A variational principle for eigenvalue bounds

1979 J. Phys. A: Math. Gen. 12 325

(http://iopscience.iop.org/0305-4470/12/3/007)

J. Phys. A: Math. Gen., Vol. 12, No. 3, 1979. Printed in Great Britain

Ein Variationsprinzip zur Einschachtelung von Eigenwerten

G-U Sölter, A M K Müller and G Gerlich

Lehrstuhl B Für Theoretische Physik, Technische Universität Carolo-Wilhelmina, Mendelssohnstraße 1A, D-3300 Braunschweig, West Germany

Received 18 May 1978, in final form 18 July 1978

Abstract. A functional is given which can be used to derive lower and upper bounds for the discrete eigenvalues of a self-adjoint operator. The lower bounds of the functional are deduced and the connections to other variational principles are pointed out.

1. Einleitung

Es sei H ein linearer Hilbertraumoperator und $\bar{\lambda}$ ein diskreter Eigenwert des zu H adjungierten Operators H^+. Die Dimension des zugehörigen abgeschlossenen Teilraums $M_{\bar{\lambda}}$ bezeichnen wir mit $d(M_{\bar{\lambda}})$. Hiermit definieren wir eine Funktion von λ durch

$$d(\lambda)\begin{cases} = d(M_{\bar{\lambda}}), \text{ wenn } \bar{\lambda} \text{ ein diskreter Eigenwert von } H^+ \text{ ist,} \\ = 0 \text{ sonst.} \end{cases} \tag{1}$$

Es wird hier ein nichtnegatives Funktional angegeben, das außer von H und λ noch von einem linearen Hilbertraumoperator A abhängig ist mit der Eigenschaft

$$f(H, \lambda, A) \geqslant d(\lambda). \tag{2}$$

Dies gilt für beliebige Operatoren A. Ist also dieses Funktional für gewisse λ-Werte kleiner als 1, können die zugehörigen $\bar{\lambda}$-Werte nicht diskrete Eigenwerte des Operators H^+ sein. In dem für die Praxis wichtigsten Fall, daß H selbstadjungiert ist, liefert dieses Funktional die Möglichkeit, Bereiche zu bestimmen, in denen diskrete Eigenwerte von H liegen können. Hierfür ist natürlich in der Praxis nur eine solche λ-Abhängigkeit (des Operators A) zuzulassen, für die das Funktional in bezug auf die Variable λ genügend glatt ist, damit man mit der Berechnung von endlich vielen Funktionswerten auskommt. Es ist möglich, zumindest im Prinzip eine von H und λ abhängige Schar von Operatoren A anzugeben, für die in (2) sogar die Gleichung gilt. Dann handelt es sich bei dem Funktional um die Spur des Projektionsoperators auf den Teilraum $M_{\bar{\lambda}}$. Im nichttrivialen Fall, d.h. $d(\lambda)>0$, ist zwar dieser von H und λ abhängige Operator A nicht eindeutig, aber alle solche Operatoren liefern den gleichen Projektionsoperator. Das Minimum des Funktionals ist also die Funktion $d(\lambda)$. Je weiter man sich mit einer Schar von Operatoren A diesem Minimum nähert, desto kleiner werden die Schranken für die möglichen diskreten Eigenwerte. Für eine vorgegebene Schar von Operatoren erhält man also die besten Schranken für die Eigenwerte, wenn das Funktional $f(H, \lambda, A)$ minimal wird. Dies kann man zur Formulierung eines Variationsprinzips verwenden.

0305-4470/79/030325+04\$01.00

Das Funktional $f(H, \lambda, A)$ läßt sich als die Spur eines von H, λ und A abhängigen Operators schreiben:

$$f(H, \lambda, A) = \mathrm{Sp}[((H-\lambda E)\circ A+E)^{+}\circ((H-\lambda E)\circ A+E)]. \tag{3}$$

Hier ist E der Einheitsoperator. Berechnet man diese Spur in der Ortsdarstellung, erhält man nach einigen Umformungen

$$f = \int\int |(H-\lambda E)\phi(x, x') + \delta(x-x')|^2 \, \mathrm{d}x \, \mathrm{d}x'. \tag{4}$$

In diesem Ausdruck haben die Funktionen $\phi(x, x')$ die Rolle des Operators A übernommen. Es ist $\delta(x-x')$ die übliche n-dimensionale δ-Distribution, die anstelle der linken Seite einer Vollständigkeitsrelation von Ortseigenfunktionen steht. Dieses von Müller gefundene Funktional (Müller 1964, 1978) kann man zur Grundlage eines entsprechenden Variationsprinzips machen, bei dem statt der Operatoren A die Funktionen ϕ zu variieren sind. Das Minimum des Funktionals liefert die besten Schranken für die diskreten Eigenwerte von H^{+}. Es wurde mit Erfolg für gewisse physikalische Probleme zur Bestimmung von Energieeigenwerten herangezogen (Multhoff 1972, Sölter 1977). Bei der Ableitung von (2) erhält man ein Zwischenergebnis, das sich analog zu (4) in der Ortsdarstellung schreiben läßt und das Variationsprinzip von Rayner (1962) liefert.

2. Herleitung der Ungleichung

Wenn $\bar{\lambda}$ ein diskreter Eigenwert von H^{+} ist, kann man den Hilbertraum als direkte Summe zweier orthogonaler Teilräume $M_{\bar{\lambda}}$ und $M_{\bar{\lambda}}^{\perp}$ schreiben. Es läßt sich dann jedes Hilbertraumelement ϕ eindeutig als Summe eines Elements aus $M_{\bar{\lambda}}$ und eines Elements aus $M_{\bar{\lambda}}^{\perp}$ schreiben:

$$\phi = \phi_{\parallel} + \phi_{\perp}. \tag{5}$$

Ist $\bar{\lambda}$ kein diskreter Eigenwert von H^{+}, ist hier $\phi_{\parallel}$ der Nullvektor. Für ein Element ϕ aus dem Definitionsbereich des Operators

$$F = (H-\lambda E)\circ A + E \tag{6}$$

ist $\langle F\phi|F\phi\rangle \geqslant 0$ und endlich. Schreibt man für

$$((H-\lambda E)\circ A+E)\phi = \psi = \psi_{\parallel} + \psi_{\perp}, \tag{7}$$

kann man die folgenden Umformungen machen:

$$\begin{aligned}\langle F\phi|F\phi\rangle &= \langle \psi_{\parallel}+\psi_{\perp}|((H-\lambda E)\circ A+E)\phi\rangle \\ &= \langle [A^{+}\circ(H^{+}-\bar{\lambda}E)+E](\psi_{\parallel}+\psi_{\perp})|\phi\rangle \\ &= \langle \psi_{\parallel}+[A^{+}\circ(H^{+}-\bar{\lambda}E)+E]\psi_{\perp}|\phi\rangle \\ &= \langle \psi|\phi_{\parallel}\rangle + \langle \psi_{\perp}|\psi_{\perp}\rangle.\end{aligned} \tag{8}$$

Für den ersten Summanden ergibt sich:

$$\begin{aligned}\overline{\langle \phi_{\parallel}|\psi\rangle} = \overline{\langle [A^{+}\circ(H^{+}-\bar{\lambda}E)+E]\phi_{\parallel}|\phi\rangle} = \overline{\langle \phi_{\parallel}|\phi\rangle} \\ = \langle \phi_{\parallel}|\phi_{\parallel}\rangle \geqslant 0.\end{aligned} \tag{9}$$

Also erhält man

$$\langle\phi F^{+}\circ F\phi\rangle=\langle F\phi|F\phi\rangle=\langle\psi_{\perp}|\psi_{\perp}\rangle+\langle\phi_{\|}|\phi_{\|}\rangle. \tag{10}$$

Wegen $\langle\psi_{\perp}|\psi_{\perp}\rangle\geqslant 0$ folgt hieraus die Ungleichung

$$\langle\phi|F^{+}\circ F\phi\rangle\geqslant\langle\phi_{\|}|\phi_{\|}\rangle. \tag{11}$$

In der Ortsdarstellung liefert diese Ungleichung das Variationsprinzip von Rayner (1962). Nimmt man an, daß F dicht definiert ist, kann man die Ungleichungen für die ϕ_i eines vollständigen Orthonormalsystems aus dem Definitionsbereich von F summieren:

$$\sum_i\langle\phi_i|F^{+}\circ F\phi_i\rangle\geqslant\sum_i\langle\phi_{i\|}|\phi_{i\|}\rangle=\sum_i\langle\phi_i|P_{M_{\bar\lambda}}\phi_i\rangle=d(\lambda). \tag{12}$$

Dies ist die zu beweisende Ungleichung (2).

3. Das minimale Funktional

Ist $\bar\lambda$ ein diskreter Eigenwert des Operators H^{+}, ist $(H^{+}-\bar\lambda E)$ nicht injektiv, besitzt also keine inverse Abbildung. Auf dem Definitionsbereich $M_{\bar\lambda}^{\perp}$ ist die Abbildung $(H^{+}-\bar\lambda E)$ injektiv, da für $\phi\in M_{\bar\lambda}^{\perp}$ aus $(H^{+}-\bar\lambda E)\phi=0$ folgt $\phi\in M_{\bar\lambda}$, also $\phi=0$. Diese Abbildung kann man also umkehren:

$$B(H,\lambda)\circ(H^{+}-\bar\lambda E)|_{M_{\bar\lambda}^{\perp}}=E|_{M_{\bar\lambda}^{\perp}}. \tag{13}$$

Ist $\bar\lambda$ kein diskreter Eigenwert von H^{+}, ist $H^{+}-\bar\lambda E$ injektiv, und es existiert die Inverse, die wir ebenfalls $B(H,\lambda)$ nennen wollen. In beiden Fällen ist der Definitionsbereich von $B(H,\lambda)$ der Wertebereich von $H^{+}-\bar\lambda E$. Ist λ ein diskreter Eigenwert von H mit dem zugehörigen abgeschlossenen Eigenraum M_λ, ist der Wertebereich von $H^{+}-\bar\lambda E$ orthogonal zu M_λ und für dicht definierte H^{+} eine dichte Teilmenge des zugehörigen Orthogonalraums $M_{\bar\lambda}^{\perp}$. Denn gilt für die ϕ einer dichten Teilmenge des Hilbertraums für gewisse ψ

$$\langle\phi|(H-\lambda E)\psi\rangle=\langle(H^{+}-\bar\lambda E)\phi|\psi\rangle=0, \tag{14}$$

so ist ψ aus M_λ und orthogonal zum Wertebereich von $H^{+}-\bar\lambda E$. Wenn man $B(H,\lambda)$ auf M_λ mit Null fortsetzt, ist $B(H,\lambda)$ dicht definiert und besitzt einen adjungierten Operator $B^{+}(H,\lambda)$. Die Schar von Operatoren, für die in (2) das Gleichheitszeichen steht, ist dann gegeben durch $-B^{+}(H,\lambda)$. Es ist zu beachten, daß diese Operatoren einen von H und λ abhängigen Definitionsbereich haben. Mit den vorne eingeführten Bezeichnungen für die Projektionen erhält man

$$F_M^{+}\psi=(-B(H,\lambda)\circ(H^{+}-\bar\lambda E)+E)(\psi_{\perp}+\psi_{\|})=\psi_{\|}. \tag{15}$$

Also ist F_M^{+} und damit

$$F_M=-(H-\lambda E)\circ B^{+}(H,\lambda)+E \tag{16}$$

der Projektor auf den Eigenraum $M_{\bar\lambda}$, wenn $\bar\lambda$ ein diskreter Eigenwert von H^{+} ist. Wenn $H^{+}-\bar\lambda E$ injektiv ist, ist F_M^{+} und damit F_M gleich Null. Dann gilt also

$$\mathrm{Sp}(F_M)=\mathrm{Sp}(F_M^{+}\circ F_M)=d(\lambda). \tag{17}$$

An der Definition von $-B^{+}(H, \lambda)$ und dem Beweis erkennt man, daß für die λ-Werte, die diskrete Eigenwerte von H sind, auch andere Fortsetzungen von $B(H, \lambda)$ das Gewünschte leisten.

4. Umrechnung des Funktionals in die Ortsdarstellung

In der Ortsdarstellung kann man die linke Seite der Ungleichung (11) in der Form schreiben

$$\langle\phi|F^{+}\circ F\phi\rangle=\langle F\phi|F\phi\rangle=\int|F\phi(x)|^{2}\,\mathrm{d}x, \tag{18}$$

was mit (6) zur Ungleichung von Rayner führt, indem man $A\phi$ als zu variierende Funktion ϕ_1 liest. Setzt man in (18) für ϕ ein vollständiges Orthonormalsystem von Ortsfunktionen ϕ_i ein und summiert über i, erhält man die linke Seite von (12). Hiermit führen wir die folgenden Umformungen durch:

$$\begin{aligned}\sum_i\int|F\phi_i|^2\,\mathrm{d}x&=\sum_{i,j}\int\overline{F\phi_i}F\phi_j\,\mathrm{d}x\,\delta_{ij}\\&=\iint\sum_i\overline{F\phi_i(x)}\phi_i(x')\sum_j F\phi_j(x)\overline{\phi_j(x')}\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}x'\\&=\iint\Big|\sum_i F\phi_i(x)\overline{\phi_i(x')}\Big|^2\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}x'\\&=\iint\Big|(H-\lambda E)\sum_i A\phi_i(x)\overline{\phi_i(x')}+\sum_i\phi_i(x)\overline{\phi_i(x')}\Big|^2\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}x'\\&=\iint|(H-\lambda E)\phi(x,x')+\delta(x-x')|^2\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}x'.\end{aligned} \tag{19}$$

Damit erhält man die ursprüngliche Form des Variationsprinzips (Müller 1964, 1978). Man erkennt an diesen Umformungen sowohl, wie dieses Doppelintegral exakt zu lesen ist, als auch daß die Ortsdarstellung nur für den letzten Schritt benötigt wurde. Schreibt man also anstelle der δ-Distribution die ursprüngliche Summe, sind auch andere Integrationsräume als Darstellungsräume für diese Form des Funktionals möglich.

References

Müller A M K 1964 *Phys. Lett.* **11** 238
—— 1978 *Phys. Lett.* **65A** 273
Multhoff W 1972 *Diplomarbeit* Technische Universität Braunschweig
Sölter G-U 1977 *Diplomarbeit* Technische Universität Braunschweig
Rayner M E 1962 *J. Math. Oxf.* (2) **13** 137