_1} определена равенством (13.13).

Матрицы \mathbf{M} и $\mathbf{M}_1 = \mathbf{V}_1 \mathbf{M} \mathbf{V}_1^*$ унитарно эквивалентны, имеют одинаковые собственные значения, и ортонормированные собственные векторы $\varphi_j^{(1)} = \varphi^{(1)}(x, j)$ матрицы \mathbf{M}_1 выражаются через ортонормированные собственные векторы $\varphi_j = \varphi(x, j)$ матрицы \mathbf{M} формулой

$$\varphi_j^{(1)} = \mathbf{V}_1 \varphi_j. \quad (14.2)$$

Вследствие блочной диагональности матрицы \mathbf{V}_1 блоки $\mathbf{M}_1^{\alpha\beta}$ матрицы \mathbf{M}_1 выражаются через блоки $\mathbf{M}^{\alpha\beta}$ матрицы \mathbf{M} формулами

$$\mathbf{M}_1^{\alpha\beta} = \mathbf{V}_1^{\alpha\alpha} \mathbf{M}^{\alpha\beta} (\mathbf{V}_1^{\beta\beta})^* \quad (14.3)$$

и формула (14.2) распадается на такие равенства

$$\varphi_\alpha^{(1)}(j) = \mathbf{V}_1^{\alpha\alpha} \varphi_\alpha(j) \quad (14.2')$$

для векторов $\varphi_\alpha(j)^{(1)}$, $\varphi_\alpha(j)$ пространства $H([m])$

Из равенств (14.3) следует, что $\mathbf{M}_1^{\alpha\beta} = 0$ тогда и только тогда, когда $\mathbf{M}^{\alpha\beta} = 0$ и $\text{Det}(\mathbf{M}_1^{\alpha\beta}) = \text{Det}(\mathbf{M}^{\alpha\beta})$. Отсюда и из определения графа взаимодействия следует, что матрицы \mathbf{M} и \mathbf{M}_1 имеют одинаковые графы взаимодействия.

Далее, согласно (14.1), (14.2') и (13.12)

$$\varphi_{\alpha}^{(1)}(j) = \begin{cases} \varphi_{\alpha}(j), & \alpha \neq \bar{\alpha}_1, \\ \mathbf{V}_{\alpha_1} \varphi_{\bar{\alpha}_1}(j) = \left(\sqrt{\mathbf{D}_{\alpha_1}}\right)^{-1} \boldsymbol{\theta}_{\alpha_1}(j), & \alpha = \bar{\alpha}_1, \end{cases}$$

откуда следует, что $S_B(M_1) = S_B(M)$ и, т.к. вектор $\boldsymbol{\theta}_{\alpha_1}(j)$ и матрица \mathbf{D}_{α_1} вычисляются по формулам (13.9) и (13.10), то сужение спектральных данных $S_{B^{(1)}}(\mathbf{M}_1)$ матрицы \mathbf{M}_1 на множество $B^{(1)}$ вычисляется из сужения спектральных данных $S_B(\mathbf{M})$ матрицы \mathbf{M} на множество B .

Поэтому лемме 12 можно дать такую формулировку:

Лемма 12'. *С \mathbf{M} -продолжением $B^{(1)} = \mathfrak{B}^{(1)} \times [m]$ множества $B = \mathfrak{B} \times [m]$ связана такая блочно-диагональная унитарная матрица \mathbf{V}_1 , что матрицы \mathbf{M} и $\mathbf{M}_1 = \mathbf{V}_1 \mathbf{M} \mathbf{V}_1^*$ имеют одинаковый граф взаимодействий и одинаковые сужения спектральных данных на множество B , а сужение спектральных данных матрицы \mathbf{M}_1 на множество $B^{(1)}$ вычисляется из сужения спектральных данных матрицы \mathbf{M} на множество B .*

При этом, если недиагональные, невырожденные ($\text{Det} \mathbf{M}^{\alpha\beta} \neq 0$) блоки матрицы \mathbf{M} положительно определенные, то $\mathbf{V}_1 = \mathbf{I}$, $\mathbf{M}_1 = \mathbf{M}$ и сужение спектральных данных $S_{B^{(1)}}(\mathbf{M})$ матрицы \mathbf{M} на множество $B^{(1)}$ вычисляется из сужения ее спектральных данных $S_B(\mathbf{M})$ на множество B .

Символически эту лемму удобно записать так:

$$\mathbf{M}_1 = \mathbf{V}_1 \mathbf{M} \mathbf{V}_1^*, \quad S_B(\mathbf{M}_1) = S_B(\mathbf{M}) \xrightarrow{\alpha_1 \bar{\alpha}_1} S_{B^{(1)}}(\mathbf{M}_1).$$

Здесь стрелкой $\xrightarrow{\alpha_1 \bar{\alpha}_1}$ обозначены математические операции, которые нужно произвести над элементами множества $S_B(\mathbf{M})$, чтобы вы-

числить множество $S_{B^1}(\mathbf{M}_1)$. Согласно (13.9), (13.10) эти операции сводятся к таким вычислениям:

- А. Вычислить ортогональные проекции $\theta_{\alpha_1}^i$ векторов $\Lambda\varphi_{\alpha_1}^i$ пространства $H([N])$ на его подпространство $O(\mathbf{B})$ по формуле

$$\theta_{\alpha_1}^i(j) = \sum_{j'=1}^N \left(\delta_j^{j'} - \sum_{y \in B} \varphi(y, j) \overline{\varphi(y, j')} \right) \lambda(j') \varphi_{\alpha_1}^i(j').$$

- В. Вычислить элементы $D_{\alpha_1}(i, i')$, $i, i' \in [m]$ матрицы \mathbf{D}_{α_1} по формуле

$$D_{\alpha_1}(i, i') = \sum_{j=1}^N \theta_{\alpha_1}^i(j) \overline{\theta_{\alpha_1}^{i'}(j)}.$$

- С. Вычислить спектральные данные матрицы \mathbf{D}_{α_1} , т.е. ее собственные значения $\mu(s)$ и соответствующие ортонормированные собственные функции $\mathbf{u}_s = u(i, s)$, $i, s \in [m]$.

- Д. Вычислить сужение ортонормированных собственных функций $\varphi_j^{(1)} = \varphi^{(1)}(x, j)$ матрицы \mathbf{M}_1 на множество $B^{(1)}$ по формуле

$$\varphi^{(1)}(x, j) = \begin{cases} \varphi(x, j), & x \in B, \\ \sum_{i'=1}^m \sum_{s=1}^m \frac{u(i, s) \overline{u(i', s)}}{\sqrt{\mu(s)}} \theta_{\alpha_1}^{i'}(j), & x \in B^1 \setminus B = \{\alpha_1\} \times [m]. \end{cases}$$

При $m = 1$ (т.е. для матриц $\mathbf{M} \in \mathfrak{M}(1)$) вычисления сильно упрощаются т.к. в этом случае пространство $H([m])$ одномерно, матрица \mathbf{D}_{α_1} является числом, $x = (\alpha, i)$ отождествляется с α , множества A, B отождествляются соответственно с $\mathfrak{A}, \mathfrak{B}$ и $N = \#\mathfrak{A} = n$. Поэтому при $m = 1$ нужно:

- А(1). Вычислить вектор $\theta_{\alpha_1} = \theta(\alpha_1, j) \in H([m])$ по формуле

$$\theta(\alpha_1, j) = \sum_{i'=1}^n \left(\delta_j^{j'} - \sum_{\beta \in \mathfrak{B}} \varphi(\beta, j) \overline{\varphi(\beta, j')} \right) \lambda(j') \varphi_{\alpha_1}(j').$$

V(1). Вычислить ортонормированные собственные векторы $\varphi^{(1)}(\alpha, j)$ матрицы \mathbf{M}_1 по формуле

$$\varphi^{(1)}(\alpha, j) = \begin{cases} \varphi(\alpha, j), & \alpha \neq \bar{\alpha}_1, \\ \frac{\theta(\alpha_1, j)}{\sqrt{\sum_{j=1}^n |\theta(\alpha_1, j)|^2}}, & \alpha = \bar{\alpha}_1. \end{cases}$$

Теорема 6. *С максимальным \mathbf{M} -продолжением $B(\mathbf{M}) = \mathfrak{B}(\mathbf{M}) \times [m]$ множества $B = \mathfrak{B} \times [m]$ связана такая унитарная блочно-диагональная матрица \mathbf{V} , что матрицы \mathbf{M} и \mathbf{VMV}^* имеют одинаковые сужения своих спектральных данных на множество B , т.е. $S_B(M) = S_B(\mathbf{VMV}^*)$, и сужение спектральных данных матрицы \mathbf{VMV}^* на множество $B(\mathbf{M})$, т.е. $S_{B(\mathbf{M})}(\mathbf{VMV}^*)$, вычисляется из сужения спектральных данных матрицы \mathbf{M} на множество B , т.е. из $S_B(\mathbf{M})$.*

При этом, если недиагональные невырожденные ($\text{Det}(\mathbf{M}^{\alpha\beta}) \neq 0$) блоки $\mathbf{M}^{\alpha\beta}$ матрицы \mathbf{M} положительно определенные, то $\mathbf{V} = \mathbf{I}$, $\mathbf{VMV}^ = M$ и сужение спектральных данных $S_{B(\mathbf{M})}(\mathbf{M})$ матрицы \mathbf{M} на множество $B(\mathbf{M})$ вычисляется из сужения $S_B(M)$ ее спектральных данных на множество B .*

Доказательство. Пусть

$$\begin{aligned} \mathfrak{B} &= \mathfrak{B}^{(0)} \subset \mathfrak{B}^{(1)} \subset \dots \subset \mathfrak{B}^{(p)} = \mathfrak{B}(\mathbf{M}), \\ B &= B^{(0)} \subset B^{(1)} \subset \dots \subset B^{(p)} = B(M), \quad B^{(k)} = \mathfrak{B}^{(k)} \times [m] \end{aligned}$$

максимальные цепочки \mathbf{M} -продолжений множеств \mathfrak{B} , $B = \mathfrak{B} \times [m]$ и $\alpha_k \in \mathfrak{B}^{(k-1)}$, $\bar{\alpha}_k \in \mathfrak{B}^{(k)}$, $k = 1, 2, \dots, p$, связанная с ними последовательность пар сильно взаимодействующих частиц. Согласно Лемме 12', выполнив над множеством $S_B(\mathbf{M})$ описанные выше операции A, B, C, D, мы получим сужение спектральных данных $S_{B^{(1)}}(\mathbf{M}_1)$

§ 14. Построение матрицы по сужению ее спектральных данных

матрицы $\mathbf{M}_1 = \mathbf{V}_1 \mathbf{M} \mathbf{V}_1^*$ на множество $B^{(1)} = \mathfrak{B}^{(1)} \times [m]$, что символически записывается так:

$$\mathbf{M}_1 = \mathbf{V}_1 \mathbf{M} \mathbf{V}_1^*, \quad S_B(\mathbf{M}) \xrightarrow{\alpha_1 \bar{\alpha}_1} S_{B^{(1)}}(\mathbf{M}_1),$$

где \mathbf{V}_1 — унитарная блочно-диагональная матрица, $S_B(\mathbf{M}) = S_{B^{(1)}}(\mathbf{M}_1)$ и матрицы \mathbf{M} , \mathbf{M}_1 имеют одинаковый граф взаимодействий. Следовательно множество $B^{(1)}$ не только \mathbf{M} -продолжимо, но и \mathbf{M}_1 -продолжимо, что позволяет провести операции A, B, C, D над множеством $S_{B^{(1)}}(\mathbf{M}_1)$, заменив при этом пару $\alpha_1, \bar{\alpha}_1$ на $\alpha_2, \bar{\alpha}_2$ и т.д. В результате получится последовательность матриц

$$\mathbf{M}, \mathbf{M}_1, \mathbf{M}_2, \dots, \mathbf{M}_p, \quad \mathbf{M}_k = \mathbf{V}_k \mathbf{V}_{k-1} \dots \mathbf{V}_1 \mathbf{M} (\mathbf{V}_k \mathbf{V}_{k-1} \dots \mathbf{V}_1)^*$$

и сужение их спектральных данных

$$S_B(\mathbf{M}) \xrightarrow{\alpha_1 \bar{\alpha}_1} S_{B^{(1)}}(\mathbf{M}_1) \xrightarrow{\alpha_2 \bar{\alpha}_2} S_{B^{(2)}}(\mathbf{M}_2) \xrightarrow{\alpha_3 \bar{\alpha}_3} \dots \xrightarrow{\alpha_p \bar{\alpha}_p} S_{B^{(p)}}(\mathbf{M}_p)$$

на множестве $B^{(k)} = \mathfrak{B}^{(k)} \times [m]$, заканчивающиеся матрицей $\mathbf{M}_p = \mathbf{V} \mathbf{M} \mathbf{V}^*$, где $\mathbf{V} = \mathbf{V}_p \mathbf{V}_{p-1} \dots \mathbf{V}_1$ — унитарная блочно-диагональная матрица. Согласно Лемме 12' каждое множество $S_{B^{(k)}}(\mathbf{M}_k)$ вычисляется из предыдущего $S_{B^{(k-1)}}(\mathbf{M}_{k-1})$ и $S_{B^{(k-1)}}(\mathbf{M}_{k-1}) = S_{B^{(k-1)}}(\mathbf{M}_k)$. Поэтому множество $S_{B^{(M)}}(\mathbf{V} \mathbf{M} \mathbf{V}^*) = S_{B^{(p)}}(\mathbf{M}_p)$ вычисляется из множества $S_B(\mathbf{M})$ последовательным применением операций A, B, C, D, и $S_B(\mathbf{V} \mathbf{M} \mathbf{V}^*) = S_B(\mathbf{M})$.

Наконец, если все недиагональные невырожденные блоки матрицы \mathbf{M}_{k-1} положительно определенные, то $\mathbf{V}_k = \mathbf{I}$, $\mathbf{M}_k = \mathbf{M}_{k-1}$. Отсюда по индукции следует, что если все недиагональные невырожденные блоки матрицы \mathbf{M} положительно определенные, то $\mathbf{M}_k = \mathbf{M}$ при всех $k = 1, 2, \dots, p$ и множество $S_{B(\mathbf{M})}(\mathbf{M})$ вычисляется из множества $S_B(\mathbf{M})$. ■

Если множество B вполне \mathbf{M} -продолжимо, то $B(\mathbf{M}) = A = \mathfrak{A} \times [m]$ и $S_{B(\mathbf{M})}(\mathbf{V} \mathbf{M} \mathbf{V}^*) = S(\mathbf{V} \mathbf{M} \mathbf{V}^*)$, откуда вытекает такое следствие теоремы:

Следствие. *С вполне \mathbf{M} -продолжимым множеством B связана такая унитарная блочно-диагональная матрица \mathbf{V} , что спектральные данные матрицы \mathbf{VMV}^* вычисляются из сужения спектральных данных матрицы \mathbf{M} на множество B .*

В общем случае матрица \mathbf{V} зависит от множества B . Однако, если все недиагональные невырожденные блоки матрицы \mathbf{M} положительно определенные, то $\mathbf{V} = \mathbf{I}$, и спектральные данные матрицы \mathbf{M} , а, значит, и сама матрица, однозначно вычисляются из сужения ее спектральных данных на любое вполне \mathbf{M} -продолжимое множество.

Если же все недиагональные невырожденные блоки матрицы \mathbf{M} отрицательно определенные (как, например, у \mathbf{L} -матриц систем с устойчивым парным взаимодействием), то матрица $-\mathbf{M}$ однозначно вычисляется из сужения ее спектральных данных $S(-\mathbf{M})$ на любое \mathbf{M} -продолжимое множество. Множество $S(-\mathbf{M})$ получается из спектральных данных матрицы \mathbf{M} заменой ее собственных значений λ на $-\lambda$. Поэтому матрица $\mathbf{M} \in \mathfrak{M}(m)$ однозначно вычисляется из сужения ее спектральных данных на любое вполне \mathbf{M} -продолжимое множество, если все ее недиагональные невырожденные блоки положительно определенные или все отрицательно определенные.

В Леммах 7, 8 дано описание математических операций, которые нужно произвести над наблюдаемыми данными, чтобы вычислить сужение спектральных данных \mathbf{L} -матрицы на множество $A(0) = \mathfrak{A}_0 \times [m]$, где \mathfrak{A}_0 — множество наблюдаемых частиц. При этом предполагалось, что собственные функции \mathbf{L} -матрицы не обращаются тождественно в нуль на множестве $A(0)$. В § 12 мы доказали, что собственные функции \mathbf{L} -матрицы не могут тождественно обратиться в нуль на вполне \mathbf{L} -продолжимом множестве. Отсюда согласно вышесказанному вытекает

Теорема 7. *В механических системах с устойчивым парным взаимодействием \mathbf{L} -матрицы однозначно вычисляются из наблю-*

§ 14. Построение матрицы по сужению ее спектральных данных

даемых данных, если множество наблюдаемых частиц \mathfrak{A}_0 вполне \mathbf{L} -продолжимо.

§ 15. Свойства вполне \mathbf{M} -продолжимых множеств

Результаты предыдущего параграфа показывают, что при решении обратных задач спектрального анализа эрмитовых матриц основную роль играют вполне \mathbf{M} -продолжимые множества. Поэтому желательно выяснить, какие свойства матрицы $\mathbf{M} \in \mathfrak{M}(m)$ гарантируют существование вполне \mathbf{M} -продолжимого множества, и какими свойствами должно обладать множество $\{\Phi_B, \mathbf{A}\}$ для того, чтобы оно было сужением спектральных данных некоторой матрицы $\mathbf{M} \in \mathfrak{M}(m)$ на вполне \mathbf{M} -продолжимое множество B .

Пусть $\mathbf{M} = (\mathbf{M}^{\alpha\beta}) \in \mathfrak{M}(m)$, $\alpha, \beta \in \mathfrak{A}$, $\#\mathfrak{A} = n$. Напомним, что блок $\mathbf{M}^{\alpha\beta}$ называется невырожденным, если $\text{Det}(\mathbf{M}^{\alpha\beta}) \neq 0$.

Теорема 8. *Вполне \mathbf{M} -продолжимое множество, состоящее из q частиц, существует тогда и только тогда, когда найдется такая нумерация частиц, при которой над главной (блочной) диагональю матрицы \mathbf{M} лежит $n - q$ невырожденных блоков по одному на каждом из столбцов с номерами $q + 1, q + 2, \dots, n$ и правее этих невырожденных блоков на общих с ними строках лежат нулевые блоки.*

Доказательство. Если вполне \mathbf{M} -продолжимое множество \mathfrak{B} состоит из q частиц ($q < n$), то существует максимальная цепочка

$$\mathfrak{B} = \mathfrak{B}^{(0)} \subset \mathfrak{B}^{(1)} \subset \dots \subset \mathfrak{B}^{(n-q)} = \mathfrak{A} \quad (15.1)$$

и связанная с ней последовательность пар $\alpha_l, \overline{\alpha_l}$ сильно взаимодействующих частиц, таких, что

$$\begin{cases} \alpha_l \in \mathfrak{B}^{(l-1)}, & \{\overline{\alpha_l}\} = \mathfrak{B}^{(l)} \setminus \mathfrak{B}^{(l-1)}, \\ \text{Det}(\mathbf{M}^{\alpha_l \overline{\alpha_l}}) \neq 0, & \text{и } \mathbf{M}^{\alpha_l \overline{\alpha_l}} = 0 \text{ при } \beta \in \mathfrak{A} \setminus \mathfrak{B}^{(l)}. \end{cases} \quad (15.2)$$

Занумеруем все частицы множества \mathfrak{A} по следующему правилу: частицы множества $\mathfrak{B} = \mathfrak{B}^{(0)}$ нумеруются произвольными числами

$1, 2, \dots, q$, так что $\mathfrak{B}^{(0)} = \bigcup_{s=1}^q \{\alpha(s)\}$, а частицам $\overline{\alpha_l}$ приписываются номера $q + l$

$$\overline{\alpha_l} = \alpha(q + l), \quad l = 1, 2, \dots, n - q.$$

Таким способом будут занумерованы все частицы множества \mathfrak{A} , в том числе и частицы α_l , номера которых обозначаем через $k(l)$:

$$\alpha_l = \alpha(k(l)), \quad l = 1, 2, \dots, n - q.$$

При такой нумерации множества $\mathfrak{B}^{(l)}$ цепочка (15.1) и матрица \mathbf{M} запишутся так:

$$\begin{aligned} \mathfrak{B}^{(l)} &= \bigcup_{s=1}^{q+l} \{\alpha(s)\}, & \mathfrak{A} \setminus \mathfrak{B}^{(l)} &= \bigcup_{s=q+l+1}^n \{\alpha(s)\} \\ \mathbf{M} &= (\mathbf{M}^{sp}), & \mathbf{M}^{sp} &= \mathbf{M}^{\alpha(s)\alpha(p)}, \quad s, p \in [n], \end{aligned}$$

а формулы (15.2) — так:

$$\begin{aligned} \alpha(k(l)) &\in \bigcup_{s=1}^{q+l-1} \{\alpha(s)\}, & \text{Det } \mathbf{M}^{k(l)(q+l)} &\neq 0, \\ & & \text{и } \mathbf{M}^{k(l)(q+l')} &= 0 \text{ при всех } l > l'. \end{aligned}$$

Следовательно $k(l) < q + l$, невырожденные блоки $\mathbf{M}^{k(l)(q+l)}$ лежат выше главной диагонали по одному на каждом из столбцов с номерами $q + 1, q + 2, \dots, n$, и блоки $\mathbf{M}^{k(l)(q+l')}$, $l > l'$, лежащие правее этих невырожденных блоков на общих с ними строчках, равны нулю.

Следовательно условия теоремы необходимы.

Наоборот, если эти условия выполнены, то существует такая нумерация частиц $\alpha(s)$, $s = 1, 2, \dots, n$, при которой выше главной диагонали на каждом из столбцов с номерами $q + l$, $l = 1, 2, \dots, n - q$, лежит невырожденный блок $\mathbf{M}^{\alpha(k(l))\alpha(q+l)} = \mathbf{M}^{k(l)(q+l)}$, $k(l) < q + l$, а

правее этих блоков на общих с ними строках лежат нулевые блоки.

Полагая $\mathfrak{B}^{(l)} = \bigcup_{s=1}^{q+l} \{\alpha(s)\}$, получим цепочку подмножеств

$$\mathfrak{B}^{(0)} \subset \mathfrak{B}^{(1)} \subset \dots \subset \mathfrak{B}^{(n-q)} = \bigcup_{s=1}^n \{\alpha(s)\} = \mathfrak{A},$$

в которой $\#\mathfrak{B}^{(0)} = q$, $\alpha(q+l) \in \mathfrak{B}^{(l)}$, $\alpha(k(l)) \in \mathfrak{B}^{(l-1)}$ (т.к. $\alpha(k(l)) < q+l$) и частицы $\alpha(k(l))$ не взаимодействуют со всеми со всеми частицами множества $\mathfrak{A} \setminus \mathfrak{B}^{(l)} = \bigcup_{s=q+l+1}^n \{\alpha(s)\}$ (т.к. $\mathbf{M}^{\alpha(k(l))\alpha(q+l')} = 0$ при $l > l'$).

Следовательно эта цепочка является максимальной цепочкой множества $\mathfrak{B}^{(0)}$, состоящего из q частиц, а, т.к. она заканчивается множеством \mathfrak{A} , то множество $\mathfrak{B}^{(0)}$ вполне \mathbf{M} -продолжимо. ■

П р и м е р. На рис. 5 изображен граф взаимодействий \mathbf{L} -матрицы механической системы, состоящей из 18 частиц, т.е. $\#\mathfrak{A} = 18$.

Вполне \mathbf{L} -продолжимое подмножество $\mathfrak{B}(4) \subset \mathfrak{A}$ состоит из четырех частиц, изображенных темными кружками \bullet , которые занумерованы числами 1, 2, 3, 4. Все остальные частицы изображены светлыми кружками \circ и занумерованы числами 5, 6, ..., 18 по правилу, использованному при доказательстве теоремы 8.

Получающаяся при такой нумерации \mathbf{L} -матрица рассматриваемой системы изображена на рис. 6. Нулевые блоки изображены серыми квадратами \blacksquare , невырожденные блоки изображены квадратами, перечеркнутыми по обеим диагоналям \boxtimes , блоки \mathbf{L}^{km} , $k, m \in [4]$ изображены квадратами с одной диагональю \boxdot , все остальные изображены светлыми квадратами \square .

Полный ответ на второй из поставленных в начале этого параграфа вопросов удастся дать только для матриц $\mathbf{M} \in \mathfrak{M}(1)$, т.е. для систем, в которых частицы имеют только одну степень свободы.

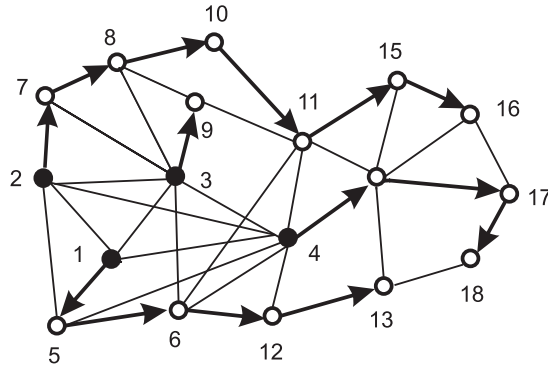


Рис. 5:

Рассмотрим пару множеств $\{\Phi_{\mathfrak{B}}, \Lambda\}$, где Λ — вещественная диагональная матрица n -го порядка с диагональными элементами

$$\lambda(1) = \lambda(2) = \dots = \lambda(j_1) = \mu_1 < \lambda(j_1 + 1) = \dots \\ = \lambda(j_2) = \mu_2 < \dots = \lambda(j_{k-1}) = \mu_{k-1} < \lambda(j_{k-1} + 1) = \dots = \lambda(j_k) = \mu_k$$

и

$$\Phi_{\mathfrak{B}} = (\varphi(\beta, j)), \quad \beta \in \mathfrak{B}, \quad j \in [n],$$

произвольная прямоугольная матрица.

Таким образом, спектр матрицы Λ состоит из собственных значений $\mu_s = \lambda(j_s)$ кратности $j_s - j_{s-1}$, $s \in [k]$, прообразы которых $\lambda^{-1}(\mu_s)$ состоят из целых чисел полусегментов $(j_{s-1}, j_s]$, где для удобства положено $j_0 = 0$.

Теорема 9. Пара $\{\Phi_{\mathfrak{B}}, \Lambda\}$ тогда и только тогда является сужением спектральных данных некоторой матрицы $\mathbf{M} \in \mathfrak{M}(1)$ на вполне \mathbf{M} -продолжимое множество $\mathfrak{B} \subset \mathfrak{A}$, когда при всех $\beta, \beta' \in \mathfrak{B}$

$$\langle \varphi_{\beta}, \varphi_{\beta'} \rangle = \sum_{j=1}^n \varphi(\beta, j) \overline{\varphi(\beta', j)} = \delta_{\beta}^{\beta'} \quad (15.3)$$

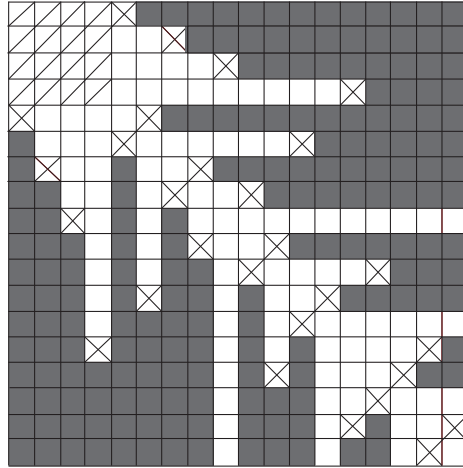


Рис. 6:

и векторы пространства $H(\mathfrak{B})$

$$\varphi_j = \varphi(\beta, j), \quad \beta \in \mathfrak{B}, \quad j \in \lambda^{-1}(\mu_s), \quad (15.4)$$

линейно независимы при каждом $s \in [k]$.

Доказательство. Согласно теореме 5 равенство (15.3) необходимо и достаточно для того, чтобы $\{\Phi_{\mathfrak{B}}, \Lambda\}$ было сужением спектральных данных некоторой матрицы $\mathbf{M} \in \mathfrak{M}(1)$ на подмножество $\mathfrak{B} \subset \mathfrak{A}$, т.е. чтобы функции $\varphi_j = \varphi(\beta, j)$, $\beta \in \mathfrak{B}$ были сужениями ортонормированных собственных функций $\varphi(\alpha, j)$, $\alpha \in \mathfrak{A}$, матрицы \mathbf{M} на подмножество \mathfrak{B} .

Если подмножество \mathfrak{B} вполне \mathbf{M} -продолжимо, то согласно лемме 10 собственные функции $\varphi(\alpha, j)$ матрицы \mathbf{M} не могут тождественно обращаться в нуль на множестве \mathfrak{B} . Так как линейные комбинации собственных функций вида

$$\psi_s(\alpha) = \sum_{j \in \lambda^{-1}(\mu_s)} \varphi(\alpha, j) c_j, \quad \sum_{j \in \lambda^{-1}(\mu_s)} |c_j| > 0,$$

очевидно, тоже являются собственными функциями с собственными значениями μ_s , то они не могут тождественно обращаться в нуль на вполне \mathbf{M} -продолжимом множестве \mathfrak{B} , т.е. векторы

$$\varphi_j = \varphi(\alpha, j), \quad \alpha \in \mathfrak{B}, \quad j \in \lambda^{-1}(\mu_s)$$

пространства $H(\mathfrak{B})$ линейно независимы.

Следовательно равенства (15.3) и линейная независимость векторов (15.4) необходимы для того, чтобы пара $\{\Phi_{\mathfrak{B}}, \Lambda\}$ была сужением спектральных данных некоторой эрмитовой матрицы \mathbf{M} на подмножество $\mathfrak{B} \subset \mathfrak{A}$ и это подмножество было вполне \mathbf{M} -продолжимо.

Для доказательства их достаточности рассмотрим векторы $\Lambda\varphi_{\beta} = \lambda(j)\varphi(\beta, j)$, $\beta \in \mathfrak{B}$ пространства $H(n)$, занумерованные частями β подмножества $\mathfrak{B} \subset \mathfrak{A}$, и их ортогональные проекции

$$\mathbf{P}_{\overline{\mathfrak{B}}}\Lambda\varphi_{\beta} = \lambda(j)\varphi(\beta, j) - \sum_{\beta' \in \mathfrak{B}} \langle \Lambda\varphi_{\beta}, \varphi_{\beta'} \rangle \varphi(\beta', j) \quad (15.5)$$

на ортогональное дополнение $O(\overline{\mathfrak{B}})$ к линейной оболочке $O(\mathfrak{B})$ векторов $\varphi_{\beta} = \varphi(\beta, j) \in H([n])$, $\beta \in \mathfrak{B}$.

Докажем прежде всего, что эти проекции не могут обратиться в нуль для всех $\beta \in \mathfrak{B}$. Действительно, согласно (15.5) в противном случае при всех $\beta \in \mathfrak{B}$, $j \in [n]$, выполняются равенства

$$\lambda(j)\varphi(\beta, j) - \sum_{\beta' \in \mathfrak{B}} A^{\beta\beta'} \varphi(\beta', j) = 0,$$

где

$$A^{\beta\beta'} = \langle \Lambda\varphi_{\beta}, \varphi_{\beta'} \rangle = \sum_{j=1}^n \lambda(j)\varphi(\beta, j)\overline{\varphi(\beta', j)},$$

и, т.к. $\lambda(j) = \mu_s$ при всех $j \in \lambda^{-1}(\mu_s)$, то функции

$$\psi_s(\beta) = \sum_{j \in \lambda^{-1}(\mu_s)} \varphi(\beta, j)c_j \quad (15.6)$$

при любых c_j удовлетворяют уравнению

$$\mu_s \psi_s(\beta) - \sum_{\beta' \in \mathfrak{B}} A^{\beta\beta'} \psi_s(\beta') = 0,$$

откуда следует, что они попарно ортогональны, т.е.

$$\sum_{\beta' \in \mathfrak{B}} \psi_s(\beta) \overline{\psi_{s'}(\beta)} = 0,$$

если $s \neq s'$

Произвольную линейную комбинацию функций $\varphi_j = \varphi(\beta, j) \in H(\mathfrak{B})$ можно записать так:

$$\sum_{j=1}^n \varphi(\beta, j) c_j = \sum_{s=1}^k \sum_{j \in \lambda^{-1}(\mu_s)} \varphi(\beta, j) c_j = \sum_{s=1}^k \psi_s(\beta),$$

откуда, вследствие попарной ортогональности функций $\psi_s(\beta)$, следует, что равенство $\sum_{j=1}^n \varphi(\beta, j) c_j = 0$ выполняется только тогда, когда

$$\psi_s(\beta) = 0 \quad \text{при всех } s \in K, \beta \in \mathfrak{B}. \quad (15.7)$$

Из (15.6) и линейной независимости векторов (15.4) следует, что равенства (15.7), а, значит, и равенство $\sum_{j=1}^n \varphi(\beta, j) c_j = 0, \beta \in \mathfrak{B}$ выполняются только тогда, когда все коэффициенты c_j равны нулю, т.е. когда функции $\varphi_j = \varphi(\beta, j) \in H(\mathfrak{B}), j \in [n]$ линейно независимы, что приводит к противоречию, т.к. размерность пространства $H(\mathfrak{B})$ равна $\sharp\mathfrak{B}$, а число этих функций равно $n = \sharp\mathfrak{A} > \sharp\mathfrak{B}$.

Следовательно проекции $\mathbf{P}_{\mathfrak{B}} \mathbf{\Lambda} \varphi_\beta$ не могут обратиться в нуль при всех $\beta \in \mathfrak{B}$, и найдется такая частица $\beta_1 \in \mathfrak{B} = \mathfrak{B}^{(0)}$, что $\mathbf{P}_{\mathfrak{B}} \mathbf{\Lambda} \varphi_{\beta_1} \neq 0$

Обозначим через $\overline{\beta}_1$ произвольную частицу множества $\overline{\mathfrak{B}} = \mathfrak{A} \setminus \mathfrak{B}$, через

$$\varphi_{\overline{\beta}_1} = \varphi(\overline{\beta}_1, j) = \|\mathbf{P}_{\overline{\mathfrak{B}}} \mathbf{\Lambda} \varphi_{\beta_1}\|^{-1} \mathbf{P}_{\overline{\mathfrak{B}}} \mathbf{\Lambda} \varphi_{\beta_1} \quad (15.8)$$

нормированную проекцию вектора $\Lambda\varphi_{\beta_1}$ на ортогональное дополнение $O(\overline{\mathfrak{B}})$ к линейной оболочке $O(\mathfrak{B})$ векторов $\varphi_\beta \in H([n])$, $\beta \in \mathfrak{B}$, и положим $\mathfrak{B}^{(1)} = \mathfrak{B} \cup \{\overline{\beta_1}\}$. Из тождества

$$\Lambda\varphi_{\beta_1} = \mathbf{P}_{\overline{\mathfrak{B}}}\Lambda\varphi_{\beta_1} + \mathbf{P}_{\mathfrak{B}}\Lambda\varphi_{\beta_1}$$

согласно (15.5) следует, что

$$\langle \Lambda\varphi_{\beta_1}, \varphi \rangle = \begin{cases} \|\mathbf{P}_{\overline{\mathfrak{B}}}\Lambda\varphi_{\beta_1}\| > 0, & \varphi = \varphi_{\overline{\beta_1}} \in O(\overline{\mathfrak{B}^{(0)}}), \\ 0, & \varphi \in O(\overline{\mathfrak{B}^{(1)}}). \end{cases} \quad (15.9)$$

Вектор $\varphi_{\overline{\beta_1}}$ является ортом пространства $H([n])$, ортогональным ортам φ_β , $\beta \in \mathfrak{B}$, т.е. строкам матрицы $\Phi_{\mathfrak{B}}$, а функции $\varphi_j = \varphi(\beta, j)$, $\beta \in \mathfrak{B}^{(1)}$, $j \in \lambda^{-1}(\mu_s)$, пространства $H(\mathfrak{B}^{(1)})$ линейно независимы т.к. их сужения на подмножество $\mathfrak{B} \subset \mathfrak{B}^{(1)}$ линейно независимы по условию. Поэтому, добавив матрице $\Phi_{\mathfrak{B}}$ новую строку $\varphi_{\overline{\beta_1}}$, мы получим пару $\{\Phi_{\mathfrak{B}^{(1)}}, \Lambda\}$, удовлетворяющую условиям доказываемой теоремы, если им удовлетворяет пара $\{\Phi_{\mathfrak{B}}, \Lambda\}$.

Это позволяет последовательно добавлять строки матрице $\Phi_{\mathfrak{B}}$ пока не исчерпаем все частицы множества $\mathfrak{A} \setminus \mathfrak{B}$. В результате получим последовательность множеств

$$\mathfrak{B} = \mathfrak{B}^{(0)} \subset \mathfrak{B}^{(1)} \subset \dots \subset \mathfrak{B}^{(p)} = \mathfrak{A}, \quad \mathfrak{B}^{(k+1)} = \mathfrak{B}^{(k)} \cup \{\overline{\beta_{k+1}}\},$$

частиц $\beta_k \in \mathfrak{B}^{(k-1)}$, $\overline{\beta_k} \in \overline{\mathfrak{B}^{(k-1)}}$ и ортов $\varphi_{\overline{\beta_k}} = \varphi(\overline{\beta_k}, j)$, $k = 1, 2, \dots, p$, которые вместе с ортами $\varphi_\beta = \varphi(\beta, j)$, $\beta \in \mathfrak{B}$, образуют ортонормированный базис пространства $H([n])$, и согласно (15.9) удовлетворяют равенствам

$$\langle \Lambda\varphi_{\beta_k}, \varphi \rangle = \begin{cases} \|\mathbf{P}_{\overline{\mathfrak{B}^{(k-1)}}}\Lambda\varphi_{\beta_k}\| > 0, & \varphi = \varphi_{\overline{\beta_k}} \in O(\overline{\mathfrak{B}^{(k-1)}}), \\ 0, & \varphi \in O(\overline{\mathfrak{B}^{(k)}}). \end{cases} \quad (15.10)$$

Следовательно векторы $\varphi_j = \varphi(\beta, j)$, $j \in [n]$, образуют ортонормированный базис пространства $H(\mathfrak{A})$, и сужение спектральных данных эрмитовой матрицы $M = (M^{\beta\beta'})$ с элементами

$$M^{\beta\beta'} = \langle \Lambda \varphi_\beta, \varphi_{\beta'} \rangle = \sum_{j=1}^n \lambda(j) \varphi(\beta, j) \overline{\varphi(\beta', j)}$$

на подмножество \mathfrak{B} равно $\{\Phi_{\mathfrak{B}}, \Lambda\}$.

Наконец, согласно (15.10) $M^{\beta_k \bar{\beta}_k} > 0$ и при всех $\beta \in \mathfrak{A} \setminus \mathfrak{B}^{(k)}$ $M^{\beta_k \beta} = 0$, где $\beta_k \in \mathfrak{B}^{(k-1)}$, $\bar{\beta}_k \in \mathfrak{B}^{(k)}$, откуда следует, что множество $\mathfrak{B}^{(k)}$ является \mathbf{M} -продолжением множества $\mathfrak{B}^{(k-1)}$, и т.к. $\mathfrak{B}^{(p)} = \mathfrak{A}$, то подмножество \mathfrak{B} вполне \mathbf{M} -продолжимо. ■

§ 16. Вычисление масс частиц по известной \mathbf{L} -матрице системы

Механическими характеристиками системы называется матрица ее потенциальной энергии и массы содержащихся в ней частиц. Системы с одинаковыми характеристиками неразличимы.

В предыдущих параграфах были найдены условия, при которых из наблюдаемых данных можно вычислить \mathbf{L} -матрицу системы, связанную с матрицей потенциальной энергии равенствами

$$\mathbf{U}^{\alpha\beta} = \mathbf{L}^{\alpha\beta} \sqrt{m(\alpha)m(\beta)},$$

откуда следует, что механические характеристики всех систем с заданной \mathbf{L} -матрицей даются формулами

$$m(\alpha) = \nu(\alpha)^2, \quad \mathbf{U}^{\alpha\beta} = \mathbf{L}^{\alpha\beta} \nu(\alpha)\nu(\beta), \quad (16.1)$$

где через $\nu(\alpha)$ обозначены произвольные положительные числа.

Эти числа являются независимыми параметрами, которые вместе с \mathbf{L} -матрицей однозначно определяют механические характеристики системы. Их число равно числу частиц, и в общем случае число любых параметров, которые вместе с \mathbf{L} -матрицей однозначно определяют механические характеристики не может быть меньше.

Однако в системах, у которых с внешним полем взаимодействуют не все частицы, таких параметров меньше: их число равно числу частиц, взаимодействующих с внешним полем.

Действительно, коэффициенты взаимодействия \mathcal{E}^α частиц с внешним полем связаны с числовыми параметрами $\nu(\alpha)$ и \mathbf{L} -матрицей системы равенствами

$$\mathcal{E}^\alpha = \sum_{\beta \in \mathfrak{A}} \mathbf{U}^{\alpha\beta} = \sum_{\beta \in \mathfrak{A}} \mathbf{L}^{\alpha\beta} \nu(\alpha)\nu(\beta),$$

левая часть которых \mathcal{E}^α и коэффициенты $\mathbf{L}^{\alpha\beta}$ являются матрицами n -го порядка. Эти матричные равенства эквивалентны множеству

числовых равенств

$$\mathcal{E}^\alpha(\mathbf{x}) = \sum_{\beta \in \mathfrak{A}} \mathbf{L}^{\alpha\beta}(\mathbf{x}) \nu(\alpha) \nu(\beta), \quad (16.2)$$

в которых вектор \mathbf{x} пробегает пространство $H([m])$,

$$\mathcal{E}^\alpha(\mathbf{x}) = \langle \mathcal{E}^\alpha \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle, \quad \mathbf{L}^{\alpha\beta}(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{L}^{\alpha\beta} \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle$$

и через $\langle \cdot, \cdot \rangle$ обозначено скалярное произведение в пространстве $H([m])$.

Полагая

$$\theta^\alpha(\mathbf{x}) = \nu(\alpha)^{-1} \mathcal{E}^\alpha(\mathbf{x}) = \nu(\alpha)^{-1} \langle \mathcal{E}^\alpha \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle, \quad (16.3)$$

получим согласно (16.1) равенства

$$\theta^\alpha(\mathbf{x}) = \sum_{\beta \in \mathfrak{A}} L^{\alpha\beta}(\mathbf{x}) \nu(\beta), \quad (16.4)$$

которые при каждом $\mathbf{x} \neq 0$ порождают систему линейных уравнений относительно $\nu(\beta)$, $\beta \in \mathfrak{A}$ с матрицей

$$\mathbf{L}(\mathbf{x}) = \left(L^{\alpha\beta}(\mathbf{x}) \right) \in \mathfrak{M}([1]).$$

Легко видеть, что из положительной определенности \mathbf{L} -матрицы следует положительная определенность матриц $\mathbf{L}(\mathbf{x})$ при всех $\mathbf{x} \neq 0$. Поэтому при всех $\mathbf{x} \neq 0$ они обратимы, обратные им матрицы

$$(\mathbf{L}(\mathbf{x}))^{-1} = (L_{\alpha\beta}(\mathbf{x})) \in \mathfrak{M}(1)$$

положительно определенные и уравнения (16.4) однозначно разрешимы:

$$\nu(\alpha) = \sum_{\beta \in \mathfrak{A}} L_{\alpha\beta}(\mathbf{x}) \theta^\beta(\mathbf{x}).$$

Подчеркнем, во избежание путаницы в обозначениях, что элементы $L^{\alpha\beta}(\mathbf{x})$ матрицы $\mathbf{L}(\mathbf{x})$ являются квадратичными формами

координат вектора $\mathbf{x} \in H([m])$, но элементы $L_{\alpha\beta}(\mathbf{x})$ обратной матрицы $(\mathbf{L}(\mathbf{x}))^{-1}$ не являются квадратичными формами.

Если с внешним полем взаимодействуют только частицы множества \mathfrak{B} , то согласно (16.3) $\theta^\alpha(\mathbf{x}) = 0$ при всех $\beta \in \mathfrak{A} \setminus \mathfrak{B}$, и

$$\nu(\alpha) = \sum_{\beta \in \mathfrak{B}} L_{\alpha\beta}(\mathbf{x}) \theta^\beta(x) \quad (16.5)$$

Для вычисления параметров $\nu(\alpha) = \sqrt{m(\alpha)}$ достаточно знать значения функций $\theta^\beta(\mathbf{x})$, $\beta \in \mathfrak{B}$, только для одного произвольно взятого ненулевого вектора $\mathbf{x}_0 \in H([m])$:

$$\nu(\alpha) = \sum_{\beta \in \mathfrak{B}} L_{\alpha\beta}(\mathbf{x}_0) \theta^\beta(\mathbf{x}_0). \quad (16.6)$$

Следовательно механические характеристики систем, в которых с внешним полем взаимодействуют только частицы множества \mathfrak{B} , однозначно определяются \mathbf{L} -матрицей и значениями параметров $\theta^\beta(\mathbf{x}_0)$, $\beta \in \mathfrak{B}$, число которых равно числу частиц, взаимодействующих с внешним полем.

Например, в нагруженных струнах с внешним полем взаимодействуют две крайние частицы с массами m_1 и m_N , или только одна из них. Поэтому полученные в § 7 формулы для механических характеристик нагруженных струн с известной \mathbf{L} -матрицей содержат два параметра m_N и $\omega^2 = m_N^{-1} k_N$, если с внешним полем взаимодействуют обе частицы, и только один параметр m_N , если с внешним полем взаимодействует только одна частица. (Во втором случае $\omega^2 = 0$, если $k_N = 0$, и $\omega^2 = \omega_0^2$, если $k_0 = 0$.)

Для того, чтобы использовать формулу (16.5) при вычислении механических характеристик, необходимо знать область допустимых значений параметров $\theta^\beta(\mathbf{x}_0)$, $\beta \in \mathfrak{B}$. Так как $\nu(\alpha) = \sqrt{m(\alpha)} > 0$, то эти параметры могут принимать только такие значения, при которых для всех $\alpha \in \mathfrak{A}$ выполняется неравенство

$$\sum_{\beta \in \mathfrak{B}} L_{\alpha\beta}(\mathbf{x}_0) \theta^\beta(\mathbf{x}_0) > 0 \quad (16.7)$$

Кроме того, согласно (16.5), (16.6) при всех $\mathbf{x} \neq 0$ должны выполняться равенства

$$\sum_{\beta \in \mathfrak{B}} L_{\alpha\beta}(\mathbf{x}_0)\theta^\beta(\mathbf{x}_0) = \sum_{\beta \in \mathfrak{B}} L_{\alpha\beta}(\mathbf{x})\theta^\beta(\mathbf{x}),$$

равносильные следующим:

$$\sum_{\beta \in \mathfrak{A}} L^{\alpha\beta}(\mathbf{x}) \sum_{\gamma \in \mathfrak{B}} L_{\beta\gamma}(\mathbf{x}_0)\theta^\gamma(\mathbf{x}_0) = 0, \quad \alpha \in \mathfrak{A} \setminus \mathfrak{B}. \quad (16.8)$$

Требования (16.7) и (16.8) не только дают неявное описание области допустимых значений параметров $\theta^\beta(\mathbf{x}_0)$, $\beta \in \mathfrak{B}$, но, как легко видеть, являются также необходимыми и достаточными условиями того, что вещественная положительно определенная матрица $\mathbf{L} = (\mathbf{L}^{\alpha\beta}) \in \mathfrak{M}([m])$ являлась \mathbf{L} -матрицей некоторой системы, в которой с внешним полем взаимодействуют только частицы множества \mathfrak{B} .

Механические характеристики этой системы находятся по формулам (16.1), в которых $\nu(\alpha)$ выражается через параметры $\theta^\beta(\mathbf{x}_0)$, $\beta \in \mathfrak{B}$ формулой (16.6).

Например, если с внешним полем взаимодействует только одна частица β_0 , то согласно (16.7), (16.8)

$$L_{\alpha\beta_0}(\mathbf{x}_0)\theta^{\beta_0}(\mathbf{x}_0) > 0, \quad \alpha \in \mathfrak{A},$$

и при всех $\alpha \in \mathfrak{A}$, $\mathbf{x} \in H([m])$

$$L_{\alpha\beta_0}(\mathbf{x}_0)\theta^{\beta_0}(\mathbf{x}_0) = L_{\alpha\beta_0}(\mathbf{x})\theta^{\beta_0}(\mathbf{x}).$$

Поэтому все числа $L_{\alpha\beta_0}(\mathbf{x}_0)$, $\alpha \in \mathfrak{A}$, отличны от нуля и имеют одинаковые знаки, совпадающие со знаком $\theta^{\beta_0}(\mathbf{x}_0)$, и столбцы $L_{\alpha\beta_0}(\mathbf{x})$ матрицы $(\mathbf{L}(\mathbf{x}))^{-1}$ с "номерами" β_0 пропорциональны столбцу матрицы $(\mathbf{L}(\mathbf{x}_0))^{-1}$ с тем же номером. Из положительной определенности матрицы $(\mathbf{L}(\mathbf{x}))^{-1}$ следует, что ее диагональные элементы положительны, в частности $L_{\beta_0\beta_0}(\mathbf{x}_0) > 0$.

Следовательно вещественная положительно определенная матрица $\mathbf{L} = (L^{\alpha\beta}) \in \mathfrak{M}([m])$ тогда и только тогда является \mathbf{L} -матрицей некоторой механической системы, в которой с внешним полем взаимодействует только одна частица β_0 , когда при всех $\alpha \in \mathfrak{A}$ выполняются неравенства $L_{\alpha\beta_0}(\mathbf{x}_0) > 0$ и при всех $\mathbf{x} \in H([m])$ отношения $L_{\alpha\beta_0}(\mathbf{x})(L_{\alpha\beta_0}(\mathbf{x}_0))^{-1}$ не зависят от α .

Механические характеристики таких систем таковы:

$$m(\alpha) = \theta^2 (L_{\alpha\beta_0}(\mathbf{x}_0))^2, \\ \mathbf{U}^{\alpha\beta} = \theta^2 \mathbf{L}^{\alpha\beta} L_{\alpha\beta_0}(\mathbf{x}_0) L_{\beta\beta_0}(\mathbf{x}_0),$$

где $\theta = \theta^{\beta_0}(\mathbf{x}_0)$ — произвольный положительный параметр.

В общем случае явно описать область допустимых значений параметров $\theta^\beta(x_0)$, $\beta \in \mathfrak{B}$, т.е. найти все независящие от \mathbf{x} решения $\theta^\gamma(\mathbf{x}_0)$ уравнения (16.8), удовлетворяющее неравенствам (16.7), удастся только для систем со скалярным взаимодействием, т.е. когда $\mathbf{L} = (L^{\alpha\beta}) \in \mathfrak{M}(1)$.

В этом случае пространство $H([m])$ одномерно, $\mathbf{x} = c\mathbf{x}_0$, $L^{\alpha\beta}(\mathbf{x}) = |c|^2 L^{\alpha\beta}(\mathbf{x}_0)$,

$$\sum_{\beta \in \mathfrak{A}} L^{\alpha\beta}(\mathbf{x}) \sum_{\gamma \in \mathfrak{B}} L_{\beta\gamma}(\mathbf{x}_0) \theta^\gamma(\mathbf{x}_0) = |c|^2 \sum_{\gamma \in \mathfrak{B}} \left(\sum_{\beta \in \mathfrak{A}} L^{\alpha\beta}(\mathbf{x}_0) L_{\beta\gamma}(\mathbf{x}_0) \right) \theta^\gamma(\mathbf{x}_0) \\ = |c|^2 \sum_{\gamma \in \mathfrak{B}} \delta_\gamma^\alpha \theta^\gamma(\mathbf{x}_0) = |c|^2 \theta^\alpha(\mathbf{x}_0)$$

и т.к. $\theta^\alpha(\mathbf{x}_0) = 0$ при всех $\alpha \in \mathfrak{A} \setminus \mathfrak{B}$, то уравнения (16.8) удовлетворяются автоматически.

В системах со скалярным взаимодействием коэффициенты взаимодействия частиц с внешним полем неотрицательны, а недиагональные элементы матрицы $\mathbf{L} = (L^{\alpha\beta}) \in \mathfrak{M}(1)$ неположительны:

$$L^{\alpha\beta} \leq 0, \quad \alpha \neq \beta.$$

Поэтому параметры $\theta^\beta(\mathbf{x}_0)$ могут принимать любые положительные значения, удовлетворяющие неравенствам (16.7).

Лемма 13. Если вещественная эрмитова матрица $\mathbf{M} = (M^{\alpha\beta}) \in \mathfrak{M}(1)$, $\alpha, \beta \in \mathfrak{A}$, неразложима и ее недиагональные элементы $M^{\alpha\beta}$, $\alpha \neq \beta$, неположительны, то инвариантное подпространство $H(\lambda_{min})$, образованное собственными функциями матрицы \mathbf{M} с минимальным собственным значением λ_{min} , одномерно и содержит строго положительную собственную функцию $\varphi(\alpha) : \varphi(\alpha) > 0$ при всех $\alpha \in \mathfrak{A}$.

Доказательство. Минимальное собственное значение λ_{min} равно минимальному значению квадратичной формы $\sum_{\alpha \in \mathfrak{A}} \sum_{\beta \in \mathfrak{A}} M^{\alpha\beta} x(\alpha)x(\beta)$ на единичной сфере $\|\mathbf{x}\|^2 = \sum_{\alpha \in \mathfrak{A}} x(\alpha)^2 = 1$, и оно достигается на нормированных собственных функциях $\varphi(\alpha) \in H(\lambda_{min})$:

$$\lambda_{min} = \min_{\|\mathbf{x}\|^2=1} \sum_{\alpha \in \mathfrak{A}} \sum_{\beta \in \mathfrak{A}} M^{\alpha\beta} x(\alpha)x(\beta) = \sum_{\alpha \in \mathfrak{A}} \sum_{\beta \in \mathfrak{A}} M^{\alpha\beta} \varphi(\alpha)\varphi(\beta).$$

Так как по условию $M^{\alpha\beta} \leq 0$, при всех $\alpha \neq \beta$, то

$$\begin{aligned} \lambda_{min} &= \sum_{\alpha \in \mathfrak{A}} \sum_{\beta \in \mathfrak{A}} M^{\alpha\beta} \varphi(\alpha)\varphi(\beta) \geq \sum_{\alpha \in \mathfrak{A}} \sum_{\beta \in \mathfrak{A}} M^{\alpha\beta} |\varphi(\alpha)||\varphi(\beta)| \\ &\geq \min_{\|\mathbf{x}\|^2=1} \sum_{\alpha \in \mathfrak{A}} \sum_{\beta \in \mathfrak{A}} M^{\alpha\beta} x(\alpha)x(\beta) = \lambda_{min}, \end{aligned}$$

откуда следует, что λ_{min} одновременно достигается на собственной функции $\varphi(\alpha) \in H(\lambda_{min})$ и на функции $|\varphi(\alpha)|$. Поэтому $|\varphi(\alpha)| \in H(\lambda_{min})$, т.е.

$$\sum_{\beta \in \mathfrak{A}} M^{\alpha\beta} |\varphi(\beta)| = \lambda_{min} |\varphi(\alpha)| \quad (16.9)$$

Обозначим через $\mathfrak{B}_+ \subset \mathfrak{A}$ множество, на котором функция $|\varphi(\alpha)|$ принимает положительные значения, и через $\overline{\mathfrak{B}_+} = \mathfrak{A} \setminus \mathfrak{B}_+$ его дополнение, на котором она тождественно равна нулю. Из (16.9)

следует, что при всех $\alpha \in \overline{\mathfrak{B}}_+$ $\sum_{\beta \in \mathfrak{B}_+} M^{\alpha\beta} |\varphi(\beta)| = 0$, и, т.к. при всех $\alpha \neq \beta$ $M^{\alpha\beta} \leq 0$, а при всех $\beta \in \mathfrak{B}_+$ $|\varphi(\beta)| > 0$, то

$$M^{\alpha\beta} = 0, \quad \text{если } \alpha \in \overline{\mathfrak{B}}_+, \beta \in \mathfrak{B}_+. \quad (16.10)$$

Если множество $\overline{\mathfrak{B}}_+$ не пусто, то найдется частица $\alpha \in \overline{\mathfrak{B}}_+$ и частица $\beta \in \mathfrak{B}_+$, которые в силу неразложимости матрицы \mathbf{M} можно соединить цепочкой частиц $\alpha = \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n = \beta$, в которой $M^{\alpha_i \alpha_{i+1}} \neq 0$ при всех $i = 1, 2, \dots, n$. Но т.к. $\alpha_1 = \alpha \in \overline{\mathfrak{B}}_+$, $\alpha_n = \beta \in \mathfrak{B}_+$, в этой цепочке найдется такая пара частиц $\alpha_{i_0}, \alpha_{i_0+1}$, что $\alpha_{i_0} \in \overline{\mathfrak{B}}_+$, $\alpha_{i_0+1} \in \mathfrak{B}_+$, и согласно (16.10) $M^{\alpha_{i_0} \alpha_{i_0+1}} = 0$. Это противоречие доказывает, что $\mathfrak{B}_+ = \mathfrak{A}$, т.е. собственная функция $|\varphi(\alpha)| \in H(\lambda_{min})$ строго положительна: $|\varphi(\alpha)| > 0$ при всех $\alpha \in \mathfrak{A}$.

В силу произвольности функции $\varphi(\alpha) \in H(\lambda_{min})$ все собственные функции подпространства $H(\lambda_{min})$ отличны от нуля при всех $\alpha \in \mathfrak{A}$. Если бы подпространство $H(\lambda_{min})$ содержало две линейно независимые функции, то нашлась бы такая их линейная комбинация, которая, будучи собственной функцией этого подпространства, обратилась бы в нуль хотя бы в одной точке множества \mathfrak{A} , что согласно вышесказанному невозможно. Поэтому подпространство $H(\lambda_{min})$ одномерно и содержит строго положительную собственную функцию. ■

Лемма 14. Если у вещественной положительно определенной неразложимой матрицы $\mathbf{M} = (M^{\alpha\beta}) \in \mathfrak{M}(1)$, $\alpha, \beta \in \mathfrak{A}$, недиагональные элементы неположительны ($M^{\alpha\beta} \leq 0$, если $\alpha \neq \beta$), то у обратной матрицы $\mathbf{M}^{-1} = (M_{\alpha\beta})$ все элементы положительны ($M_{\alpha\beta} > 0$ при всех $\alpha, \beta \in \mathfrak{A}$).

Доказательство. Рассмотрим зависящее от вещественного параметра τ семейство матриц

$$\mathbf{M}(\tau) = \mathbf{M} - \tau \mathbf{D},$$

где \mathbf{D} — произвольная диагональная матрица с неотрицательными диагональными элементами $d(\alpha)$, нормированная условием

$$\sum_{\alpha \in \mathfrak{A}} d(\alpha) = 1, \quad d(\alpha) \geq 0. \quad (16.11)$$

Наименьшее собственное значение матрицы $\mathbf{M}(\tau)$ обозначим через $\lambda(\tau)$, а соответствующую нормированную положительную собственную функцию — через $\varphi(\tau) = \varphi(\alpha, \tau) \in H(\mathfrak{A})$. Согласно лемме 13 такая функция существует и единственна. Имеем:

$$\begin{aligned} \lambda(\tau) &= \min_{\|\mathbf{x}\|=1} (\mathbf{M}(\tau)\mathbf{x}, \mathbf{x}) = (\mathbf{M}(\tau)\varphi(\tau), \varphi(\tau)) \\ &= (\mathbf{M}(\tau')\varphi(\tau), \varphi(\tau)) + (\tau' - \tau)(\mathbf{D}\varphi(\tau), \varphi(\tau)) \\ &\geq \lambda(\tau') + (\tau' - \tau)(\mathbf{D}\varphi(\tau), \varphi(\tau)), \end{aligned}$$

где через $(,)$ обозначено скалярное произведение в пространстве $H(\mathfrak{A})$.

В силу произвольности τ и τ' имеем также

$$\lambda(\tau') = \lambda(\tau) + (\tau' - \tau)(\mathbf{D}\varphi(\tau'), \varphi(\tau')),$$

откуда вытекают неравенства

$$(\tau' - \tau)D(\tau') \geq \lambda(\tau) - \lambda(\tau') \geq (\tau' - \tau)D(\tau), \quad (16.12)$$

где

$$D(\tau) = (\mathbf{D}\varphi(\tau), \varphi(\tau)) = \sum_{\alpha \in \mathfrak{A}} d(\alpha)\varphi(\alpha, \tau)^2,$$

и согласно (16.10) при всех τ

$$1 \geq D(\tau) > 0. \quad (16.13)$$

Из (16.12), (16.13) следует, что при всех $\tau' > \tau$ выполняются неравенства

$$(\tau' - \tau) \geq \lambda(\tau) - \lambda(\tau') > 0.$$

Следовательно функция $\lambda(\tau)$ непрерывна и монотонно убывает. Далее, в силу положительной определенности матрицы $\mathbf{M}(0) = \mathbf{M}$ ее наименьшее собственное значение $\lambda(0)$ положительно. Полагая в (16.11) $\tau' = 0$, находим, что

$$\lambda(0) - \tau D(0) \geq \lambda(\tau),$$

где $D(0) > 0$. Поэтому непрерывная монотонно убывающая функция $\lambda(\tau)$ удовлетворяет неравенствам $\lambda(\tau) > 0$ при $\tau \leq 0$, $\lambda(\tau) < 0$ при $\tau > \lambda(0)D(0)^{-1}$, и уравнение $\lambda(\tau) = 0$ имеет единственное решение $\tau_0 > 0$. Соответствующая собственная функция $\varphi(\tau_0)$ строго положительна ($\varphi(\alpha, \tau_0) > 0$ при всех $\alpha \in \mathfrak{A}$) и удовлетворяет уравнению $(\mathbf{M} - \tau_0 \mathbf{D})\varphi(\tau_0) = 0$, из которого следует, что $\varphi(\tau_0) = \tau_0 \mathbf{M}^{-1} \mathbf{D} \varphi(\tau_0)$, т.е.

$$\varphi(\alpha, \tau_0) = \tau_0 \sum_{\beta \in \mathfrak{A}} M_{\alpha\beta} d(\beta) \varphi(\beta, \tau_0)$$

В частности, полагая $d(\beta) = \delta_\gamma^\beta$, находим, что $\varphi(\alpha, \tau_0) = \tau_0 M_{\alpha\gamma} \varphi(\gamma, \tau_0)$, а т.к. $\tau_0 > 0$ и $\varphi(\beta, \tau_0) > 0$ при всех $\beta \in \mathfrak{A}$, то $M_{\alpha\gamma} > 0$ при всех $\alpha, \gamma \in \mathfrak{A}$. ■

Согласно вышеизложенному прямым следствием леммы 14 является

Теорема 10. *Механические характеристики неразложимых систем со скалярным взаимодействием выражаются через их \mathbf{L} -матрицы формулами*

$$m(\alpha) = \nu(\alpha)^2, \quad U^{\alpha\beta} = L^{\alpha\beta} \nu(\alpha) \nu(\beta),$$

где

$$\nu(\alpha) = \sum_{\gamma \in \mathfrak{B}} L_{\alpha\gamma} \theta^\gamma, \quad \alpha \in \mathfrak{A},$$

\mathfrak{B} — множество N частиц, взаимодействующих с внешним полем, $\theta^\gamma, \gamma \in \mathfrak{B}$ — произвольные положительные параметры и через $L_{\alpha\gamma}$ обозначены элементы матрицы $\mathbf{L}^{-1} = (L_{\alpha\gamma})$, обратной \mathbf{L} -матрице рассматриваемой системы.

§ 17. Обратная задача рассеяния

Рассмотрим механическую систему Σ со скалярным взаимодействием, состоящую из счетного множества \mathfrak{A} частиц α, β, \dots с массами $m(\alpha), m(\beta), \dots$ и коэффициентами взаимодействия $k(\alpha, \beta) = k(\beta, \alpha) \geq 0$ пар частиц, $\alpha \neq \beta$ и частиц α с внешним полем $k(\alpha) \geq 0$. Полагая

$$k(\alpha, \alpha) = -\left(k(\alpha) + \sum_{\beta \in \mathfrak{A} \setminus \{\alpha\}} k(\alpha, \beta)\right),$$

находим, согласно (11.5), что уравнения движения частиц в таких системах

$$m(\alpha)\ddot{q}(\alpha, t) - \sum_{\beta \in \mathfrak{A}} k(\alpha, \beta)q(\beta, t) = 0 \quad (17.1)$$

одинаковы для всех трех координат $q_\alpha^1, q_\alpha^2, q_\alpha^3$ векторов отклонения. Подстановкой

$$q(\alpha, t) = \frac{\eta(\alpha, t)}{\sqrt{m(\alpha)}}$$

это уравнение приводится к стандартному виду

$$\ddot{\eta}(\alpha, t) + \sum_{\beta \in \mathfrak{A}} L^{\alpha\beta}\eta(\beta, t) = 0,$$

где через

$$L^{\alpha\beta} = -\frac{k(\alpha, \beta)}{\sqrt{m(\alpha)m(\beta)}}$$

обозначены элементы \mathbf{L} -матрицы рассматриваемой системы.

Условимся значения параметра λ , при которых уравнение

$$\lambda\varphi(\alpha) = \sum_{\beta \in \mathfrak{A}} L^{\alpha\beta}\varphi(\beta) \quad (17.2)$$

имеет ограниченное нетривиальное решение называть собственным значением, а сами решения $\varphi(\alpha)$ — собственными функциями \mathbf{L} -матрицы, и обозначать их через $\varphi(\alpha, \lambda)$

Функции

$$q(\alpha, t) = \frac{1}{\sqrt{m(\alpha)}} \operatorname{Re}(\varphi(\alpha, \lambda) e^{i\omega t}) \quad (17.3)$$

удовлетворяют уравнению (17.1) и описывают собственные колебания системы с частотой $\omega = \sqrt{\lambda}$.

Определение. Последовательность $\nu = \{\nu(k)\}_{k=0}^{\infty}$ частиц множества \mathfrak{A} называется каналом, если при всех $k \geq 1$ частица $\nu(k)$ взаимодействует только с частицами $\nu(k-1)$, $\nu(k+1)$ и, возможно, с внешним полем.

Множество всех каналов обозначается через Γ , сами каналы — через σ, ν, \dots , а частицы, образующие канал ν , обозначаются через $\nu(0), \nu(1), \nu(2) \dots$.

Частицы $\nu(k)$, $k \geq 1$, называются внутренними частицами канала ν , а частица $\nu(0)$ называется концом этого канала. Предполагается, что каждая частица может быть концом не более, чем одного канала, т.е. все концевые частицы различны.

Множество всех внутренних частиц каналов обозначим через

$$\mathfrak{A}_0 = \bigcup_{\nu \in \Gamma} \bigcup_{k=1}^{\infty} \{\nu(k)\},$$

а его дополнение — через

$$\mathfrak{A}_1 = \mathfrak{A} \setminus \mathfrak{A}_0.$$

В дальнейшем рассматриваются системы, у которых множество каналов Γ и множество \mathfrak{A}_1 конечны:

$$\#\Gamma = N < \infty, \quad \#\mathfrak{A}_1 = M < \infty.$$

Внутренние частицы $\nu(k)$, $k \geq 1$, каналов могут взаимодействовать только с частицами $\nu(k-1)$, $\nu(k+1)$ и внешним полем. Поэтому матричные элементы $L^{\alpha\nu(k)} = L^{\nu(k),\alpha}$, $\alpha \in \mathfrak{A}$, $\nu \in \Gamma$, $k \geq 1$ можно записать с помощью символов Кронекера в таком виде:

$$L^{\alpha\nu(k)} = \delta_{\nu(k-1)}^{\alpha} L^{\nu(k-1)\nu(k)} + \delta_{\nu(k)}^{\alpha} L^{\nu(k)\nu(k)} + \delta_{\nu(k+1)}^{\alpha} L^{\nu(k+1)\nu(k)}.$$

Введя для краткости обозначения

$$L^{\nu(k-1)\nu(k)} = -b_\nu(k-1), \quad L^{\nu(k)\nu(k)} = a_\nu(k), \quad (17.4)$$

находим, что при всех $\alpha \in \mathfrak{A}$, $\nu \in \Gamma$, $k \geq 1$

$$L^{\alpha\nu(k)} = L^{\nu(k)\alpha} = -b_\nu(k-1)\delta_{\nu(k-1)}^\alpha + a_\nu(k)\delta_{\nu(k)}^\alpha - b_\nu(k)\delta_{\nu(k+1)}^\alpha. \quad (17.5)$$

При всех $k \geq 1$ частицы $\nu(k)$ не принадлежат множеству \mathfrak{A}_1 , а частицы $\nu(k-1)$ принадлежат этому множеству только при $k=1$. Поэтому, если $\alpha \in \mathfrak{A}_1$, то $\delta_{\nu(k)}^\alpha = \delta_{\nu(k+1)}^\alpha = 0$, а $\delta_{\nu(k-1)}^\alpha = \delta_{\nu(0)}^\alpha \delta_1^k$, откуда согласно (17.5) следует, что при всех $\alpha \in \mathfrak{A}_1$, $\nu \in \Gamma$, $k \geq 1$

$$L^{\alpha\nu(k)} = L^{\nu(k)\alpha} = -b_\nu(0)\delta_{\nu(0)}^\alpha \delta_1^k. \quad (17.6)$$

Если $\alpha \in \mathfrak{A}_0$, то при некотором $\nu \in \Gamma$ и $k \geq 1$ имеем $\alpha = \nu(k)$, и согласно (17.2), (17.5)

$$\begin{aligned} \lambda\varphi(\nu(k)) &= \sum_{\beta \in \mathfrak{A}} L^{\nu(k)\beta} \varphi(\beta) \\ &= \sum_{\beta \in \mathfrak{A}} (-b_\nu(k-1)\delta_{\nu(k-1)}^\beta + a_\nu(k)\delta_{\nu(k)}^\beta - b_\nu(k)\delta_{\nu(k+1)}^\beta) \varphi(\beta) \\ &= -b_\nu(k-1)\varphi(\nu(k-1)) + a_\nu(k)\varphi(\nu(k)) - b_\nu(k)\varphi(\nu(k+1)). \end{aligned}$$

Следовательно, при всех $\nu \in \Gamma$ и $k \geq 1$ собственные функции **L**-матрицы удовлетворяют уравнениям

$$-b_\nu(k-1)\varphi(\nu(k-1)) + a_\nu(k)\varphi(\nu(k)) - b_\nu(k)\varphi(\nu(k+1)) = \lambda\varphi(\nu(k)) \quad (17.7)$$

Имеем далее

$$\lambda\varphi(\alpha) = \sum_{\beta \in \mathfrak{A}_1} L^{\alpha\beta} \varphi(\beta) + \sum_{\beta \in \mathfrak{A}_0} L^{\alpha\beta} \varphi(\beta),$$

где

$$\sum_{\beta \in \mathfrak{A}_0} L^{\alpha\beta} \varphi(\beta) = \sum_{\nu \in \Gamma} \sum_{k=1}^{\infty} L^{\alpha\nu(k)} \varphi(\nu(k)),$$

откуда при $\alpha \in \mathfrak{A}_1$ согласно (17.6) следует, что

$$\sum_{\beta \in \mathfrak{A}_1} L^{\alpha\beta} \varphi(\beta) = \sum_{\nu \in \Gamma} \sum_{k=1}^{\infty} -b_{\nu}(0) \delta_{\nu(0)}^{\alpha} \delta_1^k \varphi(\nu(k)) = \sum_{\nu \in \Gamma} -b_{\nu}(0) \delta_{\nu(0)}^{\alpha} \varphi(\nu(1)).$$

Поэтому при всех $\alpha \in \mathfrak{A}_1$ собственные функции $\widehat{\mathbf{L}}$ -матрицы удовлетворяют равенствам

$$\sum_{\beta \in \mathfrak{A}_1} (L^{\alpha\beta} - \lambda \delta_{\beta}^{\alpha}) \varphi(\beta) = \sum_{\nu \in \Gamma} -b_{\nu}(0) \delta_{\nu(0)}^{\alpha} \varphi(\nu(1)). \quad (17.8)$$

Обозначим через \mathbf{L}_1 действующий в пространстве $H(\mathfrak{A}_1)$ линейный положительно определенный оператор с матрицей

$$\mathbf{L}_1 = (L^{\alpha\beta}), \quad \alpha, \beta \in \mathfrak{A}_1, \quad (17.9)$$

через

$$\begin{aligned} 0 < \lambda(1) = \lambda(2) = \dots = \lambda(j_1) = \mu(1) < \lambda(j_1 + 1) = \dots \\ = \lambda(j_{p-1}) = \mu(p-1) < \lambda(j_{p-1} + 1) = \dots = \lambda(p_j) = \mu(p) \end{aligned} \quad (17.10)$$

($j_p = M = \#\mathfrak{A}_1$) его собственные значения и через $g(\alpha, j)$, $j \in [M]$, соответствующие ортонормированные собственные функции. Элементы $E(\alpha, \beta; s)$, $\alpha, \beta \in \mathfrak{A}_1$ матриц ортопроекторов $\mathbf{E}(s)$ на инвариантные подпространства $H(\mu(s))$ оператора \mathbf{L}_1 равны

$$E(\alpha, \beta; s) = \sum_{j_{s-1} < j \leq j_s} g(\alpha, j) \overline{g(\beta, j)} \quad (17.11)$$

Резольвента

$$R(\lambda) = (\mathbf{L}_1 - \lambda \mathbf{I})^{-1}$$

существует при всех $\lambda \notin \{\mu(1), \mu(2), \dots, \mu(p)\}$ и ее матричные элементы равны

$$R(\alpha, \beta; \lambda) = \sum_{s=1}^p \frac{E(\alpha, \beta; s)}{\mu(s) - \lambda}. \quad (17.12)$$

Поэтому при всех λ , не принадлежащих спектру матрицы \mathbf{L}_1 , равенства (17.8) эквивалентны следующим:

$$\begin{aligned} \varphi(\alpha) &= \sum_{\beta \in \mathfrak{A}_1} R(\alpha, \beta; \lambda) \sum_{\nu \in \Gamma} b_\nu(0) \delta_{\nu(0)}^\beta \varphi(\nu(1)) = \\ &= \sum_{\nu \in \Gamma} R(\alpha, \nu(0); \lambda) b_\nu(0) \varphi(\nu(1)), \end{aligned}$$

то есть

$$\varphi(\alpha) = \sum_{\nu \in \Gamma} R(\alpha, \nu(0); \lambda) b_\nu(0) \varphi(\nu(1)). \quad (17.13)$$

Полагая здесь $\alpha = \sigma(0)$, $\sigma \in \Gamma$, получим равенства

$$\varphi(\sigma(0)) = \sum_{\nu \in \Gamma} R(\sigma(0), \nu(0); \lambda) b_\nu(0) \varphi(\nu(1)), \quad (17.14)$$

связывающие значения собственных функций \mathbf{L} -матрицы на концевых частицах с их значениями на внутренних частицах каналов. Эти равенства называются *граничным условием*.

Следующая лемма является прямым следствием равенств (17.7), (17.13), (17.14).

Лемма 15. *При всех λ , не принадлежащих спектру матрицы \mathbf{L}_1 , заданная на множестве \mathfrak{A}_0 функция $\varphi(\alpha)$ тогда и только тогда равна сужению на это множество собственной функции \mathbf{L} -матрицы, когда она является ограниченным решением уравнений (17.7) и удовлетворяет граничному условию (17.14). При этом значение собственной функции \mathbf{L} -матрицы на множестве \mathfrak{A}_1 определяется формулой (17.13).*

Каналы называются однородными, если массы $m(\nu(k))$ и коэффициенты $a_\nu(k)$, $b_\nu(k)$ не зависят от k , то есть

$$m(\nu(k)) = m(\nu), \quad a_\nu(k) = a(\nu), \quad b_\nu(k) = b(\nu).$$

В этом случае уравнения (17.7) приводятся к виду

$$b(\nu)y_\nu(k-1) + a(\nu)y_\nu(k) - b(\nu)y_\nu(k+1) = \lambda y_\nu(k) \quad (17.15)$$

то есть являются уравнениями с постоянными коэффициентами.

При всех $\theta_\nu \neq 0$ и $\lambda = a(\nu) - b(\nu)(\theta_\nu + \theta_\nu^{-1})$ функции $e_\nu(k) = \theta_\nu^k$, $e_\nu(-k) = \theta_\nu^{-k}$ удовлетворяют уравнению (17.15), и эти решения линейно независимы, если $\theta_\nu \neq \pm 1$. Поэтому при $\theta_\nu \neq \pm 1$ общее решение уравнения (17.15) равно их линейной комбинации:

$$e_\nu(k)n(\nu) + e_\nu(-k)m(-\nu).$$

Определение. Канал $\nu \in \Gamma$ называется асимптотически однородным, если существуют отличные от нуля пределы

$$\lim_{k \rightarrow \infty} a_\nu(k) = a(\nu), \quad \lim_{k \rightarrow \infty} b_\nu(k) = b(\nu), \quad \lim_{k \rightarrow \infty} m(\nu(k)) = m(\nu),$$

и

$$\sum_{k=1}^{\infty} k(|a_\nu(k) - a(\nu)| + |b_\nu(k) - b(\nu)|) < \infty.$$

В этом случае при всех θ_ν , лежащих на единичной окружности $|\theta_\nu| = 1$ и отличных от ± 1 , уравнение (17.7) с

$$\lambda = a(\nu) - b(\nu)(\theta_\nu + \theta_\nu^{-1}) \tag{17.16}$$

имеет два линейно независимых решения

$$e_\nu(k), \quad e_\nu(-k) = \overline{e_\nu(k)} \tag{17.17}$$

удовлетворяющих при $k \rightarrow \infty$ асимптотическим равенствам

$$e_\nu(\pm k) = \theta_\nu^{\pm k}(1 + o(1)). \tag{17.18}$$

Эти решения называются решениями Иоста. Общее решение уравнения (17.7) равно их линейной комбинации

$$\varphi_\nu(k) = e_\nu(k)n(\nu) + e_\nu(-k)m(\nu).$$

Из равенства (17.16) следует, что когда θ_ν пробегает единичную окружность $|\theta_\nu| = 1$, спектральный параметр λ дважды пробегает сегмент $[a(\nu) - 2b(\nu), a(\nu) + 2b(\nu)]$, концы которого получаются при $\theta_\nu = \pm 1$.

Поэтому решение Иоста существует только при

$$\lambda \in (A_\nu, B_\nu), \quad (17.19)$$

где

$$A_\nu = a(\nu) - 2b(\nu), \quad B_\nu = a(\nu) + 2b(\nu). \quad (17.19')$$

Параметр θ_ν связан со спектральным параметром $\lambda \in (A_\nu, B_\nu)$ уравнением (17.16), решая которое относительно θ_ν получим два возможных значения

$$\left(\frac{a(\nu) - \lambda}{2b(\nu)} \right) \pm i \sqrt{1 - \left(\frac{a(\nu) - \lambda}{2b(\nu)} \right)^2}.$$

Для определенности через θ_ν мы будем обозначать решение с положительной мнимой частью

$$\left(\frac{a(\nu) - \lambda}{2b(\nu)} \right) + i \sqrt{1 - \left(\frac{a(\nu) - \lambda}{2b(\nu)} \right)^2}.$$

где, согласно (17.19')

$$\operatorname{Im} \theta_\nu = \sqrt{1 - \left(\frac{a(\nu) - \lambda}{2b(\nu)} \right)^2} = \frac{1}{2b(\nu)} \sqrt{(\lambda - A_\nu)(B_\nu - \lambda)} > 0 \quad (17.20)$$

Следовательно, θ_ν является функцией спектрального параметра λ , и, если желательно это подчеркнуть, мы будем пользоваться таким обозначением:

$$\theta_\nu = \theta(\nu, \lambda).$$

Решения Иоста для краткости мы будем обозначать так:

$$e_\nu(k) = e_\nu, \quad e_\nu(-k) = \overline{e_\nu(k)} = \overline{e_\nu},$$

а когда нужно подчеркнуть их зависимость от спектрального параметра λ — так:

$$e_\nu(k) = e_\nu(k, \lambda).$$

Конечноразностный аналог Вронскиана решений Иоста

$$\begin{aligned} \{e_\nu, \bar{e}_\nu\}(k) &= b_\nu \{e_\nu(k+1)\overline{e_\nu(k)} - e_\nu(k)\overline{e_\nu(k+1)}\} = \\ &= 2i \operatorname{Im}(b_\nu(k)e_\nu(k+1)\overline{e_\nu(k)}) \end{aligned}$$

не зависит от k , откуда согласно (17.18) следует, что

$$\{e_\nu, \bar{e}_\nu\}(k) = \lim_{k \rightarrow \infty} \{e_\nu, \bar{e}_\nu\}(k) = b(\nu)(\theta_\nu - \bar{\theta}_\nu) = 2ib(\nu)\operatorname{Im} \theta_\nu$$

и, согласно (17.20)

$$\operatorname{Im}(b_\nu(k)e_\nu(k+1)\overline{e_\nu(k)}) = d(\nu), \quad (17.21)$$

где

$$d(\nu) = d(\nu, \lambda) = \frac{1}{2} \sqrt{(\lambda - A_\nu)(B_\nu - \lambda)} > 0.$$

Если все каналы рассматриваемой системы асимптотически однородны, то каждое уравнение системы (17.7), $\nu \in \Gamma$, имеет решения Иоста только при тех значениях λ , которые принадлежат соответствующему интервалу (A_ν, B_ν) . Поэтому все уравнения этой системы имеют решения Иоста только при тех λ , которые принадлежат пересечению этих интервалов, т.е. при

$$\lambda \in \bigcap_{\nu \in \Gamma} (A_\nu, B_\nu).$$

Это пересечение не пусто тогда и только тогда, когда выполняются такие неравенства

$$A = \max_{\nu \in \Gamma} A_\nu < B = \min_{\nu \in \Gamma} B_\nu \quad (17.22)$$

и в этом случае

$$\bigcap_{\nu \in \Gamma} (A_\nu, B_\nu) = (A, B). \quad (17.22')$$

В дальнейшем рассматриваются механические системы с асимптотически однородными каналами, в которых 1: концевые частицы каналов образуют вполне \mathbf{L}_1 -продолжимое множество; 2: кроме неравенства (17.22) выполняется также неравенство

$$\mu(p) < A, \quad (17.23)$$

где $\mu(p)$ — наибольшее собственное значение матрицы \mathbf{L}_1 .

З а м е ч а н и е. В силу следствия леммы 10, в таких системах \mathbf{L}_1 -матрица не имеет собственных функций, тождественно равных нулю на множестве концевых частиц каналов. Согласно предыдущему в таких системах при $\lambda \in (A, B)$ уравнения (17.7), $\nu \in \Gamma$, имеют решения Йоста $e_\nu(k)$, $\overline{e_\nu(k)}$, все решения этих уравнений представимы в виде

$$\varphi(\nu(k, \lambda)) = e_\nu(k)n(\nu) + \overline{e_\nu(k)}m(\nu) \quad (17.24)$$

и ограничены в силу асимптотических равенств (17.18).

Отсюда согласно Лемме 15 следует, что множество сужений на подмножество \mathfrak{A}_0 собственных функций \mathbf{L} -матрицы с собственным значением $\lambda \in (A, B)$ совпадает с множеством функций (17.24), удовлетворяющих граничному условию

$$e_\nu(0)n(\nu) + \overline{e_\nu(0)}m(\nu) = \sum_{\sigma \in \Gamma} R(\nu(0), \sigma(0), \lambda) b_\sigma(0) (e_\sigma(1)n(\sigma) + \overline{e_\sigma(1)}m(\sigma)),$$

которое эквивалентно равенству

$$\begin{aligned} & \sum_{\sigma \in \Gamma} (e_\nu(0)\delta_\sigma^\nu - R(\nu(0), \sigma(0), \lambda) b_\sigma(0) e_\sigma(1)) n(\sigma) \\ &= - \sum_{\sigma \in \Gamma} (\overline{e_\nu(0)}\delta_\sigma^\nu - R(\nu(0), \sigma(0), \lambda) b_\sigma(0) \overline{e_\sigma(1)}) m(\sigma). \end{aligned} \quad (17.25)$$

Введем Гильбертово пространство $H(\Gamma)$ функций $f(\nu)$, $\nu \in \Gamma$, с обычным скалярным произведением и обозначим через $\mathbf{R}_0(\lambda)$, $\mathbf{E}(k)$, $\mathbf{A}(k)$, $\mathbf{B}(k)$, \mathbf{V} и \mathbf{D} действующие в этом пространстве линейные операторы с матрицами

$$\begin{aligned}\mathbf{R}_0(\lambda) &= (R(\nu(0), \sigma(0), \lambda)), & \mathbf{E}(k) &= (\delta_\sigma^\nu e_\nu(k)), \\ \mathbf{A}(k) &= (\delta_\sigma^\nu a_\nu(k)), & \mathbf{B}(k) &= (\delta_\sigma^\nu b_\nu(k)), \\ \mathbf{V} &= \lim_{k \rightarrow \infty} \hat{B}(k) = (\delta_\sigma^\nu b_\nu(k)), & \mathbf{D} &= (\delta_\sigma^\nu \sqrt{d(\nu)})\end{aligned}$$

где $\nu, \sigma \in \Gamma$ и $d(\nu) = \frac{1}{2} \sqrt{(\lambda - A_\nu)(B_\nu - \lambda)} \geq \frac{1}{2} \sqrt{(\lambda - A)(B - \lambda)} > 0$. Матрицы $E(k)$ удовлетворяют уравнению

$$\mathbf{V}(k-1)\mathbf{E}(k-1) + \mathbf{A}(k)\mathbf{E}(k) - \mathbf{B}(k)\mathbf{E}(k+1) = \lambda\mathbf{E}(k),$$

эквивалентному системе уравнений (17.7), их вронскиан

$$\begin{aligned}\{\mathbf{E}, \mathbf{E}^*\}(k) &= \mathbf{E}(k)^* \mathbf{B}(k) \mathbf{E}(k+1) - \mathbf{E}(k+1)^* \mathbf{B}(k) \mathbf{E}(k) \\ &= 2i \operatorname{Im} \mathbf{E}(k)^* \mathbf{B}(k) \mathbf{E}(k+1) = -2i \operatorname{Im} \mathbf{E}(k+1)^* \mathbf{B}(k) \mathbf{E}(k)\end{aligned}$$

не зависит от k и согласно (17.21)

$$\operatorname{Im} \mathbf{E}(k+1)^* \mathbf{B}(k) \mathbf{E}(k)^* = \mathbf{D}^2, \quad (17.26)$$

где \mathbf{D} — диагональная матрица с положительными элементами $\sqrt{d(\nu)}$.

Сужения $\varphi(\nu(k), \lambda)$ собственных функций \mathbf{L} -матрицы на множество \mathfrak{A} и коэффициенты $n(\nu)$, $m(\nu)$ в формуле (17.24), рассматриваемые как функции параметра ν , т.е. как векторы пространства $H(\Gamma)$, будем обозначать $\varphi(k, \lambda)$, \mathbf{n} , \mathbf{m} .

В этих обозначениях формула (17.24) и граничное условие (17.25) запишутся так:

$$\begin{aligned}\varphi(k, \lambda) &= \mathbf{E}(k)\mathbf{n} + \mathbf{E}(k)^*\mathbf{m}, \\ (\mathbf{E}(0) - \mathbf{R}_0(\lambda)\mathbf{B}(0)\mathbf{E}(1))\mathbf{n} &= -(\mathbf{E}(0)^* - \mathbf{R}_0(\lambda)\mathbf{B}(0)\mathbf{E}(1)^*)\mathbf{m}\end{aligned}$$

или короче так:

$$\varphi(k, \lambda) = \mathbf{E}(k)\mathbf{n} + \mathbf{E}(-k)\mathbf{m}, \quad (17.27)$$

$$\mathbf{T}(1)\mathbf{n} = -\mathbf{T}(-1)\mathbf{m}, \quad (17.28)$$

где

$$\mathbf{T}(\pm 1) = \mathbf{E}(\pm 0) - \mathbf{R}_0(\lambda)\mathbf{B}(0)\mathbf{E}(\pm 1), \quad (17.29)$$

и по определению $\mathbf{E}(-k) = \mathbf{E}(k)^*$, $k = 0, 1, 2, \dots$.

Заметим, что матрица \mathbf{M} обратима, если ее мнимая часть $\mathbf{C} = \text{Im}\mathbf{M} = \frac{1}{2i}(\mathbf{M} - \mathbf{M}^*)$ является положительно (или отрицательно) определенной матрицей. Действительно, из равенства

$$\text{Im}(\mathbf{M}\mathbf{f}, \mathbf{f}) = (\mathbf{C}\mathbf{f}, \mathbf{f})$$

следует, что при всех $\mathbf{f} \neq 0$ $\text{Im}(\mathbf{M}\mathbf{f}, \mathbf{f}) > 0$ (или < 0). Следовательно, $\mathbf{M}\mathbf{f} \neq 0$, если $\mathbf{f} \neq 0$ и матрица \mathbf{M} обратима.

Лемма 16. Матрицы $\mathbf{E}(\pm 0)$, $\mathbf{E}(\pm 1)$ и $\mathbf{T}(\pm 1)$ обратимы при всех $\lambda \in (A, B)$.

Доказательство. В рассматриваемых системах все собственные значения $\mu(s)$ матрицы \mathbf{L} удовлетворяют неравенствам $\mu(s) < A < \lambda \in (A, B)$, откуда согласно (17.12) следует, что при $\lambda \in (A, B)$ матрица $\mathbf{R}_0(\lambda)$ корректно определена и эрмитова. Далее, из определения (17.29) матриц $\mathbf{T}(\pm 1)$, следует, что

$$\mathbf{E}(\mp 1)\mathbf{B}(0)\mathbf{T}(\pm 1) = \mathbf{E}(\mp 1)\mathbf{B}(0)\mathbf{E}(\pm 0) - \mathbf{E}(\mp 1)\mathbf{B}(0)\mathbf{R}_0(\lambda)\mathbf{B}(0)\mathbf{E}(\pm 1),$$

и так как $\mathbf{E}(-k) = \mathbf{E}(k)^*$, второе слагаемое в правой части этого равенства является эрмитовой матрицей. Поэтому

$$\text{Im}(\mathbf{E}(\mp 1)\mathbf{B}(0)\mathbf{T}(\pm 1)) = \text{Im}(\mathbf{E}(\mp 1)\mathbf{B}(0)\mathbf{E}(\pm 0)) = \mp \mathbf{D}^2,$$

где \mathbf{D} диагональная положительно определенная матрица, откуда следует, матрицы $\mathbf{E}(\mp 1)\mathbf{B}(0)\mathbf{T}(\pm 1)$, $\mathbf{E}(\mp 1)\mathbf{B}(0)\mathbf{E}(\pm 0)$, а, значит, и их сомножители $\mathbf{E}(\pm 0)$, $\mathbf{E}(\pm 1)$ и $\mathbf{T}(\pm 1)$ обратимы. ■

Из равенства (17.28) и обратимости матрицы $\mathbf{T}(-1)$ следует, что граничное условие выполняется тогда и только тогда, когда $\mathbf{m} = \mathbf{\Pi n}$, где

$$\mathbf{\Pi} = -\mathbf{T}(-1)^{-1}\mathbf{T}(1). \quad (17.30)$$

Следовательно, координаты векторов

$$\varphi(k, \lambda) = (\mathbf{E}(k) + \mathbf{E}(k)^*\mathbf{\Pi})\mathbf{n} \quad (17.31)$$

удовлетворяют уравнениям (17.7) и граничному условию (17.14), т.е. равны сужениям $\varphi(\nu(k), \lambda)$ на множество \mathfrak{A}_0 собственных функций $\varphi(\alpha, \lambda)$ \mathbf{L} -матрицы:

$$\varphi(\nu(k), \lambda) = \sum_{\sigma \in \Gamma} \left(e_\nu(k)\delta_\nu^\sigma + \overline{e_\nu(k)}\Pi(\nu, \sigma) \right) n(\sigma),$$

где через $\Pi(\nu, \sigma)$ обозначены элементы матрицы $\mathbf{\Pi}$. Поэтому собственные функции \mathbf{L} -матрицы $\varphi_\sigma(\alpha, \lambda)$, $\sigma \in \Gamma$, сужение которых на множество \mathfrak{A}_0 равно

$$\varphi_\sigma(\nu(k), \lambda) = e_\nu(k)\delta_\nu^\sigma + \overline{e_\nu(k)}\Pi(\nu, \sigma),$$

образуют базис в подпространстве ее собственных функций с данным собственным значением $\lambda \in (A, B)$. Согласно (17.3) собственные колебания системы с частотой $\omega = \sqrt{\lambda}$ описывают линейные комбинации функций

$$q_\sigma(\nu(k), t) = \frac{1}{\sqrt{m(\nu(k))}} \operatorname{Re} \left(e_\nu(k)\delta_\nu^\sigma + \overline{e_\nu(k)}\Pi(\nu, \sigma) \right) e^{i\omega t},$$

которые при $k \rightarrow \infty$ удовлетворяют асимптотическим равенствам

$$q_\sigma(\nu(k), t) = \frac{1}{\sqrt{m(\nu)}} \operatorname{Re} \left(\theta_\nu^k \delta_\nu^\sigma + \theta_\nu^{-k} \Pi(\nu, \sigma) \right) e^{i\omega t} + o(1).$$

Введя обозначения $\theta_\nu = e^{i\omega(\nu)}$, $\Pi(\nu, \sigma) = |\Pi(\nu, \sigma)|e^{i\varphi(\nu, \sigma)}$, находим, что

$$q_\sigma(\nu(k), t) =$$

$$\frac{1}{\sqrt{m(\nu)}} \left(\delta_\nu^\sigma \cos(\omega(\nu)k + \omega t) + |\Pi(\nu, \sigma)| \cos(-\omega(\nu)k + \omega t + \varphi(\nu, \sigma)) \right) + o(1). \quad (17.32)$$

Функция $\delta_\nu^\sigma \cos(\omega(\nu)k + \omega t)$ описывает бегущую из бесконечности по каналу σ падающую волну, а функции $|\Pi(\nu, \sigma)| \cos(-\omega(\nu)k + \omega t + \varphi(\nu, \sigma))$ описывают уходящие в бесконечность отраженные волны, возникшие в результате рассеяния падающей волны на частицах множества \mathfrak{A}_1 и на неоднородностях каналов. Падающую и отраженные волны можно наблюдать на достаточно удаленных участках каналов. Поэтому матрица $\mathbf{\Pi}$ вычислима. Эта матрица полностью определяет рассеянные волны и называется поэтому матрицей рассеяния.

Лемма 17. Матрица $\mathbf{V} = \mathbf{D}\mathbf{\Pi}\mathbf{D}^{-1}$ унитарна и симметрична.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Пусть \mathbf{f} — произвольный вектор пространства $H(\Gamma)$ и $\mathbf{g} = \mathbf{\Pi}\mathbf{f}$. Тогда согласно (17.29), (17.30)

$$\begin{aligned} 0 &= \mathbf{T}(-1)\mathbf{g} + \mathbf{T}(1)\mathbf{f} \\ &= \mathbf{E}(-0)\mathbf{g} + \mathbf{E}(0)\mathbf{f} - \mathbf{R}_0(\lambda)\mathbf{B}(0)(\mathbf{E}(-1)\mathbf{g} + \mathbf{E}(1)\mathbf{f}) \end{aligned}$$

и, т.к. оператор $\mathbf{R}_0(\lambda)$ самосопряженный, то

$$0 = \text{Im} \left(\mathbf{E}(-0)\mathbf{g} + \mathbf{E}(0)\mathbf{f}, \mathbf{B}(0)\mathbf{E}(-1)\mathbf{g} + \mathbf{B}(0)\mathbf{E}(1)\mathbf{f} \right),$$

откуда в силу перестановочности операторов $\mathbf{E}(k)$, $\mathbf{B}(0)$ и равенств $\mathbf{E}(-k) = \mathbf{E}(k)^*$ следует что

$$\begin{aligned} 0 &= \text{Im} \left\{ (\mathbf{E}(1)\mathbf{B}(0)\mathbf{E}(0)^*\mathbf{g}, \mathbf{g}) + (\mathbf{E}(1)^*\mathbf{B}(0)\mathbf{E}(0)^*\mathbf{g}, \mathbf{f}) \right. \\ &\quad \left. + (\mathbf{f}, \mathbf{E}(1)^*\mathbf{B}(0)\mathbf{E}(0)^*\mathbf{g}) + (\mathbf{f}, \mathbf{E}(1)\mathbf{B}(0)\mathbf{E}(0)^*\mathbf{f}) \right\}. \end{aligned}$$

Так как сумма второго и третьего слагаемых в фигурной скобке вещественна, то

$$\begin{aligned} 0 &= \text{Im}(\mathbf{E}(1)\mathbf{B}(0)\mathbf{E}(0)^*\mathbf{g}, \mathbf{g}) - \text{Im}(\mathbf{E}(1)\mathbf{B}(0)\mathbf{E}(0)^*\mathbf{f}, \mathbf{f}) \\ &= ((\text{Im}\mathbf{M})\mathbf{g}, \mathbf{g}) - ((\text{Im}\mathbf{M})\mathbf{f}, \mathbf{f}), \end{aligned}$$

где $\mathbf{M} = \mathbf{E}(1)\mathbf{B}(0)\mathbf{E}(0)^*$ и согласно (17.26) $\text{Im}\mathbf{M} = \mathbf{D}^2$. Поэтому

$$0 = (\mathbf{D}^2\mathbf{g}, \mathbf{g}) - (\mathbf{D}^2\mathbf{f}, \mathbf{f}) = (\mathbf{D}\Pi\mathbf{f}, \mathbf{D}\Pi\mathbf{f}) - (\mathbf{D}\mathbf{f}, \mathbf{D}\mathbf{f}),$$

т.е.

$$(\mathbf{V}\mathbf{p}, \mathbf{V}\mathbf{p}) = (\mathbf{p}, \mathbf{p}),$$

где

$$\mathbf{V} = \mathbf{D}\Pi\mathbf{D}^{-1}, \quad \mathbf{p} = \mathbf{D}\mathbf{f}.$$

Из этих равенств в силу произвольности вектора $\mathbf{p} \in H(\Gamma)$ следует, что матрица \mathbf{V} унитарна.

Матрица \mathbf{A} симметрична, если $\mathbf{A} = \overline{\mathbf{A}^*}$, где через $\overline{\mathbf{A}}$ обозначается матрица с элементами, комплексно сопряженными элементам матрицы \mathbf{A} . Из определения матриц $\mathbf{T}(\pm 1)$ и вещественности матрицы $\mathbf{R}_0(\lambda)$ следует, что $\mathbf{T}(-1) = \overline{\mathbf{T}(1)}$. Поэтому

$$\overline{\Pi} = \overline{(-\mathbf{T}(+1)^{-1}\mathbf{T}(-1))} =$$

$$-\mathbf{T}(-1)^{-1}\mathbf{T}(1) = (-\mathbf{T}(-1)^{-1}\mathbf{T}(1))^{-1} = \Pi^{-1}.$$

Наконец, т.к. матрица \mathbf{D} вещественна и матрица $\mathbf{V} = \mathbf{D}\Pi\mathbf{D}^{-1}$ унитарна, то $\mathbf{V}^* = \mathbf{V}^{-1} = \mathbf{D}\Pi^{-1}\mathbf{D}^{-1} = \overline{(\mathbf{D}\Pi\mathbf{D}^{-1})} = \overline{\mathbf{V}}$ и $\mathbf{V} = \overline{\mathbf{V}^*}$

■

Согласно вышеизложенному векторы (17.31) удовлетворяют граничному условию

$$\varphi(0, \lambda) = \mathbf{R}_0(\lambda)\mathbf{B}(0)\varphi(1, \lambda),$$

откуда в силу произвольности вектора \mathbf{n} следует, что матрица

$$\mathbf{U}(k, \lambda) = \mathbf{E}(k) + \mathbf{E}(k)^*\Pi \tag{17.33}$$

удовлетворяет следующему граничному условию

$$\mathbf{U}(0, \lambda) = \mathbf{R}_0(\lambda)\mathbf{B}(0)\mathbf{U}(1, \lambda). \tag{17.34}$$

Из обратимости и перестановочности диагональных матриц $\mathbf{E}(\pm 0)$, $\mathbf{E}(\pm 1)$, $\mathbf{B}(0)$, \mathbf{B} и формул (17.30), (17.31) следует

$$\mathbf{U}(1, \lambda) = \mathbf{E}(-1)\mathbf{T}(-1)^{-1}(\mathbf{T}(-1)\mathbf{E}(1) - \mathbf{T}(1)\mathbf{E}(-1))\mathbf{E}(-1)^{-1}$$

и так как, согласно (17.29)

$$\begin{aligned} & \mathbf{T}(-1)\mathbf{E}(1) - \mathbf{T}(1)\mathbf{E}(-1) \\ = & \mathbf{E}(-0)\mathbf{E}(1) - \mathbf{E}(0)\mathbf{E}(-1) - \mathbf{R}_0(\lambda)\mathbf{B}(0)(\mathbf{E}(-1)\mathbf{E}(1) - \mathbf{E}(1)\mathbf{E}(-1)) \\ = & \mathbf{B}(0)^{-1}(\mathbf{E}(1)\mathbf{B}(0)\mathbf{E}(0)^* - \mathbf{E}(0)\mathbf{B}(0)\mathbf{E}(1)^*) = 2i\mathbf{B}(0)^{-1}\mathbf{D}^2, \end{aligned}$$

то

$$\mathbf{U}(1, \lambda) = 2i\mathbf{E}(-1)\mathbf{T}(-1)^{-1}\mathbf{B}(0)^{-1}\mathbf{D}^2\mathbf{E}(-1)^{-1},$$

откуда следует обратимость матрицы $\mathbf{U}(1, \lambda)$:

$$\mathbf{U}(1, \lambda)^{-1} = \frac{1}{2i}\mathbf{E}(-1)\mathbf{D}^2\mathbf{B}(0)\mathbf{T}(-1)\mathbf{E}(-1)^{-1}.$$

Поэтому равенство (17.34) эквивалентно следующему

$$\mathbf{R}_0(\lambda) = \mathbf{U}(0, \lambda)\mathbf{U}(1, \lambda)^{-1}\mathbf{B}(0)^{-1}.$$

Из определения матрицы $\mathbf{R}_0(\lambda)$ и формул (17.11), (17.12) следует, что

$$\mathbf{R}_0(\lambda) = \sum_{s=1}^p \frac{\mathcal{E}(s)}{\mu(s) - \lambda},$$

где

$$\mathcal{E}(s) = (E(\nu(0), \sigma(0), s)), \quad \nu, \sigma \in \Gamma, \quad (17.35)$$

$$E(\alpha, \beta, s) = \sum_{j_{s-1} < j \leq j_s} g(\alpha, j)\overline{g(\beta, j)}, \quad \alpha, \beta \in \mathfrak{A}_1.$$

Поэтому

$$-\sum_{s=1}^p \frac{\mathcal{E}(s)}{\lambda - \mu(s)} = \sum_{s=1}^p \frac{\mathcal{E}(s)}{\mu(s) - \lambda} = \mathbf{Q}(\lambda), \quad (17.36)$$

где

$$\mathbf{Q}(\lambda) = \mathbf{U}(0, \lambda)\mathbf{U}(1, \lambda)^{-1}\mathbf{B}(0)^{-1} \quad (17.37)$$

В задачах рассеяния систему Σ удобно разбить на две взаимодействующие между собой подсистемы Σ_1 и Σ_0 . Подсистема Σ_1 состоит из частиц множества \mathfrak{A}_1 , взаимодействующих между собой и с внешним полем. Напомним, что \mathbf{L} -матрицу подсистемы Σ_1 мы обозначили через \mathbf{L}_1 (см. формулу (17.9)). Подсистема Σ_0 состоит из внутренних частиц $\nu(k)$, $k \geq 1$ каналов $\nu \in \Gamma$. Взаимодействие между подсистемами Σ_1 и Σ_0 создается парами частиц $\nu(0)$ и $\nu(1)$, $\nu \in \Gamma$. Матрица $B(0)$ называется коэффициентом взаимодействия этих подсистем.

Предполагается, что для наблюдений доступна только часть системы Σ , состоящая из достаточно удаленных участков каналов, в которых они практически однородны. Эту наблюдаемую часть мы будем называть окрестностью бесконечности.

Каналы играют роль волноводов, в которых на бесконечности возбуждаются собственные колебания системы Σ . Эти колебания образуют падающие волны, бегущие по каналам из бесконечности к подсистеме Σ_1 и возбуждающие ее колебания, которые вместе с неоднородностями каналов образуют отраженные волны. Падающие и отраженные волны описываются формулой (17.32) и наблюдаемы в окрестности бесконечности. Из этой формулы видно, что при $\lambda \in (A, B)$ в каждом канале можно возбудить собственные колебания с частотой $\omega = \sqrt{\lambda}$, наблюдаемые в окрестности бесконечности. Если же $\lambda \notin (A, B)$, все собственные колебания с частотой $\omega = \sqrt{\lambda}$ образуют в некоторых каналах стоячие волны, не наблюдаемые в окрестности бесконечности, т.к. их амплитуда быстро стремится к нулю при $k \rightarrow \infty$. Поэтому наблюдая в окрестности бесконечности собственные колебания с частотами $\omega(k) = \frac{k}{N}$, где $k = 1, 2, \dots$, и N - число каналов, можно найти первую $\omega(k_1)$ и последнюю $\omega(k_2)$ частоты, при которых эти колебания наблюдаемы в любом канале, т.е. найти сегмент $[A_1, B_1]$, $A_1 = \omega(k_1)^2$, $B_1 = \omega(k_2)^2$, лежащий в интервале (A, B) . Затем, наблюдая в

окрестности бесконечности падающие и отраженные волны, можно с помощью формулы (17.31) вычислить матрицу рассеяния $\mathbf{\Pi}$ для частот $\omega \in [\sqrt{A_1}, \sqrt{B_1}]$.

Определение. Сегмент $[A_1, B_1] \subset (A, B)$ и матрица рассеяния $\mathbf{\Pi}$ для частот $\omega \in [\sqrt{A_1}, \sqrt{B_1}]$ называются данными рассеяния.

В обратной задаче рассеяния требуется выяснить, что нужно знать о каналах, чтобы по наблюдаемым данным рассеяния можно было вычислить \mathbf{L}_1 -матрицу подсистемы Σ_1 .

Лемма 18. Если известна матрица взаимодействия $\mathbf{V}(0)$ подсистем Σ_1 и Σ_0 и значения решений Иоста $e_\nu(k)$ при $\nu \in \Gamma$, $k = 0, 1$, то по данным рассеяния вычисляются собственные значения $\mu(1), \mu(2), \dots, \mu(p)$ \mathbf{L}_1 -матрицы подсистемы Σ_1 и матрицы $\mathcal{E}(s)$, $s = 1, 2, \dots, p$.

Доказательство. Из формулы (17.33) следует, что если известны $e_\nu(0)$, $e_\nu(1)$, $\nu \in \Gamma$ и $\mathbf{V}(0)$, то матрица

$$\mathbf{Q}(\lambda) = \mathbf{U}(0, \lambda)\mathbf{U}(1, \lambda)^{-1}\mathbf{V}(0)^{-1}$$

вычислима по данным рассеяния при всех $\lambda \in [A_1, B_1]$. Функция Жуковского

$$\lambda(\theta) = a - b(\theta + \theta^{-1}),$$

где

$$a = \frac{1}{2}(A_1 + B_1), \quad b = \frac{1}{4}(B_1 - A_1),$$

отображает единичную окружность $\mathbb{T} = (\theta : |\theta|) = 1$ на сегмент $[A_1, B_1]$, не содержащий собственных значений $\mu(s)$ матрицы \mathbf{L}_1 в силу (17.23).

Поэтому рациональная дробь $\sum_{s=1}^p \frac{Tr \mathcal{E}(s)}{\lambda(\theta) - \mu(s)}$ не имеет особенностей на окружности \mathbb{T} и, согласно (17.36), при всех $l = 1, 2, \dots$ выполня-

ются равенства

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{\mathbb{T}} \sum_{s=1}^p \frac{Tr \mathbf{E}(s)}{\mu(s) - \lambda(\theta)} \theta^l d\theta = \int_{\mathbb{T}} Tr \mathbf{Q}(\lambda, \theta) \theta^l d\theta. \quad (17.38)$$

Правые части этих равенств вычислимы, а левые части согласно теореме о вычетах равны

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{\mathbb{T}} \sum_{s=1}^p \frac{Tr \mathbf{E}(s)}{\mu(s) - \lambda(\theta)} \theta^l d\theta = \sum_{s=1}^p \frac{Tr \mathbf{E}(s) \theta_s^l}{b(\theta_s^{-2} - 1)}, \quad (17.39)$$

где через θ_s обозначены корни уравнений

$$\lambda(\theta) = a - b(\theta + \theta^{-1}) = \mu(s),$$

лежащие в единичном круге $|\theta| \leq 1$. Из неравенства (17.23) следует, что эти корни лежат в интервале $(0, 1)$.

Обозначим через $\rho(\theta)$, $\theta \in (-\infty, \infty)$ кусочно-постоянную функцию

$$\rho(\theta) = \sum_{\theta_s < \theta} \frac{Tr \mathbf{E}(s)}{b(\theta_s^{-2} - 1)}.$$

По условию собственная функция матрицы \mathbf{L}_1 не может тождественно обратиться в ноль на множестве концевых частиц каналов, откуда, согласно (17.35) следует, что $Tr \mathbf{E}(s) > 0$ при всех $s = 1, 2, \dots, p$. Поэтому функция $\rho(\theta)$ не убывает и имеет ровно p положительных скачков в точках $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_p$. Из очевидного равенства

$$\int_{-\infty}^{\infty} \theta^l d\rho(\theta) = \sum_{s=1}^p \frac{Tr \mathbf{E}(s) \theta_s^l}{b(\theta_s^{-2} - 1)}$$

и равенств (17.38), (17.39) следует, что

$$\int_{-\infty}^{\infty} \theta^l d\rho(\theta) = - \int_{\mathbb{T}} Tr \mathbf{Q}(\lambda, \theta) \theta^l d\theta.$$

Следовательно, степенные моменты

$$s(l) = \int_{-\infty}^{\infty} \theta^l d\rho(\theta)$$

вычислимы.

Гильбертово пространство полиномов $P(\theta)$, $\theta \in (-\infty, \infty)$ со скалярным произведением

$$(P_1, P_2) = \int_{-\infty}^{\infty} P_1(\theta) \overline{P_2(\theta)} d\theta$$

конечномерно и полиномы $1, \theta, \dots, \theta^{p-1}$ образуют его базис.

Поэтому определители Грама

$$\Delta(l) = \begin{vmatrix} s(0), & s(1), & \dots & s(l) \\ s(l), & s(l+1), & \dots & s(2l) \end{vmatrix}$$

положительны при $l \leq p-1$ и равны нулю при $l \geq p$, что позволяет последовательно вычисляя эти определители, найти число p (т.е. число точек роста функции $\rho(\theta)$), а затем вычислить полином p -й степени

$$N(\theta) = \begin{vmatrix} s(0), & s(1), & \dots & s(p) \\ s(p-1), & s(p), & \dots & s(2p-1) \\ 1 & \theta & \dots & \theta^p \end{vmatrix}$$

Так как

$$(N(\theta), \theta^l) = \int_{-\infty}^{\infty} N(\theta) \theta^l d\rho(\theta) = \begin{vmatrix} s(0), & s(1), & \dots & s(p) \\ \vdots & & & \\ s(p-1), & \dots & \dots & s(2p-1) \\ s(l) & \dots & \dots & s(p+l) \end{vmatrix}$$

и при $l = 0, 1, \dots, p-1$ определители в правых частях этих равенств имеют две одинаковые строки, то полином $N(\theta)$ ортогонален всем полиномам базиса. Следовательно

$$\|N(\theta)\|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} |N(\theta)|^2 d\rho(\theta) = 0$$

и все корни этого полинома p -й степени совпадают с точками роста $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_p$ функции $\rho(\theta)$. Поэтому собственные значения $\mu(s) = a - b(\theta_s + \theta_s^{-1})$ \mathbf{L}_1 -матрицы вычислимы.

Наконец, согласно (17.36)

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{\mathbb{T}} \sum_{s=1}^p \frac{N(\theta)\mathcal{E}(s)}{(\theta - \theta_l)(\mu(s) - \lambda(\theta))} d\theta = \frac{1}{2\pi i} \int_{\mathbb{T}} \frac{N(\theta)}{(\theta - \theta_l)} \mathbf{Q}(\lambda(\theta)) d\theta$$

и, так как при каждом $l = 1, 2, \dots, p$ подынтегральное выражение в левой части имеет в круге $|\theta| \leq 1$ единственный полюс в точке θ_l с вычетом

$$\frac{N'(\theta_l)\mathcal{E}(s)}{b(\theta_l^{-2} - 1)},$$

то

$$\frac{N'(\theta_l)\mathcal{E}(s)}{b(\theta_l^{-2} - 1)} = \frac{1}{2\pi i} \int_{\mathbb{T}} \frac{N(\theta)\mathbf{Q}(\lambda(\theta))}{(\theta - \theta_l)} d\theta$$

и

$$\mathcal{E}(l) = \frac{b(\theta_l^{-2} - 1)}{2\pi i N'(\theta_l)} \int_{\mathbb{T}} \frac{N(\theta)\mathbf{Q}(\lambda(\theta))}{(\theta - \theta_l)} d\theta$$

откуда вытекает вычислимость матрицы $\mathcal{E}(l)$. ■

Обозначим через $A(0)$ множество концевых частиц каналов:

$$A(0) = \bigcup_{\nu \in \Gamma} \{\nu(0)\}.$$

Теорема 11. *Если множество $A(0)$ вполне \mathbf{L}_1 -продолжимо, то \mathbf{L}_1 -матрица вычисляется по данным рассеяния, значениям решений Йоста $e_\nu(k)$, $\nu \in \Gamma$ при $k = 0, 1$ и значению коэффициента взаимодействия $B(0)$ подсистем Σ_1, Σ_0 .*

Доказательство. Согласно лемме 18 при условиях доказываемой теоремы вычислимы собственные значения $\mu(s)$ матрицы \mathbf{L}_1 и матрицы $\mathcal{E}(s)$, $s = 1, 2, \dots, p$. Из определения (17.35) матриц $\mathcal{E}(s)$ следует, что при $\alpha, \beta \in A(0)$ матричные элементы $E(\alpha, \beta, s)$ ортопроекторов $\mathbf{E}(s)$ совпадают с элементами матриц $\mathcal{E}(s)$. Поэтому элементы $E(\alpha, \beta, s)$, $\alpha, \beta \in A(0)$ ортопроекторов $\mathbf{E}(s)$ вычислимы. Так как множество $A(0)$ вполне \mathbf{L}_1 -продолжимо, то согласно лемме 10 собственная функция \mathbf{L}_1 -матрицы не может тождественно обратиться в нуль на множестве $A(0)$. Это позволяет воспользоваться леммой 8, согласно которой сужение спектральных данных матрицы \mathbf{L}_1 на множество $A(0)$ вычислимо. Поэтому доказываемая теорема является прямым следствием теоремы 7. ■

Из наблюдений в окрестности бесконечности за собственными колебаниями системы Σ с частотами $\omega \in [\sqrt{A_1}, \sqrt{B_1}]$ можно, используя формулу (17.32), описывающую эти колебания, вычислить параметры $\omega(\nu)$ и $\theta_\nu = e^{-i\omega(\nu)}$ как функции спектрального параметра $\lambda = \omega^2 \in [A_1, B_1]$. Равенства

$$\lambda = a(\nu) - b(\nu)(\theta_\nu + \theta_\nu^{-1})$$

позволяют затем найти коэффициенты $a(\nu)$, $b(\nu)$, зная θ_ν хотя бы для двух значений λ .

Поэтому, если каналы однородны, то матрицы

$$\mathbf{E}(k) = (\theta_\nu^k \delta_\sigma^\nu), \quad \mathbf{B}(0) = (b(\nu) \delta_\sigma^\nu)$$

вычисляемы из наблюдений в окрестности бесконечности, откуда вытекает такое следствие теоремы 11:

Следствие. *Если каналы однородны, и их концевые частицы $\nu(0)$, $\nu \in \Gamma$ образуют вполне \mathbf{L}_1 -продолжимое множество, то \mathbf{L}_1 -матрица подсистемы Σ_1 и \mathbf{L} -матрица всей системы Σ вычисляются из наблюдений в окрестности бесконечности*

З а м е ч а н и е. В общем случае вычислить решения Иоста из наблюдений в окрестности бесконечности нельзя, т.к. для этого необходимо знать некоторые характеристики стоячих волн, не наблюдаемых в окрестности бесконечности.

§ 18. Примеры вполне \mathbf{L} -продолжимых подмножеств

В этом параграфе рассмотрены типичные примеры механических систем, в которых легко находятся максимальные \mathbf{L} -продолжения подмножеств частиц и вполне \mathbf{L} -продолжимые подмножества. Для простоты мы ограничимся рассмотрением систем, в которых все взаимодействия сильные, т.е. у которых ненулевые блоки $L^{\alpha\beta}$ их \mathbf{L} -матриц невырождены: если $L^{\alpha\beta} \neq 0$, то $\det L^{\alpha\beta} \neq 0$. В частности, системы, в которых частицы имеют только одну степень свободы.

Мы будем пользоваться следующей терминологией.

Валентностью частицы α называется число взаимодействующих с ней частиц. Она обозначается через $Val(\alpha)$. Степенью графа взаимодействий называется наибольшая валентность содержащихся в нем частиц и обозначается через $Deg(\Gamma)$. Частицы, имеющие максимальную валентность, равную степени графа, называются внутренними; все остальные частицы называются крайними.

Внешней по отношению к подмножеству \mathfrak{B} валентностью частицы $\alpha \in \mathfrak{B}$ называется число взаимодействующих с ней частиц дополнительного подмножества $\mathfrak{A} \setminus \mathfrak{B}$. Она обозначается через $Val(\alpha \in \mathfrak{B})$.

По определению подмножество \mathfrak{B} называется \mathbf{L} -продолжимым, если оно содержит частицу $\alpha \in \mathfrak{B}$, внешняя валентность которой $Val(\alpha \in \mathfrak{B})$ равна единице. Та единственная частица дополнительного множества $\mathfrak{A} \setminus \mathfrak{B}$, с которой взаимодействует частица α , обозначается через $\bar{\alpha}$, а множество $\mathfrak{B}^{(1)} = \mathfrak{B} \cup \{\bar{\alpha}\}$ называется \mathbf{L} -продолжением подмножества \mathfrak{B} .

На рисунках переход от подмножества \mathfrak{B} к его \mathbf{L} -продолжению обозначается стрелкой, идущей из частицы α к частице $\bar{\alpha}$.

Для нахождения максимального \mathbf{L} -продолжения $[\mathfrak{B}]$ подмножества \mathfrak{B} нужно перейти к множеству $\mathfrak{B}^{(1)}$ и искать его \mathbf{L} -продолжение $\mathfrak{B}^{(2)}$, затем \mathbf{L} -продолжение множества $\mathfrak{B}^{(2)}$, и т.д., пока не получим подмножество $\mathfrak{B}^{(n)}$, не имеющее \mathbf{L} -продолжения. Это

множество и является максимальным \mathbf{L} -продолжением подмножества \mathfrak{B} : $[\mathfrak{B}] = \mathfrak{B}^{(n)}$. Согласно Лемме 9 оно единственно. Если \mathfrak{B} не имеет \mathbf{L} -продолжения, то $[\mathfrak{B}] = \mathfrak{B}$.

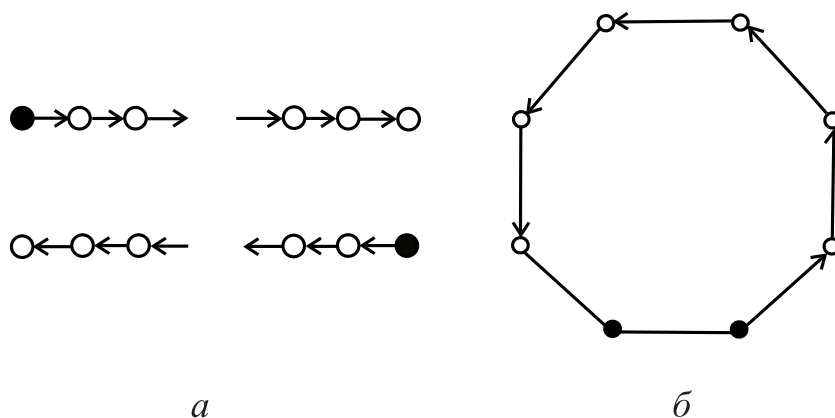


Рис. 7:

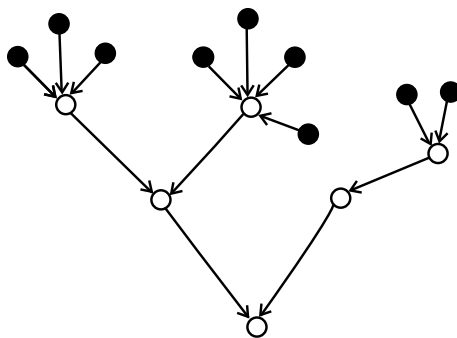


Рис. 8:

Для отыскания вполне \mathbf{L} -продолжимого множества, содержащего данное подмножество \mathfrak{B} , нужно сначала найти максимальное \mathbf{L} -продолжение $[\mathfrak{B}]$ этого подмножества. Если оно совпадает со

всем множеством \mathfrak{A} , то само \mathfrak{B} является вполне \mathbf{L} -продолжимым множеством. Если нет, то к множеству $[\mathfrak{B}]$ нужно добавить частицу γ из дополнительного множества $\mathfrak{A} \setminus [\mathfrak{B}]$ и искать максимальное \mathbf{L} -продолжение полученного множества. Если оно совпадает с множеством \mathfrak{A} , то множество $\mathfrak{B} \cup \{\gamma\}$ является вполне \mathbf{L} -продолжимым подмножеством, содержащим множество \mathfrak{B} , и т.д.

На рисунках частицы исходного подмножества \mathfrak{B} изображены темными кружками (\bullet); добавляемая к множеству $[\mathfrak{B}]$ частица γ изображается темным квадратиком (\blacksquare), следующая добавляемая частица изображена черным треугольником (\blacktriangle) и т.д. Через $\mathfrak{B}(\bullet)$, $\mathfrak{B}(\bullet, \blacksquare)$, $\mathfrak{B}(\bullet, \blacksquare, \blacktriangle)$ и т.д. обозначены соответственно подмножества, состоящие из частиц "темный кружок"; "темный кружок" и "темный квадратик"; "темный кружок" и "темный треугольник" и т.д. Частицы множеств $[\mathfrak{B}(\bullet)] \setminus \mathfrak{B}(\bullet)$, $[\mathfrak{B}(\bullet, \blacksquare)] \setminus \mathfrak{B}(\bullet, \blacksquare)$ и $[\mathfrak{B}(\bullet, \blacksquare, \blacktriangle)] \setminus \mathfrak{B}(\bullet, \blacksquare, \blacktriangle)$ изображены соответственно светлыми кружками (\circ), квадратиками (\square), треугольниками (\triangle) и т.д.

Системы с графами взаимодействия второй степени имеют очень простую структуру: они содержат либо две крайние частицы (Рис. 7 а), либо все их частицы внутренние (Рис. 7 б). Поэтому вполне \mathbf{L} -продолжимые подмножества таких систем, содержащие минимальное число частиц, состоят либо из одной крайней частицы (Рис. 7 а), либо из двух соседних частиц (Рис. 7 б). В частности, граф взаимодействия нагруженных струн имеет вид, изображенный на Рис. 7 а. В этом случае вполне \mathbf{L} -продолжимые подмножества одночастичны, чем объясняется сравнительная простота решения соответствующих обратных задач.

Просто находятся вполне \mathbf{L} -продолжимые подмножества также в системах, у которых графы взаимодействий являются деревьями: подмножество всех одновалентных частиц заведомо вполне продолжимо (Рис. 8).

У графа третьей степени, изображенного на Рис. 9, все крайние вершины двухвалентны. Поэтому вполне \mathbf{L} -продолжимое мно-

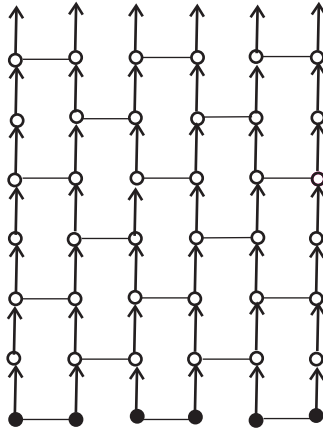


Рис. 9:

жество $\mathfrak{B}(\bullet)$ состоит из шести частиц. Это минимальное вполне продолжимое подмножество в том смысле, что любая его часть не будет вполне продолжимой.

На Рис. 10 изображен простейший граф четвертой степени.

Очевидно, что вполне \mathbf{L} -продолжимыми являются множества всех вершин, лежащих на одной из сторон прямоугольника. При этом множество вершин, лежащих на короткой стороне прямоугольника (Рис. 10 а), минимально. Множество вершин, принадлежащих длинной стороне не является минимальным, т.к. оно содержит вполне \mathbf{L} -продолжимое подмножество (Рис. 10 б).

На рисунках 11 показано как может влиять на \mathbf{L} -продолжимость добавление к графу взаимодействия новых ребер (т.е. включение взаимодействия между новыми парами частиц графа).

Граф на рис. 11 а получается из графа на рис. 7 б добавлением ребер, соединяющих левую частицу подмножества $\mathfrak{B}(\bullet)$ со всеми другими частицами. При этом внешняя относительно $\mathfrak{B}(\bullet)$ валентность левой частицы стала максимально возможной (она равна

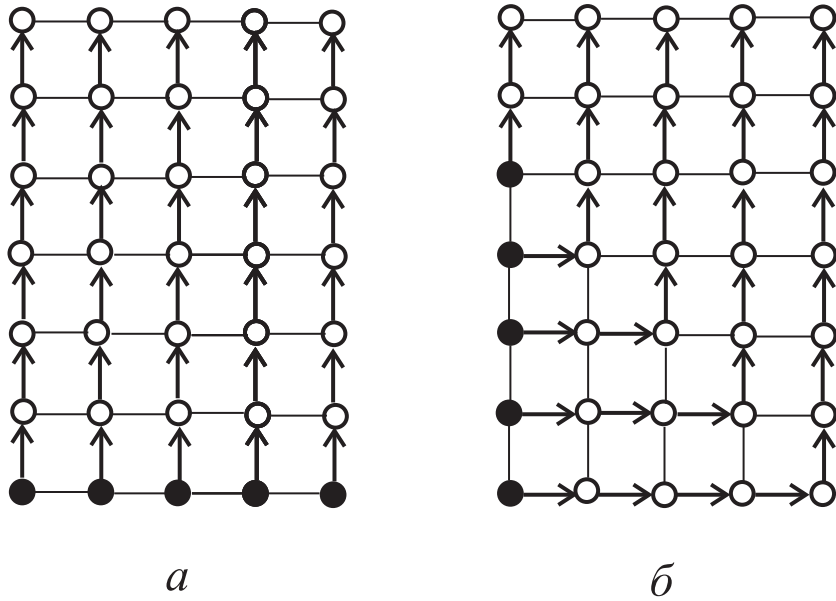


Рис. 10:

числу частиц множества $\mathfrak{A} \setminus \mathfrak{B}(\bullet)$, но внешняя валентность правой частицы подмножества $\mathfrak{B}(\bullet)$ осталась равной единице и подмножество $\mathfrak{B}(\bullet)$ осталось вполне L -продолжимым.

Графы, изображенные на рисунке 11 б, получаются из графа, изображенного на рисунке 10, добавлением ребер, соединяющих их частицы по параллельным диагоналям одного направления. При этом, внешняя относительно $\mathfrak{B}(\bullet)$ валентность левой частицы этого подмножества осталась равной единице, и подмножество $\mathfrak{B}(\bullet)$ осталось вполне L -продолжимым.

Если же к графу добавить диагональные ребра обоих направлений (рис. 11 в), то подмножество $\mathfrak{B}(\bullet)$ перестанет быть вполне L -продолжимым, а вполне L -продолжимое подмножество $\mathfrak{B}(\bullet, \blacksquare)$ получится из него, если к подмножеству $\mathfrak{B}(\bullet)$ добавить частицы \blacksquare .

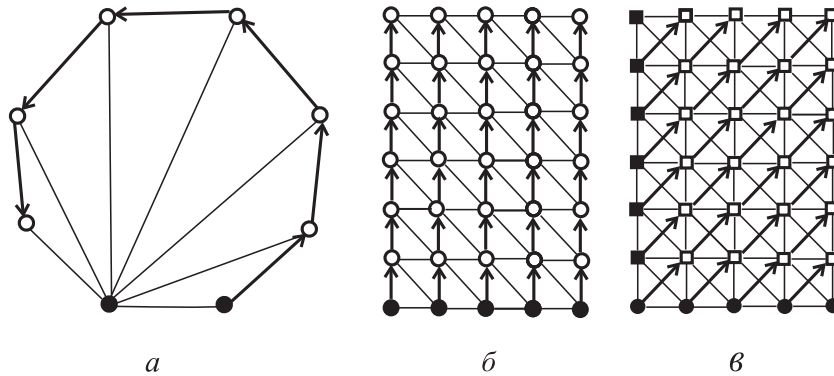


Рис. 11:

На рисунках 12 изображены графы, получающиеся из изображенного на рисунке 10 прямоугольного графа добавлением новых ребер $(\alpha(1), \beta(1)), (\alpha(2), \beta(2)), \dots, (\alpha(7), \beta(7))$ (рис. 12 *a*) или ребер $(\alpha(1), \beta(7)), (\alpha(2), \beta(6)), \dots, (\alpha(7), \beta(1))$ (рис. 12 *б*), соединяющих двумя разными способами вершины, лежащие на противоположных сторонах прямоугольника. Это графы взаимодействия двух систем, у которых частицы в положении устойчивого равновесия лежат на поверхности цилиндра (в случае *a*) или листа Мебиуса (в случае *б*).

Добавленные ребра увеличивают на 1 валентность вершин, которые они соединяют, но внешняя относительно множества $\mathfrak{B}(\bullet)$ валентность всех его частиц в случае (*a*) остается равной 1, а в случае (*б*) внешняя валентность частиц $\alpha(7), \beta(7)$ увеличивается на 1 и становится равной 2. Поэтому в случае (*a*) множество $\mathfrak{B}(\bullet)$ остается вполне **L**-продолжимым, а в случае (*б*) к нему нужно добавить множество $\mathfrak{B}(\blacksquare)$, чтобы получить вполне **L**-продолжимое множество $\mathfrak{B}(\bullet, \blacksquare) = \mathfrak{B}(\bullet) \cup \mathfrak{B}(\blacksquare)$.

Заметим, что граница цилиндрической поверхности состоит из двух окружностей, а граница листа Мебиуса состоит из одной замкнутой кривой. Таким образом, в случае цилиндра вполне **L**-продолжимое множество образуют частицы, лежащие на половине

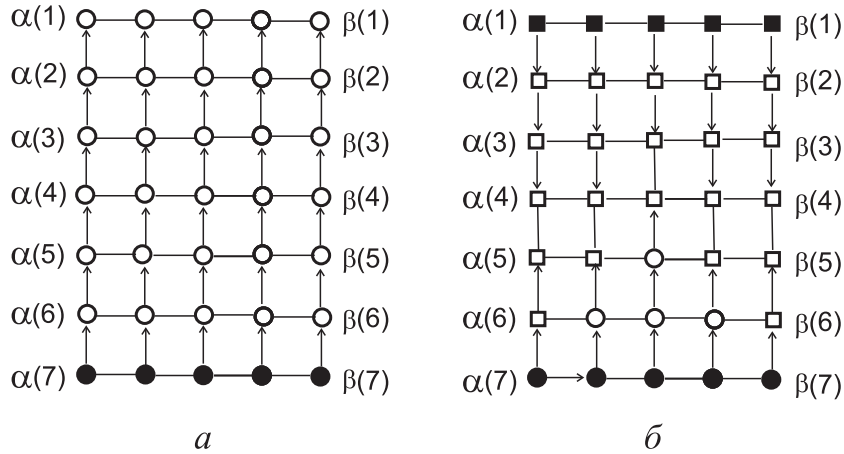


Рис. 12:

границы цилиндра (нижняя его окружность), а в случае листа Мебиуса вполне \mathbf{L} -продолжимое множество содержит вдвое больше частиц — все частицы, лежащие на его границе.

На рисунке 13 демонстрируется зависимость вида вполне \mathbf{L} -продолжимого подмножества от конфигурации крайних частиц графа. Максимальное \mathbf{L} -продолжение подмножества $\mathfrak{B}(\bullet)$ состоит из частиц, изображенных на рисунке кружками. Оно не совпадает со всем множеством частиц, т.е. подмножество $\mathfrak{B}(\bullet)$ не является вполне \mathbf{L} -продолжимым. Добавляя к нему частицу \blacksquare , получим множество $\mathfrak{B}(\bullet, \blacksquare)$, максимальное \mathbf{L} -продолжение которого состоит из частиц, изображенных кружками и квадратиками. Оно тоже не совпадает со всем множеством частиц, следовательно множество $\mathfrak{B}(\bullet, \blacksquare)$ не является вполне \mathbf{L} -продолжимым. Только добавляя к этому множеству еще одну частицу \blacktriangle , получим, наконец, вполне \mathbf{L} -продолжимое подмножество $\mathfrak{B}(\bullet, \blacksquare, \blacktriangle)$.

Аналогично ищутся вполне \mathbf{L} -продолжимые подмножества в системах, у которых частицы в положении устойчивого равновесия

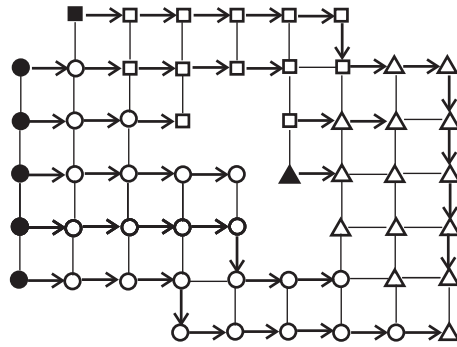


Рис. 13:

образуют многомерные решетки (см., например, рисунок 14, на котором частицы, лежащие на нижней грани параллелепипеда, образуют вполне \mathbf{L} -продолжимое подмножество).

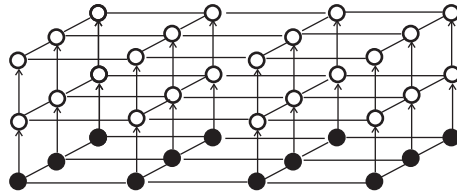


Рис. 14:

§ 19. Численное решение обратной задачи теории малых колебаний

Численное решение обратной задачи теории малых колебаний имеет ряд особенностей, поскольку используется приближенный численный метод. Это означает, что ошибки при вычислениях могут на много порядков превышать погрешности, естественно возникающие в вычислительных системах при выполнении арифметических операций над вещественными числами. Наблюдаемыми характеристиками изучаемых систем являются зависимости амплитуд колебаний частиц от времени. Следовательно, в данном случае речь идет об ошибках, возникающих при численном определении амплитуд и частот колебаний. Для определения этих величин используется дискретное Фурье-преобразование. Следует обратить внимание, что на практике время наблюдений за любой системой всегда конечно, поэтому необходимо учитывать эффекты, возникающие при Фурье-преобразовании на конечном интервале. Вышеуказанные ошибки затем последовательно накапливаются при применении рекуррентной процедуры, используемой для вычисления координат собственных векторов $\varphi(\beta, j)$ матрицы \mathbf{L} . Главная задача состоит в том, чтобы минимизировать возникающие ошибки и повысить устойчивость рекуррентной процедуры.

Численное решение обратной задачи теории малых колебаний можно разделить на следующие этапы:

- Первым этапом является проведение дискретного Фурье-преобразования зависимостей амплитуд колебаний наблюдаемых частиц от времени.
- На втором этапе необходимо с максимальной точностью восстановить амплитуды и частоты колебаний по данным, полученным при Фурье-преобразовании.
- Следующим шагом является восстановление координат собственных векторов, соответствующих наблюдаемым частицам.

- Затем, используя рекуррентное соотношение (см. § 23.), необходимо восстановить оставшиеся координаты собственных векторов.
- В результате, зная собственные векторы и частоты колебаний, мы можем восстановить исходную матрицу взаимодействий \mathbf{L} .

Реализация каждого из этапов численного решения обратной задачи теории малых колебаний имеет свои особенности, которые будут подробно рассмотрены в последующих параграфах. В § 20. рассмотрены особенности численного проведения дискретного Фурье-преобразования на конечном временном интервале. В этом параграфе также описана численная процедура вычисления амплитуд и частот колебаний по данным, полученным при Фурье-преобразовании. Рассмотрены вопросы, касающиеся повышения точности данной процедуры.

В следующем параграфе (§ 21.) рассмотрены вопросы, касающиеся определения координат собственных векторов, соответствующих наблюдаемым частицам.

В параграфе § 22. описана численная процедура восстановления ортогональности набора векторов.

Параграф § 23. посвящен подробному анализу рекуррентной процедуры восстановления координаты собственных векторов $\varphi(\gamma, j)$. Предложен метод, позволяющий повысить устойчивость данной процедуры.

В последнем параграфе рассмотрены различные примеры, иллюстрирующие предложенный метод.

§ 20. Анализ спектров дискретного Фурье-преобразования

Выражения для прямого и обратного непрерывного преобразования Фурье функции $g(t)$ имеют вид:

$$G(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} g(t) \exp(-i\omega t) dt \quad (20.1)$$

и

$$g(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G(\omega) \exp(i\omega t) d\omega \quad (20.2)$$

Функцию $G(\omega)$ часто называют Фурье-образом функции $g(t)$. В дискретном Фурье-преобразовании (в англоязычной литературе DFT - Discrete Fourier transform) предполагается, что функция $g(t)$ определена на некотором дискретном множестве значений t_n , $n = 0, 1, \dots, N - 1$. Часто говорят, что вводится сетка значений аргумента t , на которой определена функция $g(t)$. Обозначим такую функцию посредством $g_d(t)$:

$$g_d(t) = \sum_{n=0}^{N-1} g(t) \delta(t - t_n), \quad (20.3)$$

где $\delta(t)$ - дельта-функция. Обычно рассматривается случай, когда точки t_n расположены эквидистантно, т.е.

$$t_n = t_0 + n\Delta t, \quad n = 0, 1, \dots, N - 1.$$

Если переменная t подразумевает время, то t_0 - начальный момент времени, а Δt - временной интервал между двумя соседними измерениями функции $g(t)$ (шаг временной сетки). Общее время измерения T равно $N\Delta t$. Значение Δt , вообще говоря, может быть

выбрано произвольным образом, но на практике эта величина часто однозначно диктуется параметрами измерительных систем (например, частотой дискретизации сигнала). Вопрос об оптимальном выборе Δt будет рассмотрен ниже. Выражение (20.3) приобретает вид:

$$g_d(t) = \sum_{n=0}^{N-1} g(t)\delta(t - n\Delta t), \quad (20.4)$$

Подставив (20.4) в (20.1), получаем:

$$\begin{aligned} G(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{n=0}^{N-1} g(t)\delta(t - n\Delta t) \exp(-i\omega t) dt = \\ &= \sum_{n=0}^{N-1} g(n\Delta t) \exp(-i\omega n\Delta t) = \sum_{n=0}^{N-1} g_n \exp(-i\omega n\Delta t) \end{aligned} \quad (20.5)$$

где введено обозначение:

$$g_n = g(n\Delta t).$$

Заметим, что частота ω в (20.5) является непрерывной переменной, меняющейся на всей числовой оси. Периодически продолжая $g_d(t)$, можно ограничить область изменения ω диапазоном:

$$\omega = [0, \omega_{max}), \quad (20.6)$$

где

$$\omega_{max} = \frac{2\pi}{\Delta t}. \quad (20.7)$$

Аналогично тому, как вводилась сетка для переменной t , введем сетку для переменной ω в диапазоне (20.6):

$$\omega_k = \omega_{max} \frac{k}{N} = \frac{2\pi}{\Delta t} \frac{k}{N} = \frac{2\pi}{T} k, \quad k = 0, 1, \dots, N-1. \quad (20.8)$$

Здесь следует заметить, что количество точек разбиения интервала частот (20.6) может отличаться от количества точек разбиения интервала по t . Однако в большинстве стандартных пакетов численного Фурье-преобразования эти величины совпадают. Окончательно получаем формулы для прямого и обратного дискретного Фурье-преобразования:

$$G_k = \sum_{n=0}^{N-1} g_n \exp(-i\omega_k n \Delta t) = \sum_{n=0}^{N-1} g_n \exp\left(-i\frac{2\pi}{N}kn\right) \quad (20.9)$$

где введено обозначение:

$$G_k = G(\omega_k)$$

и

$$g_k = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} G_n \exp\left(i\frac{2\pi}{N}kn\right) \quad (20.10)$$

Заметим, что нормировочный множитель в формуле (20.10) для обратного дискретного Фурье-преобразования равен $1/N$, а не $1/2\pi$, как в случае для непрерывного Фурье-преобразования (20.2). Вообще говоря, нормировочные константы определены неоднозначно. Требуется лишь, чтобы при прямом и обратном преобразовании функция переходила в саму себя. Хотелось бы также обратить внимание на то, что в суммы (20.9) и (20.10) входят произведения индексов k и n . Это позволяет существенно ускорить численное проведение дискретного Фурье-преобразования. Дело в том, что численное вычисление экспонент (точнее, синусов и косинусов соответствующих аргументов) является достаточно медленной операцией. Тот факт, что значение экспоненты n -го слагаемого сумм (20.9), (20.10) для k -го коэффициента разложения G_k совпадает со значением экспоненты k -го слагаемого суммы для n -го коэффициента

разложения, позволяет сократить количество вычислений как минимум вдвое. Вообще, вычислительные пакеты дискретного Фурье-преобразования для ускорения работы находят все пары целых чисел n и k такие, что $nk = m$, где $m = 1, 2, \dots, N-1$ (иными словами, проводят разложение числа m на простые множители).

До сих пор мы не рассматривали эффекты, связанные с конечностью временного интервала, на котором производится измерение функции $g(t)$. Выражения (20.1) и (20.2), приведенные в предыдущем параграфе, предполагают, что функция $g(t)$ определена на бесконечном интервале ($-\infty < t < \infty$). Функцию, заданную на конечном интервале (например, $-T/2 \leq t \leq T/2$), можно доопределить следующим образом:

$$g_0(t) = \begin{cases} g(t) & |t| \leq T/2 \\ 0 & |t| > T/2 \end{cases},$$

что эквивалентно умножению функции $g(t)$ на функцию

$$h(t) = \begin{cases} 1 & |t| \leq T/2 \\ 0 & |t| > T/2 \end{cases}. \quad (20.11)$$

Таким образом, вместо Фурье-преобразования исходной функции $g(t)$ производится преобразование функции

$$g_0(t) = g(t)h(t). \quad (20.12)$$

В соответствии с теоремой о свертке получаем:

$$G_0(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} G(\omega')H(\omega - \omega')d\omega'. \quad (20.13)$$

Здесь $G(\omega)$ - Фурье-образ функции $g(t)$ (см. 20.1), а

$$H(\omega - \omega') = T \frac{\sin((\omega - \omega')T/2)}{(\omega - \omega')T/2}, \quad (20.14)$$

Фурье-образ функции $h(t)$. Очевидно, что в пределе $T \rightarrow \infty$ функция $H(\omega) = \delta(\omega)$ и $\tilde{G}(\omega) = G(\omega)$.

В дальнейшем мы будем использовать Фурье-преобразование для анализа спектра малых колебаний механической системы. Это означает, что исходная функция $g(t)$ представляет собой суперпозицию периодических колебаний частотами ω_m и амплитудами a_m ($m = 1, 2, \dots, M$, где M - полное число колебаний). Согласно (8.13) и (8.14) выражение для зависимости амплитуды колебаний частиц от времени $q_z(x, t)$ можно переписать в виде:

$$g(t) = q_z(x, t) = \sum_{m=1}^M a_m \sin(\omega_m t), \quad (20.15)$$

где

$$a_m = \frac{\varphi(x, m)\varphi(z, m)}{\omega_m}.$$

Здесь и далее мы будем рассматривать системы, состоящие из частиц одинаковой массы. Кроме того, мы будем работать в системе единиц, где $v = 1$. Фурье-образ функции $g(t)$ (20.15) представляет собой набор острых пиков на частотах ω_m . Высоты этих пиков, очевидно, равны a_m . В соответствии с (20.13) при конечном времени наблюдения T , каждый такой пик “размывается” в меру (20.14). При этом уменьшаются амплитуды максимумов $\tilde{G}(\omega)$, а также появляются т.н. боковые лепестки (в англоязычной литературе - leakage, ripples или side lobes). Пример такого “размывания” основного пика и образования боковых лепестков представлен на Рис. 15. На данном рисунке показана зависимость Фурье компоненты

$$\tilde{H}(\omega - \omega') = \frac{H(\omega - \omega')}{T}$$

от приведенной частоты

$$\nu = \frac{(\omega - \omega')T}{2\pi}.$$

$$\tilde{H}(\nu) = \frac{\sin(\pi\nu)}{\pi\nu}.$$

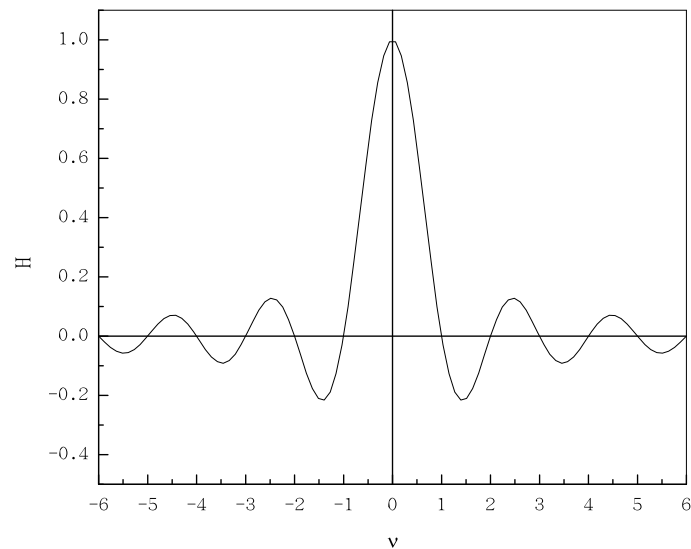


Рис. 15:

Как видно, характерная “ширина” лепестка $\sim \frac{2\pi}{T}$. Расстояние между основным пиком и первым боковым лепестком равно $\frac{3\pi}{T}$, а расстояние между боковыми лепестками равно $\frac{2\pi}{T}$.

Это явление имеет простой физический смысл: появление боковых лепестков означает появление дополнительных гармоник в спектре сигнала, что приводит к перераспределению энергий между основным и боковыми экстремумами.

В дальнейшем нам будет необходимо с максимальной точностью определять частоты $\tilde{\omega}_m$ и амплитуды \tilde{a}_m колебаний $g(t)$. Наличие боковых лепестков существенно усложняет эту задачу:

- Во-первых, как указывалось выше, искажаются (уменьшаются) амплитуды максимумов.
- Во-вторых, появляются дополнительные (паразитные) экстремумы, которые необходимо идентифицировать и исключить из рассмотрения.
- В-третьих, крайне сложно бывает отличить реальный малоамплитудный пик в окрестности мощного экстремума от бокового лепестка.

Как видно из (20.11), искажения формы $G(\omega)$ возникают из-за резких скачков функции $h(t)$ на краях интервала (в точках $t = \pm T/2$). Чтобы подавить боковые лепестки необходимо уменьшить влияние границ интервала по t . В этом случае удастся максимально приблизить вид зависимости $\tilde{G}(\omega)$ к $G(\omega)$ при фиксированном времени наблюдения T . С этой целью Фурье-преобразование проводят не с “весовой” функцией $h(t)$, а с т.н. функцией временного окна (в англоязычной литературе - window function). Существует большое количество функций временного окна. Они отличаются друг от друга степенью подавления боковых лепестков. В качестве примера рассмотрим две наиболее широко применяемые функции временного окна - функцию Ханна (Hanning window) и функцию Хамминга (Hamming window). Первая имеет вид:

$$w(t) = \begin{cases} 0.5 \left(1 - \cos \left(\frac{2\pi t}{T} - \pi \right) \right), & |t| \leq T/2 \\ 0, & |t| > T/2 \end{cases} ,$$

При дискретном Фурье-преобразовании на интервале $-T/2 \leq t_n < T/2$ ($n = 0, 1, \dots, N - 1$) функция Ханна приобретает вид:

$$w(t_n) = \begin{cases} 0.5 \left(1 - \cos \left(\frac{2\pi n}{N-1} \right) \right), & n \in [0, 1, \dots, N-1] \\ 0, & n \notin [0, 1, \dots, N-1] \end{cases},$$

Функция Хамминга обычно записывается в виде:

$$w(t) = \begin{cases} \beta - \gamma \cos \left(\frac{2\pi t}{T} - \pi \right), & |t| \leq T/2 \\ 0, & |t| > T/2 \end{cases},$$

где

$$\beta = 0.54, \gamma = 1 - \beta = 0.46.$$

При дискретном Фурье-преобразовании на интервале $-T/2 \leq t_n < T/2$ ($n = 0, 1, \dots, N-1$) эта функция приобретает вид:

$$w(t_n) = \begin{cases} \beta - \gamma \cos \left(\frac{2\pi n}{N-1} \right), & n \in [0, 1, \dots, N-1] \\ 0, & n \notin [0, 1, \dots, N-1] \end{cases},$$

Как видно, обе функции плавно убывают при $t \rightarrow \pm T/2$.

На Рис. 16 и Рис. 17 приведены зависимости модуля амплитуды $|\tilde{G}|$ от разности частот $\omega - \omega_0$, полученные при Фурье-преобразовании $g(t) = \cos(\omega_0 t)$, без использования функций временного окна и с использованием функции Ханна, соответственно. Как указывалось в выше, в большинстве стандартных пакетов численного Фурье-преобразования количество точек разбиения интервала по времени t и по частоте ω совпадают. Закрашенными квадратами на рисунках представлены результаты Фурье-преобразования для этого случая. Как видно, при таком соотношении параметров разбиения интервалов по времени и частоте наличие боковых лепестков не так существенно влияет на анализ результатов преобразования Фурье, поскольку расстояние между соседними лепестками того же порядка, что и расстояние между соседними значениями частот ($\sim 1/T$). Наличие боковых лепестков в первую очередь проявляются в виде уширения основных пиков, уменьшения

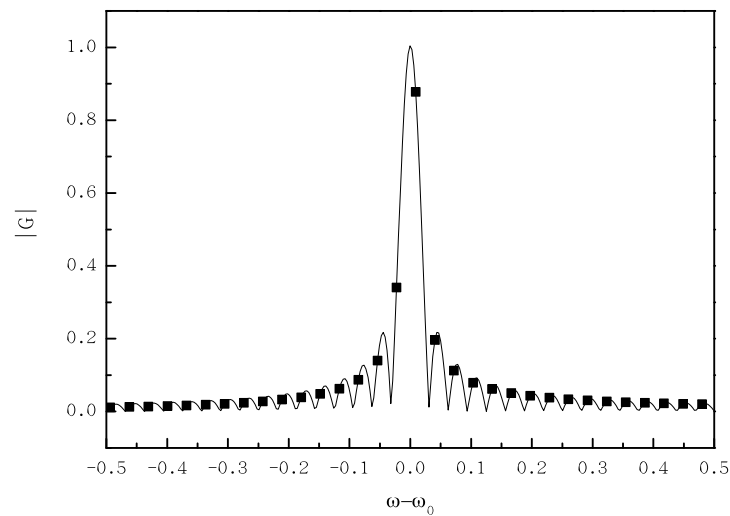


Рис. 16:

их высот и искажения формы. Непрерывными линиями на этих рисунках отображены результаты Фурье-преобразования для случая, когда количество точек разбиения интервала частоте в 10 раз больше, чем интервала по времени. В этом случае боковые лепестки на Рис. 16 видны хорошо, в то время как на Рис. 17 они существенно подавлены. Хотелось бы заметить, что те или иные функции временного окна встроены в некоторые стандартные библиотеки для численного Фурье-преобразования.

Завершая этот краткий обзор, посвященный дискретному Фурье-преобразованию, хотелось бы особо отметить, что при численном решении обратной задачи в теории малых колебаний от корректности применяемого метода Фурье-преобразования и от выбора

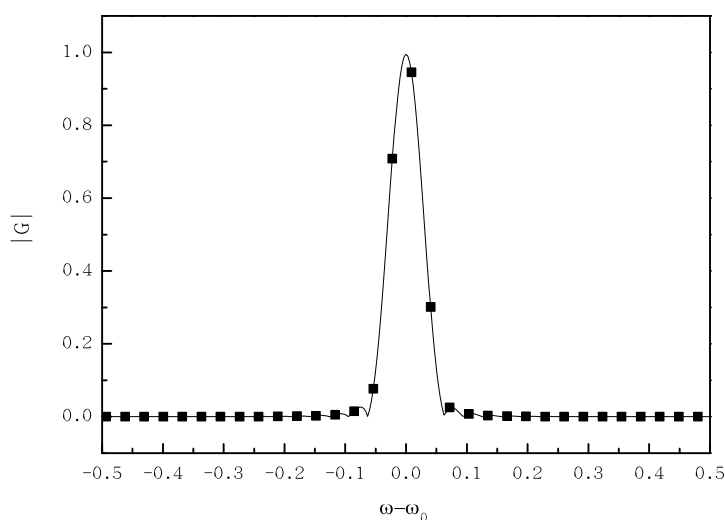


Рис. 17:

функции временного окна в существенной мере зависит точность и достоверность получаемых результатов. Кроме того, Фурье-анализ занимает существенную часть вычислительного времени, необходимого для решения данной задачи. По этой причине следует обратить внимание на все возможные пути ускорения данной процедуры. В качестве одного из таких путей следует обратить внимание на возможность распараллеливания процесса Фурье-преобразования. В некоторых стандартных библиотеках (например, `fftw`, `cufft`) такая возможность реализована.

В первой из них – `fftw` (`fftw3`) – поддерживаются два режима распараллеливания процесса вычислений. Это т.н. MPI (Message Passing Interface) и OpenMP (Open Multi-Processing).

Вторая библиотека – `cufft` – изначально разработана для параллельной работы, поскольку использует архитектуру графических процессоров CUDA (Compute Unified Device Architecture).

Рассмотрим теперь вопрос об использовании Фурье-преобразования для численного восстановления частот и амплитуд колебаний исходной функции $g(t)$ (20.15). Проведя численное дискретное Фурье-преобразование $g(t)$, мы получаем набор (массив) комплексных чисел G_k , соответствующих амплитудам гармоник с частотами ω_k (см. 20.8), где $k = 0, 1, \dots, N - 1$. Прежде всего, необходимо найти все экстремумы G_k , т.е. такие k' , что

$$|G_{k'}| > |G_{k' \pm l}|. \quad (20.16)$$

где $l = 1, 2, \dots, l_0$. Эмпирический параметр l_0 не должен быть слишком мал. В противном случае флуктуации и шумы, неизбежно присутствующие в любом реальном сигнале $g(t)$, будут идентифицироваться как экстремумы. С другой стороны, не следует выбирать l_0 слишком большим. В этом случае могут быть пропущены соседние, близко расположенные друг к другу пики. В остальном данный параметр является произвольным. Опыт показывает, что оптимальным является диапазон $2 < l_0 < 10$.

Определив таким образом все точки экстремумов (все k' , удовлетворяющие условию (20.16)), мы определим их частоты $\omega_{k'}$. В соответствии с (20.8), точность определения частот порядка

$$\delta\omega \sim \frac{2\pi}{N\Delta t}$$

Отсюда следует, что для повышения точности определения частот необходимо выбирать Δt максимально возможным, то так, чтобы наибольшая частота Фурье-преобразования (20.7) была не меньше максимальной частоты спектра исходного сигнала. Иными словами

$$\omega_{max} = \frac{2\pi}{\Delta t} \geq \max_{m=1,2,\dots,M} \omega_m. \quad (20.17)$$

Если изначально диапазон, в котором находятся частоты ω_m , неизвестен, то следует проводить Фурье-преобразование при различных значениях параметра Δt , например, последовательно уменьшая этот параметр. Критерием выполнения условия (20.17) является то, что дальнейшее уменьшение параметра Δt не влияет на количество точек экстремумов k' .

Для того, чтобы максимально точно восстановить амплитуды гармоник a_m , необходимо учитывать тот факт, что при Фурье-преобразовании на конечном интервале T неизбежно происходит перераспределение энергий между основными пиками и боковыми лепестками, что, в свою очередь, приводит к уменьшению амплитуд основных пиков. Поскольку энергия гармоник пропорциональна квадрату амплитуды, то

$$|a_{k'}|^2 \approx |\tilde{a}_{k'}|^2 = \sum_{k=k'-\Delta k}^{k'+\Delta k} |G_k|^2. \quad (20.18)$$

Параметр Δk определяет диапазон частот, по которому производится суммирование. Увеличение Δk повышает точность вычислений, однако чрезмерное увеличение данного параметра может привести к тому, что в частотный интервал $[k' - \Delta k, k' + \Delta k]$ могут попасть пики, соответствующие другим гармоникам $g(t)$. На практике обычно используют следующий критерий для определения Δk . Проводят вычисление суммы (20.18) при некотором начальном значении Δk . Затем удваивают величину Δk и снова проводят вычисление (20.18). Этот процесс повторяют до тех пор, пока не будет выполнено условие:

$$\left| \sum_{k=k'-\Delta k}^{k'+\Delta k} |G_k|^2 - \sum_{k=k'-2\Delta k}^{k'+2\Delta k} |G_k|^2 \right| < \varepsilon \quad (20.19)$$

где ε - задаваемая точность вычислений амплитуд гармоник.

Амплитуды колебаний частиц, очевидно, являются вещественными величинами. Если проводится вещественное Фурье-

преобразование (т.е. разложение по синусам и/или косинусам), то величины G являются вещественными числами и окончательное выражение для приближенных значений амплитуд имеет вид:

$$\tilde{a}_{k'} = \text{sign}(G_{k'}) \sqrt{\sum_{k=k'-\Delta k}^{k'+\Delta k} |G_k|^2}, \quad (20.20)$$

Если же проводится комплексное Фурье-преобразование, то следует учитывать тот факт, что вещественная и мнимая части комплексной амплитуды G меняют свой знак при переходе через частоту соответствующей гармоники $\tilde{\omega}$. Частота экстремума $\omega_{k'}$, определенная нами численным методом при дискретном Фурье-преобразовании, может как совпадать с истинной частотой соответствующей гармоники $\tilde{\omega}$, так и находиться слева либо справа от нее. Можно гарантировать лишь, что

$$|\tilde{\omega} - \omega_{k'}| < \delta\omega = \frac{2\pi}{T} \quad (20.21)$$

По этой причине знаки вещественной и мнимой части G в точке k' могут содержать неправильную информацию о знаке амплитуды $a_{k'}$. Для того, чтобы правильно определить знак $a_{k'}$, необходимо брать значение вещественной и мнимой части G не в самой точке k' , а, например, в соседней справа, т.е. в точке $k' + 1$. В этом случае выражение для приближенных значений амплитуд может быть записано в виде:

$$\tilde{a}_{k'} = -\text{sign}(\text{Im}(G_{k'+1})) \sqrt{\sum_{k=k'-\Delta k}^{k'+\Delta k} |G_k|^2}. \quad (20.22)$$

**§ 21. Вычисление координат собственных векторов
L-матрицы, соответствующих наблюдаемым
частицам**

Как указывалось выше, наблюдаемыми характеристиками являются зависимости амплитуд колебаний наблюдаемых частиц от времени t . Обозначим посредством $g^{\beta,\gamma}(t)$ соответствующие этим частицам зависимости амплитуд колебаний от времени (см. (8.13), (8.14) и (20.15)):

$$g^{\beta,\gamma}(t) = \sum_{j=1}^M a_j^{\beta,\gamma} \sin(\omega_j t)$$

Здесь $\beta, \gamma = 1, 2, \dots, n$, где n - число наблюдаемых частиц, а M - полное число колебаний системы. Частоты

$$\omega_j = \sqrt{\lambda_j}, \quad (21.1)$$

где λ_j - собственные значения **L**-матрицы. Для удобства будем рассматривать случай положительно определенных матриц, когда $\lambda_j > 0$ ($j = 1, 2, \dots, M$). Если это не так, то всегда можно перейти к матрице

$$\mathbf{L}' = \mathbf{L} + c\mathbf{I}, \quad (21.2)$$

где константа $c > |\lambda_1|$ ($\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_M$). Такой переход изменит лишь несущественные для нашего рассмотрения диагональные элементы **L**-матрицы.

Амплитуды $a_j^{\beta,\gamma}$ связаны с компонентами собственных волновых векторов $\varphi(\beta, j)$ **L**-матрицы следующим образом (см. (8.13), (8.14) и замечание после (20.15)):

$$a_j^{\beta,\gamma} = \frac{\varphi(\beta, j)\varphi(\gamma, j)}{\omega_j}. \quad (21.3)$$

Откуда окончательно получаем:

$$g^{\beta,\gamma}(t) = \sum_{j=1}^M \frac{\varphi(\beta, j)\varphi(\gamma, j)}{\omega_j} \sin(\omega_j t) \quad (21.4)$$

Проведя дискретное Фурье-преобразование для каждой функции $g^{\beta,\gamma}(t)$, получаем наборы (массивы) комплексных амплитуд $G_k^{\beta,\gamma}$, соответствующих частотам ω_k (20.8).

Анализ этих данных, описанный в § 20., позволяет получить наборы приближенных значений частот $\{\tilde{\omega}\}^{\beta,\gamma}$ и амплитуд $\{\tilde{a}\}^{\beta,\gamma}$ экстремумов функций $G_k^{\beta,\gamma}$.

Примечание. Здесь и далее значок $\tilde{}$ (тильда) обозначает, что соответствующая величина определена приближенно (численно).

$$\begin{aligned} \{\tilde{\omega}\}^{\beta,\gamma} &= \tilde{\omega}_1^{\beta,\gamma}, \tilde{\omega}_2^{\beta,\gamma}, \dots, \tilde{\omega}_{M^{\beta,\gamma}}^{\beta,\gamma}. \\ \{\tilde{a}\}^{\beta,\gamma} &= \tilde{a}_1^{\beta,\gamma}, \tilde{a}_2^{\beta,\gamma}, \dots, \tilde{a}_{M^{\beta,\gamma}}^{\beta,\gamma}. \end{aligned}$$

Важно отметить, что при Фурье-анализе реальных спектров $M^{\beta,\gamma}$ может не совпадать с M . Так, например, в некоторых спектрах могут обнаруживаться паразитные гармоники. В этом случае $M^{\beta,\gamma} > M$. В других случаях $M^{\beta,\gamma}$ может быть меньше, чем M . Такое может произойти, если амплитуда соответствующей гармоники настолько мала, что ее невозможно выделить на фоне шумов. Другая возможная причина - вырождение спектра \mathbf{L} -матрицы.

Для того, чтобы исключить паразитные гармоники и максимально точно восстановить спектр колебаний системы, необходимо провести анализ всех наборов частот $\{\tilde{\omega}\}^{\beta,\gamma}$. В силу симметрии

$$g^{\beta,\gamma}(t) = g^{\gamma,\beta}(t),$$

достаточно провести такой анализ для $\beta = 1, 2, \dots, n$ и $\gamma = \beta, \beta + 1, \dots, n$. Объединяя полученные наборы приближенных значений частот, получаем “сводную таблицу частот”:

$$\{\tilde{\Omega}\} = \bigcup_{\beta, \gamma} \{\tilde{\omega}\}^{\beta, \gamma}$$

Из этой таблицы необходимо исключить “паразитные частоты” $\{\tilde{\omega}'\}$, неизбежно возникающие при Фурье анализе реальных сигналов из-за шумов. Оценки показывают, что если некоторая частота $\tilde{\omega}'$ встречается в наборах частот $\{\tilde{\omega}\}^{\beta, \gamma}$ менее чем $n/2$ раз, то такую частоту можно считать паразитной.

Далее, необходимо привести таблицы амплитуд $\{\tilde{a}\}^{\beta, \gamma}$ в соответствие с $\{\tilde{\Omega}\}$:

- Если некоторая частота $\tilde{\omega}_{m'}^{\beta, \gamma}$ отсутствует в сводной таблице частот $\{\tilde{\Omega}\}$ (т.е. данная частота является паразитной), то соответствующая ей амплитуда $\tilde{a}_{m'}^{\beta, \gamma}$ исключается из списка амплитуд $\{\tilde{a}\}^{\beta, \gamma}$.
- Если же некоторая частота $\tilde{\omega}_{m'}$ из таблицы $\{\tilde{\Omega}\}$ отсутствует в списке $\{\tilde{\omega}\}^{\beta, \gamma}$, то это означает, что соответствующая ей амплитуда $\{\tilde{a}\}^{\beta, \gamma}$ крайне мала:

$$|\tilde{a}_{m'}^{\beta, \gamma}| \lesssim \varepsilon = 1/N.$$

Здесь N - количество точек разбиения интервала частот (20.6). Столь малый пик в последовательности чисел $G_k^{\beta, \gamma}$ зачастую не может быть обнаружен численно методом, описанным в § 20. В этом случае будем считать, что

$$\tilde{a}_{m'}^{\beta, \gamma} = -\text{sign}(\text{Im}(G_{m'+1}^{\beta, \gamma})) |G_{m'}^{\beta, \gamma}|.$$

Это значение амплитуды добавляется в список $\{\tilde{a}\}^{\beta, \gamma}$. Хотелось бы заметить, что “огрубление” малых амплитуд (т.е. приравнивание нулю $\tilde{a}_{m'}^{\beta, \gamma}$) существенно увеличивает ошибки при вычислении координат собственных векторов $\tilde{\varphi}(\beta, j)$.

Следующим шагом является вычисление координат собственных векторов $\tilde{\varphi}$ по восстановленным амплитудам $\{\tilde{a}\}^{\beta,\gamma}$ и частотам $\{\tilde{\Omega}\}$. Для повышения точности вычислений здесь также необходимо уделить особое внимание малым амплитудам (т.е. амплитудам $\lesssim 1/N$). Прежде всего, вычислим первые координаты всех собственных векторов $\tilde{\varphi}(\beta, j)$. Если соответствующая амплитуда $\tilde{a}_j^{1,1}$ не слишком мала ($|\tilde{a}_j^{1,1}| > 1/N$), то согласно (21.3).

$$\tilde{\varphi}(1, j) = \sqrt{\tilde{a}_j^{1,1} \tilde{\Omega}_j} \quad j = 1, 2, \dots, M \quad (21.5)$$

(для удобства будем считать, что первые координаты всех векторов $\tilde{\varphi}$ неотрицательны). Если же $|\tilde{a}_j^{1,1}| < \varepsilon$, то погрешность при использовании выражения (21.5) становится существенной и для ее уменьшения необходимо вычислять $\tilde{\varphi}(1, j)$ иным способом. Для этого найдем β' , реализующее максимум модуля амплитуд $|\tilde{a}_j^{\beta,\beta}|$:

$$\beta' = \max_{\beta=2,3,\dots,n} |\tilde{a}_j^{\beta,\beta}|$$

Тогда, согласно (21.3):

$$\tilde{\varphi}(1, j) = \frac{|\tilde{a}_j^{1,\beta'}| \sqrt{\tilde{\omega}_j}}{\sqrt{\tilde{a}_j^{\beta',\beta'}}}, \quad j = 1, 2, \dots, M. \quad (21.6)$$

Вычисление остальных координат собственных векторов $\tilde{\varphi}(\beta, j)$ ($\beta = 2, 3, \dots, n$) происходит аналогично. Отличие заключается лишь в том, что знаки этих координат уже не могут быть выбраны произвольным образом. Для примера рассмотрим вычисление второй координаты – $\tilde{\varphi}(2, j)$. Если $|\tilde{a}_j^{2,1}| > \varepsilon$, то, согласно (21.3):

$$\tilde{\varphi}(2, j) = \frac{\tilde{a}_j^{2,1} \tilde{\omega}_j}{\tilde{\varphi}(1, j)}, \quad j = 1, 2, \dots, M.$$

В противном случае, для увеличения точности вычислений следует воспользоваться следующим выражением (см. (20.22)):

$$\tilde{\varphi}(2, j) = \frac{|\tilde{a}_j^{2, \beta'}| \sqrt{\tilde{\omega}_j}}{\sqrt{\tilde{a}_j^{\beta', \beta'}}} \text{sign}(\tilde{a}_j^{2, 1}) \quad j = 1, 2, \dots, M,$$

где

$$\beta' = \max_{\substack{\beta=1, \dots, n \\ \beta \neq 2}} |\tilde{a}_j^{\beta, \beta}|.$$

Таким образом удается численно определить координаты собственных векторов $\tilde{\varphi}(\beta, j)$, соответствующие наблюдаемым частицам. Важно отметить, что несмотря на то, что погрешности, возникающие при определении $\tilde{a}_j^{2, 1}$, могут быть существенными, знак этой величины определяется достоверно при использовании данного численного метода.

§ 22. Численный метод ортогонализации набора векторов

Матрица Φ , составленная из собственных векторов $\varphi(\beta, j)$ L -матрицы, является ортогональной. Это означает, что

$$\sum_{\beta=1}^M \varphi(\beta, j) \varphi(\beta, j') = \delta(j, j'), \quad (22.1)$$

$$\sum_{j=1}^M \varphi(\beta, j) \varphi(\gamma, j) = \delta(\beta, \gamma). \quad (22.2)$$

Поскольку мы пользовались численными методами, условия (22.1) и (22.2) для $\tilde{\varphi}(\beta, j)$ могут и не выполняться. Анализ, описанный в предыдущем параграфе, позволяет вычислить первые n координат всех векторов $\tilde{\varphi}(\beta, j)$. Иными словами, нам известны первые n строк матрицы $\tilde{\Phi}$, составленной из численно определенных собственных векторов $\tilde{\varphi}(\beta, j)$. Обозначим посредством $\tilde{\mathbf{f}}_\beta$ вектор, компоненты которого равны матричным элементам β -й строки $\tilde{\Phi}$:

$$\tilde{\mathbf{f}}_\beta = \begin{cases} \tilde{\mathbf{f}}_\beta(1) = \tilde{\varphi}(\beta, 1) \\ \tilde{\mathbf{f}}_\beta(2) = \tilde{\varphi}(\beta, 2) \\ \dots \\ \tilde{\mathbf{f}}_\beta(M) = \tilde{\varphi}(\beta, M) \end{cases}. \quad (22.3)$$

Из (22.2) следует, что найденные нами векторы $\tilde{\mathbf{f}}_\beta$ должны быть ортонормированными:

$$(\tilde{\mathbf{f}}_\beta, \tilde{\mathbf{f}}_\gamma) = \delta(\beta, \gamma),$$

где символ (\cdot, \cdot) обозначает скалярное произведение векторов. Нормировка найденных векторов восстанавливается очевидным образом:

$$\tilde{\mathbf{f}}_\beta = \pm \frac{\tilde{\mathbf{f}}_\beta}{\sqrt{(\tilde{\mathbf{f}}_\beta, \tilde{\mathbf{f}}_\beta)}}. \quad (22.4)$$

В терминах переменных $\tilde{\varphi}(\beta, j)$ это выражение может быть записано следующим образом:

$$\tilde{\mathbf{f}}_\beta(j) = \tilde{\varphi}(\beta, j) = \pm \frac{\tilde{\varphi}(\beta, j)}{\sqrt{Z}}, \quad Z = \sum_{j=1}^M \tilde{\varphi}^2(\beta, j), \quad (22.5)$$

где $\beta = 1, 2, \dots, n$.

Восстановить ортогональность полученного набора векторов $\tilde{\mathbf{f}}_1, \tilde{\mathbf{f}}_2, \dots, \tilde{\mathbf{f}}_n$ или, как иногда говорят, реортогонализировать набор векторов, можно при помощи метода, описанного в § 4. Введем второй набор векторов $\tilde{\mathbf{g}}_1, \tilde{\mathbf{g}}_2, \dots, \tilde{\mathbf{g}}_n$ так, что

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{g}}_1 &= \tilde{\mathbf{f}}_1 \\ \tilde{\mathbf{g}}_2 &= \tilde{\mathbf{f}}_2 - \frac{(\tilde{\mathbf{f}}_2, \tilde{\mathbf{g}}_1)}{(\tilde{\mathbf{g}}_1, \tilde{\mathbf{g}}_1)} \tilde{\mathbf{g}}_1 \\ &\dots \\ \tilde{\mathbf{g}}_m &= \tilde{\mathbf{f}}_m - \sum_{k=1}^{m-1} \frac{(\tilde{\mathbf{f}}_m, \tilde{\mathbf{g}}_k)}{(\tilde{\mathbf{g}}_k, \tilde{\mathbf{g}}_k)} \tilde{\mathbf{g}}_k \end{aligned} \quad (22.6)$$

Легко проверить, что

$$(\tilde{\mathbf{g}}_\beta, \tilde{\mathbf{g}}_\gamma) = \delta(\beta, \gamma)$$

Компоненты векторов $\tilde{\mathbf{g}}_\beta$ являются уточненными матричными элементами β -й строки матрицы $\tilde{\Phi}$.

Заметим, что процедура восстановления ортогональности набора векторов определена неоднозначно. Набор векторов $\tilde{\mathbf{f}}_1, \tilde{\mathbf{f}}_2, \dots, \tilde{\mathbf{f}}_n$ можно перенумеровать произвольным образом. Иными словами, существует $n!$ вариантов восстановления ортогональности набора из n

векторов. Поскольку в данном случае все компоненты $\tilde{\varphi}(\beta, j)$ были определены с одинаковой точностью, то способ нумерации не влияет на точность получаемых результатов. Однако, как будет видно из следующего параграфа, при использовании рекуррентной процедуры вычисления координат собственных векторов точность получаемых результатов может существенно зависеть от выбора способа нумерации.

§ 23. Рекуррентный метод вычисления координат собственных векторов \mathbf{L} -матрицы

В предыдущих параграфах была описана процедура, которая позволяет численно восстановить координаты собственных векторов $\tilde{\varphi}$, соответствующие наблюдаемым частицам. Наша задача теперь состоит в том, чтобы вычислить (восстановить) остальные координаты $\tilde{\varphi}$. Для этого будет использована рекуррентная процедура вычисления координат $\tilde{\varphi}$, представляющая собой численную реализацию метода, описанного в § 13. и § 14. Аналогично (22.3) введем вектор $\tilde{\mathbf{f}}$. Согласно § 13. - § 14.,

$$\tilde{\mathbf{f}}_{\beta}(j) = \tilde{\varphi}(\alpha(\beta), j) \tilde{\lambda}_j - \sum_{\gamma=1}^{\beta-1} \sum_{j'=1}^M \tilde{\varphi}(\gamma, j) \tilde{\varphi}(\gamma, j') \tilde{\varphi}(\alpha(\beta), j') \tilde{\lambda}_{j'}. \quad (23.1)$$

Здесь $j = 1, 2, \dots, M$, где M - полное число колебаний системы, равное размерности \mathbf{L} . $\tilde{\lambda}_j = \tilde{\omega}_j^2$ - приближенные собственные значения \mathbf{L} -матрицы, а $\alpha(k)$ - способ нумерации частиц, описанный на стр. 138.

Важно отметить, что в (23.1) суммирование по γ производится от единицы до $\beta - 1$. Это означает, что вектор $\tilde{\mathbf{f}}_{\beta}$ выражается только через предыдущие векторы, т.е. через $\tilde{\mathbf{f}}_{\beta'}$, где $\beta' = 1, 2, \dots, \beta - 1$. Вычисленный таким образом вектор $\tilde{\mathbf{f}}_{\beta}$ должен быть ортогонален всем $\tilde{\mathbf{f}}_{\beta'}$:

$$(\tilde{\mathbf{f}}_{\beta}, \tilde{\mathbf{f}}_{\beta'}) = 0, \quad \beta' = 1, 2, \dots, \beta - 1. \quad (23.2)$$

После нормировки этого вектора (см. (22.4), (22.5)) мы, согласно (22.3), получаем β -ю координату всех собственных векторов $\tilde{\varphi}$, т.е. заполняем β -ю строку матрицы $\tilde{\Phi}$. Заметим, что знак в (22.4) и (22.5) определяется знаком соответствующего матричного элемента $\tilde{\mathbf{L}}_{\beta, \alpha(\beta)}$, где

$$\tilde{\mathbf{L}}_{\beta,\gamma} = \sum_{j=1}^M \tilde{\varphi}(\beta, j) \tilde{\varphi}(\gamma, j) \tilde{\lambda}_j. \quad (23.3)$$

Численный метод, описанный в предыдущем параграфе, позволяет вычислить первые n строк этой матрицы (напомним, n - число наблюдаемых частиц). Иными словами, нами уже определены $\tilde{\mathbf{f}}_\beta$, где $\beta = 1, 2, \dots, n$. Применяя последовательно формулу (23.1) с $\beta = n + 1, n + 2, \dots, M$ мы вычислим все координаты собственных векторов $\tilde{\varphi}$, т.е. полностью восстановим матрицу $\tilde{\Phi}$. Зная все матричные элементы $\tilde{\Phi}$, мы можем приближенно вычислить матричные элементы исходной \mathbf{L} -матрицы:

Таким образом, описанная в § 20. - § 23. процедура позволяет численно восстановить все координаты собственных векторов $\tilde{\varphi}$. Это, в свою очередь, позволяет восстановить \mathbf{L} -матрицу, т.е. численно решить обратную задачу теории малых колебаний.

Важное замечание. При численной реализации описанного выше метода ошибка в определении координат $\tilde{\varphi}$ экспоненциально нарастает на каждом шаге использования рекуррентной формулы (23.1). Причина заключается в нарушении условия (23.2). Как было показано в § 14., для выполнения этого условия необходимо, чтобы все матричные элементы \mathbf{L} в β -й строке были равны нулю, начиная с $\alpha(\beta) + 1$ элемента включительно. Матричные элементы восстанавливаемой матрицы $\tilde{\mathbf{L}}$ выражаются через величины $\tilde{\lambda}_j$ и $\tilde{\varphi}(\gamma, j)$ (см.(23.3)). Поскольку величины $\tilde{\lambda}_j$ и $\tilde{\varphi}(\gamma, j)$ были определены приближенно (численно), то они неизбежно будут содержать погрешность. В результате справа от $\alpha(\beta)$ -го матричного элемента в β -й строке могут содержаться малые, но отличные от нуля величины, что и приводит к нарушению ортогональности векторов $\tilde{\mathbf{f}}_\beta$.

Для того, чтобы уменьшить ошибку при вычислениях, необходимо на каждом шаге рекуррентной процедуры восстанавливать ортогональность набора векторов $\tilde{\mathbf{f}}$. Например, используя метод,

описанный в предыдущем параграфе. Заметим, что в данном случае порядок нумерации векторов $\tilde{\mathbf{f}}$ крайне важен. Ортогонализация на β -м шаге применений рекуррентной процедуры не должна изменять уже вычисленные векторы $\tilde{\mathbf{f}}_{\beta'}$, где $\beta' < \beta$. Это означает, согласно (22.6), что вектор $\tilde{\mathbf{f}}_{\beta}$ должен стоять на последнем месте в наборе векторов $\tilde{\mathbf{f}}$.

Вышесказанное иллюстрируют примеры, приведенные в следующем параграфе. Поскольку исходные \mathbf{L} -матрицы этих моделей известны, можно произвести их полную точную численную диагонализацию. Под термином “полная” подразумевается, что вычисляются все собственные векторы $\varphi(\beta, j)$ и собственные значения λ_j \mathbf{L} -матрицы. Такую численную диагонализацию можно провести, используя, например, метод Якоби (Jacobi method) или преобразование Хаусхолдера (Householder transformation). Термин “точная” подразумевает, что ошибки при вычислении собственных векторов и собственных значений определяются исключительно точностью, с которой вычислительные системы проводят операции над вещественными числами. Эта величина на много порядков меньше погрешностей при численном решении обратной задачи теории малых колебаний и мы вправе считать, что $\varphi(\beta, j)$ - точные собственные векторы, а λ_j - точные собственные значения \mathbf{L} . Зная $\varphi(\beta, j)$ и λ_j можно построить функции $g^{\beta, \gamma}(t)$ (см. (21.3), (21.4)). Произведя численное решение обратной задачи теории малых колебаний (§ 21.-§ 23.), мы получаем приближенные значения координат собственных векторов $\tilde{\varphi}(\beta, j)$ и частот $\tilde{\omega}_j$.

В Таблице 3 следующего параграфа приведены относительные погрешности

$$E(\beta) = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \left| \frac{\tilde{\varphi}(\beta, j) - \varphi(\beta, j)}{\varphi(\beta, j)} \right|, \quad (23.4)$$

возникающие при вычислении β -й компоненты векторов $\tilde{\varphi}(\beta, j)$. Эти данные были получены при проведении дискретного Фурье-преобразования с $N = 5 \cdot 10^6$ и $\Delta t = 1$ в Примере №1. В этом

примере общее число частиц $M = 18$, а количество наблюдаемых частиц $n = 4$. Как видно из таблицы, ошибка, возникающая при вычислении первых четырех координат, не превышает 10^{-3} . Последовательное применение рекуррентной процедуры без восстановления ортогональности (третья колонка Таблицы 3) приводит к тому, что на последнем (14-м) шаге, соответствующем определению 18-х координат собственных векторов, эта ошибка уже порядка 10^1 , т.е. возрастает примерно на 4 порядка. Восстановление ортогональности (четвертая колонка) позволяет стабилизировать рекуррентную процедуру. Как видно, погрешность вычислений в этом случае возрастает примерно на один порядок.

Важными критериями, позволяющими оценить точность численного метода, являются величины относительной погрешности при восстановлении нормы \mathbf{L} -матрицы:

$$E_N = \left| \frac{\|\tilde{\mathbf{L}}\| - \|\mathbf{L}\|}{\|\mathbf{L}\|} \right|, \quad (23.5)$$

где

$$\|\mathbf{L}\| = \max_{1 \leq i \leq M} \sum_{k=1}^M |l_{i,k}|, \quad (23.6)$$

а также суммарная относительная погрешность при вычислении матричных элементов

$$E_M = \frac{1}{M^2} \sum_{\beta=1}^M \sum_{j=1}^M \left| \frac{\tilde{\varphi}(\beta, j) - \varphi(\beta, j)}{\varphi(\beta, j)} \right| = \frac{1}{M} \sum_{\beta=1}^M E(\beta).$$

Разумеется, погрешности E_N , $E(\beta)$ и E_M доступны для вычислений только в том случае, когда известна исходная матрица взаимодействий. Такая ситуация возникает, например, при решении модельных задач, рассмотренных в следующем параграфе. При решении же реальных задач единственной информативной величиной,

позволяющей оценить точность вычислений, является значение погрешности E_O , характеризующее нарушение ортогональности матрицы $\tilde{\Phi}$ (см. (22.1), (22.2))

$$E_O = \max_{k \neq k'} \{E_1(k, k'), E_2(k, k')\} \quad (23.7)$$

где

$$E_1(k, k') = \frac{\left| \sum_{j=1}^M \tilde{\varphi}(k, j) \tilde{\varphi}(k', j) \right|}{\sqrt{\sum_{j=1}^M \tilde{\varphi}^2(k, j) \sum_{j=1}^M \tilde{\varphi}^2(k', j)}}$$

и

$$E_2(k, k') = \frac{\left| \sum_{j=1}^M \tilde{\varphi}(j, k) \tilde{\varphi}(j, k') \right|}{\sqrt{\sum_{j=1}^M \tilde{\varphi}^2(j, k) \sum_{j=1}^M \tilde{\varphi}^2(j, k')}}.$$

В следующем параграфе будет показано, что применение рекуррентной процедуры без последовательного восстановления ортогональности набора векторов $\tilde{\mathbf{f}}$ приводит к тому, что величина E_O может достигать значений порядка 1, т.е. происходит полное разрушение ортогональности матрицы $\tilde{\Phi}$. Применение процедуры восстановления ортогональности позволяет существенно уменьшить E_N , E_M , $E(\beta)$ и E_O .

§ 24. Примеры численного решения обратной задачи теории малых колебаний

В данном параграфе рассмотрены конкретные примеры численного решения обратной задачи теории малых колебаний на примерах моделей, приведенных в § 15. и § 18.. Все вычисления проводились как с использованием библиотеки для численного Фурье-преобразования `fftw3`, так и с использованием библиотеки `cufft`, предназначенной для работы с графическими сопроцессорами. Результаты вычислений полностью совпадают. Точность вычисления амплитуд ε (20.19) принималась равной $1/N$, где N - число точек разбиения интервалов по времени и по частоте.

Пример №1. Начнем с описания примера, частично рассмотренного в предыдущем параграфе. Данная модель состоит из 18 частиц ($M = \#\mathfrak{A} = 18$), а вполне \mathbf{L} -продолжимое подмножество $\mathfrak{B}(4) \subset \mathfrak{A}$ состоит из четырех частиц, т.е. $n = 4$. Граф этой модели изображен на Рис. 5. Способ нумерации частиц $\alpha(s)$, описанный на стр. 138, имеет вид (см. Рис. 6):

$$\begin{aligned} \alpha(5) &= 1, & \alpha(6) &= 5, & \alpha(7) &= 2, & \alpha(8) &= 7, & \alpha(9) &= 3, \\ \alpha(10) &= 8, & \alpha(11) &= 10, & \alpha(12) &= 6, & \alpha(13) &= 12, & \alpha(14) &= 4, \\ \alpha(15) &= 11, & \alpha(16) &= 15, & \alpha(17) &= 14, & \alpha(18) &= 17 \end{aligned}$$

Отличные от нуля элементы исходной \mathbf{L} -матрицы были выбраны следующим образом (в силу симметрии, $\mathbf{L}_{i,k} = \mathbf{L}_{k,i}$):

Константа c (21.2), отвечающая за “сдвиг” частот, принималась равной $c = 1.5|\lambda_{min}| = 2.4558$. Фурье-преобразование проводилось при $N = 5 \cdot 10^6$ и $\Delta t = 1$.

Значения “исходных” ω и “восстановленных” $\tilde{\omega}$ частот, а также относительные погрешности приведены в Таблице 1. Эти погрешности не превышают величины $6 \cdot 10^{-7}$, что укладывается в диапазон (20.21), поскольку $\delta\omega = \frac{2\pi}{T} \approx 10^{-6}$.

$$\begin{array}{llll}
 \mathbf{L}_{1,1} = 2.0, & \mathbf{L}_{2,2} = 3.0, & \mathbf{L}_{3,3} = 1.0, & \mathbf{L}_{4,4} = 1.0, \\
 \mathbf{L}_{5,5} = 2.0 & \mathbf{L}_{6,6} = 1.0, & \mathbf{L}_{7,7} = 1.0, & \mathbf{L}_{8,8} = 2.0, \\
 \mathbf{L}_{9,9} = 3.0, & \mathbf{L}_{10,10} = 1.0, & \mathbf{L}_{11,11} = 0.5, & \mathbf{L}_{12,12} = 3.0, \\
 \mathbf{L}_{13,13} = 2.0, & \mathbf{L}_{14,14} = 1.0, & \mathbf{L}_{15,15} = 2.0, & \mathbf{L}_{16,16} = 1.0, \\
 \mathbf{L}_{17,17} = 2.0, & \mathbf{L}_{18,18} = 1.0, & \mathbf{L}_{1,2} = 0.5, & \mathbf{L}_{1,3} = 0.1, \\
 \mathbf{L}_{1,4} = -1.0, & \mathbf{L}_{1,5} = -2.0, & \mathbf{L}_{2,3} = 1.0, & \mathbf{L}_{2,4} = 1.0, \\
 \mathbf{L}_{2,7} = -0.5, & \mathbf{L}_{3,4} = 0.5, & \mathbf{L}_{3,9} = -0.7, & \mathbf{L}_{4,14} = -0.5, \\
 \mathbf{L}_{5,6} = -1.0, & \mathbf{L}_{6,12} = -1.0, & \mathbf{L}_{7,8} = -2.0, & \mathbf{L}_{8,10} = -1.0, \\
 \mathbf{L}_{10,11} = -2.0, & \mathbf{L}_{11,15} = -1.0, & \mathbf{L}_{12,13} = -1.0, & \mathbf{L}_{14,17} = -1.0, \\
 \mathbf{L}_{15,16} = -0.5, & \mathbf{L}_{17,18} = -1.0 & &
 \end{array}$$

Погрешности $E(\beta)$ (23.4), возникающие при вычислении координат векторов $\tilde{\varphi}$, приведены в Таблице 3. Анализ данных из этой таблицы был проведен в предыдущем параграфе.

Норма исходной матрицы \mathbf{L}' с учетом “сдвига” (см. (21.2), (23.6)) равна:

$$\|\mathbf{L}'\| = 8.4558$$

При использовании рекуррентного метода вычисления координат собственных векторов без восстановления ортогональности набора векторов $\tilde{\mathbf{f}}$ норма восстановленной матрицы равна:

$$\|\tilde{\mathbf{L}}\| = 15.5310$$

При восстановлении ортогональности (см. предыдущий параграф) норма $\tilde{\mathbf{L}}$ равна:

$$\|\tilde{\mathbf{L}}\| = 8.4559$$

Погрешности E_N , E_M и E_O , возникающие при проведении рекуррентной процедуры без и с использованием процедуры восстановления ортогональности, приведены в Таблице 2. Как видно из таблицы, восстановление ортогональности позволяет уменьшить погрешность при вычислении матричных элементов (E_M) примерно на 3 порядка, ошибку вычислений нормы \mathbf{L} -матрицы (E_N) почти на 6 порядков, а E_O - примерно на 10 порядков!

§ 24. Примеры численного решения обратной задачи

	ω_j	$\tilde{\omega}_j$	$E(j)$
1	0.9047655834701692	0.9047661178632460	$5.90642 \cdot 10^{-7}$
2	1.2683983298205979	1.2683979276938959	$3.17035 \cdot 10^{-7}$
3	1.3872378637805305	1.3872380945938907	$1.66383 \cdot 10^{-7}$
4	1.5381895866526829	1.5381891083247574	$3.10968 \cdot 10^{-7}$
5	1.6535659821064672	1.6535659834834346	$8.32726 \cdot 10^{-10}$
6	1.7004453570366576	1.7004448290603016	$3.10492 \cdot 10^{-7}$
7	1.8048447703813317	1.8048449794873360	$1.15858 \cdot 10^{-7}$
8	1.8395338147036855	1.8395331889312134	$3.40179 \cdot 10^{-7}$
9	1.9396381803821205	1.9396381538822598	$1.36622 \cdot 10^{-8}$
10	2.0517018658666601	2.0517012771099306	$2.86960 \cdot 10^{-7}$
11	2.0782802385681967	2.0782804075963615	$8.13307 \cdot 10^{-8}$
12	2.3235387147116575	2.3235382628768098	$1.94459 \cdot 10^{-7}$
13	2.3387286612403897	2.3387284916754467	$7.25030 \cdot 10^{-8}$
14	2.3600117624082393	2.3600121535849872	$1.65752 \cdot 10^{-7}$
15	2.4996544594987946	2.4996546903999919	$9.23732 \cdot 10^{-8}$
16	2.5050368885889340	2.5050368669341223	$8.64450 \cdot 10^{-9}$
17	2.5718888196509258	2.5718887019654511	$4.57583 \cdot 10^{-8}$
18	2.6176795869689014	2.6176792998471150	$1.09685 \cdot 10^{-7}$

Таблица 1: Пример №1. Точные (ω_j) и численно определенные ($\tilde{\omega}_j$) частоты колебаний. Последняя колонка - относительная погрешность вычислений.

Пример №2. Одномерная цепочка с взаимодействием между ближайшими соседями и циклическими граничными условиями (кольцо).

Данная модель описана на стр. 180 (см. Рис. 7). Без учета граничных условий отличными от нуля являются матричные элементы вида $\mathbf{L}_{\alpha,\alpha}$ и $\mathbf{L}_{\alpha,\alpha+1} = \mathbf{L}_{\alpha+1,\alpha}$. В силу периодических граничных условий добавляются ненулевые матричные элементы, соответствующие взаимодействию последней частицы в цепочке с первой: $\mathbf{L}_{1,M} = \mathbf{L}_{M,1}$. Для простоты вычислений, чтобы избежать появления вырожденных частот колебаний, мы будем считать эти матрич-

	без реортогонализации	с реортогонализацией
E_N	$8.3672 \cdot 10^{-1}$	$7.4205 \cdot 10^{-6}$
E_M	$9.3291 \cdot 10^{-2}$	$9.3313 \cdot 10^{-5}$
E_O	$9.2951 \cdot 10^{-1}$	$7.077 \cdot 10^{-11}$

Таблица 2: Погрешности E_N , E_M и E_O , возникающие при проведении рекуррентной процедуры без и с использованием процедуры восстановления ортогональности в Примере №1.

ные элементы отличными от $\mathbf{L}_{\alpha, \alpha+1}$. Физически это соответствует случаю, когда одна связь отличается от остальных.

Исходная матрица взаимодействий была выбрана в виде:

$$\begin{aligned} \mathbf{L}_{\alpha, \alpha} &= 1.6 \\ \mathbf{L}_{\alpha, \alpha+1} &= \mathbf{L}_{\alpha+1, \alpha} = -1.0 \quad (\alpha < M) \\ \mathbf{L}_{1, M} &= \mathbf{L}_{M, 1} = -1.5 \end{aligned}$$

Рассматривалась система из 36 частиц ($M = 36$), число наблюдаемых частиц $n = 2$. Способ нумерации частиц $\alpha(s)$ для этой модели имеет простой вид:

$$\alpha(s) = s - 1, \quad s = 3, 4, \dots, M. \quad (24.1)$$

Фурье-преобразование проводилось при $N = 5 \cdot 10^6$ и $\Delta t = 1$. Константа $c = 1.5|\lambda_{min}| = 0.85$ (см. (21.2)).

Норма исходной матрицы \mathbf{L}' (с учетом “сдвига” (21.2)) равна:

$$\|\mathbf{L}'\| = 4.95$$

Норма матрицы без восстановления ортогональности:

$$\|\tilde{\mathbf{L}}\| = 51.7252$$

Норма матрицы с восстановлением ортогональности:

$$\|\tilde{\mathbf{L}}\| = 4.9517$$

Аналогично Примеру №1, погрешности E_N , E_M и E_O , возникающие при проведении рекуррентной процедуры без и с использованием процедуры восстановления ортогональности, приведены в Таблице 4.

Пример №3. Одномерная цепочка с циклическими граничными условиями (кольцо), в которой одна из частиц взаимодействует со всеми соседями, а остальные - только с ближайшими.

Модель описана на стр. 184 (см. Рис. 11). Аналогично Примеру №2, отличными от нуля являются матричные элементы вида:

$$\begin{aligned} \mathbf{L}_{\alpha,\alpha} &= 1.6 \\ \mathbf{L}_{\alpha,\alpha+1} &= \mathbf{L}_{\alpha+1,\alpha} = -1.0 \quad (\alpha < M) \\ \mathbf{L}_{1,M} &= \mathbf{L}_{M,1} = -1.5 \end{aligned}$$

Кроме того, первая частица взаимодействует со всеми соседями, поэтому добавляются ненулевые матричные элементы вида:

$$\mathbf{L}_{1,k} = \mathbf{L}_{k,1} = -(r_k/a_0)^{-\delta}, \quad k = 3, 4, \dots, M-1$$

где

$$\begin{aligned} r_k &= \sqrt{2 \left[1 - \cos \left(\frac{2\pi(k-1)}{M} \right) \right]}, \\ a_0 &= \sqrt{2 \left[1 - \cos \left(\frac{2\pi}{M} \right) \right]} \end{aligned}$$

Параметр δ , отвечающий за скорость убывания потенциальной энергии взаимодействия частиц, был выбран $\delta = 3$.

Рассматривалась система из 36 частиц ($M = 36$), число наблюдаемых частиц $n = 2$. Фурье-преобразование проводилось при

$N = 5 \cdot 10^6$ и $\Delta t = 1$. Способ нумерации частиц имеет вид (24.1).
 Константа $c = 1.5|\lambda_{min}| = 1.0059$ (21.2).
 Норма исходной матрицы \mathbf{L}' (с учетом “сдвига” (21.2)) равна:

$$\|\mathbf{L}'\| = 5.5278$$

β	Шаг рекуррентной процедуры	Погрешность вычислений $E(\beta)$	
		без реортогонализации	с реортогонализацией
1	—	$6.9457 \cdot 10^{-4}$	$6.9457 \cdot 10^{-4}$
2	—	$2.6030 \cdot 10^{-4}$	$2.6030 \cdot 10^{-4}$
3	—	$2.7575 \cdot 10^{-4}$	$2.7575 \cdot 10^{-4}$
4	—	$7.5431 \cdot 10^{-5}$	$7.5431 \cdot 10^{-5}$
5	1	$4.3157 \cdot 10^{-4}$	$1.3486 \cdot 10^{-4}$
6	2	$1.3440 \cdot 10^{-3}$	$5.4195 \cdot 10^{-4}$
7	3	$2.6236 \cdot 10^{-3}$	$2.5069 \cdot 10^{-4}$
8	4	$3.2536 \cdot 10^{-3}$	$1.2921 \cdot 10^{-4}$
9	5	$3.8031 \cdot 10^{-2}$	$3.3290 \cdot 10^{-4}$
10	6	1.1563	$1.1795 \cdot 10^{-3}$
11	7	$2.0759 \cdot 10^{-2}$	$1.7137 \cdot 10^{-4}$
12	8	$6.1411 \cdot 10^{-1}$	$3.0537 \cdot 10^{-4}$
13	9	8.9534	$6.0838 \cdot 10^{-4}$
14	10	$2.5171 \cdot 10^{-1}$	$4.2604 \cdot 10^{-4}$
15	11	$5.0722 \cdot 10^{-1}$	$2.6642 \cdot 10^{-4}$
16	12	$5.6619 \cdot 10^{-1}$	$1.3031 \cdot 10^{-3}$
17	13	3.1915	$6.9546 \cdot 10^{-3}$
18	14	6.3694	$1.5720 \cdot 10^{-3}$

Таблица 3: Ошибка при вычислении координат векторов $\tilde{\varphi}$ без и с использованием процедуры восстановления ортогональности в Примере №1.

Норма матрицы без восстановления ортогональности:

$$\|\tilde{\mathbf{L}}\| = 59.0775$$

§ 24. Примеры численного решения обратной задачи

	без реортогонализации	с реортогонализацией
E_N	9.4495	$3.4634 \cdot 10^{-4}$
E_M	$4.2564 \cdot 10^{-1}$	$2.5558 \cdot 10^{-5}$
E_O	$9.9957 \cdot 10^{-1}$	$3.3611 \cdot 10^{-10}$

Таблица 4: Погрешности E_N , E_M и E_O , возникающие при проведении рекуррентной процедуры без и с использованием процедуры восстановления ортогональности в Примере №2.

Норма матрицы с восстановлением ортогональности:

$$\|\tilde{\mathbf{L}}\| = 5.5274$$

Погрешности E_N , E_M и E_O , возникающие при проведении рекуррентной процедуры без и с использованием процедуры восстановления ортогональности, приведены в Таблице 5.

	без реортогонализации	с реортогонализацией
E_N	9.6873	$6.7835 \cdot 10^{-5}$
E_M	$2.4618 \cdot 10^2$	$1.2058 \cdot 10^{-2}$
E_O	1.0	$5.8188 \cdot 10^{-10}$

Таблица 5: Погрешности E_N , E_M и E_O , возникающие при проведении рекуррентной процедуры без и с использованием процедуры восстановления ортогональности в Примере №3.

Пример №4. Квадратная решетка с взаимодействием между ближайшими соседями и открытыми граничными условиями.

Эта модель описана на стр. 185 (см. Рис. 12). Аналогично Примерам №2 и 3, для простоты вычислений введем некоторую “анизотропию” взаимодействий, чтобы избежать появления вырожденных частот. Будем считать, что горизонтальные взаимодействия u_{xx} от-

личаются от вертикальных u_{yy} :

$$u_{xx} \neq u_{yy}.$$

Отличные от нуля матричные элементы имеют вид:

$$\mathbf{L}_{\beta,\beta} = u_0 \quad \beta = 1, 2, \dots, M,$$

$$\mathbf{L}_{\beta,\gamma} = u_{xx},$$

где

$$\beta = hy + x,$$

$$\gamma = hy + x + 1 \quad (\gamma < M),$$

$$x, y = 0, 1, \dots, h - 1.$$

Здесь h - линейные размеры системы ($M = h \times h$). Кроме того, отличны от нуля

$$\mathbf{L}_{\beta,\gamma} = u_{yy},$$

где

$$\beta = hy + x,$$

$$\gamma = h(y + 1) + x \quad (\gamma < M),$$

$$x, y = 0, 1, \dots, h - 1.$$

Рассматривалась система из 64 частиц ($M = h^2 = 64$), число наблюдаемых частиц $n = h = 8$. Фурье-преобразование проводилось при $N = 2 \cdot 10^6$ и $\Delta t = 0.8824$. Способ нумерации частиц имеет вид:

$$\alpha(s) = s - n, \quad s = n + 1, \dots, M.$$

Приведенные ниже результаты получены при $u_0 = 1.6$, $u_{xx} = -1.4$ и $u_{yy} = -1.0$. Константа $c = 1.5|\lambda_{min}| = 4.3658$ (см. (21.2)).

Норма исходной матрицы \mathbf{L}' (с учетом “сдвига” (21.2)) равна:

$$\|\mathbf{L}'\| = 10.7658$$

Норма матрицы без восстановления ортогональности:

$$\|\tilde{\mathbf{L}}\| = 214.6394$$

Норма матрицы с восстановлением ортогональности:

$$\|\tilde{\mathbf{L}}\| = 11.1155$$

Погрешности E_N , E_M и E_O , возникающие при проведении рекуррентной процедуры без и с использованием процедуры восстановления ортогональности, приведены в Таблице 6.

	без реортогонализации	с реортогонализацией
E_N	$1.8937 \cdot 10^1$	$3.2482 \cdot 10^{-2}$
E_M	1.592	$3.1160 \cdot 10^{-3}$
E_O	1.0	$2.9927 \cdot 10^{-9}$

Таблица 6: Погрешности E_N , E_M и E_O , возникающие при проведении рекуррентной процедуры без и с использованием процедуры восстановления ортогональности в Примере №4.

Приведенные выше примеры демонстрируют использование численных методов для решения обратной задачи теории малых колебаний. Из них видно, в частности, что восстановление ортогональности матрицы $\tilde{\Phi}$ при использовании рекуррентной процедуры определения компонент собственных векторов $\tilde{\varphi}$ матрицы \mathbf{L} позволяет существенно уменьшить погрешности вычислений. Такая ситуация, вообще говоря, встречается достаточно часто при использовании приближенных численных методов. Особенно ярко эффекты накопления ошибок проявляются при использовании итерационных

и рекуррентных методов. Так, например, для повышения точности вычислений при использовании итерационного метода Ланцоша (Lanczos method), применяемого для нахождения собственных векторов и собственных значений самосопряженных операторов, также используется процедура дополнительной реортогонализации базиса.

Литература

- [1] Агранович З.С., Марченко В.А., Обратная задача теории рассеяния. — Харьков: изд. Харьковского университета, 1960.
- [2] Ахиезер Н.И., Континуальный аналог ортогональных многочленов на системе интервалов. — ДАН, 1961, т. 141, N 2, с. 262-266.
- [3] Гельфанд И.М., Левитан Б.М., Об определении дифференциального уравнения по его спектральной функции. — Изв. АН, сер. матем., 1951, т. 15, с. 309-360.
- [4] Захаров В.Е., Шабат А.Б., Точная теория двумерной самофокусировки и одномерной автомодуляции волн в нелинейных средах, ЖЭТФ, 1971, т. 61 N 1, с.118-134
- [5] Итс А.Р., Матвеев В.Б., Функц. анализ и его прил., 1975, т. 9, выпуск 1, с. 69–70
- [6] Крейн М.Г., Решение обратной задачи Штурма — Лиувилля. — ДАН 1951, т. 76, N 1, с. 21–24; Об обратных задачах для неоднородной струны. — ДАН, 1952, т. 82. № 5, с. 669–672.
- [7] Левитан В.М. и Гасымов М.Г., Определение дифференциального уравнения по двум спектрам. — УМН, 1964, т. 19, N 2 (116), с. 3-63.

-
- [8] Новиков С.П., Периодическая задача Кортевега — де Фриза I. — Функц. анализ и приложения, 1974, т. 8. N 3. с. 54-66.
- [9] Фадеев Л.Д., Обратная задача квантовой теории рассеяния. — УМН, 1959, т. 14, № 4, с. 57—119; Обратная задача квантовой теории рассеяния. II. Итоги науки и техн. Сер. Современ. пробл. мат., 1974, т. 3, с. 93—180
- [10] Ambarzumjan W.A., Uber eine Frage der Eigenwerttheorie. - Zeitschrift fur Physik, 1929, Bd. 53, S. 690-695.
- [11] Borg G., Eine Umkehrung der Sturm - Liouvillschen Eigenwertaufgabe. - Acta Math., 1946, Bd. 78. N 1, S. 1-96.
- [12] Deift P., Zhou X., Direct and inverse scattering on the line with arbitrary singularities. Comm. Pure Appl. Math. 44 (1991), N 5, 485-533.
- [13] Levinson N., On the uniqueness of the potential in a Schrodinger equation for a given asymptotic phase. - Danske Vid. Selsk. Mat. Fys. Medd., 1949, v. 25, N 9, p. 25.
- [14] Lubarskii Yu.I., Marchenko V.A., Inverse problem for small oscillations, Spectral analysis, differential equations and mathematical physics: a festschrift in honor of Fritz Gesztesy's 60th birthday, 263-290, Proc. Sympos. Pure Math., 87, Amer. Math. Soc., Providence, RI, 2013.
- [15] Newton R., Construction of potential from the phase shifts at fixed energy. — J. Math. Phys., 1962, v. 3, N 1, p. 75.
- [16] Yurko V.A., Inverse Spectral Problems for Differential Operators and their Applications. Gordon and Breach, London, Amsterdam, 2000, 253pp.