arXiv:2302.03891v1 [math-ph] 8 Feb 2023

通过有限部分积分将斯蒂尔切斯级数延拓至大参数区域

CHRISTIAN D. TICA 和 ERIC A. GALAPON

Abstract. 我们提出了一种方法，利用适用于斯蒂尔切斯积分及其推广形式 [Galapon E.A Proc.R.Soc A 473, 20160567(2017)] 的强渐近区域新型收敛展开，对其相关的发散斯蒂尔切斯级数在所有渐近区域内求和。这种新型展开利用了发散的负幂矩，并将其视为Hadamard有限部分积分。由此，我们得以通过单一展开，计算四次和六次非谐振子的基态能量，以及 $\mathcal{PT}$对称三次振子和漏斗势在所有微扰区间内的基态能量。该展开基于发散的弱耦合微扰级数构造，并纳入了已知的谱的强耦合领先阶行为。

1. Introduction

发散微扰理论（PT）级数在理论物理的许多领域中普遍存在 [1]。在量子场论中各种物理量的计算，以及量子力学中的特征值问题，都离不开这类级数；而精确且收敛的解十分罕见。因此，大量理论研究致力于恰当地诠释这些发散解，并研究如何将一个参数区域中的数据外推，以构建相反区域中的解 [2, 3, 4]。斯蒂尔切斯级数是一类已针对这些问题提出解决方案的微扰理论级数，

$$F(\beta) = \sum_{k=0}^{\infty} \mu_k (-\beta)^k, \qquad \beta \to 0, \tag{1.1}$$

其中 μ_k 是正函数 $\rho(x)$ 的正幂矩，$\mu_k = \int_0^\infty x^k \rho(x) \mathrm{d}x$。对于由发散的斯蒂尔切斯级数表示的有限物理量 $F(\beta)$，当 β 较小时[5, 6, 7, 8, 9, 10]，可以通过多种方法对其求和。尤其值得一提的是，由斯蒂尔切斯级数构造的帕德近似具有已被充分理解的收敛性质 [5, 11]。

已知 β 较大时 $F(\beta)$ 的首阶行为（当 $\beta \to \infty$ 时），以及有限个正幂矩 μ_k，要确定 $F(\beta)$，却是物理学中一个艰巨且由来已久的难题 [8, 12, 13, 14]。在湍流输运过程 [15], 中，若仅已知发散的斯蒂尔切斯型小 P´eclet 数展开，而当 $Pe \to \infty$ 时有效扩散率 κ^* 呈现 $\kappa^*(Pe) \sim Pe^{1/2}$，那么我们希望在强 P´eclet 数区间 Pe 求得该有效扩散率。类似地，在量子力学的奇异特征值微扰理论中 [16, 17, 18], ，对于各种非谐振子，在强耦合区间 $\beta \to \infty$ 下计算谱 $E(\beta)$

Date: 2023年2月9日。

已知有限个弱耦合展开系数，以及强耦合区间 $E(\beta) \sim \beta^{\lambda}$ 中的代数幂首阶行为 $0 < \lambda < 1$。Pad´e 逼近显示出首阶行为 $P_M^N(\beta) \sim \beta^{N-M}$，当 $\beta \to \infty$ 时，其中 N, M 为整数，因此在这些情况下，当 β 较大时，它们必然无法收敛到 $F(\beta)$ [16, 19]。

一些作者 [20, 21]采取了更直接的方法，将发散的斯蒂尔切斯级数求和为相应的斯蒂尔切斯积分，

$$\int_0^{\infty} \frac{\rho(x)}{1+\beta x}\mathrm{d}x \sim \sum_{k=0}^{\infty} \mu_k(-\beta)^k, \qquad \beta \to 0, \tag{1.2}$$

通过求解其背后的斯蒂尔切斯矩问题，也就是利用现有的正幂矩 μ_k 重构$\rho(x)$，并获得一种即使在相反的渐近区域 $\beta \to \infty$也适用于计算的展开。然而，在强渐近区域通过展开几何级数（$1/(x\beta)+1$）$^{-1}$，按 $1/(x\beta)$的幂展开并逐项积分来计算斯蒂尔切斯积分，会得到一个各项均分别发散的展开，

$$\int_0^{\infty} \frac{\rho(x)}{1+\beta x}\mathrm{d}x \sim \sum_{k=0}^{\infty} \mu_{-(k+1)} \frac{(-1)^k}{\beta^{k+1}} \tag{1.3}$$

其中负幂矩，$\mu_{-(k+1)} = \int_0^{\infty} \rho(x)/x^{k+1}\mathrm{d}x$, $k = 0, 1 \ldots$都是发散积分 [12, 16]。因此，斯蒂尔切斯积分是通过数值方法求得的。在一项开创性研究 [22], 中，我们中的一位进一步推进了这一做法，将这些发散的负幂矩$\mu_{-(k+1)}$ 严格地解释为复围道积分。由此，我们推导出斯蒂尔切斯积分及其推广形式 [23, 24]的一组精确且收敛的大-β 展开。

本文展示了一种简单的方案，说明如何利用这些收敛展开，对参数β 的所有取值下的发散斯蒂尔切斯级数（1.1）求和，尤其是在 $\beta \to \infty$ 这一棘手区间内，在这里大多数求和技术都无能为力。我们在第2节讨论这一过程，并在第3节将其作为发散斯蒂尔切斯级数及其推广形式的求和技术加以应用。为展示这一方案，我们将从有限个系数出发，推导 $\mathcal{PT}$ 对称三次振子、四次非谐振子和漏斗势的基态能量强耦合展开。这些系数来自阶乘式发散的瑞利–薛定谔（RS）弱耦合微扰展开；此外，我们还利用它们在强耦合区间已知的非整数代数幂领先阶行为。除此之外，我们还将面对更棘手的六次非谐振子基态能量的RS弱耦合展开，并通过将其求和为广义斯蒂尔切斯积分来处理。最后，我们在第4节总结并提出若干要点，以进一步拓展并提升该方法的效用。

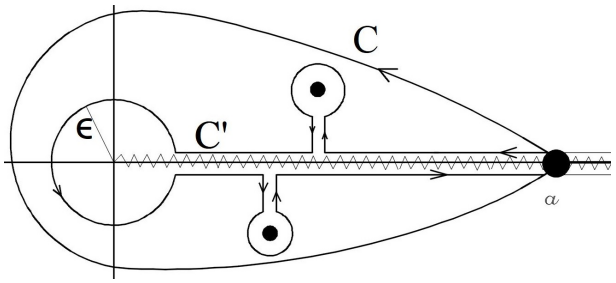


FIGURE 1. 积分围道。上限 a 可以是无穷大。图中的点表示极点；对于斯蒂尔切斯积分，极点位于 $z=-1/\beta$。 ϵ 是一个很小的正参数。

2. THE METHOD

我们提出的方案能够避开导出方程（1.3）的形式推导过程中出现的发散积分问题。解决之道在于将这些发散量解释为Hadamard有限部分[25, 22]。附录 A 对本研究涉及的定义和表示作了简要讨论。由于有限部分在求得斯蒂尔切斯积分及其推广形式的精确收敛展开方面发挥着核心作用，这种方法便称为有限部分积分。

2.1. 有限部分积分。 关于如何在 $\beta\to\infty$ 区间内为斯蒂尔切斯积分获得收敛展开，

$$S(\beta)=\beta\int_0^\infty \frac{\rho(x)}{1+\beta x}\mathrm{d}x, \tag{2.1}$$

及其推广形式，已有一系列研究 [22, 23, 24, 26, 27,28]。在后续应用中将会用到的一项特定结果，是如下情形：当 $\rho(x)=x^{-\nu}g(x)$ 对于 $|\nu|<1$ 成立，且 $g(x)$ 的复扩展$g(z)$ 是整函数时。与公式 (1.3) 中一样，第一步是通过代入 $(1/x\beta+1)^{-1}$ 关于 $1/x\beta$ 的幂展开，并逐项进行形式积分，有意引入发散积分，

$$\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k}{\beta^k}\int_0^\infty \frac{x^{-\nu}g(x)}{x^{k+1}}\mathrm{d}x. \tag{2.2}$$

然后，我们将 $\rho(x)=x^{-\nu}g(x)$ 的发散积分，即负幂矩，解释为 Hadamard有限部分积分，

$$\mu_{-(k+1)}=\int_0^\infty \frac{x^{-\nu}g(x)}{x^{k+1}}\mathrm{d}x \to \text{⨍}_0^\infty \frac{x^{-\nu}g(x)}{x^{k+1}}\mathrm{d}x. \tag{2.3}$$

在 [22],中，它们被严格表示为复围道积分

$$\text{⨍}_0^a \frac{x^{-\nu}g\left(x\right)}{x^m}\,\mathrm{d}x=\frac{1}{(e^{-2\,\pi\,\nu\,i}-1)}\int_{\mathcal{C}}\frac{z^{-\nu}g\left(z\right)}{z^m}\,\mathrm{d}z, \tag{2.4}$$

对于 $m=1,\ 2,\ \ldots\ldots$以及 a，可以取为无穷大。围道 $\mathcal{C}$如图 1 所示。

阿达马有限部分积分值的显式计算见附录 A，其中我们采用了更简便、也更为人熟知的形式（A.6）；或者如（A.13）所示，将其计算为

梅林变换的解析延拓。 [22]的主要结果以及较近期的工作 [28] 旨在证明这两种对偶表示的等价性。Hadamard有限部分积分的围道积分表示式（2.4），旨在借助图1所示的等价围道 $\mathcal{C}'$，将斯蒂尔切斯积分（2.1）的计算引入复平面，

$$\int_{\mathcal{C}'} \frac{z^{-\nu}\, g(z)}{1/\beta + z}\mathrm{d}z = \left(e^{-2\pi\nu i} - 1\right) \int_0^a \frac{x^{-\nu} g(x)}{1/\beta + x}\mathrm{d}x + 2\pi i \mathrm{Res}\left[\frac{z^{-\nu}\, g(z)}{1/\beta + z}\right]_{z=-\frac{1}{\beta}}. \tag{2.5}$$

求解沿实轴的斯蒂尔切斯积分，

$$\int_0^a \frac{x^{-\nu} g(x)}{1/\beta + x}\mathrm{d}x = \frac{1}{(e^{-2\pi\nu i} - 1)} \int_{\mathcal{C}'} \frac{z^{-\nu}\, g(z)}{1/\beta + z}\mathrm{d}z - \frac{2\pi i}{(e^{-2\pi\nu i} - 1)} \mathrm{Res}\left[\frac{z^{-\nu}\, g(z)}{1/\beta + z}\right]_{z=-1/\beta}. \tag{2.6}$$

现在，我们可以对等式（2.6）右侧第一项逐项积分，

$$\begin{aligned} \frac{1}{(e^{-2\pi\nu i} - 1)} \int_{\mathcal{C}'} \frac{z^{-\nu}\, g(z)}{1/\beta + z}\mathrm{d}z &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\beta^k\,(e^{-2\pi\nu i} - 1)} \int_{\mathcal{C}'} \frac{z^{-\nu} g(z)}{z^{k+1}}\mathrm{d}z \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\beta^k} \int\!\!\!\!\!\!\diagup_0^a \frac{x^{-\nu} g(x)}{x^{k+1}}\mathrm{d}x, \qquad |z| > \frac{1}{\beta}, \end{aligned} \tag{2.7}$$

其中使用了围道积分表示（2.4）。不同于导出等式（2.2）时的形式步骤，可以证明上述展开是绝对收敛的（见 [22]中的定理3.4证明）。计算等式（2.6）中的留数项后，斯蒂尔切斯积分（2.1）可得到如下精确且收敛的展开，

$$\beta \int_0^{\infty} \frac{x^{-\nu} g(x)}{1 + \beta x}\mathrm{d}x = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k \mu_{-(k+1)}}{\beta^k} + \frac{\pi\, g(-\frac{1}{\beta})\, \beta^{\nu}}{\sin(\pi\nu)}, \tag{2.8}$$

其中，负幂矩$\mu_{-(k+1)}$ 是有限部分积分（2.3）。展开式（2.8）的第二项是通过在复平面上积分得到的；仅仅像等式（2.2）那样形式地逐项积分，再将发散积分正则化为Hadamard有限部分积分，则会遗漏这一项。若 $g(0) \neq 0$，这一遗漏项将在 $\beta \to \infty$ [23, 24]时主导斯蒂尔切斯积分的行为。

我们还可以将有限部分积分应用于斯蒂尔切斯积分的一些推广形式。例如，完全按照相同的步骤操作，可得到以下精确的收敛展开，

$$\beta \int_0^{\infty} \frac{x^{-\nu} g(x)}{1 + \beta x^2}\mathrm{d}x = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\beta^k} \mu_{-(2k+2)} + \Delta(\beta) \tag{2.9}$$

其中留数项的值为

$$\Delta(\beta) = \frac{\pi\, \beta^{(1+\nu)/2}}{\sin(\pi\nu)} \left(\cos\left(\frac{\pi\nu}{2}\right) \mathrm{Im}\, g\left(i/\sqrt{\beta}\right) + \sin\left(\frac{\pi\nu}{2}\right) \mathrm{Re}\, g\left(i/\sqrt{\beta}\right)\right), \tag{2.10}$$

假设 $g(z)$ 在实轴上为实数。Re z 和 Im z 分别表示复数 z的实部和虚部。发散的负

幂矩 $\mu_{-(2k+2)}$ 再次解释为 Hadamard有限部分积分

$$\mu_{-(2k+2)} = \text{⨍}_0^\infty \frac{x^{-\nu} g(x)}{x^{2k+2}} \mathrm{d}x, \ k = 0, 1, \ldots \tag{2.11}$$

展开式 (2.8) 和 (2.9) 的一个共同重要特征是，它们的第二项分别呈现出代数首阶行为 $\sim \beta^\nu$ 和 $\beta^{(1+\nu)/2}$，处于 $\beta \to \infty$ 区域。这意味着，可以利用对这些积分在 $\beta \to \infty$ 时的行为的先验知识，作为选择 ν 适当值的标准，从而使第二项能够模拟这种首阶代数行为。这一点对于即将考察的物理实例尤其重要。

3. Application to Summation Problems

本节讨论如何将有限部分积分应用于 Stieltjes 求和问题：给定一组有限的正幂矩μ_k，即斯蒂尔切斯级数的展开系数，

$$\int_0^\infty \frac{\rho(x)}{1+\beta x} \mathrm{d}x \sim \sum_{k=0}^\infty \mu_k (-\beta)^k, \qquad \beta \to 0, \tag{3.1}$$

我们现在希望获得适用于 β所有取值的斯蒂尔切斯积分近似，理想情况下是在 $\beta \to \infty$ 区域内。

为了利用展开式 (2.8) 及其推广式 (2.9)，我们需要根据前 $d+1$ 个正幂矩 μ_k 重构 $\rho(x)$。我们要求重构的形式为 $\rho(x) = x^{-\nu} g(x)$，其中 $|\nu| < 1$ 和 $g(x)$ 为某些函数，且其复扩张 $g(z)$ 是整函数。为此，可以将 $g(x)$ 展开为广义傅里叶级数，并以拉盖尔多项式作为标准正交基，

$$g(x) = e^{-x/2} \sum_{m=0}^\infty c_m m! \sum_{k=0}^m \frac{(-x)^k}{(k!)^2 (m-k)!}, \tag{3.2}$$

满足条件

$$\mu_k = \int_0^\infty x^{k-\nu} g(x) \mathrm{d}x, \qquad k = 0, 1, \ldots, d. \tag{3.3}$$

将 $g(x)$ 的重构式 (3.2) 代入方程 (3.3)，得到关于前 $d+1$ 个展开系数 c_m 的 $d+1$ 个线性方程组成的方程组

$$\mu_n = \sum_{m=0}^d c_m \, P(n, m) \tag{3.4}$$

其中，矩阵 $P(n,m)$ 定义为

$$P(n, m) = m! 2^{n-\nu+1} \sum_{k=0}^m \frac{(-2)^k \Gamma(n+k-\nu+1)}{(k!)^2 (m-k)!}. \tag{3.5}$$

对于本文所考虑的示例，我们通过实现一种基于 C++ Boost uBLAS 库中 LU 函数的分块 LU 分解算法 [29, 30]（采用部分选主元）来求解系统 (3.5)。这使我们能够在应用层借助 C++ Boost MPI 库进行并行计算，并使用 C++ Boost Thread 库实现逻辑线程。我们还使用 Boost Multiprecision 库提供的任意精度数据类型来表示

正幂矩 μ_k，其扩展精度最高可达三千位，并以任意精度算术进行计算，从而消除舍入误差。关于 C++ Boost 库的优秀入门介绍可见[31]。我们还将结果与 Eigen 3 库 [32]提供的 LU 分解进行了比较。该库为 MPFR C++ 库 [33]提供的任意精度数据类型提供矩阵和向量容器。我们使用的扩展精度库均基于 GNU GMP [34] 和 MPFR [35] 库。

一旦得到重构式 (3.2)，现在即可将 (2.8) 中的第一项计算为

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k \mu_{-(k+1)}}{\beta^k} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\beta^k} \fint_0^{\infty} \frac{x^{-\nu} g(x)}{x^{k+1}} \mathrm{d}x. \tag{3.6}$$

代入重构式 (3.2)，并分离出涉及有限部分积分的各项，可得

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k \mu_{-(k+1)}}{\beta^{k+1}} = \sum_{k=0}^{d} \frac{(-1)^k}{\beta^k} \left(A_k + B_k + C_k\right) + \sum_{k=d+1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\beta^k} D_k,$$

其中

$$A_k = \sum_{m=0}^{k} c_m m! \sum_{l=0}^{m} \frac{(-1)^l}{(l!)^2 (m-l)!} \fint_0^{\infty} \frac{e^{-x/2}}{x^{k+\nu+1-l}} \mathrm{d}x, \tag{3.7}$$

$$B_k = \sum_{m=k+1}^{d} c_m m! \sum_{l=0}^{k} \frac{(-1)^l}{(l!)^2 (m-l)!} \fint_0^{\infty} \frac{e^{-x/2}}{x^{k+\nu+1-l}} \mathrm{d}x, \tag{3.8}$$

$$C_k = \sum_{m=k+1}^{d} c_m m! \sum_{l=k+1}^{m} \frac{(-1)^l \, \Gamma(l-k-\nu) 2^{l-k-\nu}}{(l!)^2 (m-l)!}, \tag{3.9}$$

and

$$D_k = \sum_{m=0}^{d} c_m m! \sum_{l=0}^{m} \frac{(-1)^l}{(l!)^2 (m-l)!} \fint_0^{\infty} \frac{e^{-x/2}}{x^{k+\nu+1-l}} \mathrm{d}x. \tag{3.10}$$

上面出现的有限部分积分在附录 A 中进行了显式计算，其结果由方程 (A.12) 给出，

$$\fint_0^{\infty} \frac{e^{-x/2}}{x^{k+\nu+1-l}} \mathrm{d}x = \frac{(-1)^{k-l+1} \left(\frac{1}{2}\right)^{k-l+1+\nu} \pi}{\Gamma(k-l+1+\nu) \sin(\pi\nu)}. \tag{3.11}$$

展开式 (2.8) 第二项中因子 $g(-1/\beta)$ 的存在，揭示了一个关键问题：在 $x = 0$ 附近重构 $\rho(x) = x^{-\nu} g$ 时的逐点收敛，可能会如何破坏 $S(\beta)$ 在区域 $\beta \to \infty$内的收敛。对于将 $\rho(x) = x^{-\nu} g(x)$ 重构为广义傅里叶级数 (3.2) 而言，$x = 0$ 附近的吉布斯现象 [36] 尤其值得关注。如果重构 $\rho(x)$ 时无法正确模拟 $x = 0$ 处的零点或奇点，就可能产生伪振荡。从这个意义上说，在该区域内对发散的斯蒂尔切斯级数求和，主要转化为求解其背后的斯蒂尔切斯矩问题。

3.1. 量子力学中的奇异摄动理论。 在接下来的几个小节中，我们将把上述方法应用于对哈密顿算符 $H(\beta) = H_0 + \beta V$ 的谱的发散瑞利－薛定谔（RS）微扰级数求和，其中 β 是耦合参数，用以量化哈密顿量 $H(\beta)$ 偏离 H_0 的程度； H_0 的特征函数和特征值已知其闭式表达。我们所考虑的哈密顿量涉及的特征值问题属于奇异摄动理论，而谱关于 β 的发散微扰理论（PT）级数则被解释为庞加莱意义下的渐近展开 [37, 38, 39]。在这些例子中，西曼齐克标度 [39] 对哈密顿量 $H(\beta)$ 进行幺正变换，从而将奇异微扰理论转化为常规微扰理论；更重要的是，它还给出谱的强耦合领先阶行为[39, 16]。

为展示这一过程，考虑这一族非谐振子，

$$H(\alpha,\beta) = \hat{p}^2 + \alpha\hat{x}^2 + \beta x^{2m},\ m = 2,3,4,\dots \tag{3.12}$$

以及 $\alpha,\ \beta > 0$。谱的瑞利–薛定谔弱耦合展开为，

$$E_n^{(m)}(\alpha,\beta) = \sum_{k=0}^{\infty} E_{k,n}^{(m)}(\alpha)\,\beta^k. \tag{3.13}$$

考虑幺正变换，

$$(U(\lambda)\psi)(x) = \lambda^{1/2}\psi(\lambda x),\ \lambda > 0,\quad \psi(x) \in L^2(\mathbb{R}). \tag{3.14}$$

因此，

$$U(\lambda)\hat{x}U(\lambda)^{-1} = \lambda\hat{x}, \qquad U(\lambda)\,\hat{p}\,U(\lambda)^{-1} = \lambda^{-1}\hat{p}. \tag{3.15}$$

将幺正变换应用于 (3.12)，

$$U(\lambda)H(\alpha,\beta)U(\lambda)^{-1} = \lambda^{-2}H(\alpha\lambda^4, \beta\lambda^{2m+2}). \tag{3.16}$$

因此，谱满足缩放性质

$$E_n^{(m)}(\alpha,\beta) = \lambda^{-2}E_n^{(m)}(\alpha\lambda^4, \beta\lambda^{2m+1}). \tag{3.17}$$

对于 $\lambda = \beta^{-1/(2m+2)}$ 和 $\alpha = 1$的情况，

$$H(1,\beta) = \hat{p}^2 + \hat{x}^2 + \beta\hat{x}^{2m} \tag{3.18}$$

并且 $U(\lambda)H(1,\ \beta)U(\lambda)^{-1} = \mathcal{H}(\beta)$，

$$\mathcal{H}(\beta) = \beta^{1/(2m+1)}(\hat{p}^2 + \beta^{-2/(m+1)}\hat{x}^2 + \hat{x}^{2m}) \tag{3.19}$$

因此，第 n个态的能量 (3.13) 也具有强耦合展开

$$E_n^{(m)}(\beta) = \beta^{1/(m+1)}\sum_{k=0}^{\infty} K_{k,n}^{(m)}\beta^{-2k/(m+1)} \tag{3.20}$$

当 β 足够大时，该展开收敛，因为酉等价的哈密顿量 (3.19) 表示一个正则微扰理论（参见 [39]第 384 页关于 Kato-Rellich 定理的讨论）。

该方法的出发点是：对于四次情形 $m = 2$ ，将弱耦合展开（3.13）求和为斯蒂尔切斯积分（2.8）；对于六次情形 $m = 3$，则求和为广义斯蒂尔切斯积分（2.9）。随后，我们利用展开式（3.20）中的领先阶强耦合行为 $E_n^{(m)} \sim \beta^{1/(m+1)}$ 作为

β	第二项	第三项， $\Delta(\beta)$
10^{-1}	$-1.8895969(10^{105})$	$1。8895969(10^{105})$
1.0	$-7.583247(10^{28})$	$7.583247(10^{28})$
10	$3.56913(10^{5})$	$-3.56913(10^{5})$
10^{2}	-1.0963506	3.01245278
10^{4}	-0.9991713	7.2954004
10^{5}	-0.99896648	11.5613682
10^{15}	-0.99894396	1156.1251

TABLE 1. 基态能量展开式（3.27）中各项的比较： $\mathcal{PT}$ 对称三次振子。在弱耦合至中间耦合区间，两项都很重要；而在强耦合区间 $\beta \to \infty$，第三项占主导地位，超过第二项。

在展开式（2.8）和（2.9）中选择参数 ν 适当取值的判据，使其主导项能够在强耦合区间模拟这种行为。我们还将该方法应用于另外两个系统；这两个系统的谱的弱耦合展开表现出与四次非谐振子情形相同的阶乘发散。

3.1.1. $\mathcal{PT}$ 对称三次振子。 </style}其谱的瑞利–薛定谔弱耦合展开

$$E_n(\beta) = E_n(0) + \sum_{k=1}^{\infty} e_{n,k}\beta^k, \qquad E_n(0) = 2n+1 \tag{3.21}$$

的 $\mathcal{PT}$ 对称非厄米三次振子

$$\hat{H}(\beta) = \hat{p}^2 + \hat{x}^2 + i\sqrt{\beta}\hat{x}^3, \qquad (\beta > 0) \tag{3.22}$$

是发散的。这一点从展开系数所呈现的阶乘增长中显而易见$e_{n,\ k}$ [18],

$$e_{n,k} = \frac{-4\sqrt{15}}{(2\pi)^{3/2}}\left(-\frac{15}{8}\right)^k \Gamma\left(k+\frac{1}{2}\right)\left(1+\mathcal{O}\left(\frac{1}{k}\right)\right). \tag{3.23}$$

展开式（3.21）也已被证明是一次减法的斯蒂尔切斯级数 [17, 18, 40]。这意味着，$e_{n,\ k}$ 被映射为某个正函数 $\rho_n(x)$的正幂矩,

$$e_{n,k+1} = (-1)^k \mu_{n,k} = (-1)^k \int_0^{\infty} t^k \rho_n(t)\mathrm{d}t,\ k = 0, 1, \ldots \tag{3.24}$$

因此，该谱可以表示为斯蒂尔切斯积分 [40, 17]

$$E_n(\beta) = E_n(0) + \beta \int_0^{\infty} \frac{\rho_n(t)}{1+\beta t}\mathrm{d}t. \tag{3.25}$$

重构 $\rho_n(t) = x^{-\nu} g(x)$ 后，其中 $g(x)$ 是广义傅里叶级数 (3.2)，随后我们可以利用通过有限部分积分得到的斯蒂尔切斯积分展开 (2.8)，来计算扰动参数 $\beta > 0$ 的所有取值下的谱。此外，西曼齐克标度 $\hat{}x \to \beta^{-\frac{1}{10}}\hat{}x$ [40] 将

哈密顿量 (3.22) 变换为

$$\mathcal{H}(\beta) = \beta^{1/5}\left(\hat{p} + \beta^{-2/5}\hat{x}^2 + i\hat{x}^3\right). \tag{3.26}$$

这给出了强耦合区间中的首阶行为 $E_n(\beta) \sim \beta^{1/5}$，我们通过在方程（2.8）中设定 $\nu = 1/5$ 来模拟这一行为。因此，对于基态能量，我们得到以下收敛展开

$$E_0(\beta) = 1 + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k \mu_{-(k+1)}}{\beta^k} + \frac{\pi\, g(-\frac{1}{\beta})}{\sin(\pi/5)}\,\beta^{1/5}. \tag{3.27}$$

我们在表1中列出了各种β 下展开（3.27）中各项的数值。显然，在 $\beta \to \infty$ 区间内，包含因子 $g(-1/\beta)$ 的第三项取样了 $\rho(x) = x^{-\nu} g$在原点附近的重构；尽管仍然与 $\beta \to 0$相关，但其主导了第二项。

展开（3.27）的收敛性总结于表2中。对于一些已深入强耦合区间的基态能量取值，在帕德逼近式的方法变得不可靠时，我们的结果在前几位数字上仍表现出收敛性。对于 β的较小值至中间值，我们看到，由（3.21）利用两千个正幂矩$\mu_{0,k}$ 并以最高3000位精度表示而构造的帕德逼近式 $P^{1000}_{1001}(\beta)$ 与结果高度一致。

3.1.2. 四次非谐振子。 四次非谐振子谱的瑞利–薛定谔弱耦合展开

$$\mathcal{H}(\beta) = \hat{p}^2 + \hat{x}^2 + \beta x^4 \tag{3.28}$$

对于所有 $\beta > 0$ 都是发散的。对于基态能量，

$$E^{(2)}(\beta) = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} b^{(k)} \beta^k. \tag{3.29}$$

能量修正展开的系数呈阶乘增长[41]，

$$b^{(k)} \sim (-1)^{k+1} \frac{\sqrt{24}}{\pi^{3/2}}\,\Gamma\left(k + \frac{1}{2}\right)\left(\frac{3}{2}\right)^k, \tag{3.30}$$

更重要的是，已证明能量修正是斯蒂尔切斯级数，因此可以求和为唯一的斯蒂尔切斯积分 [42]。这意味着，弱耦合展开系数 $b^{(k)}$ 是某个正函数 $\rho(x)$的正幂矩，

$$b^{(k+1)} = (-1)^k \mu_k = (-1)^k \int_0^{\infty} x^k \rho(x)\mathrm{d}x \tag{3.31}$$

对于 $k = 0,\ 1 \ldots$。因此，基态能量可表示为斯蒂尔切斯积分，

$$E^{(2)}(\beta) = 1 + \beta \int_0^{\infty} \frac{\rho(x)}{1 + \beta x}\mathrm{d}x. \tag{3.32}$$

此外，根据方程 (3.20) 中的西曼齐克标度，基态能量也呈现出主导阶强耦合行为，$E(\beta) \sim \beta^{1/3}$。因此，应用

矩 $\beta=0.1$		$\beta=0.2$	$\beta=1.0$	$\beta=10$	$\beta=100$
10	10^{-9}	10^{-7}	10^{-5}	10^{-4}	10^{-3}
50	10^{-17}	10^{-14}	10^{-9}	10^{-4}	10^{-3}
100	10^{-24}	10^{-18}	10^{-11}	10^{-6}	10^{-4}
200	10^{-32}	10^{-24}	10^{-14}	10^{-8}	10^{-4}
500	10^{-49}	10^{-36}	10^{-20}	10^{-10}	10^{-5}
1000	10^{-67}	10^{-50}	10^{-26}	10^{-12}	10^{-6}
1500	10^{-84}	10^{-59}	10^{-30}	10^{-13}	10^{-7}
2000	10^{-95}	10^{-69}	10^{-34}	10^{-15}	10^{-7}

所用矩	$\beta=10^3$	$\beta=10^4$	$\beta=10^5$	$\beta=10^6$
10	4.578585	7.234330	11.4448	18.1181
100	4.604231	7.289783	11.5481	18.2974
300	4.605774	7.294272	11.5575	18.3147
500	4.60602	7.29517	11.5595	18.3187
1000	4.60616	7.29582	11.5612	18.3219
1500	4.60619	7.29603	11.5617	18.3230
2000	4.60621	7.29612	11.5620	18.3236
$P^{1000}_{1001}(\beta)$	4.35 592	4.35 592	5.11 080	5.11 080

所用的矩	$\beta=10^7$	$\beta=10^{15}$	$\beta=10^{16}$	$\beta=2(10^{20})$
10	28.6946	1140.99	1808.32	13106.1
500	29.0313	1155.63	1831.54	13274.6
1000	29.0370	1155.90	1831.98	13277.8
2000	29.0402	1156.06	1832.23	13279.6
$P^{1000}_{1001}(\beta)$	5.12171	5.12182	5.12182	13.9605

TABLE 2. 通过有限部分积分，研究式（3.27）在所有微扰区间内对 $\mathcal{PT}$ 对称三次振子的基态能量展开的收敛性。相对于 Padé 近似式 $P^{1000}_{1001}(\beta)$ 计算误差的数量级；当 $\beta\to\infty$ 时，该近似式会变得不可靠。

展开式 (2.8)，并令 $\nu=1/3$ 将这一行为纳入第二项，可得收敛展开

$$E^{(2)}(\beta)=1+\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k\mu_{-(k+1)}}{\beta^k}+\frac{\pi\,g(-\frac{1}{\beta})\,\beta^{1/3}}{\sin(\pi/3)}. \tag{3.33}$$

计算所有耦合区间下 $E^{(2)}(\beta)$ 的结果汇总于表3。我们重现了由强耦合展开 (3.20) 得出的结果的前几位数字；该结果是在 [16] 中使用复杂得多的算法获得的。对于若干较小和中等的 β 值，我们计算了我们所得结果相对于 Padé 近似式 $P^{1000}_{1001}(\beta)$ 的误差。当 β 不超过 $\sim 10^2$ 时，我们的方法所得结果与 Padé 近似式的结果高度吻合。耦合更强时，后者便不再可靠。

3.1.3. 漏斗势。具有线性禁闭势的哈密顿量，

$$H(\beta)=\frac{p^2}{2}-\frac{1}{r}+\beta r,\qquad p=-i\nabla, \tag{3.34}$$

矩 $\beta=10^2$		$\beta=10^3$	$\beta=10^7$	$\beta=10^8$	$\beta=10^9$	$\beta=10^{19}$
10	4.956457	10.46254	222.097	478.313	1030.313	2219404
100	4.997441	10.61987	227.111	489.212	1053.891	2270382
500	4.999350	10.63710	228.008	491.178	1058.161	2279646
1000	4.999409	10.63887	228.178	491.554	1058.982	2281434
2000	4.9994169	10.63953	228.283	491.790	1059.498	2282561
$\mathcal{E}(\beta)$	4.9994175	10.63979	228.450	492.177	1060.362	2284481
$P_{1001}^{1000}(\beta)$	4.9991097	9.999928	13.9598	13.9604	13.9605	13.9605

所用的矩	$\beta=0.1$	$\beta=0.2$	$\beta=1.0$	$\beta=4$	$\beta=10$
10	10^{-9}	10^{-7}	10^{-4}	10^{-4}	10^{-3}
500	10^{-48}	10^{-28}	10^{-19}	10^{-12}	10^{-9}
1000	10^{-66}	10^{-48}	10^{-25}	10^{-15}	10^{-11}
1500	10^{-80}	10^{-60}	10^{-29}	0^{-17}	10^{-13}
2000	10^{-92}	10^{-67}	10^{-33}	10^{-19}	10^{-14}
3000	10^{-115}	10^{-83}	10^{-38}	10^{-22}	10^{-16}

TABLE 3. 四次非谐振子基态能量的展开式 (3.33) 在所有耦合区间内的收敛性。误差的数量级是相对于 Padé 逼近式 $P_{1001}^{1000}(\beta)$ 计算的，其中 $\beta=0.1-10$，而 $\mathcal{E}(\beta)$ 则利用 [16] 中的结果得到。

与量子色动力学中描述重夸克偶素态 [43] 有关。谱可通过对数微扰法 [44] 进行微扰求得。尤其是基态能量的微扰展开，

$$E(\beta)=-\frac{1}{2}\sum_{k=0}^{\infty}\epsilon_k(-\beta)^k,\qquad \epsilon_0=1 \tag{3.35}$$

对于微扰参数 $\beta>0$ 的所有取值均发散，这一点从阶乘增长中可以明显看出，

$$\epsilon_k\sim\frac{36}{\pi e^3}k!\left(\frac{3}{2}\right)^k k,\qquad k\to\infty. \tag{3.36}$$

系数 ϵ_k 的。我们将这些系数映射为正幂矩，并将展开求和为一次减法斯蒂尔切斯级数

$$\epsilon_{k+1}=\mu_k=\int_0^{\infty}x^k\rho(x)\mathrm{d}x,\qquad k=0,1,\ldots \tag{3.37}$$

因此，基态能量可表示为一次减法斯蒂尔切斯积分 [44]

$$E(\beta)=-\frac{1}{2}\left(1-\beta\sum_{k=0}^{\infty}\mu_k(-\beta)^k\right)=-\frac{1}{2}\left(1-\beta\int_0^{\infty}\frac{\rho(x)}{1+\beta x}\,\mathrm{d}x\right).$$

西曼齐克标度 $r\to\beta^{-1/3}r$ 给出 $H(\beta)=\beta^{2/3}H\left(\beta^{-1/3}\right)$，因此基态能量在强耦合区间呈现首阶行为 $E(\beta)\sim\beta^{2/3}$。通过设定 $\nu=2/3$，使重构呈现为 $\rho(x)=x^{-2/3}g(x)$，其中 $g(x)$由方程（3.2）给出，我们将这一首阶

矩 $\beta=1$		$\beta=10$	$\beta=18$
10	0.577313	6.053	9.7803
100	0.5779213441	6.14241	9.99991
200	0.5779213519479	6.143333	10.0049751
500	0.577921351961593503	6.1434332	10.00592966
1000	0.5779213519615935659650094	6.14343459	10.00596453
1250	0.5779213519615935659650859 2	6.1434346068578	10.00596532
$E^*(\beta)$	0.57792135	6.1434346	10.005967
$P^{624}_{625}(\beta)$	0.57792135196159356596508625	6.1434346088273	10.00596539

矩 $\beta=62.5$		$\beta=100$	$\beta=10^3$	$\beta=10^6$	$\beta=10^{11}$
10	23.833	33.20	160.6324	16264.15	35044767.8
100	24.77139	34.71469	171.2058	17487.35	37684845.6
200	24.82973	34.83425	172.7231	17706.17	38158567.2
500	24.85288	34.8919	173.9565	17926.99	38638242.3
1000	24.85589	34.90229	174.4599	18053.81	38915266.1
1250	24.856117	34.90335	174.5643	18088.61	38991664.5
$E^*(\beta)$	24.856630	34.90444	-	-	-
$P^{624}_{625}(\beta)$	24.854283	34.88143	148.0630	286.9456	289.84609

TABLE 4. 利用有限部分积分计算漏斗势在所有耦合区间内基态能量展开式 (3.38) 的收敛性。 $E^*(\beta)$ 引自 [45, 46]，而 $P^{624}_{625}(\beta)$ 是根据能量修正的微扰理论级数 (3.35) 构造的 Padé 逼近式。

行为纳入斯蒂尔切斯积分的展开（2.8），从而得到强耦合展开，

$$E(\beta) = -\frac{1}{2}\left(1 - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k \mu_{-(k+1)}}{\beta^k} - \frac{\pi g(-\frac{1}{\beta})\beta^{2/3}}{\sin(2\pi/3)}\right). \tag{3.38}$$

我们在表4中列出了利用展开式 (3.38) 计算漏斗势在所有耦合区间内基态能量 $E(\beta)$ 的结果。我们还列出了 [45, 46] 和 Padé 逼近式 $P^{1000}_{1001}(\beta)$ 的结果以作比较。与前述系统一样，我们的结果与通过其他方法在弱耦合区域得到的结果高度一致。此外，凭借与 Padé 逼近式中大致相同的信息，我们还能够处理更广泛的参数区间，尤其是 Padé 逼近式失效的强耦合域。

3.1.4. 六次非谐振子。与前述系统不同，发散的弱耦合展开的系数$b_3^{(k)}$

$$E^{(3)}(\beta) = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} b_3^{(k)} \beta^k \tag{3.39}$$

六次非谐振子的基态能量修正

$$H(\beta) = \hat{p}^2 + \hat{x}^2 + \beta x^6, \qquad \beta > 0. \tag{3.40}$$

使用的术语	$\beta = 10^{-3}$	$\beta = 10^{-2}$	$\beta = 10^{-1}$
1	1.0018750	1.01875	1.187500
5	1.00184881776	1.017593128	1。302(10²)
10	1.00184881554160	3。56(10⁻¹)	−7.57(10⁹)
20	1.0018488139131	−2.22(10¹¹)	
$E^{(3)}(\beta)$	1.00184881557231	1.016741136375	1.109087078466

TABLE 5. 六次非谐振子基态能量的发散弱耦合微扰论展开（3.39）的部分和的收敛性。 $E^{(3)}(\beta)$由展开式（3.46）中的结果得到。

表现出更为反常的发散速率 [8, 16],

$$b_3^{(k)} \sim (-1)^{k+1} \frac{\sqrt{128}}{\pi^2} \Gamma\left(2k + \frac{1}{2}\right) \left(\frac{4}{\pi}\right)^{2k}, \ r \to \infty. \tag{3.41}$$

表5列出了利用发散的瑞利–薛定谔弱耦合展开（3.39）的一系列部分和近似基态能量的结果。该表表明，由于展开式（3.39）的发散速率，甚至在弱耦合区间内也需要求和过程。正如 [8], 所述，增长速率（3.41）可由广义斯蒂尔切斯积分的庞加莱型渐近展开模拟

$$\int_0^\infty \frac{t^{-1/2} e^{-t} \mathrm{d}t}{1 + (64\beta t^2/45\pi^2)} \sim \pi^{1/2} \sum_{k=0}^\infty \left(\frac{1}{2}\right)_{2k} \left(\frac{-64\beta}{45\pi^2}\right)^k. \tag{3.42}$$

因此，我们将能量修正的弱耦合展开（3.39）求和为广义斯蒂尔切斯积分（2.9），方法是将瑞利–薛定谔展开系数 $b_3^{(k)}$ 映射为某个正函数 $\rho(x)$的 μ_{2k} 正幂矩,

$$b_3^{(k+1)} = (-1)^k \mu_{2k} = (-1)^k \int_0^\infty x^{2k} \rho(x) \mathrm{d}x, \qquad k = 0, 1, \ldots \tag{3.43}$$

因此，方程（3.39）中的能量修正可求和为

$$\begin{aligned} \beta \sum_{k=0}^\infty b_3^{(k+1)} \beta^k &= \beta \sum_{k=0}^\infty (-1)^k \beta^k \int_0^\infty x^{2k} \rho(x) \mathrm{d}x \\ &= \beta \int_0^\infty \rho(x) \left(\sum_{k=0}^\infty (-1)^k \beta^k x^{2k} \right) \mathrm{d}x \\ &= \beta \int_0^\infty \frac{\rho(x)}{1 + \beta x^2} \mathrm{d}x. \end{aligned} \tag{3.44}$$

因此，基态能量可表示为广义斯蒂尔切斯积分

$$E^{(3)}(\beta) = 1 + \beta \int_0^\infty \frac{\rho(x)}{1 + \beta x^2} \mathrm{d}x, \qquad \beta > 0. \tag{3.45}$$

随后我们令 $\rho(x) = x^{-\nu} g(x)$、$|\nu| < 1$ 以及 $g(0) \neq 0$，由方程（2.9）的结果可知，基态能量具有如下强耦合展开，

$$E^{(3)}(\beta) = 1 + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\beta^k} \mu_{-(2k+2)} + \Delta(\beta) \tag{3.46}$$

其中遗漏项由方程（2.10）给出，

$$\Delta(\beta) = \frac{\pi\, \beta^{(1+\nu)/2}}{\sin(\pi\nu)} \left(\cos\left(\frac{\pi\nu}{2}\right) \operatorname{Im} g\left(i/\sqrt{\beta}\right) + \sin\left(\frac{\pi\nu}{2}\right) \operatorname{Re} g\left(i/\sqrt{\beta}\right) \right), \tag{3.47}$$

且发散的负幂矩$\mu_{-(2k+2)}$ 为 Hadamard有限部分积分

$$\mu_{-(2k+2)} = \text{⨍}_0^{\infty} \frac{x^{-\nu} g(x)}{x^{2k+2}} \mathrm{d}x, \; k = 0, 1, \ldots \tag{3.48}$$

由方程（3.20）可知，基态能量呈现首阶行为$E^{(3)} \sim \beta^{1/4}$，我们可以通过设定 $\nu = -1/2$将其纳入项（3.47）中。如方程（3.2）所示，函数 $\rho(x) = x^{1/2} g(x)$ 被重构为关于拉盖尔多项式的广义傅里叶级数展开，

$$\rho(x) = x^{1/2}\, e^{-x/2} \sum_{m=0}^{\infty} c_m m! \sum_{k=0}^{m} \frac{(-x)^k}{(k!)^2 (m-k)!}. \tag{3.49}$$

在当前情况下，前 $d+1$ 个展开系数 c_m 通过施加方程（3.43）计算得到。这将导出关于展开系数 c_m的线性方程组，其中给定前 $d+1$ 个系数 $b_3^{(k+1)}$，

$$b_3^{(k+1)} = \sum_{m=0}^{d} c_m P(2k, m) \tag{3.50}$$

其中，矩阵 $P(n,\ m)$再次由方程（3.5）给出。随后，我们将重构式（3.49）代入展开式（3.46），并计算展开式（3.46）第二项中出现的有限部分积分（3.48），

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k \mu_{-(2k+2)}}{\beta^k} = \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{d}{2} \rfloor - 1} \frac{(-1)^k}{\beta^k} \left(A_{2k} + B_{2k} + C_{2k}\right) + \sum_{k=\lfloor \frac{d}{2} \rfloor}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\beta^k} D_{2k}, \tag{3.51}$$

其中 $\lfloor x \rfloor$ 是下取整函数，A_k、B_k、C_k以及 D_k 由方程（3.7）—（3.11）给出。

我们在表6中列出了使用展开（3.46）计算强耦合区间基态能量的结果。为便于比较，我们还列出了由微扰理论级数（3.39）构造的 Pad´e 近似式 $P_{26}^{25}(\beta)$ 的结果，以及 [16] 给出的强耦合展开（3.20）的结果。对于耦合阶数 $\sim 10^{-2} - 10^{-1}$，即使更高阶的 Pad´e 近似式和强耦合展开（3.20）也变得不可靠，而我们的结果仍表现出极佳的收敛速度。在强耦合区间内，我们的结果成功再现了由 [16]获得的结果的前几位数字。

矩 $\beta = 0.01$	
10	1.01 674 117
100	1.01 674 136 375 472 059
200	1.01 674 136 375 473 202 826
500	1.01 674 136 375 473 203 167 183 427
1000	1.01 674 136 375 473 203 167 181 798 146 029
1500	1.01 674 136 375 473 203 167 181 798 150 975 360
2000	1.01 674 136 375 473 203 167 181 798 150 975 912 655
2500	1.01 674 136 375 473 203 167 181 798 150 975 913 335 65
$\mathcal{E}(\beta)$	0.821 842 620 537 508
$P_{26}^{25}(\beta)$	1.01 674 136 331 858 137 175 447 611

矩 $\beta = 0.1$		$\beta = 1.0$
10	1.10 893	1.43 049
100	1.10 908 705 248	1.43 558 957
200	1.10 908 707 808	1.43 562 470
500	1.10 908 707 846 624	1.43 562 470
1000	1.10 908 707 846 558 285	1.43 562 461 738
1500	1.10 908 707 846 558 369	1.43 562 461 895
2000	1.10 908 707 846 558 370 253	1.43 562 461 898
2500	1.10 908 707 846 558 370 280 768	1.43 562 461 900
$\mathcal{E}(\beta)$	1.10 907 981 161 923	1.43 562 461 87
$P_{26}^{25}(\beta)$	1.10 864 422 246 116	1.33 992 038 209

矩 $\beta = 100$		$\beta = 10^3$	$\beta = 10^4$	$\beta = 10^5$	$\beta = 10^6$
10	3.58541	6.15915	10.7643	18.9688	33.5672
100	3.70518	6.44745	11.3605	20.1160	35.6959
200	3.71338	6.47582	11.4310	20.2654	35.9878
500	3.71758	6.49604	11.4899	20.4025	36.2722
1000	3.71690	6.49176	11.4765	20.3693	36.1989
1500	3.71697123	6.49232	11.4787086	20.3748	36.2111
$\mathcal{E}(\beta)$	3.71697473	6.49235	11.4787980	20.3750	36.2115
$P_{26}^{25}(\beta)$	1.46684099	1.46847	1.46863451	1.46865	1.46865

矩	$\beta = 10^8$	$\beta = 10^9$	$\beta = 10^{10}$	$\beta = 10^{11}$	$\beta = 2(10^{20})$
50	116.073	206.457	367.188	653.014	138110
100	112.687	200.432	356.167	633.30	133909
200	113.689	202.132	359.412	639.10	135144
300	114.854	204.255	363.237	645.95	136607
500	114.696	204.025	362.723	645.03	136411
1000	114.436	203.969	361.861	643.49	136080
1500	114.482	203.576	362.014	643.76	136139
$\mathcal{E}(\beta)$	114.483	203.579	362.019	643.77	136141
$P_{26}^{25}(\beta)$	1.46865	1.46865	1.46865	1.46865	1.46865

TABLE 6. 通过有限部分积分，考察六次非谐振子的基态能量在所有耦合区间内的展开（3.46）的收敛性。所有相关计算均以3000位精度完成。我们根据 [16]的结果得到了 $\mathcal{E}(\beta)$。 $P_{26}^{25}(\beta)$是一个Pad´e近似。

4. Summary、 Recommendations与 and Conclusion

本文提出了一种方法：通过对发散的斯蒂尔切斯级数求和，将有限部分积分方法应用于斯蒂尔切斯积分或其推广形式。我们将该程序应用于若干量子力学系统基态能量的发散微扰理论级数解。该程序使我们能够将发散的弱耦合展开转化为一种新颖的、关于耦合参数倒数幂的收敛强耦合展开，并加入一个修正项，从而自然地纳入强耦合区间内能量本征值已知的非整数代数领先阶行为。随后，我们计算了所有微扰区间内的基态能量近似值，即使在深入强耦合区间后，结果仍具有相当高的精度。

我们指出，斯蒂尔切斯矩问题的解在原点附近的逐点收敛性可能会损害强耦合区间内展开的收敛性。对此，未来的相关研究可以探讨求解斯蒂尔切斯矩问题的程序，以期在使用较少正幂矩作为输入的同时，实现更好的逐点收敛性。这将提升该方法应用于某些微扰系数有限的实际问题时的潜力。此外，重构结果必须具备有限部分积分所要求的解析性质，并在原点处具有适当形式，以确保它能够模拟问题正确的强耦合领先阶行为。例如，最大熵方法 [21] 给出的重构形式为

$$\rho(x) = \exp\left(-\sum_{n=0}^{N} \lambda_n x^n\right), \tag{4.1}$$

其中 λ_n 是待确定的常数。将其用于本文所考虑的物理实例时，这并不是一种理想的重构方案。当 $\rho(x)$ 由（4.1）给出时，通过有限部分积分可得斯蒂尔切斯积分的展开式为（见 [22]，式 3.3），

$$\beta \int_0^\infty \frac{\rho(x)}{1+\beta x}\mathrm{d}x = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\beta^k}\mu_{-(k+1)} - \rho\left(-\frac{1}{\beta}\right)\ln\left(\frac{1}{\beta}\right). \tag{4.2}$$

其中负幂矩是阿达马有限部分积分（ [22] 中的式 2.9）

$$\mu_{-(k+1)} = \text{⨍}_0^\infty \frac{\rho(x)}{x^{k+1}}\mathrm{d}x. \tag{4.3}$$

在强耦合区域，此展开将由第二项主导；该项表现出对数行为，而不是本文所研究系统的谱中所呈现的非整数代数幂。

这种方法的多功能性以及相对简单的算法特性，使我们在此提出的求和方法具有显而易见的优势。通过最直接的途径，它能够利用来自相反渐近区域的部分信息，得到一个可用于计算所有参数区域内解的单一展开。此外，正如六次非谐振子的谱这一案例所显示的，该方法还可以有效地对级数求和

该级数的发散速度快于阶乘增长，因此即使在弱耦合区间，标准的 Pad´e 逼近也无法对其进行有效处理。

Acknowledgments

我们感谢科学技术部先进科学技术研究所（DOST-ASTI）的计算与存档研究环境（COARE）提供高性能计算（HPC）设施的使用权限。本研究由菲律宾大学系统通过创意作品研究强化资助（ECWRG 2019-05-R）资助。C.D. Tica 感谢科学技术部科学教育研究所（DOST-SEI）通过 DOST ASTHRDP-NSC 提供奖学金资助。

Appendix A. Hadamard's Finite Part Integrals

本节将简要讨论如何计算在原点处具有不可积奇点的发散积分的 Hadamard 有限部分，

$$\int_0^a \frac{f(x)}{x^{m+\nu}}\mathrm{d}x, \qquad m = 1, 2, \ldots, |\nu| < 1, \tag{A.1}$$

其中 a 可取至无穷大。为此，我们引入一个任意小的截断参数 ϵ, $0 < \epsilon < a$，以替代原点处造成问题的不可积奇点。由此得到的收敛积分分为两组项

$$\int_\epsilon^a \frac{f(x)}{x^{m+\nu}}\mathrm{d}x = C_\epsilon + D_\epsilon, \tag{A.2}$$

其中， C_ϵ 是当 $\epsilon \to 0$时具有有限极限的项组，而 D_ϵ在同一极限下发散。随后，通过去除发散的项组 D_ϵ，仅保留 C_ϵ 的极限，并将该极限指定为发散积分的值，即可得到该发散积分的有限部分，

$$⨍_0^a \frac{f(x)}{x^{m+\nu}}\mathrm{d}x = \lim_{\epsilon\to 0} C_\epsilon. \tag{A.3}$$

Hadamard有限部分积分还可以更严格地表示为第2节中公式（2.4）给出的复围道积分。具体细节见 [22, 26]。构造复围道积分表示的出发点是等价形式，

$$⨍_0^a \frac{f(x)}{x^{m+\nu}}\mathrm{d}x = \lim_{\epsilon\to 0}\left[\int_\epsilon^a \frac{f(x)}{x^{m+\nu}}\mathrm{d}x - D_\epsilon\right]. \tag{A.4}$$

另一方面，标准表示（A.3）与显式计算Hadamard有限部分的值有关。为说明这一点，设 $f(x)$具有整复延拓 $f(z)$，使其能够展开为

$$f(z) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k z^k. \tag{A.5}$$

将此展开代入方程 (A.1)，由方程 (A.3) 可知

$$⨍_0^a \frac{f(x)}{x^{m+\nu}}\,\mathrm{d}x = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{c_k a^{k+1-m-\nu}}{(k+1-m-\nu)}. \tag{A.6}$$

此外,

$$\int\!\!\!\!\!\!\diagup_0^\infty \frac{f(x)}{x^{m+\nu}}\,\mathrm{d}x = \lim_{a\to\infty}\sum_{k=m}^{\infty}\frac{c_k a^{k+1-m-\nu}}{(k+1-m-\nu)}, \tag{A.7}$$

若 $f(x)x^{-m-\nu}$ 在无穷远处可积，或当 $x\to\infty$ 时 $f(x)x^{-m-\nu}=o(x^{-1})$。我们将此应用于计算有限部分，其中 $f(x)=e^{-b\,x}$, $b>0$。将系数 $c_k=(-b)^k/k!$ 代回方程 (A.7)，即可得到极限形式的有限部分

$$\int\!\!\!\!\!\!\diagup_0^\infty \frac{e^{-b\,x}}{x^{m+\nu}}\,\mathrm{d}x = \lim_{a\to\infty}\sum_{k=m}^{\infty}\frac{(-1)^k\,b^k\,a^{k+1-m-\nu}}{k!\,(k+1-m-\nu)}. \tag{A.8}$$

为便于计算该极限，我们将级数求和表示为超几何函数,

$$\sum_{k=m}^{\infty}\frac{(-1)^k\,b^k\,a^{k+1-m-\nu}}{k!\,(k+1-m-\nu)} = \frac{(-1)^{m+1}\,a^{1-\nu}\,b^m}{m!\,(\nu-1)}\;{}_2F_2\left[\begin{matrix}1,1-\nu\\ m+1,2-\nu\end{matrix};-ab\right], \tag{A.9}$$

并利用其在大参数下、针对 [47], 中单极点情形的渐近展开

$$\begin{aligned}{}_2F_2\left[\begin{matrix}a_1,a_2\\ b_1,b_2\end{matrix};z\right] &= \frac{\Gamma(b_1)\,\Gamma(b_2)\,\Gamma(a_2-a_1)}{\Gamma(a_2)\,\Gamma(b_1-a_1)\,\Gamma(b_2-a_1)}\,(-z)^{-a_1}\,\left(1+\mathcal{O}\left(z^{-1}\right)\right)\\ &+\frac{\Gamma(b_1)\,\Gamma(b_2)\,\Gamma(a_1-a_2)}{\Gamma(a_1)\,\Gamma(b_1-a_2)\,\Gamma(b_2-a_2)}\,(-z)^{-a_2}\,\left(1+\mathcal{O}\left(z^{-1}\right)\right)\\ &+\frac{\Gamma(b_1)\,\Gamma(b_2)}{\Gamma(a_1)\,\Gamma(a_2)}\,e^z\,z^{a_1+a_2-b_1-b_2}\,\left(1+\mathcal{O}\left(z^{-1}\right)\right)\end{aligned} \tag{A.10}$$

观察可知，对于方程 (A.9) 中给定的参数，该展开的第二项比其余各项都占主导。因此，当 $a\to\infty$ 时,

$${}_2F_2\left[\begin{matrix}1,1-\nu\\ m+1,2-\nu\end{matrix};-ab\right] = \frac{\Gamma(m+1)\Gamma(2-\nu)\Gamma(\nu)}{\Gamma(m+\nu)\,(ab)^{1-\nu}} \tag{A.11}$$

由此得到有限部分积分 (A.8)

$$\int\!\!\!\!\!\!\diagup_0^\infty \frac{e^{-bx}}{x^{m+\nu}}\,\mathrm{d}x = \frac{(-1)^m\,b^{m+\nu-1}\,\pi}{\sin(\pi\,\nu)\,\Gamma(m+\nu)}, \qquad b>0, \tag{A.12}$$

$m=1,\ 2,$ .....和 $|\nu|<1$.

或者，更方便地，也可以从梅林变换 [48], 的解析延拓中提取有限部分 (A.12)

$$\begin{aligned}\mathcal{M}\left[e^{-bx};1-\lambda\right] &= \int_0^\infty x^{-\lambda}e^{-bx}\,\mathrm{d}x\\ &= b^{\lambda-1}\Gamma(1-\lambda),\ \ \mathrm{Re}\,\lambda<1.\end{aligned} \tag{A.13}$$

如 [28], 所述，发散积分 $\int_0^\infty x^{-\lambda}e^{-bx}\,\mathrm{d}x$ 的有限部分是方程 (A.13) 右端在 Re $\lambda\geq 1$处的解析延拓，前提是 λ 是解析延拓的正则点。利用恒等式，结果 (A.13) 可化简为 (A.12):

$$\Gamma(1-\lambda)=\frac{\pi}{\sin(\pi\lambda)\Gamma(\lambda)} \tag{A.14}$$

并令 $\lambda = m + \nu$。在这个特定情形下，后一种方法显然更便于计算有限部分积分 (A.12)。但是，对于梅林变换不存在的情形，规范形式 (A.6) 是一种方便的替代方法。

References

[1] Le Guillou, Jean-Claude, 和 Jean Zinn-Justin，编。《微扰理论的大阶行为》。爱思唯尔，2012年。[2] Olver, Frank。《渐近分析与特殊函数》。AK Peters/CRC Press，1997年。[3] ´Alvarez, Gabriel, 和 Harris J. Silverstone。《一种求和发散幂级数的新方法：有依据的匹配》。《物理学通讯》1.2（2017）：025005。[4] Costin, Ovidiu, 和 Gerald V. Dunne。《复苏外推：根据渐近数据重建函数。Painlev´e I》。《物理学杂志 A：数学与理论》52.44（2019）：445205。[5] Bender, Carl M., Steven Orszag, 和 Steven A. Orszag。《科学家与工程师的高级数学方法 I：渐近方法与微扰理论。第1卷》。施普林格科学与商业媒体公司，1999年。[6] Gilewicz, Jacek, 等。《连分数、两点 Pad´e 逼近及斯蒂尔切斯情形下的误差》。《计算与应用数学杂志》145.1（2002）：99-112。[7] Weniger, Ernst Joachim, 和 Ji˘ri C´ı˘zek。《第二类修正贝塞尔函数的有理逼近》。《计算机物理通讯》59.3（1990）：471-493。[8] Weniger, Ernst Joachim, Ji˘r´ı ˘C´ı˘zek, 和 Francine Vinette。《利用非线性序列变换，对四次、六次和八次非谐振子基态能量的普通微扰级数与重整化微扰级数求和》。《数学物理学杂志》34.2（1993）：571-609。[9] Mera, H´ector, Thomas G. Pedersen, 和 Branislav K. Nikoli´c。《利用 Meijer-G 逼近快速求和发散级数与复苏超越级数》。《物理评论 D》97.10（2018）：105027。[10] Kazakov, D. I., 和 V. S. Popov。《量子力学与场论中发散微扰级数的求和》。《实验与理论物理学杂志》95.4（2002）：581-600。[11] Baker, George A., 等。《帕德逼近：数学百科全书及其应用，第59卷。George A. Baker, Jr., Peter Graves-Morris。第59卷》。剑桥大学出版社，1996年。[12] Bender, Carl M., 和 Stefan Boettcher。《根据 $f(\infty)$ 关于 $x = 0$ 的渐近级数确定 $f(x)$》。《数学物理学杂志》35.4（1994）：1914-1921。[13] Suslov, I. M.《强耦合极限下发散微扰级数的求和。 ϕ^4 理论的 Gell-Mann-Low 函数》。《实验与理论物理学杂志》93（2001）：1-23。[14] Le Guillou, J. C., 和 J. Zinn-Justin。《强磁场中的氢原子：弱场级数展开的求和》。《当代物理学——资料与评论》第7卷。爱思唯尔，1990年。259-286。

[15] Avellaneda, Marco, 和 Andrew J. Majda。《层流与湍流中的被动平流有效扩散率的积分表示及其界》。《数学物理通讯》138.2（1991）：339-391。[16] Weniger, Ernst Joachim。《通过重整化强耦合展开构造四次、六次和八次非谐振子基态能量的强耦合展开》。《物理评论快报》77.14（1996）：2859。[17] Grecchi, Vincenzo, Marco Maioli, 和 Andr´e Martinez。《三次振子的 Pad´e 可求和性》。《物理学杂志 A：数学与理论》42.42（2009）：425208。[18] Bender, Carl M., 和 Ernst Joachim Weniger。《数值证据表明非厄米PT对称哈密顿量的微扰展开是斯蒂尔切斯级数》。《数学物理学杂志》42.5（2001）：2167-2183。[19] Dhatt, Sharmistha, 和 Kamal Bhattacharyya。《将标度关系嵌入 Pad´e 逼近：驯服发散微扰级数的迂回方法》。《国际量子化学杂志》113.7（2013）：916-924。[20] Bender, Carl M., Lawrence R. Mead, 和 N. Papanicolaou。《发散微扰级数的最大熵求和》。《数学物理学杂志》28.5（1987）：1016-1018。[21] Mead, Lawrence R., 和 Nikos Papanicolaou。《矩问题中的最大熵》。《数学物理学杂志》25.8（1984）：2404-2417。[22] Galapon, Eric A.《涉及发散积分的逐项积分中缺失项的问题》。《皇家学会会刊A辑：数学、物理与工程科学》473.2197（2017）：20160567。[23] Tica, Christian D., 和 Eric A. Galapon。《广义斯蒂尔切斯变换的有限部分积分及其参数取小值时的主导渐近行为。I. 整数阶》。《数学物理学杂志》59.2（2018）：023509。[24] Tica, Christian D., 和 Eric A. Galapon。《广义斯蒂尔切斯变换的有限部分积分及其参数取小值时的主导渐近行为。II. 非整数阶》。《数学物理学杂志》60.1（2019）：013502。[25] Monegato, G.《有限部分积分的定义、性质与应用》。《计算与应用数学杂志》229.2（2009）：425-439。[26] Galapon, Eric A.《柯西主值与阿达马有限部分积分作为绝对收敛积分的值》。《数学物理学杂志》57.3（2016）：033502。[27] Villanueva, Lloyd L., 和 Eric A. Galapon。《存在竞争奇点时的有限部分积分：有限部分积分所产生超几何函数的变换方程》。《数学物理学杂志》62.4（2021）：043505。[28] Galapon, Eric A.《正则化极限、解析延拓与有限部分积分》，DOI: 10.1142/S021953052350001X（2023）。arXiv 预印本 arXiv:2108.02013（2021）。[29] Strang, G.《线性代数导论》第5版。韦尔斯利。剑桥出版社174（2016）：345-350。[30] Demmel, James W.《应用数值线性代数》。工业与应用数学学会，1997年。

[31] Sch¨aling，Boris。“Boost C++库。”Boris Sch¨aling，2011年。[32] G. Guennebaud、B. Jacob 等，“Eigen v3”，http://eigen.tuxfamily.org，2010年。[33] MPFR扩展精度数据类型，
http://www.holoborodko.com/pavel/mpf
r/，
[访问日期：2022]年2月23日。[34] GNU GMP 库，https://gmplib.org/，[访问日期：2022]年2月23日。[35] GNU MPFR 库，https://mpfr.org/，[访问日期：2022]年2月23日。[36] Arfken, George B. 和 Hans J. Weber。《物理学数学方法》第6版。《物理学数学方法》第6版，作者为 George B. Arfken 和 Hans J. Weber。出版地：阿姆斯特丹；波士顿：爱思唯思（2005年）。[37] Simon, Barry。“加藤敏夫在非相对论量子力学方面的工作：简要报告。”IAMP 新闻公报（2018年）：6–25。[38] Simon, Barry。“非谐振子：奇异摄动理论。”卡尔热兹物理学讲座5（1971年）：383。[39] Loeffel, J. J. 和 A. Martin。“卡尔热兹物理学讲座（1970），第5卷。”Gordon and Breach 出版社，纽约（1972年）：415。[40] Grecchi, Vincenzo 和 Andr´e Martinez。“三次振子的谱。”《数学物理通讯》319.2（2013年）：479–500。[41] Bender, Carl M. 和 吴大峻。“微扰理论的大阶行为。”《物理评论快报》27.7（1971年）：461。[42] Simon, Barry 和 A. Dicke。“非谐振子的耦合常数解析性。”《物理学年鉴》58.1（1970年）：76–136。[43] Eichten, E. 等。“粲偶素：模型。”《物理评论 D》17.11（1978年）：3090。[44] Eletsky, V. L.、V. S. Popov 和 V. M. Weinberg。“屏蔽库仑势的对数摄动理论。”《物理快报A辑》84.5（1981年）：235–238。[45] Ganster, J. 和 B. Kohler。“基于谱生成代数的修正微扰理论。”《物理学杂志A辑：数学与一般》19.8（1986年）：1291。[46] Arteca, Gustavo A.、Fra ncisco M. Fern´andez 和 Eduardo A. Castro。“一种摄动级数求和方法。”《物理学A：统计力学及其应用》128.3（1984年）：589–610。[47]关于 ${}_2F_2$ 在单极点情形下的渐近展开，
http://functions.wolfram.com/HypergeometricFunctions/Hypergeometric2F2/06/02/02/0003/，[访问日期：2019]年2月23日。[48] Brychkov, Yu A.、Oleg Igorevich Marichev 和 Nikolay V. Savischenko。《梅林变换手册》。Chapman and Hall/CRC，2018年。

Theoretical Physics Group, National Institute of Physics, University of the Philippines, Diliman Quezon City, 1101 Philippines*Email address*: eagalapon@up.edu.ph