国防科技大学学报
JOURNAL OF NATIONAL UNIVERSITY OF DEFENSE TECHNOLOGY
一九八六年第一期　总第五十三期　No.1 1986 Sum. 53

关于鞍点定理及其推论

周茂堂　杨向东*

提　要　本文指出了鞍点定理的推论的数学结果是不正确的，并进而讨论了鞍点的存在条件。

一、引　言

近几年来，在研究原子高激发态等问题中，提出了一个马鞍点定理[1]，它由下面的定理及其推论构成：

定理　令 $\hat{H}$ 是体系的哈密顿算符（是厄米的），它的本征函数为 $\psi_0(\vec{r})$，$\psi_1(\vec{r})$，……，$\psi_i(\vec{r})$，……，相应的非简并本征值为$E_0, E_1, \cdots\cdots, E_i, \cdots\cdots$。对于任意的$N\geqslant 1$，定义一个归一化函数

$$\phi_0(\vec{r})=\sum_{j=0}^{N} t_j\psi_j(\vec{r}) \tag{1}$$

令$\hat{H}$在正交于$\phi_0(\vec{r})$的子空间中的久期方程的本征值为$\lambda_1,\lambda_2,\cdots\cdots,\lambda_i,\cdots\cdots$。把$\lambda_i$视为$\{t_j\}$的函数，那么$\lambda_i$在$t_i=0$时具有极值$\lambda_i=E_i$.

为证明这个定理，可以构造一个尝试函数

$$\psi(\vec{r})=C_0\phi_0(\vec{r})+\sum_{i=1}^{M}C_i\psi_i(\vec{r}) \tag{2}$$

其中$M\geqslant N$. 在我们感兴趣的子空间中，有

$$\begin{aligned}|\psi'\rangle&=(1-|\phi_0\rangle\langle\phi_0|)|\psi\rangle\\&=\sum_{i=1}^{N}C_i[|\psi_i\rangle-t_i|\phi_0\rangle]+\sum_{i=N+1}^{M}C_i|\psi_i\end{aligned} \tag{3}$$

因为方程（3）右端第二部分中的每一项都是$\hat{H}$的本征函数，并与第一部分中的各项正交，因此，省去(3)式右端第二部分，不会影响对于$i=1$到N的各个λ_i的求解。$i=1$到N的N阶久期方程的矩阵元为

$$\begin{aligned}&\langle\psi_i-t_i\phi_0|\hat{H}-\lambda|\psi_j-t_j\phi_0\rangle\\&=(E_i-\lambda)\delta_{ij}-t_it_j(E_i+E_j-\lambda-\bar{H})\end{aligned} \tag{4}$$

本文1984年8月29日收到
*杨向东同志系成都科技大学应用物理系老师。

其中

$$\bar{H}=\langle H\rangle=\langle\phi_0|\hat{H}|\phi_0\rangle=\sum_{i=0}^{N}t_i^2E_i \tag{5}$$

$$t_0^2=1-\sum_{i=1}^{N}t_i^2 \tag{6}$$

由此得到久期方程

$$\begin{vmatrix} (E_1-\lambda)-t_1^2(2E_1-\lambda-\bar{H})\cdots\cdots-t_1t_j(E_1+E_j-\lambda-\bar{H})\cdots\cdots\cdots\cdots \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ -t_it_1(E_1+E_i-\lambda-\bar{H})\cdots\cdots\cdots(E_i-\lambda)\delta_{ij}-t_it_j(E_i+E_j-\lambda-\bar{H}) \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \end{vmatrix}=0 \tag{7}$$

推论 对于 $i=1$，……，N，方程(7)的本征值 λ_i 为：

$$\lambda_i=E_i+(E_0-E_i)t_i^2+\sum_{k=1}^{N}{}'\frac{(E_0-E_i)^2}{(E_i-E_k)}t_i^2t_k^2+O(t^6) \tag{8}$$

这里，$\sum'$ 是指在求和中不包括 i .

根据这个数学结果，原文指出，按通常所设 $E_0<E_i$，因而当 $t_i=0$ 时，λ_i 便达到其极大值 E_i. 按通常所见的变分法，E_i 可以作为极小值出现。所以，把变分原理和上述推论结合起来看，E_i 就是一个鞍点（Saddle point）。

二、推论的数学结果是不正确的

为了方便，令 $E_0<\cdots\cdots E_i<\cdots\cdots E_m<\cdots\cdots0$（例如原子体系）。从方程(7)解出 λ_i 的过程写起来很麻烦，又不容易明确地看出问题。下面仅就

$$\phi_0(\vec{r})=t_0\psi_0(\vec{r})+t_i\psi_i(\vec{r})+t_m\psi_m(\vec{r}) \tag{9}$$

进行讨论。由(6)式

$$t_0^2+t_i^2+t_m^2=1 \tag{10}$$

此时方程(7)成为二阶久期方程

$$\begin{vmatrix} (E_i-\lambda)-t_i^2(2E_i-\lambda-\bar{H}) & -t_it_m(E_i+E_m-\lambda-\bar{H}) \\ -t_it_m(E_i+E_m-\lambda-\bar{H}) & (E_m-\lambda)-t_m^2(2E_m-\lambda-\bar{H}) \end{vmatrix}=0 \tag{11}$$

由此得到

$$\begin{aligned}&[(E_m-\lambda)-t_m^2(2E_m-\lambda-\bar{H})][(E_i-\lambda)-t_i^2(2E_i-\lambda-\bar{H})]\\&=t_m^2t_i^2(E_i+E_m-\lambda-\bar{H})^2\end{aligned} \tag{12}$$

其中

$$\bar{H}=E_0+t_i^2(E_i-E_0)+t_m^2(E_m-E_0) \tag{13}$$

由(12),(13)可以看出，由(11)解得的两个解 λ_i 和 λ_m 必为 t_i^2 及 t_m^2 的函数，即有

$$\lambda_i=\lambda_i(t_i^2,t_m^2),\quad \lambda_m=\lambda_m(t_i^2,t_m^2) \tag{14}$$

由(12)还可以看出，$t_i=0$ 时得

$$\lambda_i(0,\ t_m^2)=E_i \tag{15}$$

再依原文(13)式

$$\left.\frac{\partial \lambda_i}{\partial t_i}\right|_{t_i=0}=0 \tag{16}$$

将 λ_i 在 $t_i=0$ 处展开

$$\lambda_i(t_i^2,t_m^2)=\lambda_i(0,t_m^2)+\left.\frac{\partial \lambda_i}{\partial t_i}\right|_{t_i=0}t_i+\left.\frac{1}{2}\frac{\partial^2 \lambda_i}{\partial t_i^2}\right|_{t_i=0}t_i^2+\left.\frac{1}{6}\frac{\partial^3 \lambda_i}{\partial t_i^3}\right|_{t_i=0}t_i^3+\cdots\cdots \tag{17}$$

依据(15)式，上式右端第一项为 E_i；依据(16)式，右端第二项为0；仿照原文(21)，(22)式的作法，依据原文(27a)，(27b)的结论，可见上面(17)式中，从右端第四项往后各项均可略去，因为在 $O(t^6)$ 以内它们均无贡献。由此，(17)化为

$$\lambda_i(t_i^2,t_m^2)\doteq E_i+\left.\frac{1}{2}\frac{\partial^2 \lambda_i}{\partial t_i^2}\right|_{t_i=0}t_i^2 \tag{18}$$

可以仿照原文的作法，将 $\left.\frac{1}{2}\frac{\partial^2 \lambda_i}{\partial t_i^2}\right|_{t_i=0}$ 在 $(0,0,\cdots\cdots,0,\cdots\cdots,0)$ 处按 $\{t_k\}$ 展开，进而利用原文(16)——(21)式及(25)、(26)、(27c)、(27d)各式确定之。在我们的具体情况下，可以直接将本文(12)式等号两端分别对 t_i 求偏导两次。注意到既然是对 t_i 求导，当然意味着是在研究 λ_i 的展开情况，因而(12)式中的 λ 自然视为 $\lambda_i(t_i^2,t_m^2)$。同时，在求导时要利用(13)式。两次偏导作完后，令方程中出现的 $t_i=0$，当然式中的 λ_i 便成为 $\lambda_i(0,t_2^m)=E_i$； $\left.\frac{\partial \lambda_i}{\partial t_i}\right|_{t_i=0}=0$（依据(16)式）。整理后得到：

$$\begin{aligned}\left.\frac{1}{2}\frac{\partial^2 \lambda_i}{\partial t_i^2}\right|_{t_i=0}&=(E_0-E_i)+(E_m-E_0)t_m^2\\&\quad+\frac{(E_m-E_0)^2(1-t_m^2)^2t_m^2}{(E_i-E_m)+[2E_m-E_i-E_0-t_m^2(E_m-E_0)]t_m^2}\\&=(E_0-E_i)+(E_m-E_0)t_m^2+\frac{(E_m-E_0)^2(1-t_m^2)t_m^2}{(E_i-E_m)+(E_m-E_0)t_m^2}\end{aligned} \tag{19}$$

将(19)代入(18)，

$$\begin{aligned}\lambda_i&\doteq E_i+(E_0-E_i)t_i^2+(E_m-E_0)t_m^2t_i^2+\frac{(E_m-E_0)^2(1-t_m^2)t_m^2t_i^2}{(E_i-E_m)+(E_m-E_0)t_m^2}\\&=E_i+(E_0-E_i)t_i^2+\frac{(E_m-E_0)(E_i-E_0)}{(E_i-E_m)+(E_m-E_0)t_m^2}t_i^2t_m^2\end{aligned} \tag{20}$$

将(20)式的第三项展开，保留 t 的四次方以下的项，则

$$\begin{aligned}\lambda_i&\doteq E_i+(E_0-E_i)t_i^2+\frac{(E_m-E_0)(E_i-E_0)}{E_i-E_m}t_i^2t_m^2\left[1+\frac{E_m-E_0}{E_i-E_m}t_m^2\right]^{-1}\\&=E_i+(E_0-E_i)t_i^2+\frac{(E_m-E_0)(E_i-E_0)}{E_i-E_m}t_m^2t_i^2+O(t^6)\end{aligned} \tag{21}$$

若将(12)式直接对t_i^2求导，而将λ_i按t_i^2展开，也可以很方便地求得(21)式。容易看出，根据原文推论，即本文所列的(8)式，λ_i应为

$$\lambda_i \doteq E_i+(E_0-E_i)t_i^2+\frac{(E_0-E_i)^2}{E_i-E_m}t_m^2 t_i^2+O(t^6) \tag{22}$$

可见(21)式与根据原文推论所得的(22)式在第三项上不同，这就清楚表明，将原文推论的数学结果用到(t_0^2,t_i^2,t_m^2)的情况时，得到的结果与实际不符。问题出在原文的(28)式，而原文没有对该式的求得提供任何详细的论证。可以想见对于任意的$\lambda_i(t_1^2,t_2^2,\cdots\cdots,t_i^2,\cdots\cdots,t_m^2,\cdots\cdots,t_N^2)$，应有下式

$$\lambda_i=E_i+(E_0-E_i)t_i^2+\sum_{k=1}^{N}{}'\frac{(E_i-E_0)(E_k-E_0)}{E_i-E_k}t_i^2 t_k^2+O(t^6) \tag{23}$$

我们在此不对(23)式作系统、严格的证明，而只是把它看作是(21)式的自然推广。因为实际使用鞍点定理时并不需要(23)式的具体形式，重要的是应当明确由这个推论所得出的关鍵性结论：$t_i=0$ 时 $\lambda_i=E_i$，在保证 $E_i>E_0$ 的条件下，是否如原文所指出的那样，$\lambda_i=E_i$ 是作为极大値出现？下面将要指出，$E_i>E_0$ 这一点，并不能保证 E_i 作为极大値（即鞍点值）出现。要说明这个问题，无需从普遍公式(23)出发，只需根据(20)式就可以了。上面，我们从(9)，(10)两式出发所作的推证，从某种意义上讲，是利用了一个特殊情况(t_0^2,t_i^2,t_m^2)验证了原文的普遍性推论的数学结果，从而说明原文结果是不正确的，并立足于(t_0^2,t_i^2,t_m^2)的结果，加以推广得出(23)式。下面会看到，尽管$\phi_0(t_0^2,t_i^2,t_m^2)$只有三项，但的确可以说明，所考察的能级同$\phi_0$中所含各项之间的关系，从而认清，到底在什么条件下才有眞正的鞍点存在。

三、讨 论

(1) 在$E_0<E_i<E_m$情况下讨论λ_i

为方便起见，令(20)式第二项及第三项分别用T_2，T_3表示。

$$\frac{T_3}{T_2}=\frac{-(E_m-E_0)t_m^2}{(E_i-E_m)+(E_m-E_0)t_m^2}=\frac{1}{\dfrac{(E_m-E_i)}{(E_m-E_0)t_m^2}-1} \tag{24}$$

下面，我们将指出，在下述条件下，(20)式的第二项及第三项之和为正値，因此，虽然满足$E_0<E_i$，但当$t_i\to0$时，λ_i是从高于E_i的方向去逼近E_i的，即此时的E_i不是象原文所说的：为极大值，从而使E_i为马鞍点；而是像通常所见的变分法那样，从高于E_i的地方，向E_i这个“锅底”逼近。这种情况发生在下述条件成立之时：

$$-1<\frac{(E_m-E_i)}{(E_m-E_0)t_m^2}-1<0 \tag{25}$$

在此条件下，$\dfrac{T_3}{T_2}<0$，说明T_3贡献的是正值(T_2肯定是负值)；同时还可保证$\left|\dfrac{T_3}{T_2}\right|>1$，即$T_3$比$T_2$占优势，当然$T_2+T_3$是个正值。由(25)得

$$0<\frac{E_m-E_i}{(E_m-E_0)t_m^2}<1 \tag{26}$$

即 $t_m^2 > \frac{E_m - E_i}{E_m - E_0}$ 时，就可以使原文所说的鞍点不成立，而上面推得的条件，在实际构造 ϕ_0 时不是不会出现的。这从另一个角度说明鞍点的存在是有条件的，要想使用鞍点定理处理问题，在构造 ϕ_0 时，必须留意 $t_m^2 = |\langle\psi_m|\phi_0\rangle|^2$ 的大小。

(2) 在 $E_0 < E_i < E_m$ 情况下讨论 λ_m

仿照(20)式，

$$\lambda_m = E_m + (E_0 - E_m)t_m^2 + \frac{(E_m - E_0)(E_i - E_0)}{(E_m - E_i) + (E_i - E_0)t_i^2} t_i^2 t_m^2$$

$$\frac{T_3}{T_2} = \frac{-1}{\frac{(E_m - E_i)}{(E_i - E_0)t_i^2} + 1} \text{恒小于} 0$$

由于 $T_2 < 0$，故知 $T_3 > 0$. 又因为上式分母恒大于 1，故由上式可知 $\left|\frac{T_3}{T_2}\right| < 1$，即 $|T_3| < |T_2|$。可见在此情况下，$t_m \to 0$ 时，λ_m 确实趋于鞍点值 E_m.

四、结 束 语

在上述推证与分析中，我们指出了鞍点定理的推论在数学表述上的不正确处，及由此而引起的关于鞍点存在条件方面的不同看法。应当指出的是，只要注意到这个定理的使用条件，则可以用它处理十分广泛的问题，如：弹性及非弹性散射和其中的量子共振问题，原子自电离问题等。总之，对处理原子内壳层有空穴的高激发态问题是相当成功的。本文的工作将有助于对鞍点定理的理解与使用。正确掌握鞍点值及极小值的出现条件，就可以在计算中正确认识计算值对真值的误差方向。

参 考 文 献

[1] Kwong T. Chung, Phys. Rev., A20, 1743(1979)

About Saddle Point Theorem and Its Corollary

Yang Xiangdong Zhou Maotang

Abstract

This paper points out that the mathematical result of the corollary of the saddle point theorem is incorrect, and further are discussed the conditions about the existence of the saddle point.