

AMS subject classification: 47A58, 47A05, 45L05, 15A18

Новый вид сходимости при аппроксимации обобщенного спектра

С. Камуш, Х. Геббай

Laboratoire des Mathématiques Appliquées et de Modélisation, Université 8 Mai 1945, B.P. 401, Guelma, 24000, Algérie.

E-mails: soumia.kamouche@gmail.com; kamouche.somia@univ-guelma.dz (Камуш С.),
guebbaishamza@yahoo.fr; guebbaishamza@univ-guelma.dz (Геббай Х.)

Английская версия этой статьи печатается в журнале “Numerical Analysis and Applications” № 4, Vol. 15, 2022.

Камуш С., Геббай Х. Новый вид сходимости при аппроксимации обобщенного спектра // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2022. — Т. 25, № 4. — С. 409–416.

В данной статье представлен новый способ сходимости для аппроксимации обобщенного спектра двух ограниченных операторов. Эта новая техника получена путем расширения хорошо известной ν -сходимости, используемой в случае аппроксимации классического спектра. Это новое видение позволяет нам рассматривать предположение ν -сходимости как частный случай нашего нового метода. По сравнению с гипотезами, используемыми в старых методах, гипотезы, используемые в данной статье, слабее. Кроме того, мы доказываем, что выполняется свойство U , которое решает проблему спектрального загрязнения, возникающую при спектральной аппроксимации неограниченного оператора.

DOI: 10.15372/SJNM20220406

Ключевые слова: обобщенный спектр, ν -сходимость, свойство U , спектральная аппроксимация.

Kamouche S., Guebbai H. New convergence mode for the generalized spectrum approximation // Siberian J. Num. Math. / Sib. Branch of Russ. Acad. of Sci. — Novosibirsk, 2022. — Vol. 25, № 4. — P. 409–416.

In this paper, we introduce a new convergence mode to deal with the generalized spectrum approximation of two bounded operators. This new technique is obtained by extending the well-known ν -convergence used in the case of classical spectrum approximation. This new vision allows us to see the ν -convergence assumption as a special case of our new method compared to the hypotheses needed in old methods, those required in this paper are weaker. In addition, we prove that the property U holds, which solves the spectral pollution problem arising in spectrum approximation of unbounded operator.

Keywords: generalized spectrum, ν -convergence, property U , spectral approximation.

1. Введение

Многие из задач квантовой физики и механики, химии и прикладной математики стимулировали изучение собственных значений неограниченных операторов, особенно дифференциальных операторов [2–4, 7, 9, 12, 17, 19]. Данная работа связана с вычислением энергетических уровней атома (собственных значений оператора Шредингера) и исследованием устойчивых состояний электрона (собственных векторов оператора Шредингера) [8, 16, 18, 20]. Численное решение этих задач с помощью классических методов дискретизации вызывает спектральное загрязнение. Ученые исследовали это явление в течение десяти и даже более лет (см. [1, 6, 10, 11, 13–15]). Пусть $(\mathcal{B}, \|\cdot\|_{\mathcal{B}})$ — банахово пространство, $\text{BL}(\mathcal{B})$ — банахово пространство всех линейных ограниченных операторов,

определенных на $\mathcal{B}$ в себя. Его норма имеет следующий вид:

$$\forall K \in \text{BL}(\mathcal{B}) : \|K\| = \sup_{\|u\|_{\mathcal{B}}=1} \|Ku\|_{\mathcal{B}}.$$

Пусть T и S в $\text{BL}(\mathcal{B})$. Определим **обобщенное резольвентное множество** и обозначим его $\text{re}(T, S)$ следующим образом:

$$\text{re}(T, S) = \{z \in \mathbb{C} : (T - zS) \text{ оператор обратим и ограничен}\}.$$

Для всех $z \in \text{re}(T, S)$ функция $R(\cdot)$, определенная на $\text{re}(T, S) \subset \mathbb{C}$ в $\text{BL}(\mathcal{B})$, задаваемая в виде

$$\forall z \in \text{re}(T, S), \quad R(z) = (T - zS)^{-1},$$

является **обобщенным резольвентным оператором** (T, S) для z .

Обобщенный спектр, обозначаемый $\text{sp}(T, S)$, является дополнительным множеством обобщенного резольвентного множества, т. е.

$$\text{sp}(T, S) = \mathbb{C} \setminus \text{re}(T, S).$$

Обобщенное собственное значение — это комплексное число λ , которое удовлетворяет $Tu = \lambda Su$ для всех $u \in \mathcal{B} - \{0\}$. Авторы [11, 14] занимались решением проблемы спектрального загрязнения, которая возникает при спектральной аппроксимации гармонического осциллятора, определенного на $L^2(\mathbb{R})$ следующим образом:

$$Hu = -u'' + x^2u.$$

Они показали, что этой проблемы можно избежать в обобщенной спектральной задаче, показывая спектральную сходимость при сходимости по норме и коллективно компактной сходимости. Кроме того, они доказали, что спектр неограниченного оператора H равен обобщенному спектру двух ограниченных операторов: T и S . В данной статье мы сосредоточимся на задачах, которые в основном возникают в результате преобразования бесконечной задачи в прикладной математике в конечное состояние [11, 14], которое имеет следующий вид:

$$\text{найти } \lambda \in \mathbb{C} \text{ и } u \in \mathcal{B} - \{0\} \text{ такие, что } (I + G)u = \lambda Su,$$

где $G \in \text{BL}(\mathcal{B})$, I — тождественный оператор, а $(I + G)$ представляет оператор T в предыдущих статьях [11, 14]. Авторы [15] исследовали упомянутую выше задачу. Они попытались ослабить предположения, необходимые для сходимости обобщенного спектра, по сравнению с теми, которые использовались в [11, 14] (сходимость по норме и коллективно компактная сходимость). Но они требовали, чтобы операторы G и S были компактными, а это является сильной гипотезой. Наша цель — рассмотрение спектральной аппроксимации обобщенных спектральных задач, которые имеют вид, представленный выше. По этой причине мы хотели бы найти предположения, которые являются достаточно слабыми для получения спектральной сходимости и устранения спектрального загрязнения. Основная цель данного исследования — обобщение ν -сходимости, которая является самым слабым видом сходимости для получения сходимости классического спектра [1]. Это обобщение позволяет доказать, что в нашем случае имеет место свойство U , т. е. если

$$\lambda_n \in \text{sp}(I + G_n, S_n) \text{ и } \lambda_n \rightarrow \lambda, \text{ то } \lambda \in \text{sp}(I + G, S).$$

2. Основные результаты

В этом разделе мы сформулируем три теоремы. Первая теорема содержит результаты, полученные в [11, 14], которые потребуются для нашего исследования. Вторая теорема дает некоторые результаты, которые позволят нам исследовать представленное выше свойство U при слабых предположениях в последовательностях G_n и S_n . Третья теорема является основной; она показывает сходимость обобщенного спектра при новом виде сходимости, который называется обобщенной ν -сходимостью; она представлена ниже.

Теорема 1. Пусть $T, S, \tilde{T}$ и $\tilde{S} \in \text{BL}(\mathcal{B})$.

- (а) Если $z \in \text{re}(T, S)$ и $\tilde{z} \in \mathbb{C}$ такая, что $|z - \tilde{z}| < \|R(z)S\|^{-1}$, то $\tilde{z} \in \text{re}(T, S)$.
 (б) $R(\cdot)$ является аналитической в $\text{re}(T, S)$ и ее производная задается следующим образом:

$$\text{для всех } z \in \text{re}(T, S), \quad \frac{dR}{dz}(z) = R(z)SR(z).$$

- (в) $\text{sp}(T, S)$ является замкнутым в $\mathbb{C}$.

- (г) Если $z \in \text{re}(T, S)$ такая, что

$$\left\| \left[\left[(T - \tilde{T}) - z(S - \tilde{S}) \right] R(z) \right]^2 \right\| < 1 \quad \text{или} \quad \left\| \left[(T - \tilde{T}) - z(S - \tilde{S}) \right] R(z) \right\| < 1,$$

то $z \in \text{re}(\tilde{T}, \tilde{S})$.

Теорема 2. Пусть G и $S \in \text{BL}(\mathcal{B})$.

- (а) Для z_1 и $z_2 \in \text{re}(I + G, S)$,

$$R(z_1) - R(z_2) = (z_1 - z_2)R(z_1)SR(z_2).$$

- (б) Для $z \in \text{re}(I + G, S)$,

$$R(z) = I - GR(z) + zSR(z).$$

- (в) Если имеется $z_0 \in \text{re}(I + G, S)$ такая, что G коммутирует с $R(z_0)$, т. е., $GR(z_0) = R(z_0)G$, то

(в. 1) Для всех z_1 и $z_2 \in \text{re}(I + G, S)$ оператор $R(z_1)$ коммутирует с $R(z_2)$.

(в. 2) Для всех $z \in \text{re}(I + G, S)$ оператор G, S коммутирует с $R(z)$.

Доказательство. Пусть G и $S \in \text{BL}(\mathcal{B})$.

- (а) Если $z \in \text{re}(I + G, S)$,

$$\begin{aligned} R(z_1) - R(z_2) &= R(z_1) [I - (I + G - z_1S)R(z_2)] \\ &= R(z_1) [(I + G - z_2S) - (I + G - z_1S)] R(z_2) = (z_1 - z_2)R(z_1)SR(z_2). \end{aligned}$$

- (б) Для $z \in \text{re}(I + G, S)$,

$$I = (I + G - zS)R(z) = R(z) + GR(z) - zSR(z).$$

Тогда

$$R(z) = I - GR(z) + zSR(z).$$

(в) Пусть $z_0 \in \operatorname{re}(I + G, S)$ при $GR(z_0) = R(z_0)G$. Тогда

$$GR(z_0) = (I + G - z_0S)R(z_0) - (I - z_0S)R(z_0) = I - R(z_0) + z_0SR(z_0),$$

и

$$R(z_0)G = R(z_0)(I + G - z_0S) - R(z_0)(I - z_0S) = I - R(z_0) + z_0R(z_0)S.$$

И мы получим $SR(z_0) = R(z_0)S$.

(в. 1) Для всех z_1 и $z_2 \in \operatorname{re}(I + G, S)$, умножив $R(z_1)[I + G - z_2S] = [I + G - z_2S]R(z_1)$ на $R(z_2)$ слева и справа, мы получим $R(z_2)R(z_1) = R(z_1)R(z_2)$.

(в. 2) Используя результат, полученный в (а) для всех $z \in \operatorname{re}(I + G, S)$ и для $z_0 \in \operatorname{re}(I + G, S)$, мы доказываем коммутативность S и G с $R(z)$.

Результат (б), полученный в этой теореме, является основой для обобщения классической ν -сходимости для нашей задачи. Теперь предположим, что имеются последовательности $\{G_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ и $\{S_n\}_{n \in \mathbb{N}} \subset \operatorname{BL}(\mathcal{B})$, которые устанавливают, что:

(P1) $\|G_n\|$ и $\|S_n\|$ являются ограниченными независимо от n , т. е. для всех $n \in \mathbb{N}$ $\|G_n\| < \infty$ и $\|S_n\| < \infty$.

(P2) $\lim_{n \rightarrow \infty} \|(G_n - G)G_n\| = \lim_{n \rightarrow \infty} \|(G_n - G)S_n\| = \lim_{n \rightarrow \infty} \|(S_n - S)S_n\| = \lim_{n \rightarrow \infty} \|(S_n - S)G_n\| = 0$.

(P3) $\lim_{n \rightarrow \infty} \|(G_n - G)G\| = \lim_{n \rightarrow \infty} \|(G_n - G)S\| = \lim_{n \rightarrow \infty} \|(S_n - S)S\| = \lim_{n \rightarrow \infty} \|(S_n - S)G\| = 0$.

Мы говорим, что пара (G_n, S_n) сходится в смысле обобщенной ν -сходимости к (G, S) , если получены гипотезы (P1)–(P3). Очевидно, что предположения (P1)–(P3) являются обобщением классической ν -сходимости, упомянутой в [1], это означает, что последовательность T_n считается сходящейся к T в смысле ν -сходимости, если $\|T_n\|$ является ограниченной для всех $n \in \mathbb{N}$ и $\lim_{n \rightarrow \infty} \|(T_n - T)T_n\| = \lim_{n \rightarrow \infty} \|(T_n - T)T\| = 0$. Следующая теорема показывает сходимость обобщенного спектра в смысле свойства U .

Теорема 3. Если G_n и S_n удовлетворяют (P1)–(P3), $\lambda_n \in \operatorname{sp}(I + G_n, S_n)$ и $\lambda_n \rightarrow \lambda$, то $\lambda \in \operatorname{sp}(I + G, S)$.

Доказательство. Предположим, что $\lambda \in \operatorname{re}(I + G, S)$. Поскольку $\operatorname{re}(I + G, S)$ — открытое множество в $\mathbb{C}$, т. е. имеется $r > 0$ такое, что $\Omega := \{z \in \mathbb{C} : |z - \lambda| \leq r\} \subset \operatorname{re}(I + G, S)$. Поскольку $R(\cdot)$ является аналитической на $\operatorname{re}(I + G, S)$, определим α следующим образом: $\alpha := \sup\{\|R(z)\| : z \in \Omega\}$. Для всех $z \in \Omega$, согласно теореме 2-(б)

$$\begin{aligned} & [[(G - G_n) - z(S - S_n)]R(z)]^2 \\ &= [(G - G_n) - z(S - S_n)][I - GR(z) + zSR(z)][(G - G_n) - z(S - S_n)]R(z) \\ &= \left[[(G - G_n) - z(S - S_n)][(G - G_n) - z(S - S_n)] + \right. \\ & \quad \left. [(G - G_n) - z(S - S_n)][zSR(z) - GR(z)][(G - G_n) - z(S - S_n)] \right] R(z). \end{aligned}$$

Используя тот факт, что $\|G_n\|$ и $\|S_n\|$ являются ограниченными, имеются некоторые $t, s \geq 0$ такие, что $\|G - G_n\| \leq t$ и $\|S - S_n\| \leq s$ для всех $n \in \mathbb{N}$. Поскольку

$$\|(G_n - G)G_n\|, \quad \|(S_n - S)G_n\|, \quad \|(G_n - G)S_n\|, \quad \|(S_n - S)S_n\| \rightarrow 0,$$

и

$$\|(G_n - G)G\|, \|(S_n - S)G\|, \|(G_n - G)S\|, \|(S_n - S)S\| \rightarrow 0,$$

имеются n_i , где $1 \leq i \leq 8$, для всех $k = \max(t, s)$, такие что

$$\begin{aligned} \|(G_n - G)G\| &\leq \frac{1}{16\alpha(r + |(1 + \lambda)\alpha k|)}, \quad n \geq n_1, \\ \|(G - G_n)S\| &\leq \frac{1}{16\alpha(r + |\lambda + (\lambda + \lambda^2)\alpha k|)}, \quad n \geq n_2, \\ \|(S - S_n)S\| &\leq \frac{1}{16\alpha(r + |\lambda^2 + (\lambda^2 + \lambda^3)\alpha k|)}, \quad n \geq n_3, \\ \|(S - S_n)G\| &\leq \frac{1}{16\alpha(r + |\lambda + (\lambda + \lambda^2)\alpha k|)}, \quad n \geq n_4, \\ \|(G_n - G)G_n\| &\leq \frac{1}{16\alpha}, \quad n \geq n_5, \\ \|(G - G_n)S_n\| &\leq \frac{1}{16\alpha(r + |\lambda|)}, \quad n \geq n_6, \\ \|(S - S_n)S_n\| &\leq \frac{1}{16\alpha(r + |\lambda|^2)}, \quad n \geq n_7, \\ \|(S - S_n)G_n\| &\leq \frac{1}{16\alpha(r + |\lambda|)}, \quad n \geq n_8. \end{aligned}$$

Тогда для всех $n \geq \max\{n_i, 1 \leq i \leq 8\}$, мы получим

$$\left\| \left[(G - G_n) - z(S - S_n) \right] R(z) \right\|^2 \leq \frac{1}{2}.$$

Используя **(в)** теоремы 1, мы находим, что $z \in \operatorname{re}(I + G_n, S_n)$ и Ω является подмножеством $\operatorname{re}(I + G_n, S_n)$ для всех n . Поскольку $\lambda_n \rightarrow \lambda$, мы имеем $\lambda_n \in \Omega \subset \operatorname{re}(I + G_n, S_n)$ для всех n , что противоречит гипотезе о том, что $\lambda_n \in \operatorname{sp}(I + G_n, S_n)$ для каждого n . Поэтому λ должна быть в $\operatorname{sp}(I + G, S)$. $\square$

Заметим, что обобщенная ν -сходимость слабее, чем другие виды сходимости, такие как сходимость по норме и коллективно компактная сходимость, которые использовались в [1, 11, 14], т.е. если последовательности G_n и S_n сходятся по норме к G и S соответственно, что означает

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|G - G_n\| = \lim_{n \rightarrow \infty} \|S - S_n\| = 0.$$

Эти результаты позволяют нам получить гипотезы (P1)–(P3).

Кроме того, если последовательности G_n и S_n сходятся в коллективно компактном смысле к G и S соответственно, т.е. для всех $u \in \mathcal{B}$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|(S - S_n)u\|_{\mathcal{B}} = \lim_{n \rightarrow \infty} \|(G - G_n)u\|_{\mathcal{B}} = 0,$$

и для некоторого положительного целого числа n_0 множества

$$\begin{aligned} &\bigcup_{n \geq n_0} \{S_n u - S u : u \in \mathcal{B}, \|u\|_{\mathcal{B}} = 1\}, \\ &\bigcup_{n \geq n_0} \{G_n u - G u : u \in \mathcal{B}, \|u\|_{\mathcal{B}} = 1\} \end{aligned}$$

являются относительно компактными подмножествами $\mathcal{B}$.

Ясно, что предыдущие условия дают обобщенную ν -сходимость.

3. Численные тесты

Чтобы показать сходимость и эффективность метода аппроксимации обобщенного спектра, приведем в качестве примера следующую спектральную задачу, определенную в $L^2(0, 1)$ следующим образом:

$$(P) \begin{cases} -u'' + u' = \lambda u, \\ u(0) = u(1) = 0. \end{cases}$$

Положим $A = -u'' + u'$, который является неограниченным оператором в $L^2(0, 1)$. Собственные значения этого оператора определяются формулой $\left\{\frac{1}{4} + k^2\pi^2, k \geq 1\right\}$. Преобразуем (P) к следующей ограниченной обобщенной задаче на собственные значения: найти

$$\lambda \in \mathbb{C}, u \in L^2(0, 1) - \{0\} : u(t) + \int_0^1 -\frac{\partial K(t, s)}{\partial s} u(s) ds = \lambda \int_0^1 K(t, s) u(s) ds,$$

где K является ядром Грина, заданным следующим образом:

$$K(t, s) = \begin{cases} t(1-s) & \text{если } 0 \leq t \leq s \leq 1, \\ s(1-t) & \text{если } 0 \leq s \leq t \leq 1. \end{cases}$$

Это означает, что $\forall u \in L^2(0, 1), \forall t \in [0; 1]$

$$Gu(t) = \int_0^1 -\frac{\partial K(t, s)}{\partial s} u(s) ds,$$

$$Su(t) = \int_0^1 K(t, s) u(s) ds.$$

Определим последовательности G_n и S_n как подход Нистрема к G и S , задаваемые для всех $n \geq 2$ следующим образом:

$$G_n u(t) = \frac{1}{2(n-1)} \frac{\partial K(t, t_1)}{\partial s} u(t_1) + \frac{1}{(n-1)} \sum_{i=2}^{n-1} \frac{\partial K(t, t_i)}{\partial s} u(t_i) + \frac{1}{2(n-1)} \frac{\partial K(t, t_n)}{\partial s} u(t_n),$$

$$S_n u(t) = \frac{1}{2(n-1)} K(t, t_1) u(t_1) + \frac{1}{(n-1)} \sum_{i=2}^{n-1} K(t, t_i) u(t_i) + \frac{1}{2(n-1)} K(t, t_n) u(t_n),$$

где $t_i = \frac{(i-1)}{n-1}$, $1 \leq i \leq n$.

С использованием леммы 11.4.2 из [5] мы можем показать, что наши гипотезы обобщенной ν -сходимости обеспечены для $\{G_n\}_{n \geq 1}$ и $\{S_n\}_{n \geq 1}$.

Рисунок показывает поведение ошибки между первыми тремя собственными значениями $(I + G, S)$ и их приближенными собственными значениями для различных значений n .

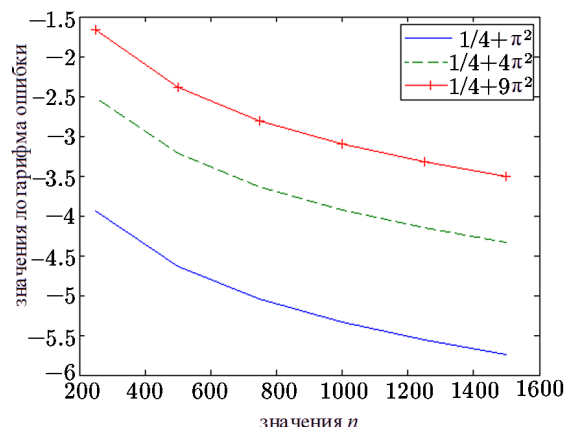


Рис. Поведение ошибки метода аппроксимации обобщенного спектра

4. Выводы

Наше исследование посвящено сходимости обобщенного спектра в смысле свойства U . Мы используем новый вид сходимости, чтобы показать его сходимость, которая позволяет избежать спектрального загрязнения, рассматривавшегося в недавних упомянутых выше работах. Этот новый вид сходимости называется обобщенной ν -сходимостью, поскольку он является результатом обобщения классической ν -сходимости, известной в литературе. Гипотезы, получаемые из обобщенной ν -сходимости, слабее упомянутых выше гипотез. Поэтому мы можем применить численный метод в качестве проекций Слоана и Канторовича и аппроксимации Нистрема.

Благодарности. Мы признательны редколлегии и рецензентам за время, уделенное рассмотрению нашей статьи и ценные комментарии, которые помогли значительно улучшить нашу статью.

Литература

1. Ahues M., Largillier A., Limaye B. Spectral Computations for Bounded Operators. — CRC Press, 2001.
2. Aliev A.R., Eyvazov E.H. On the discreteness of the spectrum of the magnetic Schrödinger operator // J. Functional Analysis and Its Applications. — 2012. — Vol. 46. — P. 305–307.
3. Aljawi S., Marletta M. On the eigenvalues of spectral gaps of matrix-valued Schrödinger operators // Numerical Algorithms. — 2021. — Vol. 86. — P. 637–657.
4. Alonso-Rodriguez A., Camano J., Rodriguez R., Valli A., Venegas P. Correction to: finite element approximation of the spectrum of the curl operator in a multiply connected domain // Foundations of Computational Mathematics. — 2019. — Vol. 19. — P. 243–244.
5. Atkinson K.E. The Numerical Solution of Integral Equations of the Second Kind. — Cambridge University Press, 1996.
6. Boulton L. Spectral pollution and eigenvalue bounds // Appl. Numerical Math. — 2016. — Vol. 99. — P. 1–23. — DOI:10.1016/j.apnum.2015.08.007.
7. Breuer J., Denisov S., Eliaz L. On the essential spectrum of Schrödinger operators on trees // Mathematical Physics, Analysis and Geometry. — 2018. — Vol. 21, № 33. — DOI: <https://doi.org/10.1007/s11040-018-9290-4>.

8. **Budnev V.M., Ginzburg I.F., Meledin G.V., Serbo V.G.** The two-photon particle production mechanism. Physical problems. Applications. Equivalent photon approximation // Physics Reports. — 1975. — Vol. 15, № 4. — P. 181–282.
9. **Cances E., Ehrlicher V., Maday Y.** Periodic Schrödinger operators with local defects and spectral pollution // SIAM J. Numerical Analysis. — 2012. — Vol. 50, № 6. — P. 3016–3035.
10. **Davies E.B., Plum M.** Spectral pollution // IMA J. Numerical Analysis. — 2004. — Vol. 24, № 3. — P. 417–438. — DOI:10.1093/imanum/24.3.417.
11. **Guebbai H.** Generalized spectrum approximation and numerical computation of eigenvalues for Schrödinger's operators // Lobachevskii Journal of Mathematics. — 2013. — Vol. 34, № 1. — P. 45–60. — DOI: <https://doi.org/10.1134/S1995080213010058>.
12. **Haddadi K., Muller S., Bloch I.** Validation of a bi-energetic spectrum approximation in bone mineral density measurement with a DXA digital twin // 2021 IEEE 18th Intern. Symposium on Biomedical Imaging (ISBI). — 2021. — P. 380–384.
13. **Kamouche S., Guebbai H., Ghiat M., Segni S.** Generalized quadratic spectrum approximation in bounded and unbounded cases // J. Probl. Anal. Issues Anal. — 2021. — Vol. 10, № 28. — P. 53–70.
14. **Khellaf A., Guebbai H.** A note on generalized spectrum approximation // Lobachevskii Journal of Mathematics. — 2018. — Vol. 39, № 9. — P. 1388–1395. — DOI: <https://doi.org/10.1134/S1995080218090263>.
15. **Khellaf A., Merchela W., Guebbai H.** New sufficient conditions for the computation of generalized eigenvalues // Russian Mathematics. — 2021. — Vol. 65, № 2. — P. 65–68. — DOI: <https://doi.org/10.3103/S1066369X21020067>.
16. **Kitaura K., Morokuma K.** A new energy decomposition scheme for molecular interactions within the Hartree–Fock approximation // Intern. J. of Quantum Chemistry. — 1976. — Vol. 10, № 2. — P. 325–340.
17. **Levin A.M.** The spectrum of a perturbed operator associated with a hyperbolic toral automorphism // J. of Mathematical Sciences. — 2014. — Vol. 196. — P. 187–191.
18. **Maozhu Z., Sun J., Zettl A.** The spectrum of singular Sturm–Liouville problems with eigenparameter dependent boundary conditions and its approximation // Results in Mathematics. — 2013. — Vol. 63. — P. 1311–1330.
19. **Tashpulatov S.M.** Structure of essential spectrum and discrete spectrum of the energy operator of five-electron systems in the Hubbard model–doublet states // Conference proceedings Operator Theory and Differential Equations / A.G. Kusraev, Z.D. Totieva. — 2021. — P. 275–301.
20. **Thiel W.** Semiempirical quantum-chemical methods // Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science. — 2014. — Vol. 4, № 2. — P. 145–157.

Поступила в редакцию 22 февраля 2022 г.

После исправления 31 марта 2022 г.

Принята к печати 18 июля 2022 г.