— 0 —

К эффективной процедуре построения вариационных принципов для уравнений математической физики.

Что здесь есть:

К эффективной процедуре построения вариационных принципов для уравнений математической физики.

1. Неформальная постановка задачи.

Как известно, многие задачи математической физики могут быть сформулированы как в виде уравнения относительно неизвестной функции u:

$$Fu = 0, \quad u \in \mathcal{Y}, \qquad (1)$$

так и в виде вариационного принципа:

$$\delta \Phi[u]_{\mathcal{Y}} = 0 \qquad (2)$$

$\mathcal{Y}$ обозначает область функционального пространства $\mathcal{U}$ (фиксирующую, например, краевыми условиями), в которой ищется решение. Индекс $\mathcal{Y}$ в уравнении (2) показывает, что варьирование происходит таким образом, что функция u не покидает $\mathcal{Y}$. Оператор F предполагается определённым по крайней мере на $\mathcal{Y}$: $F: \mathcal{Y} \to \mathcal{U}$, это же относится к функционалу Φ. Оператор F — вообще говоря нелинейный оператор произвольного вида. Предполагаем, что пространство $\mathcal{U}$ является гильбертовым, со скалярным произведением, определенным как $(u, v) = \int_\Omega u(\vec{x}) v(\vec{x})\, d\Omega$ или ещё каким-нибудь способом. Задачи (1) и (2) назовём эквивалентными, если каждое решение задачи (1) является решением задачи (2) и обратно. Отметим, что условие (2) не обязательно означает достижения экстремума функционалом Φ, но лишь достижение стационарной точки.

Может случиться, что уравнение (1) имеет много эквивалентных вариационных задач. Например, задачи вида

$\delta(Fu,Fu)=0$, $\delta(Fu,Fu)^2=0$ и т.д. могут оказаться эквивалентными для этого уравнения. Такие „вариационные принципы" выглядят несколько искусственно и нами рассматриваться не будут. Из множества всех вариационных принципов мы выделим класс в некотором смысле наиболее простых, которые будут предметом нашего анализа.

<u>Определение 1</u>. Вариационная задача (2) называется естественной вариационной задачей для уравнения (1) (ЕВЗ), если

1° задача (2) эквивалентна уравнению (1);

2° $\forall u \in \mathcal{Y}$ $\quad \delta\Phi[u]_{\mathcal{Y}} = (Fu, \delta u_{\mathcal{Y}})$

Пункт (2°) определения можно также записать в виде:

$$Fu = \left(\frac{\delta\Phi[u]}{\delta u}\right)_{\mathcal{Y}}.$$

<u>Замечание 1</u>. Перед $(Fu, \delta u_{\mathcal{Y}})$ может стоять ~~[illegible]~~ несущественный постоянный множитель, который мы будем либо опускать, либо выбирать тот, который удобнее.

<u>Замечание 2</u>. Если в пространстве $\mathcal{U}$ можно построить несколько разных скалярных произведений, то, в принципе, может оказаться, что уравнение (1) имеет несколько ЕВЗ для разных произведений, причём, может быть, с одним скалярным произведением ЕВЗ построить нельзя, а с другим - можно.

Естественным, с точки зрения нашего определения, является принцип наименьшего действия для уравнений движения, известный вариационный принцип для стационарного уравнения Шредингера и многие другие. Однако, не для любого уравнения математической физики существует ЕВЗ, примером является уравнение теплопроводности.

По разным причинам, на которых мы не будем останавливаться, хорошо было бы иметь эффективную процедуру, которая позволила бы

а) По виду уравнения (1) определить, существует ли для него ЕВЗ;

б) Если ЕВЗ существует, то в явном виде найти функционал $\Phi[u]$.

Мы покажем, как можно построить такую процедуру для довольно широкого класса уравнений.

2. Построение процедуры.

Будем считать, что $\mathcal{U}$ – вещественное пространство достаточно гладких функций n аргументов, определённых в некоторой области $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ с достаточно гладкой границей $\partial\Omega$. Элементы пространства $\mathcal{U}$ мы будем называть функциями, векторами или точками.

Определение 2. Пусть $\mathcal{K}$ - подпространство пространства $\mathcal{U}$, тогда множество ~~Y~~ $\mathcal{Y}$ вида $\mathcal{Y} = u_0 + \mathcal{K}$, где $u_0 \in \mathcal{U}$ – постоянный вектор, называется гиперплоскостью, полученной сдвигом пространства $\mathcal{K}$ на вектор u_0

Определение 3. Подпространство $\mathcal{K} \subseteq \mathcal{U}$ называется полным в $\mathcal{U}$, если из того, что $\forall v \in \mathcal{K}$ выполняется $(u, v) = 0$ следует, что $u = 0$. Гиперплоскость называется полной, если она получена сдвигом полного подпространства.

Иными словами: $\mathcal{K}$ - полное, если оно не имеет в пространстве $\mathcal{U}$ ортогонального дополнения.

Пример. Пространство $\mathcal{K}_0$ функций, непрерывных на Ω

и удовлетворяющих нулевым граничным условиям на $\partial\Omega$ является полным подпространством в пространстве всех непрерывных на Ω функций. Примером полной гиперплоскости является множество непрерывных функций, удовлетворяющих ненулевым граничным условиям. Она получается сдвигом пространства $\mathcal{K}_0$ на любой вектор u_0, удовлетворяющий этим граничным условиям.

В дальнейшем, если не оговорено противное, под $\mathcal{Y}$ мы понимаем некоторую полную в $\mathcal{U}$ гиперплоскость. Это не является сильным ограничением, так как в сферу нашего внимания попадают все начальные и граничные задачи для оператора F.

Дадим точные определения вариации и функциональной производной, необходимые для дальнейшего.

<u>Определение 4</u>. Пусть функционал $\Phi[u]$ определён на полной гиперплоскости $\mathcal{Y}$; $u_0 \in \mathcal{Y}$, $u_0 + \delta u_{\mathcal{Y}} \in \mathcal{Y}$. Тогда, если

$$\Phi[u_0 + \delta u_{\mathcal{Y}}] - \Phi[u_0] \equiv \Delta\Phi[u_0]_{\mathcal{Y}} = G[\delta u_{\mathcal{Y}}] + o(\|\delta u_{\mathcal{Y}}\|), \qquad (3)$$

где $G[\cdot]$ – линейный функционал, то $G[\delta u_{\mathcal{Y}}]$ называется вариацией $\Phi[u]$ в точке u_0 по множеству $\mathcal{Y}$ (или $\mathcal{Y}$-вариацией): $G[\delta u_{\mathcal{Y}}] \equiv \delta\Phi[u_0]_{\mathcal{Y}}$.

Если кроме того $G[\delta u_{\mathcal{Y}}] = (\Phi_0', \delta u_{\mathcal{Y}})$, где $\Phi_0' \in \mathcal{U}$, то Φ_0' называется производной от $\Phi[u]$ по $\mathcal{Y}$ ($\mathcal{Y}$-производной) в точке u_0:

$$\Phi_0' \equiv \left(\frac{\delta\Phi[u_0]}{\delta u}\right)_{\mathcal{Y}}$$

В дальнейшем варьирование и функциональное дифференцирование всегда проводится по некоторой полной гиперплоскости $\mathcal{Y}$, при этом индекс и эпитет $\mathcal{Y}$ мы для краткости записи будем опускать, если это не может привести к недоразумениям.

Предложение 1 Если функционал $\Phi[u]$ в точке $u_0 \in \mathcal{Y}$ имеет вариацию и производную, то они определены однозначно.

Доказательство.

а) Единственность вариации.

Надо доказать, что если $\Delta\Phi[u_0] = G_1[\delta u] + o(\|\delta u\|)$ и $\Delta\Phi[u_0] = G_2[\delta u] + o(\|\delta u\|)$, то $\forall\, \delta u \in \mathcal{K}$ $G_1[\delta u] = G_2[\delta u]$ $(\mathcal{Y} = u_0 + \mathcal{K})$.

Положим $\tilde{G}[\delta u] = G_1[\delta u] - G_2[\delta u]$, докажем: $\forall \delta u \in \mathcal{K}$ $\tilde{G}[\delta u] = 0$. Предположим противное: $\exists\, \delta u^0 \in \mathcal{K}$ такое, что $\tilde{G}[\delta u^0] = g_0 \neq 0$.

Так как $G_1[\delta u] + o(\|\delta u\|) = G_2[\delta u] + o(\|\delta u\|)$, то $\tilde{G}[\delta u] = o(\|\delta u\|)$ и $\lim\limits_{\delta u \to 0} \dfrac{\tilde{G}[\delta u]}{\|\delta u\|} = 0$. δu^0 и 0 можно

следовательно

соединить отрезком прямой, $v(\xi) = \xi\, \delta u^0$, $\xi \in [0,1]$, причём весь он содержится в $\mathcal{K}$. Можно устремить δu к нулю по этой прямой:

$$0 = \lim_{\delta u \to 0} \frac{\tilde{G}[\delta u]}{\|\delta u\|} = \lim_{\xi \to 0} \frac{\tilde{G}[\xi\, \delta u^0]}{\|\xi\, \delta u^0\|} = \lim_{\xi \to 0} \frac{\xi\, g_0}{\xi \|\delta u^0\|} = \frac{g_0}{\|\delta u^0\|},$$

откуда $g_0 = 0$, что приводит к противоречию с предположением, следовательно функционал $G[\delta u]$ определён единственным образом и вариация единственна.

б) Единственность производной.

Пусть $G[\delta u] = (\Phi_1', \delta u) = (\Phi_2', \delta u)$. Тогда $(\Phi_1' - \Phi_2', \delta u) = 0$, и учитывая, что δu пробегает всё полное пространство $\mathcal{K}$, из определения полного пространства получим: $\Phi_1' - \Phi_2' = 0$, следовательно производная единственна.

Замечание. На множествах, отличных от полной линейплоскости, и вариация и производная, определены, вообще говоря, неоднозначно.

Лемма 1 Если $\mathcal{Y}$ – полная гиперплоскость и $\forall u \in \mathcal{Y}$ $\delta\Phi[u] = (Fu, \delta u)$, то задача (2) эквивалентна задаче (1)

Доказательство.

Если $Fu^* = 0$, то очевидно $\delta\Phi[u^*] = 0$

Если $\delta\Phi[u^*] = 0$, то $(Fu^*, \delta u) = 0$ для любого $\delta u \in \mathcal{H}$, следовательно $Fu^* = 0$. Лемма доказана.

Как известно, векторное поле $\vec{f}(\vec{r})$, $\vec{r} \in R^n$ является потенциальным, если $\exists\, \varphi(\vec{r})$ такая, что $\forall \vec{r}$ $\vec{f}(\vec{r}) = \frac{d\varphi}{d\vec{r}}$, или, что эквивалентно, $d\varphi = (\vec{f}(\vec{r}) \cdot d\vec{r})$. Дадим по аналогии определение:

Определение 5. Оператор Fu называется потенциальным на $\mathcal{Y}$, если существует функционал $\Phi[u]$ такой, что в каждой точке $\mathcal{Y}$ выполняются соотношения:

$$\delta\Phi[u]_{\mathcal{Y}} = (Fu, \delta u_{\mathcal{Y}}) \text{ или } Fu = \left(\frac{\delta\Phi[u]}{\delta u}\right)_{\mathcal{Y}},$$ тогда

функционал $\Phi[u]$ называется $\mathcal{Y}$-потенциалом оператора Fu.

Из определений 1, 5 и леммы 1 следует

Предложение 2. Уравнение (1) имеет ЕВЗ тогда и только тогда, когда оператор F $\mathcal{Y}$-потенциален, причём вариационная задача (2) для его $\mathcal{Y}$-потенциала Φ является ЕВЗ для уравнения (1)

Для решения сформулированной нами задачи достаточно научиться определять, является ли оператор F $\mathcal{Y}$-потенциальным, а если является, то вычислять его $\mathcal{Y}$-потенциал.

Обратимся снова к аналогии. Если поле $\vec{f}(\vec{r})$

потенциально, то его потенциал можно вычислить как криволинейный интеграл:

$$\varphi(\vec{r}) = \int_{\mathcal{L}_{\vec{r}_0}^{\vec{r}}} (\vec{f}(\vec{r}) \cdot d\vec{r}),$$

причём $\varphi(\vec{r})$ не зависит от конкретной кривой $\mathcal{L}_{\vec{r}_0}^{\vec{r}}$, соединяющей фиксированную точку $\vec{r}_0$ и переменную точку $\vec{r}$.

Покажем, что $\mathcal{Y}$-потенциал $\mathcal{Y}$-потенциального оператора F может быть определён аналогичным образом. Сначала дадим определение кривой и криволинейного интеграла в функциональном пространстве.

<u>Определение 6</u>. Кривой $\mathcal{L}_{u_0}^{u}$ с началом в точке u_0 и концом в точке u называется непрерывное взаимно однозначное отображение отрезка $[0,1]$ в пространство $\mathcal{U}$: $v(\xi): [0,1] \rightarrow \mathcal{U}$, $v(0)=u_0, v(1)=u$, такое, что всюду на $[0,1]$, кроме, быть может, конечного числа точек, существует производная $\frac{\partial v(\xi)}{\partial \xi} \in \mathcal{U}$, причём $\frac{\partial v(\xi)}{\partial \xi} \neq 0$, $\frac{\partial v(\xi)}{\partial \xi}$ – ограничена.

Длиной кривой называется интеграл: $l = \int_0^1 \left\| \frac{\partial v}{\partial \xi} \right\| d\xi$;

Разбиением кривой называется выбор точек $u_0 = v_0, v_1, \dots, v_N = u$; $v_i = v(\xi_i)$ такой, что если $i > j$ то $\xi_i > \xi_j$; для данного разбиения по определению $\Delta = \max_i \|\delta v_i\|$, где $\delta v_i = v_{i+1} - v_i$

Введённая нами длина кривой обладает всеми необходимыми свойствами, в частности

<u>Предложение 3</u>. Длина кривой не меньше длины любой ломаной, построенной на ней.

<u>Доказательство</u>. Докажем утверждение для самого простого случая: ломаная есть отрезок прямой, соединяющей начало и конец кривой, причём $u_0 = 0$.

Найдём длину отрезка прямой:

$$l_{прям} = \int_0^1 \left\| \frac{\partial \xi u}{\partial \xi} \right\| d\xi = \|u\|$$

Далее

$$\left\| \frac{\partial v}{\partial \xi} \right\| = \left\| \lim_{\Delta\xi \to 0} \frac{v(\xi+\Delta\xi) - v(\xi)}{\Delta \xi} \right\| = \lim_{\Delta\xi \to 0} \frac{1}{|\Delta\xi|} \| v(\xi+\Delta\xi) - v(\xi) \| \geqslant$$

$$\geqslant \lim_{\Delta\xi \to 0} \frac{1}{|\Delta\xi|} \left(\big| \| v(\xi+\Delta\xi) \| - \| v(\xi) \| \big| \right) = \left| \frac{\partial \|v\|}{\partial \xi} \right|, \text{ следовательно}$$

$$l_{\text{крив}} = \int_0^1 \left\| \frac{\partial v}{\partial \xi} \right\| d\xi \geqslant \int_0^1 \left| \frac{\partial \|v\|}{\partial \xi} \right| d\xi \geqslant \left| \int_0^1 \frac{\partial \|v\|}{\partial \xi} d\xi \right| = \big| \|v(1)\| - \|v(0)\| \big| =$$

$$= \|u\| = l_{\text{прям}}; \quad l_{\text{крив}} \geqslant l_{\text{прям}}, \text{ что и требуется.}$$

Обобщение на случай произвольной кривой и произвольной ломаной не представляет труда.

Дадим определение криволинейного интеграла.

<u>Определение 7</u> Пусть $\mathcal{L}_{u_0}^{u}$ — спрямляемая кривая, $R[v,\delta v]$ — функционал двух переменных $v, \delta v \in \mathcal{U}$, определённый $\forall v \in \mathcal{L}_{u_0}^{u}$, а при фиксированном v — для любого $\delta v_{\mathcal{L}}$ такого, что $v + \delta v_{\mathcal{L}} \in \mathcal{L}_{u_0}^{u}$; кроме того $\forall v \in \mathcal{L}$ $\lim\limits_{\delta v_{\mathcal{L}} \to 0} R[v, \delta v_{\mathcal{L}}] = 0$. Тогда криволинейным интегралом от $R[v,\delta v]$ по кривой $\mathcal{L}_{u_0}^{u}$ называется предел

$$\int\limits_{\mathcal{L}_{u_0}^{u}} R[v,\delta v] \equiv \lim_{\Delta \to 0} \sum_i R[v_i, \delta v_{i\mathcal{L}}], \qquad (4)$$

где суммирование проводится по некоторому разбиению $v(\xi_i)$, $\delta v_{i\mathcal{L}} = v_{i+1} - v_i$.

<u>Лемма 2</u> Пусть функционал $\Phi[u]$ определён ~~всюду~~ вместе со своей вариацией в каждой точке полной гиперплоскости $\mathcal{Y}$, причём $\Delta\Phi[u] = \delta\Phi[u] + \varepsilon(u, \|\delta u\|)\|\delta u\|$, где $\varepsilon(u,\|\delta u\|) \to 0$ при $\|\delta u\| \to 0$ равномерно относительно u по $\mathcal{Y}$. Тогда, если $\mathcal{L}_{u_0}^{u}$ — спрямляемая кривая, лежащая в $\mathcal{Y}$, то

$$\int\limits_{\mathcal{L}_{u_0}^{u} \subset \mathcal{Y}} \delta\Phi[v] = \Phi[u] - \Phi[u_0]$$

Доказательство. Если $\sigma_i = \sigma(\xi_i)$ - разбиение кривой $\mathcal{L}^u_{u_0}$, то очевидно $\sum_i \Delta\Phi[\sigma_i] = \Phi[u] - \Phi[u_0]$. С другой стороны:

$$\left| \sum_i \Delta\Phi[\sigma_i] - \sum_i \delta\Phi[\sigma_i] \right| = \left| \sum_i \varepsilon[\sigma_i, \|\delta\sigma_i\|] \|\delta\sigma_i\| \right| \leq$$

$$\leq \sum_i |\varepsilon[\sigma_i, \Delta] \cdot \|\delta\sigma_i\||.$$

Так как $\varepsilon[\sigma, \|\delta\sigma\|]$ равномерно по σ стремится к нулю, то существует бесконечно малая функция $\tilde{\varepsilon}[\Delta]$ такая, что для достаточно малых Δ $|\tilde{\varepsilon}[\Delta]| \geqslant |\varepsilon[\sigma, \Delta]|$ при любом $\sigma \in \mathcal{Y}$. Поэтому

$$\sum_i |\varepsilon[\sigma_i, \Delta]| \, \|\delta\sigma_i\| \leq |\tilde{\varepsilon}(\Delta)| \sum_i \|\delta\sigma_i\| \leq \tilde{\varepsilon}(\Delta) \cdot l,$$

где l - длина $\mathcal{L}^u_{u_0}$. (Последнее - в силу предложения 3). Тогда

$|\Phi(u) - \Phi(u_0) - \sum_i \delta\Phi[\sigma_i]| \leq \tilde{\varepsilon}(\Delta) \cdot l$, следовательно

$\lim\limits_{\Delta\to 0} \sum_i \delta\Phi[\sigma_i] = \Phi[u] - \Phi[u_0]$, значит интеграл

$\int\limits_{\mathcal{L}^u_{u_0} \subset \mathcal{Y}} \delta\Phi[\sigma]$ существует, равен $\Phi[u] - \Phi[u_0]$ и, следовательно, не зависит от пути интегрирования $\mathcal{L}$.

<u>Следствие</u>: Если Fu — $\mathcal{Y}$-потенциальный оператор и $\mathcal{L}^u_{u_0}$ - спрямляемая кривая лежащая в $\mathcal{Y}$, то интеграл от $(Fu, \delta u)$ по кривой $\mathcal{L}^u_{u_0}$ существует, не зависит от траектории и равен $\Phi[u] - \Phi[u_0]$, где $\Phi[u]$ - $\mathcal{Y}$-потенциал оператора Fu.

<u>Доказательство</u>: непосредственно следует из того, что $\forall\, u \in \mathcal{Y}$ $(Fu, \delta u) = \delta\Phi[u]$.

Сформулируем теперь метод эффективного вычисления криволинейных интегралов.

<u>Лемма 3</u>. Пусть $\mathcal{L}^u_{u_0}$ - спрямляемая кривая, $\sigma(\xi)$ - её параметризация. Если $\sigma(\xi)$ обладает ограниченной второй производной на $[0,1]$; оператор $F\sigma$ ограничен (по норме) на

кривой $\mathcal{L}^u_{uo}$, то $\int\limits_{\mathcal{L}^u_{uo}} (F\sigma, \delta\sigma)$ существует тогда и только тогда, когда существует интеграл $\int_0^1 \left(F\sigma(\xi), \frac{\partial \sigma(\xi)}{\partial \xi} \right) d\xi$, и если они существуют, то равны друг другу:

$$\int\limits_{\mathcal{L}^u_{uo}} (F\sigma, \delta\sigma) = \int_0^1 \left(F\sigma(\xi), \frac{\partial \sigma(\xi)}{\partial \xi} \right) d\xi \qquad (6)$$

<u>Доказательство.</u> Пусть $\sigma_i = \sigma(\xi_i)$ - разбиение $\mathcal{L}^u_{uo}$. Тогда

$$\sum_i (F\sigma_i, \delta\sigma_i) = \sum_i (F\sigma_i, \sigma(\xi_i + \Delta\xi_i) - \sigma(\xi_i)) =$$

$$= \sum_i \left(F\sigma_i, \frac{\partial \sigma(\xi_i)}{\partial \xi} \Delta\xi_i + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \sigma(\xi_i)}{\partial \xi^2} \Delta\xi_i^2 + \varepsilon(\xi_i, \Delta\xi_i)\Delta\xi_i^2\right) =$$

$$= \sum_i \left(F\sigma(\xi_i), \frac{\partial \sigma(\xi_i)}{\partial \xi} \right) \Delta\xi_i + \sum_i \left(\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \sigma(\xi_i)}{\partial \xi^2} + \varepsilon(\xi_i, \Delta\xi_i) \right) \Delta\xi_i^2$$

Обозначим $\Delta_\xi = \max\limits_i \Delta\xi_i$, тогда $\lim\limits_{\Delta \to 0} \Delta_\xi = 0$, так как, по определению кривой, $\partial\sigma/\partial\xi \neq 0$.

Учитывая ограниченность II производной $\sigma(\xi)$ и то, что $\lim\limits_{\Delta\xi \to 0} \varepsilon(\xi_i, \Delta\xi) = 0$, получим:

$$\left| \sum_i \left(\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \sigma(\xi_i)}{\partial \xi^2} + \varepsilon(\xi_i, \Delta\xi_i) \right) \Delta\xi_i^2 \right| \leqslant \Delta_\xi \tilde{C} \sum_i \Delta\xi_i = \Delta_\xi \tilde{C},$$

где $\tilde{C}$ - некоторая положительная константа. Тогда

$$\lim_{\Delta \to 0} \left| \sum_i (F\sigma_i, \delta\sigma_i) - \sum_i \left(F\sigma(\xi_i), \frac{\partial \sigma(\xi_i)}{\partial \xi} \right) \Delta\xi_i \right| =$$

$$= \left| \lim_{\Delta \to 0} \sum_i (F\sigma_i, \delta\sigma_i) - \lim_{\Delta_\xi \to 0} \sum_i \left(F\sigma(\xi_i), \frac{\partial \sigma(\xi_i)}{\partial \xi} \right) \Delta\xi_i \right| =$$

$$= \lim_{\Delta_\xi \to 0} \left| \sum_i \left(\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \sigma(\xi_i)}{\partial \xi^2} + \varepsilon(\xi_i, \Delta\xi_i) \right) \Delta \xi_i^2 \right| \leq$$

$$\leq \lim_{\Delta_\xi \to 0} \Delta_\xi \tilde{C} = 0.$$

Отсюда следует, что предел $\lim\limits_{\Delta \to 0} \sum_i (F\sigma_i, \delta\sigma_i)$ существует тогда, и только тогда, когда существует предел $\lim\limits_{\Delta_\xi \to 0} \sum_i \left(F\sigma(\xi_i), \frac{\partial \sigma(\xi_i)}{\partial \xi}\right) \Delta\xi_i$ и если они существуют, то равны друг другу, что и доказывает лемму.

Если кривая $\mathcal{L}_{u_0}^{u}$ есть отрезок прямой, соединяющей точки u_0 и u: $\sigma(\xi) = u_0 + \xi(u - u_0)$, то

$$\int_{\mathcal{L}_{u_0}^{u}} (Fu, \delta u) = \int_0^1 \left(F(u_0 + \xi(u - u_0)), u - u_0 \right) d\xi, \qquad (7)$$

если при этом $u_0 = 0$, то формула упрощается:

$$\int_{\mathcal{L}_{u_0}^{u}} (Fu, \delta u) = \int_0^1 \left(F(\xi u), u \right) d\xi \qquad (8)$$

Теперь мы можем решить задачу поиска $\mathcal{Y}$-потенциала для $\mathcal{Y}$-потенциального оператора Fu. Зафиксировав точку $u_0 \in \mathcal{Y}$ найдём функционал $\tilde{\Phi}[u]$:

$$\tilde{\Phi}[u] = \int_{\mathcal{L}_{u_0}^{u} \subset \mathcal{Y}} (F\sigma, \delta\sigma). \qquad (9)$$

Этот интеграл может быть эффективно вычислен по формулам (6), (7) или (8) (если $u_0 = 0$, т.е. $0 \in \mathcal{Y}$). Согласно следствию из леммы 2 конкретный выбор кривой не играет роли. По этому же следствию $\tilde{\Phi}[u] = \Phi[u] - \Phi[u_0]$, где $\Phi[u]$ — некоторый другой $\mathcal{Y}$-потенциал оператора Fu. Так как $\Phi[u_0]$ — константа, то $\tilde{\Phi}[u]$ — тоже $\mathcal{Y}$-потенциал

Покажем теперь, как можно эффективно определить, является оператор Fu $\mathcal{Y}$-потенциальным, или нет.

а) Предположим Fu — $\mathcal{Y}$ потенциален. Тогда, согласно сказанному выше, его $\mathcal{Y}$-потенциал можно вычислить по формуле (9), используя некоторое семейство кривых, соединяющих фиксированную точку u_0 с переменной точкой u. (Проще всего взять семейство прямолинейных отрезков и воспользоваться формулой (7)). Так мы получим некоторый функционал $\tilde{\Phi}[u]$.

б). Так как, по предположению, Fu — $\mathcal{Y}$-потенциальный, то найденный функционал $\tilde{\Phi}[u]$ — его $\mathcal{Y}$-потенциал, следовательно должно быть: $\delta\tilde{\Phi}[u] = (Fu, \delta u)$. Варьируя $\tilde{\Phi}[u]$ проверим это равенство. Если это так, то Fu — $\mathcal{Y}$-потенциальный и $\tilde{\Phi}[u]$ — его $\mathcal{Y}$-потенциал, если ~~это~~ равенство не выполняется (везде в $\mathcal{Y}$, или хотябы в некоторых точках), то мы пришли к противоречию с предположением пункта а), следовательно F не является $\mathcal{Y}$-потенциальным.

Учитывая предложение 2 можно наши выводы зафиксировать в виде теоремы о существовании естественной вариационной задачи:

<u>Теорема 1</u> Уравнение (1) на полной гиперплоскости $\mathcal{Y}$ имеет ЕВЗ тогда, и только тогда, когда:

1° Для некоторого фиксированного $u_0 \in \mathcal{Y}$ и некоторого семейства спрямляемых кривых $\mathcal{L}^{u}_{u_0}$ и лежащих в $\mathcal{Y}$ существуют интегралы

$$\Phi[u] = \int\limits_{\mathcal{L}^{u}_{u_0} \subset \mathcal{Y}} (Fv, \delta v)$$

2° Полученный функционал $\Phi[u]$ имеет вариацию в каждой точке $\mathcal{Y}$ и $\delta\Phi[u] = (F_u, \delta u)$.

В этом случае вариационная задача $\delta\Phi[u]_{\mathcal{Y}} = 0$ является ЕВЗ для уравнения (1)

Таким образом построена эффективная процедура решения задачи, сформулированной в конце первого раздела.

3. Некоторые применения

3.1. Линейные уравнения.

В этом пункте мы рассмотрим уравнение вида

$$Lu - f = 0 \quad , u \in \mathcal{Y} \qquad (10)$$

где L – линейный оператор, $\mathcal{Y} = u_0 + \mathcal{K}$ – полная гиперплоскость. Следующие две теоремы раскрывают особую роль самосопряжённых операторов в вариационном исчислении.

<u>Теорема 2</u>. Если для уравнения (10) существует ЕВЗ, то оператор L – самосопряжённый на $\mathcal{K}$, т.е. при любых $u, v \in \mathcal{K}$ $\quad (Lu, v) = (u, Lv)$

<u>Доказательство</u>. Так как уравнение (10) имеет ЕВЗ, то оператор $\tilde{L}u = Lu - f$ — $\mathcal{Y}$-потенциальный. Так как оператор $L_f u = f = \mathrm{const}$ – всегда $\mathcal{Y}$ потенциальный ($\Phi_f[u] = (u, f)$ – его $\mathcal{Y}$-потенциал), то оператор Lu – тоже $\mathcal{Y}$-потенциальный. Найдём его $\mathcal{Y}$-потенциал:

$$\Phi[u] = \int_0^1 (L[(\cancel{\xi - 1})^{1-\xi} u_0 + \xi u, u - u_0)\, d\xi =$$

$$= \frac{1}{2}(Lu_0, u - u_0) + \frac{1}{2}(Lu, u - u_0) =$$

$$= \frac{1}{2}(L(u + u_0), u - u_0), \text{ где } u_0 \in \mathcal{Y}.$$

Найдём вариацию:

$$\delta\Phi[u] = \frac{1}{2}(L\delta u, u-u_0) + \frac{1}{2}(L(u+u_0), \delta u) = \tag{11}$$

$$= \frac{1}{2}(L\delta u, u) - \frac{1}{2}(L\delta u, u_0) + \frac{1}{2}(Lu_0, \delta u) + \frac{1}{2}(Lu, \delta u).$$

Так как $\Phi[u]$ – Y-потенциал Lu, то должно быть

$\delta\Phi[u] = (Lu, \delta u)$, (12)

откуда, приравнивая (11) и (12) получим:

$$(L\delta u, u-u_0) = (\delta u, L(u-u_0)).$$

Но δu и $u-u_0$ – произвольные вектора из $\mathcal{K}$, поэтому последнее равенство означает, что оператор L – самосопряжённый на $\mathcal{K}$.

<u>Замечание</u>: обратное вообще говоря неверно.

<u>Теорема 3</u> Уравнение $Lu - f$, $u \in \mathcal{K}$, (13) где $\mathcal{K}$ – полное в $\mathcal{U}$ подпространство, имеет ЕВЗ тогда и только тогда, когда L – самосопряжён на $\mathcal{K}$, причём $\Phi[u] = (u, Lu-2f)$.

<u>Доказательство</u>. Достаточно доказать, что если L – самосопряженный, то ЕВЗ существует, обратное утверждение следует из Теоремы 2.

Предположим, что ЕВЗ существует и найдём потенциал оператора $\tilde{L}u = Lu - f$:

$$\Phi[u] = \int_0^1 (L\xi u - f, u)\, d\xi = \frac{1}{2}(Lu, u) - (f, u) =$$
$$= \frac{1}{2}(u, Lu - 2f)$$

Проверим, что $\Phi[u]$ – действительно потенциал:

$$\delta\Phi[u] = \frac{1}{2}\left[(\delta u, Lu) + (u, L\delta u) - 2(f, \delta u)\right] =$$
$$= \frac{1}{2}\left[2(Lu, \delta u) - 2(f, \delta u)\right] = (Lu - f, \delta u),$$ что и требуется. Мы воспользовались самосопряжённостью L. Для ЕВЗ $\Phi[u]$ можно выбрать в виде: $\Phi[u] = (u, Lu - 2f)$.

~~2. То, что из существования ЕВЗ вытекает $L = L'$ является следствием теоремы 2.~~

~~Теорема 3 полностью доказана.~~

Применим теорему 2 для исследования линейного уравнения теплопроводности. Рассмотрим для простоты задачу Коши с источником на бесконечной прямой:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} + \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} = f(x,t) \\ u(\cancel{t},x,0) = u_0(x) \end{cases} \qquad (12)$$

Предполагаем, что $u_0(x)$ и $f(x,t)$ — финитные функции. Ясно, что решение ищется на полуплоскости, полученной сдвигом пространства K_0 функций $u(t,x)$, удовлетворяющих нулевым граничным условиям на прямой $t=0$ и на бесконечности, на вектор $\tilde{u}(x,t)$ такой, что $\tilde{u}(x,0)=u_0(x)$, $\tilde{u}(\infty,t)=\tilde{u}(x,\infty)=0$. Легко проверить, что оператор $\dfrac{\partial}{\partial t}$ на K_0 — антисамосопряжённый, а $\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}$ — самосопряжённый, следовательно весь оператор $\dfrac{\partial}{\partial t}+\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}$ не является самосопряжённым, поэтому ЕВЗ для уравнения (12) не существует.

Напротив, можно проверить, что оператор $\Lambda u = \mathrm{div}\,(k(\vec{r})\,\mathrm{grad}\,u(\vec{r}))$ является самосопряжённым на пространстве функций, определённых в области Ω и удовлетворяющих на $\partial\Omega$ однородным граничным условиям, поэтому уравнение

$$\begin{cases} \mathrm{div}\,(k(\vec{r})\,\mathrm{grad}\,u) = f \\ u\big|_{\partial\Omega} = 0 \end{cases} \qquad (13)$$

имеет ЕВЗ, причём $\Phi[u] = \int_\Omega u[\mathrm{div}(k\,\mathrm{grad}\,u) - 2f]\,d\Omega$, или, после простых преобразований

$$\Phi[u] = \int_\Omega k(\vec{r})(\mathrm{grad}\,u)^2 d\Omega + 2\int f u\, d\Omega \qquad (14)$$

В силу некоторых дополнительных свойств оператора grad вариационный принцип (2) с функционалом (14) оказывается справедливым для уравнения (13) и в том случае, когда граничные условия неоднородны. В этом можно убедиться проварьировав функционал (14).

3.2 Нелинейные уравнения

3.2.1. Получение принципа наименьшего действия из уравнений Ньютона.

Рассмотрим механическую систему, описываемую обобщёнными координатами $q_1, q_2, \ldots, q_n$. Система уравнений Ньютона (уравнения движения) имеет вид:

$$m_i \frac{d^2 q_i}{dt^2} = X_i = -\frac{\partial U}{\partial q_i}, \qquad (15)$$

где X_i - обобщённые силы, которые мы считаем потенциальными, m_i - обобщённые массы. Перепишем систему (15) в векторном виде:

$$Fq = \hat{m}\frac{d^2 q}{dt^2} + \frac{dU}{dq} = 0, \qquad (16)$$

где $q(t) = (q_1(t), \ldots, q_n(t))$; $\frac{dU}{dq} = \left(\frac{\partial U}{\partial q_1}, \ldots, \frac{\partial U}{\partial q_n}\right)$;

$\hat{m} = \begin{pmatrix} m_1 & & & 0 \\ & m_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & m_n \end{pmatrix}$. На пространстве векторно-значных функций $q(t)$ введём скалярное произведение:

$$(q^1, q^2) = \int_{t_1}^{t_2} \left(q^1(t) \cdot q^2(t)\right) dt,$$ где $[t_1, t_2]$ - промежуток времени, на котором рассматривается движение, а

$(q^1 \cdot q^2)$ – обычное скалярное произведение,

$(q^1 \cdot q^2) = \sum\limits_{i=1}^{n} q^1_i q^2_i$.

Мы рассматриваем задачу: в момент t_1 система занимала положении q^1, в момент t_2 – положение q^2, как она двигалась в промежутке? Постановка задачи фиксирует гиперплоскость $\mathcal{Y}$, на которой ищется решение, она получается сдвигом пространства $\mathcal{K}_0$ функций, удовлетворяющих нулевым граничным условиям, на вектор $q^0(t)$, удовлетворяющий условиям $q^0(t_1)=q^1, q^0(t_2)=q^2$.

Предположим, что оператор F потенциален, и найдём его $\mathcal{Y}$-потенциал:

$$\tilde{S}[q] = \int\limits_{\mathcal{L}^{q}_{q^0} \subset \mathcal{Y}} (Fq, \delta q) = \int_0^1 d\xi \, (F[(1-\xi)q_0 + \xi q], q - q^0) =$$

$$= \int_0^1 d\xi \int_{t_1}^{t_2} \left(\hat{m}\left[\ddot{q}^0(1-\xi) + \xi \ddot{q}\right] \cdot (q - q^0)\right) dt +$$

$$+ \int_{t_1}^{t_2} dt \int_0^1 \left(\left.\frac{dU}{dq}\right|_{q_0 + \xi(q - q_0)} \cdot (q - q^0)\right) d\xi = I_1 + I_2$$

$$I_1 = \int_{t_1}^{t_2} dt \int_0^1 d\xi \left[\left(\hat{m}\, \ddot{q}_0 (1-\xi) \cdot (q - q_0)\right) + \xi \left(\hat{m} \ddot{q} \cdot (q - q_0)\right)\right] =$$

$$= \frac{1}{2} \int_{t_1}^{t_2} dt \left[\left(\hat{m} \ddot{q}_0 \cdot (q - q_0)\right) + \left(\hat{m} \ddot{q} \cdot (q - q_0)\right)\right] =$$

$$= - \cancel{\int_{t_1}^{t_2} \frac{1}{2} (\hat{m} \dot{q}^0, \dot{q})} + \int_{t_1}^{t_2} \frac{1}{2} (\hat{m} \dot{q}_0 \cdot \dot{q}_0) +$$

$$+ \cancel{\int_{t_1}^{t_2} \frac{1}{2} (\hat{m} \dot{q}, \dot{q}^0)} - \int_{t_1}^{t_2} \frac{1}{2} (\hat{m} \dot{q} \cdot \dot{q}) =$$

$$= - \int_{t_1}^{t_2} \frac{1}{2} (\hat{m} \dot{q} \cdot \dot{q}) + \int_{t_1}^{t_2} \frac{1}{2} (\hat{m} \dot{q}_0 \cdot \dot{q}_0).$$

Здесь мы применили интегрирование по частям и учли что $(q-q^0)\Big|_{t_1}^{t_2} = 0$. Рассмотрим интеграл:

$$\int_0^1 \left(\frac{du}{dq}\Big|_{q_0+\xi(q-q_0)} \cdot (q-q^0) \right) d\xi .$$

Легко видеть, что это просто криволинейный интеграл II рода взятый по прямой, соединяющей q^0 и q, поэтому для интеграла I_2 получаем:

$$I_2 = \int_{t_1}^{t_2} U[q(t)]\,dt - \int_{t_1}^{t_2} U[q_0(t)]\,dt,$$

окончательно:

$$\tilde{S}[q] = -\int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{1}{2}(\hat{m}\dot{q}\cdot\dot{q}) - U(q)\right] dt + \int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{1}{2}(\hat{m}\dot{q}_0\cdot\dot{q}_0) - U(q_0)\right] dt$$

Но последний интеграл есть константа, поэтому его можно отбросить; далее заменив $S[q] = -\tilde{S}[q]$ получим известное выражение для действия:

$$S[q] = \int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{1}{2}(\hat{m}\dot{q}\cdot\dot{q}) - U(q)\right] dt = \int_{t_1}^{t_2} \left[\sum_i m_i \frac{\dot{q}_i^2}{2} - U(q) \right] dt.$$

Обратное варьирование $S[q]$ производить не будем, так как результат хорошо известен. Таким образом, принцип наименьшего действия получается с помощью чисто формальной процедуры.

3.2.2. Задача для нелинейного оператора Лапласа.

Для простоты рассмотрим одномерную задачу:

$$\begin{cases} Fu = \dfrac{d}{dx}\left(k(u)\dfrac{du}{dx}\right) - f(x) = 0, & x \in [0, l] \\ u(0) = 0 & \\ u(l) = 0, & k(u) \neq \mathrm{Const} \end{cases} \qquad (17)$$

Предположим, что уравнение (17) имеет ЕВЗ и найдём функционал $\Phi[u]$:

$$\Phi[u] = \int_0^1 (F(\xi u), u)\, d\xi = \int_0^1 d\xi \int_0^l \left\{ \frac{d}{dx}\left[k(\xi u) \frac{d\xi u}{dx} \right] - f(x) \right\} u(x)\, dx =$$

$$= \int_0^1 d\xi \left\{ u\, k(\xi u) \frac{du}{dx} \Big|_0^l - \int_0^l k(\xi u) \left(\frac{du}{dx}\right)^2 dx - \int_0^l f(x) u(x)\, dx \right\} =$$

$$= - \int_0^l \left[\frac{\tilde{k}(u)}{u^2} \left(\frac{du}{dx}\right)^2 + f(x) u(x) \right] dx ,$$

где $\tilde{k}(u) = \int_0^u v\, k(v)\, dv$. Найдём вариацию $\delta \Phi[u]$:

$$\delta \Phi[u] = \int_0^l \left[\frac{u^2 k(u) - 2\tilde{k}(u)}{u^3} \left(\frac{du}{dx}\right)^2 - 2 \frac{d}{dx}\left(\frac{\tilde{k}(u)}{u^2} \frac{du}{dx} \right) - f \right] \delta u\, dx$$

Это выражение сводится к тому, что должно быть:

$$\delta \Phi[u] = (Fu, \delta u) = \int_0^l \left(\frac{d}{dx}\left(k(u) \frac{du}{dx} \right) - f \right) \delta u\, dx$$

только в случае $k(u) = k_0 = Const$, следовательно для задачи (17) ЕВЗ не существует.

3.3. Вариационные принципы для некоторых уравнений квантовой механики.

3.3.1. Общие положения.

Рассмотрим комплексное функциональное пространство $\mathfrak{U}^c$ со скалярным произведением, являющимся эрмитовой формой: $(u, v) = (v, u)^*$, $(u, \lambda v) = \lambda (u, v)$. Сохраним определение полного в $\mathfrak{U}^c$ подпространства и полной гиперплоскости. Справедливо следующее утверждение:

<u>Лемма 4</u> Если $\mathcal{K}$ - полное в $\mathcal{U}^c$ подпространство и $\forall v \in \mathcal{K}$ $\quad Re(u,v)=0$, то $u=0$

<u>Доказательство</u>. Предположим что $u \neq 0$. Тогда, по определению полного пространства, существует $\bar{v} \in \mathcal{K}$ такое, что $(u,\bar{v}) \neq 0$. Но $Re(u,\bar{v})=0$, следовательно $(u,\bar{v})$ - чисто мнимое число. ~~[illegible]~~ Возьмём $\bar{\bar{v}} = i\bar{v}$, очевидно $\bar{\bar{v}} \in \mathcal{K}$. Тогда $(u,\bar{\bar{v}}) = i(u,\bar{v})$ - уже действительное число не равное нулю, что противоречит условию. Следовательно $u=0$.

Рассмотрим уравнение

$$Lu = 0\,, \quad u \in \mathcal{Y} = u_0 + \mathcal{K}, \qquad (18)$$

где L - оператор, обладающий следующими свойствами:

$$\left.\begin{array}{l} \text{а) он эрмитов на } \mathcal{K}, \text{ т.е. } \forall u,v \in \mathcal{K} \ (u,Lv)=(Lu,v) \\ \text{б) } \forall v \in \mathcal{K},\ \forall u \in \mathcal{Y} \quad (Lv,u) = (v,Lu), \text{ т.е. он} \\ \text{„эрмитов на паре } (\mathcal{K},\mathcal{Y})\text{"}. \end{array}\right\} \quad (19)$$

Эрмитовость L во всём $\mathcal{U}^c$ мы не требуем.

По аналогии с вещественными пространствами рассмотрим функционал $\Phi[u] = (u, Lu)$. Найдём его вариацию:

$$\delta\Phi[u] = (\delta u, Lu) + (u, L\delta u)$$

Так как $u \in \mathcal{Y}$, $\delta u \in \mathcal{K}$, то, учитывая (19), получим:

$$\delta\Phi[u] = (\delta u, Lu) + (Lu, \delta u) = 2 Re\,(Lu, \delta u). \quad (20)$$

Из леммы 4 вытекает, что вариационная задача

$$\delta\Phi[u]_{\mathcal{Y}} = 0 \qquad (21)$$

эквивалентна уравнению (18). Вид вариации (20) не соответствует определению ЕВЗ, но переходит в него при переходе к вещественным пространствам. Заменим в определении ЕВЗ $\delta\Phi = (Fu, \delta u)$ на $\delta\Phi = Re\,(Fu, \delta u)$

и полученное определение будем считать обобщением определения ЕВЗ на случай комплексных пространств. Мы доказали теорему:

<u>Теорема 4</u> Если $\mathcal{Y} = u_0 + \mathcal{K}$ – полная интерплоскость в комплексном функциональном пространстве $\mathcal{U}^c$ и линейный оператор L удовлетворяет условиям (19), то вариационный принцип (21) для функционала $\Phi[u] = (u, Lu)$ является ЕВЗ для уравнения (18)

3.3.2. Зависящее от времени уравнение Шредингера.

Уравнение Шредингера имеет вид:

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\Psi\rangle = \mathcal{H}|\Psi\rangle, \qquad (21)$$

где оператор Гамильтона $\mathcal{H}$ вообще говоря зависит от времени.

Рассмотрим движение системы на интервале времени от t_1 до t_2. Предположим, известно, что в момент времени t_1 состояние системы было $|\Psi_1\rangle$, в момент времени t_2 – $|\Psi_2\rangle$. Как система двигалась в промежутке?

Введём пространство $\tilde{\mathcal{U}}^c$ векторно-значных функций, определённых на сегменте $[t_1, t_2]$, скалярное произведение определим как

$$(\tilde{\Psi}^1, \tilde{\Psi}^2) = \int_{t_1}^{t_2} \langle \Psi^1(t) | \Psi^2(t) \rangle \, dt. \qquad (22)$$

Оператор $\tilde{\mathcal{H}}(t)$ действует на векторы из $\tilde{\mathcal{U}}^c$, и как и для каждого фиксированного момента времени является эрмитовым:

$$\begin{aligned}(\tilde{\mathcal{H}}\tilde{\Psi}^1, \tilde{\Psi}^2) &= \int_{t_1}^{t_2} \langle \mathcal{H}(t)\Psi^1(t) | \Psi^2(t) \rangle \, dt = \\ &= \int_{t_1}^{t_2} \langle \Psi^1(t) | \mathcal{H}(t)\Psi^2(t) \rangle \, dt = (\tilde{\Psi}^1, \tilde{\mathcal{H}}\tilde{\Psi}^2)\end{aligned} \qquad (23)$$

Краевые условия $|\Psi(t_1)\rangle = |\Psi_1\rangle$, $|\Psi(t_2)\rangle = |\Psi_2\rangle$ фиксируют гиперплоскость $\tilde{\mathcal{Y}} = \tilde{\mathcal{F}}_0 + \tilde{\mathcal{K}}_0$, на которой ищется решение. Пусть $\tilde{V} \in \tilde{\mathcal{K}}_0$, $\tilde{U} \in \tilde{\mathcal{Y}}$. Проверим выполнение условий (19) для оператора $D_t = i\frac{\partial}{dt}$. Условие (19б):

$$(D_t\tilde{V}, \tilde{U}) = \int_{t_1}^{t_2} \langle i\frac{dV}{dt}|U\rangle dt = \langle iV|U\rangle\Big|_{t_1}^{t_2} - \int_{t_1}^{t_2}\langle iV|\frac{dU}{dt}\rangle dt =$$

$$= \int_{t_1}^{t_2}\langle V|i\frac{dU}{dt}\rangle dt = (\tilde{V}, D_t\tilde{U})$$

Выполнение (19а) очевидно. Так как оператор $\tilde{\mathcal{H}}$ эрмитов во всем пространстве $\tilde{\mathcal{U}}^c$, то условие (19) выполняются для всего оператора $L\tilde{\Psi} = \hbar D_t\tilde{\Psi} - \tilde{\mathcal{H}}\tilde{\Psi}$, следовательно вариационный принцип можно записать в виде:

$$\delta(\tilde{\Psi}, L\tilde{\Psi}) = \delta(\tilde{\Psi}, \hbar D_t\tilde{\Psi} - \tilde{\mathcal{H}}\tilde{\Psi}) = \delta\int_{t_1}^{t_2}\left(\langle\Psi|i\hbar\frac{d}{dt}|\Psi\rangle - \langle\Psi|\mathcal{H}|\Psi\rangle\right)dt = 0. \quad (24)$$

Легко проверить, что из вариационного принципа (24) вытекает уравнение Шредингера. Величина

$$L(t, |\Psi\rangle, \frac{d|\Psi\rangle}{dt}) = \langle\Psi|i\hbar\frac{d}{dt}|\Psi\rangle - \langle\Psi|\mathcal{H}|\Psi\rangle - \quad (25)$$

лагранжиан квантовомеханической системы. В координатном представлении можно ввести лагранжеву плотность:

$$\int \mathcal{L}\, dV = L(t, |\Psi\rangle, \frac{d|\Psi\rangle}{dt}), \quad (26)$$

$$\mathcal{L} = \Psi^* i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} + \hbar^2\Psi^*\nabla^2\Psi - \Psi^* U\Psi,$$

где интеграл берётся по всему конфигурационному пространству системы, ∇ - градиент в конфигурационном пространстве, U - потенциал взаимодействия частиц как друг с другом, так и с внешним полем.

3.3.3. Уравнение Гайзенберга и квантовое уравнение Лиувилля.

Рассмотрим уравнение Гайзенберга, описывающее в представлении Гайзенберга эволюцию оператора наблюдаемой F:

$$i\hbar \frac{dF}{dt} = [F, \mathcal{H}] \equiv [\mathcal{H}]F, \qquad (27)$$

где через $[\mathcal{H}]$ мы обозначили „супероператор" $[\mathcal{H}] \equiv [\cdot, \mathcal{H}]$, действующий на операторы. Введём в пространстве операторов такое скалярное произведение, чтобы оно было эрмитовой формой. Легко проверить, что этому требованию удовлетворяет такое определение:

$$(A, B)_{оп} = Sp(A^+B) \qquad (28)$$

Покажем, что оператор $[\mathcal{H}]$ относительно такого скалярного произведения является эрмитовым. Воспользуемся легко проверяемым соотношением:

$$([\mathcal{H}]A)^+ = -[\mathcal{H}](A^+). \qquad (29)$$

Тогда:

$$([\mathcal{H}]A, B)_{оп} = Sp[([\mathcal{H}]A)^+ \cdot B] = -Sp([\mathcal{H}]A^+ \cdot B) =$$
$$= -Sp([A^+, \mathcal{H}] \cdot B) = -(Sp\, A^+\mathcal{H}B - Sp\, \mathcal{H}A^+B) =$$
$$= -Sp\, A^+[\mathcal{H}, B] = Sp\, A^+[B, \mathcal{H}] = Sp(A^+ \cdot [\mathcal{H}]B) =$$
$$= (A, [\mathcal{H}]B)_{оп},$$

что и требуется.

Рассмотрим эволюцию оператора $F(t)$ на отрезке $[t_1, t_2]$. Введём пространство $\widetilde{\mathcal{O}}$ операторно-значных функций аргумента $t \in [t_1, t_2]$. Каждый элемент этого пространства является оператором, действующим на вектора из пространства $\widetilde{\mathfrak{U}}^c$ предыдущего пункта. Введём скалярное произведение на $\widetilde{\mathcal{O}}$:

$$(\tilde{A},\tilde{B}) = \int_{t_1}^{t_2} (A(t),B(t))_{on}\,dt$$

Рассмотрим задачу: ~~[illegible]~~ известно, что $F(t_1)=F_1$, $F(t_2)=F_2$, надо ~~[illegible]~~ определить как изменялся оператор F на всём отрезке $[t_1,t_2]$. Граничные условия определяют гиперплоскость, на которой ищется решение, причём для оператора $D_t = i\frac{d}{dt}$ легко проверить выполнение условий (19). Совершенно аналогично тому, как это было сделано для уравнения Шредингера, можем написать вариационный принцип:

$$\begin{cases} \delta \int_{t_1}^{t_2} \left[i\hbar \left(F,\frac{dF}{dt}\right)_{on} - \left(F,[F,\mathcal{H}]\right)_{on} \right] dt = 0 \\ (A,B)_{on} = Sp\,(A^+B) \end{cases} \qquad (30)$$

Из вариационного принципа (30) нетрудно получить уравнение Гайзенберга. Выпишем уравнение для матрицы плотности и соответствующий вариационный принцип:

$$\begin{cases} i\hbar \dfrac{d\hat{\rho}}{dt} = -[\hat{\rho},\hat{\mathcal{H}}] \\ \delta \int_{t_1}^{t_2} \left[i\hbar \left(\hat{\rho},\dfrac{d\hat{\rho}}{dt}\right)_{on} + \left(\hat{\rho},[\hat{\rho},\mathcal{H}]\right)_{on} \right] dt = 0. \end{cases} \qquad (31)$$

4. Дополнения. Потенциальность, локальная самосопряжённость и вариационные принципы.

4.1. Определения

Пусть оператор F определён, по крайней мере, на гиперплоскости $\mathcal{Y} = u_0 + \mathcal{K}$, полной в вещественном функциональном пространстве $\mathcal{U}$. Тогда, если приращение оператора F в точке $u \in \mathcal{Y}$ представимо в виде

$$F(u+\delta u) - Fu \equiv \Delta(Fu)_{\mathcal{Y}} = F'(u)\,\delta u + o(\delta u), \qquad (32)$$

где $\delta u \in \mathcal{K}$; $F'(u)$ - линейный оператор, $F'(u): \mathcal{K} \to \mathcal{U}$; $o(\delta u)$ - бесконечно малый вектор более высокого порядка малости, чем δu *), то выражение $F'(u)\,\delta u$ называется дифференциалом оператора F в точке u по $\mathcal{Y}$, а оператор $F'(u)$ - производной по $\mathcal{Y}$ оператора F. Если производная определена в каждой точке $\mathcal{Y}$, то оператор F назовём дифференцируемым; если в каждой точке u оператор $F'(u)$ - самосопряжённый, то оператор F назовём локально-самосопряжённым. Линейный оператор L назовём ограниченным на $\mathcal{K}$, если существует конечная $\mathcal{K}$-норма этого оператора:

$$\|L\|_{\mathcal{K}} = \sup_{\substack{e \in \mathcal{K} \\ \|e\| = 1}} \|Le\|.$$

---

*) Это означает, что $o(\delta u) = \|\delta u\|\, E\delta u$, где $\lim\limits_{\mathcal{K} \ni \delta u \to 0} E\,\delta u = 0$

Оператор F назовём непрерывно дифференцируемым на $\mathcal{Y}$, если отображение $u \mapsto F'(u)$, $u \in \mathcal{Y}$ непрерывно по норме пространства $\mathfrak{U}$ и операторной норме $\|\cdot\|_{\mathcal{K}}$.

Пусть $\Phi[u]$ – функционал, определённый вместе со своей вариацией на гиперплоскости $\mathcal{Y} = u_0+\mathcal{K}$. Через $\Phi'(u)[\delta u]$ обозначим вариацию $\Phi[u]$ в точке u ($\Phi'(u)$ – линейный функционал). Зафиксируем δu_1 и найдём приращение величины $\Phi'(u)[\delta u_1]$:

$$\Delta_2 \Phi'(u)[\delta u_1] \equiv \Phi'(u+\delta u_2)[\delta u_1] - \Phi'(u)[\delta u_1].$$

Если

$$\Delta_2 \Phi'(u)[\delta u_1] = \Phi''(u)[\delta u_2, \delta u_1] + (o(\delta u_2), \delta u_1),$$

где $\Phi''(u)[\delta u_2, \delta u_1]$ – билинейный функционал, а $o(\delta u_2)$ – бесконечно малый вектор более высокого порядка малости, чем δu_2, то $\Phi''(u)[\delta u_2, \delta u_1]$ называется второй вариацией $\Phi[u]$ в точке u. Известна следующая теорема*):

<u>Утверждение 4</u>. Если вторая вариация функционала $\Phi[u]$ в точке u существует, то $\Phi''(u)[\delta u_2, \delta u_1]$ – симметричная билинейная форма.

---

*) Л. А. Люстерник, В. И. Соболев. Краткий курс функционального анализа, глава VI § 4. „Высшая школа" 1982.

4.2 Связь потенциальности с локальной самосопряжённостью

Теорема 4. (Необходимое условие потенциальности)
Если дифференцируемый на полной интерплоскости $\mathcal{Y}$ оператор F является $\mathcal{Y}$-потенциальным, то он является локально-самосопряжённым на $\mathcal{Y}$.

Доказательство. Так как оператор F $\mathcal{Y}$-потенциален, то существует его $\mathcal{Y}$-потенциал $\Phi[u]$: $\delta\Phi[u] = (Fu, \delta u)$ $\forall u \in \mathcal{Y}$. Выясним, существует ли вторая вариация $\Phi[u]$. Дадим аргументу u приращение $\delta u_1 \in \mathcal{K}$, тогда:

$$\delta_1 \Phi[u] = (Fu, \delta u_1) \tag{33}$$

Дадим аргументу u приращение $\delta u_2 \in \mathcal{K}$ и найдём приращение вариации (33):

$$\begin{aligned}
\Delta_2 \delta_1 \Phi[u] &\equiv \delta_1 \Phi[u+\delta u_2] - \delta_1 \Phi[u] = \\
&= (F(u+\delta u_2), \delta u_1) - (Fu, \delta u_1) = \\
&= (F(u+\delta u_2) - Fu, \delta u_1) = (F'(u)\delta u_2 + o(\delta u_2), \delta u_1) = \\
&= (F'(u)\delta u_2, \delta u_1) + (o(\delta u_2), \delta u_1),
\end{aligned} \tag{34}$$

где мы воспользовались дифференцируемостью F. Формула (34) показывает, что вторая вариация существует и

$$\Phi''[\delta u_2, \delta u_1] = (F'(u)\delta u_2, \delta u_1)$$

Но, согласно утверждению 4, $\Phi''(u)[\delta u_2, \delta u_1] = \Phi''(u)[\delta u_1, \delta u_2]$, откуда $(F'(u)\delta u_2, \delta u_1) = (F'(u)\delta u_1, \delta u_2)$, а так как δu_1 и δu_2 — любые вектора пространства $\mathcal{K}$, то $F'(u)$ —

самосопряжённый. Так как u — произвольная точка $\mathcal{Y}$, то F — локально самосопряжённый. Теорема доказана.

При более жёстких ограничениях на оператор F и множество $\mathcal{Y}$ локальная самосопряжённость оказывается и достаточным условием потенциальности.

Теорема 5 (Достаточное условие потенциальности)
Если оператор F имеет на полном подпространстве $\mathcal{K}$ ограниченную непрерывную производную (по $\mathcal{K}$) и локально-самосопряжён на $\mathcal{K}$, то он $\mathcal{K}$-потенциален.

Доказательство. Проверим, что функционал

$$\Phi[u] = \int_0^1 (F(\xi u), u)\, d\xi$$

является $\mathcal{K}$-потенциалом оператора F. Дадим аргументу u приращение $\delta u \in \mathcal{K}$ и найдём приращение функционала:

$$\Delta\Phi[u] = \int_0^1 (F[\xi(u+\delta u)], u+\delta u)\, d\xi - \int_0^1 (F[\xi u], u)\, d\xi =$$
$$= \int_0^1 \{(F[\xi(u+\delta u)], u+\delta u) - (F(\xi u), u)\}\, d\xi$$

Преобразуем подинтегральное выражение:

$$(F[\xi(u+\delta u)], u \overset{(+\delta u)}{}) - (F(\xi u), u) =$$
$$= (F[\xi u + \xi\delta u] - F(\xi u), u) + (F[\xi(u+\delta u)], \delta u) \quad (35)$$

Преобразуем первый член (35)

$$(F[\xi u + \xi\delta u] - F[\xi u], u) = (F'(\xi u)[\xi\delta u] + o(\xi\delta u), u) =$$
$$= \xi(F'(\xi u)\delta u, u) + (E(\xi\delta u)\|\xi\delta u\|, u), \quad (36)$$

где $\lim\limits_{H \ni \delta u \to 0} E(\xi \delta u) = 0$

Второй член выражения (35) проинтегрируем по частям:

$$\int_0^1 (F[\xi(u+\delta u)], \delta u)\, d\xi = \int_0^1 (F[\xi(u+\delta u)], d(\xi \delta u)) =$$

$$= (F[\xi(u+\delta u)], \xi \delta u)\Big|_0^1 - \int_0^1 \xi(\delta u, d(F[\xi(u+\delta u)])) =$$

$$= (F(u+\delta u), \delta u) - \int_0^1 \xi(\delta u, F'[\xi(u+\delta u)](u+\delta u))\, d\xi \qquad (37)$$

Для $\Delta \Phi$ получим (с учётом (36) и (37)):

$$\Delta\Phi[u] = (F(u+\delta u), \delta u) +$$

$$+ \int_0^1 \{\xi[(F'(\xi u)\delta u, u) - (\delta u, F'(\xi u + \xi \delta u)(u+\delta u)] + (\|\xi \delta u\| \cdot E \xi \delta u, u)\} d\xi =$$
$$= (F(u+\delta u), \delta u) + I$$

Преобразуем подинтегральное выражение используя самосопряжённость оператора F':

$$(F'(\xi u)\delta u, u) - (\delta u, F'(\xi u + \xi \delta u)(u+\delta u)) =$$
$$= -(\delta u, [F'(\xi u + \xi \delta u) - F'(\xi u)]u) - (\delta u, F'(\xi u + \xi \delta u)\delta u)$$

Используя теорему о среднем для интеграла I можно записать:

$$I = -\xi^* \{(\delta u, [F'(\xi^* u + \xi^* \delta u) - F'(\xi^* u)]u) -$$

$$- (\delta u, F'[\xi^*(u+\delta u)]\delta u) + (\|\xi^* \delta u\| E(\xi^* \delta u), u)$$

Так как производная $F'(u)$ непрерывна, то $\forall u$

$$\lim_{\delta u\to 0} [F'(\xi^* u+\xi^*\delta u) - F'(\xi^* u)]u = 0;$$

Так как $F'(u)$ - ограничен в каждой точке $\mathcal{Y}$, то $\lim\limits_{\|\delta u\|\to 0} \{F'[\xi^*(u+\delta u)]\delta u = 0$ *); $(\|\xi^*\delta u\| E(\xi^*\delta u), u) = o(\delta u)$,

следовательно весь интеграл I есть $o(\delta u)$. Далее:

$$(F(u+\delta u), \delta u) = (Fu, \delta u) + (F'(u)\delta u, \delta u),$$ и в силу ограниченности производной $(F'(u)\delta u, \delta u) = o(\delta u)$.

Таким образом $\Delta\Phi[u] = (Fu, \delta u) + o(\delta u)$, следовательно $\delta\Phi[u] = (Fu, \delta u)$ и $\Phi[u]$ - потенциал Fu, а Fu - $\mathcal{K}$-потенциален. Теорема доказана.

Замечание. Теоремы 2 и 3 являются тривиальными следствиями теорем 4 и 5, так как производная линейного оператора равна самому этому оператору.

---

*) Схема доказательства может быть такой. Область, где может изменяться $u+\delta u$ можно заключить в некоторый компакт $\mathcal{D} \subset \mathcal{K}$. На компакте $\mathcal{D}$ определено непрерывное отображение $u \mapsto F'(u)$, следовательно и числовая функция $u \mapsto \|F'(u)\|_{\mathcal{K}}$ будет непрерывной. Так как $\mathcal{D}$ - компакт, то существует верхняя грань $\tilde{F}' = \sup\limits_{u\in\mathcal{D}} \|F'(u)\|_{\mathcal{K}}$. С помощью $\tilde{F}'$ можно замажорировать $\|F'(\xi^*(u+\delta u)\|$ при различных δu и с помощью этой мажоранты доказать соотношение.

4.3. Пример.

а). Исследуем с помощью теоремы 4 нелинейный оператор Лапласа (3.2.2):

$$Fu = \frac{d}{dx}\left(k(u)\frac{du}{dx}\right).$$

Имеем:

$$\delta Fu = \frac{d}{dx}\left(\frac{du}{dx}\frac{dk}{du}\delta u\right) + \frac{d}{dx}\left(k(u)\frac{d\delta u}{dx}\right) =$$

$$= \frac{d}{dx}\left(\frac{du}{dx}\frac{dk}{du}\right)\delta u + \left(\frac{du}{dx}\frac{dk}{du}\right)\frac{d\delta u}{dx} + \frac{dk}{dx}\frac{d\delta u}{dx} + k(u)\frac{d^2\delta u}{dx^2} =$$

$$= F'(u)\delta u$$

Этот оператор может быть самосопряженным только при $k(u) = k_0 = Const$, следовательно в общем случае оператор Fu – не потенциальный и ЕВЗ не существует

б). Рассмотрим интегральное уравнение:

$$(38) \quad \int_a^b A(x,\xi,u(\xi))\,d\xi = f(x) \; ; \quad Fu = \int_a^b A(x,\xi,u(\xi))\,d\xi.$$

Имеем:

$$\delta Fu = \int_a^b \frac{\partial A}{\partial u}\delta u\, d\xi = F'(u)\delta u.$$ Очевидно, при достаточно гладком ядре A оператор $F'(u)$ ограниченный и непрерывный по u. Если A симметрично относительно x и ξ, то и $\frac{\partial A}{\partial u}$ – симметрично, следовательно $F'(u)$ – самосопряженный. По теореме 5 получаем, что для задачи (38) существует ЕВЗ (при однородных краевых условиях на u).