Конспект лекций Федотова А.А.

Вариационное исчисление

Санкт-Петербург

весна 2016

Об обозначениях

В брошюре используются следующие обозначения:

- **def.** – определение (от англ. *definition*)
- **th.** – теорема (от англ. *theorem*)
- **st.** – утверждение (от англ. *statement*)
- **ex.** – упражнение (от англ. *exercise*)
- **proof.** – доказательство (англ.)
- **cor.** – следствие (от англ. *corollary*)
- **nb.** – замечание (от лат. *nota bene*)

Сделано в среде LaTeX Иевлевым П.Н.

С вопросами и предложениями, а также за актуальной версией брошюры обращаться по адресу ievlev.pn@gmail.com.

Эта версия брошюры – от 10 июня 2016 г. Если на Вашем календаре другое число, пожалуйста, возьмите более свежую версию.

Классические задачи на отрезке

1. Задача с фиксированными концами

Пусть $I = [t_1,\, t_2] \subset \mathbb{R}$, $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ – односвязная область, $x \in \Omega$. Рассмотрим некоторую функцию $\mathcal{L} \in C^{(2)}(I \times \Omega \times \mathbb{R}^n,\, \mathbb{R})$, которую дальше будем называть "лагранжиан". Будем также обозначать $v = x'$. Также введём в рассмотрение множество кривых $\Gamma_{a,\,b} = \Big\{ x(\cdot) \in C^{(2)}(I,\, \Omega) \mid x(t_1) = a,\ x(t_2) = b \Big\}$.

def. Функционал – это функция, заданная на множестве функций, и принимающая вещественные значения.

Рассмотрим следующий функционал

$$I(x(\cdot)) = \int\limits_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t\, \mathcal{L}(t,\, x(\cdot),\, \dot{x}(\cdot)), \quad x(\cdot) \in \Gamma_{a,\,b}$$

def. Минималь функционала I – это функция $x(\cdot) \in \Gamma_{a,\,b}$ такая, что $\forall \tilde{x}(\cdot) \in \Gamma_{a,\,b} :\ \tilde{x}(\cdot) \neq x(\cdot),\ I(\tilde{x}(\cdot)) \geqslant I(x(\cdot))$.

Аналогично определяются *максималь* и *экстремаль*[1] функционала I.

th. Необходимое условие существования экстремали. Пусть $x(\cdot)$ – экстремаль функционала I. Тогда $x(\cdot)$ удовлетворяет уравнению Лагранжа:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathcal{L}_{v_j} = \mathcal{L}_{x_j}, \quad t \in I,\ j = 1,\, \ldots,\, n.$$

proof. Пусть $x_0(\cdot)$ – экстремаль I. Пусть $\delta \in C^{(2)}(I,\, \mathbb{R}^n)$, $\varepsilon > 0 :\ \ \forall t \in I :\ x_0(t) + \varepsilon\delta(t) \in \Omega$. Тогда функционал I корректно определён на функции $x_0 + \varepsilon\delta$ и является дважды дифференцируемой функцией ε:

$$\tilde{I}(\varepsilon) = I(x_0(\cdot) + \varepsilon\delta(\cdot))$$

[1]Впрочем, экстремалью функционала I часто называют любые решения уравнения Лагранжа, вне зависимости от того, принимает ли на нём функционал экстремальное значение.

Условие экстремальности принимает вид[2]

$$\left.\frac{\mathrm{d}\tilde{I}(\varepsilon)}{\mathrm{d}\varepsilon}\right|_{\varepsilon=0} = 0 \Rightarrow \int\limits_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \sum_{j=1}^{n} \left(\mathcal{L}_{x_j}\, \delta_j(t) + \mathcal{L}_{v_j}\, \delta_j'(t)\right) =$$

$$= \underbrace{\sum_{j=1}^{n} \mathcal{L}_{v_j} \delta_j \Big|_{t_1}^{t_2}}_{=0} + \int\limits_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \sum_{j=1}^{n} \left(\mathcal{L}_{x_j} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathcal{L}_{v_j}\right) \delta_j(t)$$

Так как δ произвольно, можно выбрать её так, чтобы $\delta_j(t_1) = \delta_j(t_2) = 0$.

Для продолжения доказательства нужна лемма Дюбуа – Реймона.

st. (лемма Дюбуа – Реймона) Пусть $f \in C(I, \mathbb{R})$ и

$$\forall \delta \in C^{(2)} : \delta\Big|_{\partial I} = 0 : \int\limits_{I} \mathrm{d}t\, f(t)\delta(t) = 0. \text{ Тогда } f \equiv 0.$$

Доказательство леммы Дюбуа – Реймона чуть позже. Из этой леммы и следует утверждение теоремы о необходимом условии существования экстремаль функционала I:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathcal{L}_{v_j} = \mathcal{L}_{x_j}, \quad j = 1, \ldots, n.$$

proof. (лемма Дюбуа – Реймона). Пусть в условиях леммы найдётся точка $x_0 \in I$ такая, что $f(x_0) \neq 0$. Пусть она внутренняя[3]. Тогда $\exists \varepsilon > 0 : \ \forall x \in [x_0 - \varepsilon, x_0 + \varepsilon] \subset I : \ f(x) \neq 0$. Воспользуемся произволом в выборе δ:

$$\delta(x) = \begin{cases} (x - (x_0 - \varepsilon))^3 \cdot ((x_0 + \varepsilon) - x)^3, \ x \in [x_0 - \varepsilon, x_0 + \varepsilon], \\ 0; \end{cases}$$

Ясно, что δ, $\delta', \delta'' = 0$ при $x = x_0 \pm \varepsilon$, $\delta \in C^{(2)}$, то есть выполнены требования к δ из условий леммы. Но в таком случае

$$\int\limits_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} \mathrm{d}t\, f(t)\delta(t) \neq 0 \text{ – противоречие с условием леммы.}$$

[2] Необходимое условие экстремума функции $\tilde{I}(\varepsilon)$ в точке $\varepsilon = 0$.

[3] Случай, когда x_0 – граничная, тривиален.

Следовательно, $f(x_0) = 0$. $\square$

cor. Пусть $f \in C(I, \mathbb{R}^n)$ и $\forall \delta \in C^{(2)}(I, \mathbb{R}^n) : \delta\Big|_{\partial I} = 0 \Rightarrow \int\limits_I \mathrm{d}t\, f(t)\delta(t) = 0$. Тогда $f \equiv 0$.

proof. Очевидно. $\square$

2. Задача со свободными концами

Рассмотрим задачу о поиске экстремали того же функционала I при тех же условиях на лагранжиан $\mathcal{L}$, но на новом функциональном пространстве $\Gamma = C^{(2)}(I, \Omega)$.

th. Необходимое условие существования экстремали в задаче со свободными концами. Пусть $x \in \Gamma$ – экстремаль функционала I. Тогда x удовлетворяет уравнениям Лагранжа и естественным граничным условиям

$$\mathcal{L}_{v_j}\Big|_{\partial I} = 0, \quad j = 1, \ldots, n$$

proof. Пусть x_0 – экстремаль из Γ. Выбирая δ и ε так же, как в задаче с фиксированными концами, а затем дифференцируя $\tilde{I}(\varepsilon)$, получим[4]

$$0 = \frac{\mathrm{d}\tilde{I}}{\mathrm{d}\varepsilon}\Big|_{\varepsilon=0} = \mathcal{L}_v\,\delta(t)\Big|_{\partial I} + \int\limits_I \mathrm{d}t\, \left(\mathcal{L}_x - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathcal{L}_v\right)\delta(t)$$

Выберем δ так, чтобы $\delta(t)\Big|_{\partial I} = 0$. В этом случае получается (как в задаче с фиксированными концами) уравнение Лагранжа. Тогда[5]:

$$\mathcal{L}_v\Big|_{\partial I} = 0$$

$\square$

[4]Обратите внимание на то, что $x \in \Omega \subset \mathbb{R}^n$, и, соответственно, производные $\mathcal{L}_x$, $\mathcal{L}_v$ являются вектор-функциями. Здесь и далее под произведением вектор-функции на вектор-функцию понимается как стандартное скалярное произведение.

[5]В силу произвольности выбора δ.

3. Специальные случаи уравнений Лагранжа

- Лагранжиан не зависит явно от времени: $\mathcal{L} = \mathcal{L}(x,\, v)$. Тогда

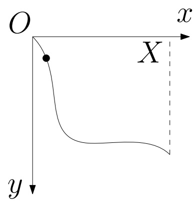
$$-\mathcal{L}_v v + \mathcal{L} = \mathrm{const.}$$

- Лагранжиан не зависит явно от координаты: $\mathcal{L} = \mathcal{L}(t,\, v)$. Тогда

$$\mathcal{L}_v = \mathrm{const.}$$

- Лагранжиан не зависит явно от скорости: $\mathcal{L} = \mathcal{L}(t,\, x)$. Тогда дифференциального уравнения нет вообще. Остаётся неявная зависимость $x(t)$.

4. Брахистохрона



Какой должна быть форма пути, чтобы время движения точки от $x = 0$ до $x = X$ было минимальным, если при этом сохраняется энергия?

$$H = \frac{1}{2}mv^2 - mgy = 0$$

Очевидно,

$$T = \int\limits_{\gamma} \frac{\mathrm{d}s}{v} = \frac{1}{\sqrt{2g}} \int\limits_0^X \mathrm{d}x \sqrt{\frac{1 + (y')^2}{y}}$$

Итак, лагранжиан задачи:

$$\mathcal{L}(x, y, y') = \sqrt{\frac{1 + (y')^2}{y}}$$

Так как он не зависит явно от x:

$$-\mathcal{L}_{y'} y' + \mathcal{L} = \mathrm{const.} \Rightarrow y(1 + (y')^2) = \mathrm{const.}$$

С помощью замены $y' = \cot(\theta)$ уравнение приводится к виду уравнения с разделяющимися переменными. Если добавить граничные условия, например, $y(0) = 0$ и $y'(X) = 0$, то ответ можно привести к параметрической зависимости y и x от $\varphi \in [0,\, 2\pi]$:

$$\begin{cases} x = R(\varphi - \sin\varphi), \\ y = R(1 - \cos\varphi); \end{cases}$$

5. Континуальный интеграл

В квантовой механике каждой физической наблюдаемой величине сопоставляется линейный оператор, действующий в некотором функциональном пространстве. Его собственные значения – возможные значения наблюдаемой величины. Пространство, о котором говорилось выше, называется *пространством состояний*. Есть много способов[6] построить пространство состояний и линейные операторы в нём. Один из канонических вариантов – выбрать в качестве пространства $L_2(\mathbb{R})$. Тогда импульсу сопоставляется оператор $\hat{p} = -i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$, координате – оператор $\hat{x}\ :\ \ \psi(x,\, t) \mapsto x\psi(x,\, t)$. Классическое определение гамильтониана частицы в потенциале v переходит в

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\hat{p}^2 + v(x) = -\frac{\hbar^2}{2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + v(x) \text{ – оператор Шрёдингера}$$

Уравнение для возможных энергий системы имеет вид $\hat{H}\psi = E\psi$, где ψ – волновая функция частицы, позволяющая описывать вероятность нахождения частицы в различных областях пространства. Сама волновая функция ψ удовлетворяет следующей задаче Коши:

$$\begin{cases} i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\psi = \hat{H}(t)\,\psi, \\ \psi\Big|_{t=t_0} = \psi_0; \end{cases}$$

[6]На самом деле, все эти пространства получаются друг из друга унитарными преобразованиями.

Если $\hat{H}$ не зависит от времени, то решение этого уравнения имеет вид

$$\psi(x,\,t) = \exp\left(-\frac{it}{\hbar}\hat{H}\right)\psi_0(x)$$

Но что делать, если $\hat{H}$ зависит от времени? Можно разбить временной интервал на N равных частей и, считая на каждом из участков разбиения $\hat{H}$ постоянным, получить ответ в виде приближения

$$\psi(x,\,t) = \exp\left(-\frac{i\Delta}{\hbar}\hat{H}(t_{N-1})\right)\ldots\exp\left(-\frac{i\Delta}{\hbar}\hat{H}(t_0)\right)\,\psi_0(x)$$

где Δ – длина промежутка.

Для вычисления $\exp\left(-\frac{i\Delta}{\hbar}\hat{H}(t_k)\right)$ используется $\hbar$-преобразование Фурье.

$$\hat{\psi}(p,\,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\,\psi(x,\,t)e^{-ipx/\hbar},\quad \psi(x,\,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p\,\hat{\psi}(p,\,t)e^{ipx/\hbar}$$

Применение оператора $\hat{p}$ к $\psi(x)$ сводится к умножению образа $\hat{\psi}(p)$ на p. Поэтому

$$\exp\left(-\frac{i\Delta}{\hbar}\hat{H}(t_0)\right)\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p_0\,\hat{\psi}(p_0)\exp\left(-\frac{i\Delta}{\hbar}\hat{H}(t_k)\right)e^{ixp_0/\hbar} =$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p_0\,\mathrm{d}x_0\;\exp\left(-\frac{i\Delta}{\hbar}\left(p_0^2 + v(x,\,t) - p_0\frac{x-x_0}{\Delta}\right)\right)\,\psi(x_0)$$

Поэтому решение записывается в виде $2N$-кратного интеграла:

$$\psi(x,t) = \underbrace{\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\ldots\int\limits_{-\infty}^{+\infty}}_{2N}\prod_{k=0}^{N-1}\frac{\mathrm{d}x_k\,\mathrm{d}p_k}{2\pi\hbar}\times$$

$$\times\exp\left(-\frac{i\Delta}{\hbar}\sum_{k=1}^{N}\left(p_{k-1}^2 + v(x,\,t_k) - p_{k-1}\frac{x_k - x_{k-1}}{\Delta}\right)\right)\,\psi(x_0)$$

Выражение, стоящее внутри экспоненты, есть сумма Римана для интеграла $\int\limits_{t_0}^{t}\mathrm{d}t\,(p^2(t) + v(x,\,t) - p(t)x'(t))$, а подинтегральное выражение есть $H - px'$, то есть $-\mathcal{L}$.

Объект, который возникает при попытке устремить в полученном решении $N \to \infty$ называется *интегралом Фейнмана* или *континуальным интегралом.* Для удобства работы с этим решением вводят так называемый *пропогатор* $G(x,\, t,\, x_0,\, t_0)$:

$$G(x,\, t,\, x_0,\, t_0) = \int\limits_{\Gamma} \prod_{\tau=t_0}^{t} \frac{\mathrm{d}x(\tau)\,\mathrm{d}p(\tau)}{2\pi\hbar} \times$$

$$\times \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int\limits_{t_0}^{t} \mathrm{d}\tau\ \left(H(\tau,\, x(\tau),\, p(\tau)) - p(\tau)x'(\tau)\right)\right)$$

Где интегрирование ведётся по всем траекториям Γ (а их континуум). Окончательно ответ можно записать в виде

$$\psi(x,\, t) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_0\, G(x,\, t,\, x_0,\, t_0)\psi_0(x_0)$$

nb. Эвристические вычисления, связанные с этим объектом, можно оправдать, повторив то же самое с $2N$-кратным интегралом.

nb. G – интеграл от функционала по функциям, следовательно, основные методы работы с ним – методы вариационного исчисления.

nb. В квазиклассическом приближении $\hbar \approx 0$. Что при этом происходит с пропогатором G? Экспонента в интеграле быстро осциллирует при "шевелении" траекторий. Основной вклад в интеграл дают такие траектории, при шевелении которых интеграл

$$\int\limits_{t_0}^{t} \mathrm{d}\tau\ \left(H(\tau,\, x(\tau),\, p(\tau)) - p(\tau)x'(\tau)\right)$$

меняется мало, то есть траектории, удовлетворяющие уравнению Лагранжа. Таким образом в квазиклассическом приближении вероятность найти частицу вблизи классических траекторий максимальна.

6. Достаточное условие экстремума

Вернёмся к одномерной задаче с фиксированными концами.

<u>**def.**</u> **Стандартная норма** $C^{(1)}$ – это норма в пространстве $C^{(1)}$, определённая следующим соотношением:

$$\|f-g\|_1 = \max_t |f(t)-g(t)| + \max_t |f'(t)-g'(t)|$$

<u>**def.**</u> **На $x_0(\cdot)$ достигается локальный минимум функционала** I, если $\forall x \in \{x \in \Gamma \mid x(t_1)=a,\, x(t_2)=b,\, \|x-x_0\|_1 \text{ достаточно мало}\}$, то $I(x) \geqslant I(x_0)$.

Аналогично определяются локальный максимум и локальный экстремум.

<u>**def.**</u> $h \in C^{(2)}$ – **допустимая**, если $h\Big|_{\partial I} = 0$, а $\|h\|_1$ достаточно мала.

Пусть h – допустимая. Тогда $I(x_0+h) = \int\limits_I \mathrm{d}t\, \mathcal{L}(t,\, x_0+h,\, x_0'+h') =$

$$= \int\limits_I \mathrm{d}t \left(\mathcal{L} + \mathcal{L}_x h + \mathcal{L}_v h' + \frac{1}{2}\left(\mathcal{L}_{xx}h^2 + 2\mathcal{L}_{xv}hh' + \mathcal{L}_{vv}(h')^2\right) + o(\|h\|^2_{C^{(1)}})\right) =$$

$$= I(x_0) + \int\limits_I \mathrm{d}t \left(\mathcal{L}_x - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathcal{L}_v\right) h +$$

$$+\frac{1}{2}\int\limits_I \mathrm{d}t\, \left(\mathcal{L}_{xx}h^2 + 2\mathcal{L}_{xv}hh' + \mathcal{L}_{vv}(h')^2\right) + o(\|h\|^2_{C^{(1)}})$$

<u>**def.**</u> **Вторая вариация I в x_0 на h** – это квадратичный функционал на множестве допустимых h

$$\delta^2 I(x_0)[h] = \int\limits_I \mathrm{d}t\, \left(\mathcal{L}_{xx}h^2 + 2\mathcal{L}_{xv}hh' + \mathcal{L}_{vv}(h')^2\right)$$

Вторую вариацию удобнее переписать в виде[7]

$$\delta^2 I(x_0)[h] = \int\limits_I \mathrm{d}t \left(\mathcal{L}_{xx} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathcal{L}_{xv}\right) h^2 + \mathcal{L}_{vv}(h')^2$$

[7]Проинтегрировать по частям.

st. Пусть $\mathcal{L} \in C^{(3)}(I \times \Omega \times \mathbb{R}^n)$. Тогда $I(x_0 + h) = I(x_0) + \frac{1}{2}\delta^2 I(x_0)[h] + \Delta$, где $|\Delta| \leqslant \text{const.} \times \int\limits_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \, \left(|h^3| + |h^2 h'| + |h(h')^2| + |(h')^3|\right)$.

proof. Следующий член из разложения $I(x_0 + h)$ в ряд Тейлора. $\square$

th. Пусть x_0 – минималь. Тогда для любой допустимой $h: \ \delta^2 I(x_0)[h] > 0$.

proof. Пусть $\varepsilon > 0$ достаточно мало (так, что $\forall t \in I: \ x_0(t) + \varepsilon h(t) \in \Omega$). Тогда $I(x_0 + \varepsilon h) = I(x_0) + \frac{1}{2}\varepsilon^2 \delta^2 I(x_0)[h] + o(\varepsilon^2)$. Если $\delta^2 I(x_0)[h] < 0$, то $I(x_0 + \varepsilon h) < I(x_0)$, что противоречит тому, что x_0 – минималь I. $\square$

th. Лежандра. Пусть x_0 удовлетворяет уравнению Лагранжа, и для любой допустимой h верно $\delta^2 I(x_0)[h] \geqslant 0$. Тогда $\forall t \in I \ \mathcal{L}_{vv} \geqslant 0$.

proof. Предположим, что $\exists t_0 \in \operatorname{Int} I: \ \mathcal{L}_{vv}\Big|_{t_0} < 0$. Пусть $h_\varepsilon(t) = \varepsilon^{1/2+\delta} H\left(\frac{t-t_0}{\varepsilon}\right)$, где $\delta > 0, \ \varepsilon > 0$ и достаточно мала, при этом δ должна быть такой, что h_ε – допустимая, а $H(t)$ – непрерывная функция, равная нулю вне $[-1, 1]$ и положительная на нём. Тогда

$$\begin{pmatrix}\text{Вклад в } \delta^2 I(x_0) \text{ от} \\ \text{слагаемого с } h_\varepsilon^2\end{pmatrix} \leqslant \text{const.} \times \int\limits_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \, h_\varepsilon^2(t) = \text{const.} \times \varepsilon^{1+2\delta} \int\limits_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \, H\left(\frac{t-t_0}{\varepsilon}\right) \leqslant$$

$$\leqslant \text{const.} \times \varepsilon^{2+2\delta} \int\limits_{-1}^{1} \mathrm{d}y \, H(y)$$

$$\begin{pmatrix}\text{Вклад в } \delta^2 I \text{ от} \\ \text{слагаемого с } (h_\varepsilon')^2\end{pmatrix} = \varepsilon^{1+2\delta} \int\limits_{t_0-\varepsilon}^{t_0+\varepsilon} \mathrm{d}t \, \left(\mathcal{L}_{vv}\Big|_{t_0} + O(\varepsilon)\right) \left(\frac{1}{\varepsilon} H'\left(\frac{t-t_0}{\varepsilon}\right)\right) =$$

$$= \varepsilon^{2\delta} \mathcal{L}_{vv}\Big|_{t_0} \int\limits_{-1}^{1} \mathrm{d}t \, H'(t) + O(\varepsilon^{1+2\delta})$$

Следовательно, при малых ε знак $\delta^2 I$ определяется знаком $\mathcal{L}_{vv}\Big|_{t_0}$, то есть больше нуля.

$\square$

6.1 Достаточное условие Якоби

Рассмотрим $\delta^2 I(x_0)[h]$ как функционал над множеством h. Для него уравнения Лагранжа принимают вид

$$-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\mathcal{L}_{vv}\frac{\mathrm{d}h}{\mathrm{d}t}\right)+\left(\mathcal{L}_{xx}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathcal{L}_{xv}\right)h=0$$

Это уравнение называется **уравнением Якоби**.

Пусть h – решение уравнения Якоби.

def. $t_0 \in (t_1, t_2]$ – **сопряжённая к** t_1, если у решения задачи Коши для уравнения Якоби с начальными условиями $h(t_1)=0$, $h'(t_1)\neq 0$ имеется нуль в точке t_0.

nb. Уравнения Якоби часто записывают в виде

$$-h''-\left(\frac{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathcal{L}_{vv}}{\mathcal{L}_{vv}}\right)h'+\left(\frac{\mathcal{L}_{xx}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathcal{L}_{xv}}{\mathcal{L}_{vv}}\right)h=0$$

th. Якоби. Пусть x_0 – решение уравнения Лагранжа, и при всех t из I выполнено необходимое условие существования минимума $\mathcal{L}_{vv}>0$. Пусть, кроме того, уравнение Якоби не имеет сопряжённых точек на отрезке $(t_1, t_2]$. Тогда x_0 – минималь.

proof. Основная идея доказательства – переписать вторую вариацию $\delta^2 I(x_0)[h]$ в виде $\int\limits_{t_1}^{t_2}\mathrm{d}t\,\mathcal{L}_{vv}\,\varphi^2(t)$, где $\varphi(t)$ не обращается в нуль на отличных от тождественного нуля допустимых h.

Ранее мы получили для функционала второй вариации формулу

$$\delta^2 I(x_0)[h]=\int\limits_{t_1}^{t_2}\mathrm{d}t\,\left(\left(\mathcal{L}_{xx}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathcal{L}_{xv}\right)h^2+\mathcal{L}_{vv}(h')^2\right)$$

Так как для функции ω, точные условия на которую выяснятся позже, в силу $h(t_1)=h(t_2)=0$ справедливо равенство

$$\int\limits_{t_1}^{t_2}\mathrm{d}t\,(\omega h^2)'=\omega h^2\Big|_{t_1}^{t_2}=0,$$

то добавка $(\omega h^2)'$ к подынтегральному выражению не изменит самого функционала второй вариации. Само подынтегральное выражение с добавкой выглядит так:

$$\left(\mathcal{L}_{xx} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathcal{L}_{xv} + \omega'\right) h^2 + 2hh'\omega + \mathcal{L}_{vv}(h')^2$$

Попробуем теперь решить следующее уравнение для того, чтобы представить функционал второй вариации в требуемом в начале теоремы виде.

$$\frac{\omega^2}{\mathcal{L}_{vv}} = \mathcal{L}_{xx} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathcal{L}_{xv} + \omega'$$

Если это уравнение удастся решить, то вторая вариация примет вид

$$\delta^2 I(x_0)[h] = \int\limits_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t\, \mathcal{L}_{vv}\left(h' + \frac{\omega h}{\mathcal{L}_{vv}}\right)^2$$

Это уравнение является уравнением Рикатти и при помощи подстановки $\omega = -u'\mathcal{L}_{vv}/u$ приводится к уравнению Якоби

$$-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\mathcal{L}_{vv}\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t}\right) + \left(\mathcal{L}_{xx} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathcal{L}_{xv}\right)u = 0$$

Отсутствие сопряжённых точек у его решения гарантирует правомерность замены $\omega = -u'\mathcal{L}_{vv}/u$, и, следовательно, возможность представить функционал второй вариации в требуемом виде.

Может ли вторая вариация обращаться в нуль при не равных нулю тождественно допустимых h? Ответить на этот вопрос поможет теорема существования и единственности решения задачи Коши. Из неё следует, что у следующей задачи Коши имеется только тривиальное решение.

$$\begin{cases} h' + \omega h/\mathcal{L}_{vv} = 0, \\ h'(t_1) = h(t_1) = 0; \end{cases}$$

Таким образом при на всех допустимых h, отличных от тождественного нуля, справедливо неравенство $\delta^2 I(x_0)[h] > 0$, так как

$$h' + \omega h/\mathcal{L}_{vv} \neq 0 \text{ и } \mathcal{L}_{vv} > 0$$

Таким образом доказано, что в условиях теоремы $\delta^2 I(x_0)[h] > 0$ для не равных нулю тождественно допустимых h. Однако, этой оценки недостаточно для сравнения $\delta^2 I(x_0)[h]$ со следующими членами разложения $I(x_0 + \alpha h)$ в ряд Тейлора. Покажем, что в условиях теоремы Якоби верна более сильная оценка для второй вариации. А именно, существует такое число α_0, что

$$\delta^2 I(x_0)[h] \geqslant \alpha_0 \int\limits_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \, |h'(t)|^2$$

Для этого обозначим $\alpha_1 = \min\limits_{[t_1,\, t_2]} \mathcal{L}_{vv}$ (так как $\mathcal{L}_{vv}$ непрерывна, минимум существует по теореме Вейерштрасса), и рассмотрим при $\alpha \in [0, \alpha_1)$ задачу Коши

$$\begin{cases} -\left((\mathcal{L}_{vv} - \alpha)h'\right)' + \left(\mathcal{L}_{xx} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathcal{L}_{vv}\right) h = 0, \\ h(t_1) = 0, \ h'(t_1) = 1; \end{cases}$$

По условию теоремы у решения этой задачи Коши нет нулей при $\alpha = 0$, при этом решение задачи Коши, как известно, зависит от параметра задачи непрерывно. Если непрерывная функция в некоторой точке не обращается в ноль, то найдётся малая окрестность этой точки, в которой функция отлична от нуля. Таким образом существует такое число $\alpha_0 < \alpha_1$ (при $\alpha = \alpha_1$, как нетрудно убедиться, нуль есть) из достаточно малой окрестности $\alpha = 0$, что у решения этой задачи Коши нет нулей на $(t_1, t_2]$.

Пользуясь доказанным выше, можно повторить все рассуждения теоремы для функционала

$$\int\limits_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \, \left(\left(\mathcal{L}_{xx} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathcal{L}_{xv}\right) h^2 + (\mathcal{L}_{vv} - \alpha)\,(h')^2\right)$$

и убедиться в том, что этот функционал на допустимых $h \not\equiv 0$ принимает лишь положительные значения, то есть справедлива указанная оценка

$$\int\limits_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \, \left(\left(\mathcal{L}_{xx} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathcal{L}_{xv}\right) h^2 + \mathcal{L}_{vv}\,(h')^2\right) \geqslant \alpha_0 \int\limits_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \, (h')^2$$

До доказательства теоремы остаётся один шаг – доказать, что кубические члены разложения $I(x_0+\alpha h)$ в ряд Тейлора малы по сравнению с полученной оценкой для второй вариации. В самом деле, если бы это было так, то знак выражения

$$I(x_0+h)-I(x_0)=\delta^2 I(x_0)[h]+\left(\substack{\text{кубические}\\ \text{члены}}\right)$$

определялся бы знаком $\delta^2 I(x_0)[h]$.

Для оценки кубических членов вынесем за знак интеграла наибольший по модулю коэффициент C_1 из стоящих при h^3, $h'h^2$, $(h')^2h$ и $(h')^3$, и воспользуемся неравенством треугольника. На следующем шаге вынесем за знак интеграла $\|h\|_1=\max|h(x)|+\max|h'(x)|$.

$$\left|\left(\substack{\text{кубические}\\ \text{члены}}\right)\right|\leqslant C_1\int\limits_{t_1}^{t_2}\mathrm{d}t\left(|h|^3+|h'h^2|+|(h')^2h|+|h'|^3\right)\leqslant$$

$$\leqslant 2C_1\|h\|_1\int\limits_{t_1}^{t_2}\mathrm{d}t\left(|h|^2+|h'|^2\right)=(*)$$

Заменим h по формуле Ньютона-Лейбница на

$$h(t)=\int\limits_{t_1}^{t}\mathrm{d}t\,h'(t).$$

Оценим $|h|$:

$$|h(t)|=\left|\int\limits_{t_1}^{t}\mathrm{d}t\,h'(t)\right|\leqslant\left|\int\limits_{t_1}^{t_2}\mathrm{d}t\,h'(t)\right|\leqslant\int\limits_{t_1}^{t_2}\mathrm{d}t\;|h'(t)|\leqslant(**)$$

Рассмотрим последний интеграл как скалярное произведение $\langle|h'|,\,1\rangle$ и воспользуемся неравенством Коши – Буняковского – Шварца

$$(**)\leqslant\|1\|\cdot\|h'\|=\sqrt{|t_2-t_1|}\cdot\sqrt{\int\limits_{t_1}^{t_2}\mathrm{d}t\,|h'(t)|^2}$$

Вернёмся теперь к оценке кубических членов $(*)$.

$$(*) \leqslant 2C_1\|h\|_1\Big(|t_2-t_1|^2+1\Big)\int\limits_{t_1}^{t_2}\mathrm{d}t\,|h'(t)|^2$$

Из этой оценки следует, что при достаточно малых по норме C^1 допустимых h кубическими членами можно пренебречь по сравнению с $\delta^2 I(x_0)[h]$, что и завершает доказательство теоремы Якоби. $\square$

6.2 Изопериметрическая задача

Изопериметрическая задача — это задача о поиске экстремума одного функционала при ограничении на множество функций в виде другого функционала. Конкретнее, будем искать экстремум функционала

$$I(x)=\int\limits_{t_1}^{t_2}\mathrm{d}t\,\mathcal{L}(t,\,x,\,x')$$

среди кривых

$$x\in\Big\{x\in C^1(I,\,\mathbb{R})\;\Big|\;J(x)=J_0\Big\}$$

где $J(x)$ – функционал, определяемый равенством

$$J(x)=\int\limits_{t_1}^{t_2}\mathrm{d}t\,\mathcal{M}(t,\,x,\,x')$$

th. Пусть $\mathcal{L}$ и $\mathcal{M}$ принадлежат $C^{(2)}(I\times\mathbb{R}\times\mathbb{R},\,\mathbb{R})$, кривая x_0 не удовлетворяет уравнениям Лагранжа для функционала J, является экстремалью I среди кривых $x\in\Big\{x\in C^1(I,\,\mathbb{R})\;\Big|\;J(x)=J_0\Big\}$. Тогда существует число $\lambda\in\mathbb{R}$ такое, что x_0 удовлетворяет уравнению Лагранжа для функционала

$$\int\limits_{t_1}^{t_2}\mathrm{d}t\,\Big(\mathcal{L}(t,\,x,\,x')+\lambda\mathcal{M}(t,\,x,\,x')\Big)$$

proof. В силу того, что x_0 не удовлетворяет уравнениям Лагранжа для J, найдётся такая допустимая h_0, что

$$\int\limits_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \left(\mathcal{M}_x - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathcal{M}_v\right) h_0(t) \neq 0$$

Пусть h – другая допустимая, а α и β – такие вещественные числа, что оба функционала I и J имеют смысл на $x_0 + \alpha h_0 + \beta h$, а также выполнено $J(x_0 + \alpha h_0 + \beta h) = J_0$. Иначе говоря, будем искать экстремаль на указанном выше множестве кривых. Положим также

$$\begin{cases} u(\alpha,\, \beta) = I(x_0 + \alpha h_0 + \beta h), \\ v(\alpha,\, \beta) = J(x_0 + \alpha h_0 + \beta h); \end{cases}$$

Покажем, что равен нулю якобиан

$$\left.\frac{\partial(u,\, v)}{\partial(\alpha,\, \beta)}\right|_{\alpha=\beta=0} = 0$$

Для этого выберем на плоскости $(\alpha,\, \beta)$ кривую γ такую, что если $(\alpha,\, \beta)^t \in \gamma$, то $v(\alpha,\, \beta) = J_0$.

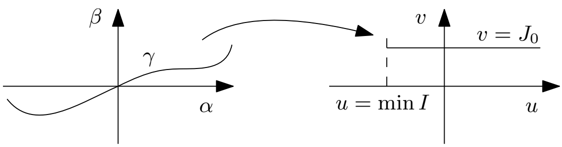


Рис. 1: Отображение $(\alpha,\, \beta) \mapsto (u,\, v)$

Её образ на плоскости $(u,\, v)$ – не прямая $v = J_0$ целиком, а лишь её часть при $u \geqslant \min I$. Если бы указанный якобиан был отличен от нуля, по теореме об обратной функции нашлось бы обратное отображение. Ясно, что это невозможно.

Вычислим теперь этот якобиан явно

$$0 = \left.\frac{\partial(u,\, v)}{\partial(\alpha,\, \beta)}\right|_{\alpha=\beta=0} = \left.\frac{\partial u}{\partial \alpha}\,\frac{\partial v}{\partial \beta} - \frac{\partial u}{\partial \beta}\,\frac{\partial v}{\partial \alpha}\right|_{\alpha=\beta=0} = (*)$$

В производных по α можно положить $\beta = 0$ до вычисления самих производных. При вычислении производных по β, также можно положить $\alpha = 0$. Такие производные мы уже считали раньше. Например,

$$\left.\frac{\partial v}{\partial \alpha}\right|_{\alpha=0} = \int\limits_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \left(\mathcal{M}_x - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathcal{M}_v\right) h_0 \neq 0$$

Поэтому $(*)$ можно переписать в виде

$$\left.\frac{\partial u/\partial \alpha}{\partial v/\partial \alpha}\right|_{\alpha=0} \left.\frac{\partial v}{\partial \beta}\right|_{\beta=0} - \left.\frac{\partial u}{\partial \beta}\right|_{\beta=0} = 0$$

Если ввести обозначение $-\lambda$

$$-\lambda = \left.\frac{\partial u/\partial \alpha}{\partial v/\partial \alpha}\right|_{\alpha=0} = \frac{\int\limits_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \left(\mathcal{L}_x - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathcal{L}_v\right) h_0(t)}{\int\limits_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \left(\mathcal{M}_x - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathcal{M}_v\right) h_0(t)}$$

и вычислить производные по β, получится уравнение

$$\int\limits_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \left(\mathcal{L}_x - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathcal{L}_v\right) h(t) + \lambda \int\limits_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \left(\mathcal{M}_x - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathcal{M}_v\right) h(t) = 0,$$

которое, в свою очередь, совпадает уравнением из формулировки теоремы. □

Пример. Классический пример изопериметрической задачи – найти форму нерастяжимой нити, при которой площадь области максимальна. Впрочем, эта задача довольно просто решается и без привлечения методов вариационного исчисления. Несколько труднее найти форму тонкой нити, закреплённой в двух точках и провисающей под действием силы тяжести.

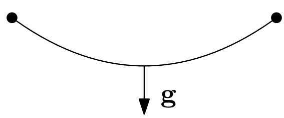


Рис. 2: Провисающая нить

Для решения этой задачи надо искать минимум функционала I (потенциальная энергия) при неизменном J (длина нити)

$$I(x) = \int\limits_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t\, x\sqrt{1+(x')^2}, \quad J(x) = \int\limits_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t\, \sqrt{1+(x')^2}$$

6.3 Задача Лагранжа

Помимо функционального условия на кривые (изопериметрическая задача), можно потребовать, чтобы они лежали в одном многообразии. Задача Лагранжа формулируется следующим образом: требуется найти экстремум функционала I

$$I(x) = \int\limits_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t\, \mathcal{L}(t,\, x,\, x')$$

среди функций

$$x \in X_g = \left\{ x \in C^{(2)}(I,\, R^n) \,\middle|\, x(t_1) = x_1,\, x(t_2) = x_2,\, g(t,\, x(t)) = 0 \right\},$$

где функция $g \in C^2(I \times \mathbb{R},\, \mathbb{R})$, а точки x_1 и x_2 заданы.

Без доказательства примем теорему

th. Пусть кривая x_0 удовлетворяет уравнению Лагранжа для I среди кривых X_g, и во всех точках $t \in [t_1,\, t_2]$ выполнено условие $\operatorname{grad} g(t,\, x) \neq 0$. Тогда найдётся функция $\lambda \in C(I,\, \mathbb{R})$ такая, что x_0 – экстремаль для функционала

$$\int\limits_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \left(\mathcal{L}(t,\, x,\, x') + \lambda(t)\, g(t,\, x(t)) \right)$$

Вместо доказательства теоремы рассмотрим пример.

Пример. Геодезические на сфере.

Геодезическими называются кривые кратчайшего расстояния, то есть минимизирующие функционал

$$\int\limits_{0}^{L} \mathrm{d}t\, \sqrt{(x_1')^2 + (x_2')^2 + (x_3')^2}$$

Условие того, что данные кривые лежат на сфере радиуса 1 записывается в виде $g(x_1,\, x_2,\, x_3) = 0$, где

$$g(x_1,\, x_2,\, x_3) = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - 1$$

Из предыдущей теоремы следует, что для решения задачи надо решить уравнения Лагранжа для функционала с лагранжианом

$$\mathcal{L}(t,\, x,\, v) = \sqrt{v_1^2 + v_2^2 + v_3^2} + \lambda(t)(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)$$

Уравнения Лагранжа для него имеют вид

$$2\lambda(t)x_j(t) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{x_j'}{\sqrt{(x_1')^2 + (x_2')^2 + (x_3')^2}},\ j = 1,\, 2,\, 3$$

Пусть параметр t, в терминах которого записана кривая, — это длина кривой. Тогда $\mathrm{d}t$ – элемент длины кривой и $\sqrt{(x_1')^2 + (x_2')^2 + (x_3')^2} = 1$. Полученные ранее уравнения Лагранжа заметно упрощаются:

$$2\lambda(t)\, x_j(t) = x_j''(t)$$

Продифференцируем равенство $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = 1$

$$x_1 x_1' + x_2 x_2' + x_3 x_3' = 0$$

и ещё раз

$$\underbrace{(x_1')^2 + (x_2')^2 + (x_3')^2}_{=1} + x_1 x_1'' + x_2 x_2'' + x_3'' = 0$$

Перенося единицу в правую часть, получим

$$x_1 x_1'' + x_2 x_2'' + x_3 x_3'' = -1$$

Подставим сюда x_j'' из уравнений Лагранжа

$$2\lambda(t)\underbrace{\left(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2\right)}_{=1} = -1$$

Откуда $\lambda(t) = -1/2$. Сама система уравнений Лагранжа становится совсем простой и знакомой:

$$x_j''(t) + x_j(t) = 0$$

Её решением является вектор

$$x(t) = A\cos t + B\sin t$$

Так как по условию $\|x(t)\|^2 = 1$ при всех t из $[t_1,\, t_2]$, то

$$\|x(t)\|^2 = \|A\cos t + B\sin t\|^2 = \|A\|^2\cos^2 t + 2\langle A,\, B\rangle\cos t\sin t + \|B\|^2\sin^2 t =$$
$$= \|A\|^2\left(\frac{1+\cos 2t}{2}\right) + \|B\|^2\left(\frac{1-\cos 2t}{2}\right) + \langle A,\, B\rangle\sin 2t = 1$$

Приравнивая коэффициенты при 1, $\sin 2t$ и $\cos 2t$ в правой и левой частях последнего равенства. Получим

$$\|A\| = \|B\| = 1, \quad \langle A,\ B\rangle = 0$$

Теперь учтём начальные условия $x(0) = a$, $x(L) = b$, $\|a\| = \|b\| = 1$.

$$a = x(0) = A, \quad b = a\cos L + B\sin L$$

Умножим второе равенство скалярно на a и воспользуемся $\langle A,\, B\rangle = 0$

$$\cos(a,\, b) = \langle a,\, b\rangle = \cos L$$

Таким образом у L появился ещё один наглядный смысл – угол между векторами a и b. Вектор B нетрудно найти из того же уравнения:

$$B = \frac{1}{\sin L}\, b - \frac{\cos L}{\sin L}\, a$$

Запишем окончательное решение, справедливое при $a \neq b$ (иначе $\sin L = 0$):

$$x(t) = \left(\cos t - \frac{\langle a,\, b\rangle}{\sqrt{1 - (\langle a,\, b\rangle)^2}}\right) a + \frac{\sin t}{\sqrt{1 - (\langle a,\, b\rangle)^2}}\, b$$

6.4 Общая форма первой вариации. Условия трансверсальности

В этом параграфе мы разрешим концам искомой экстремали двигаться вдоль заданных кривых, и выясним, какие при этом возникают условия.

Пусть теперь концы кривой зависят от некоторого параметра α. Будем рассматривать функционал

$$I_\alpha(x) = \int\limits_{t_1(\alpha)}^{t_2(\alpha)} \mathrm{d}t\, \mathcal{L}(t,\, x(t,\alpha),\, x'_t(t,\, \alpha))$$

как функцию от α. Для этого положим $\hat{I}(\alpha) = I_\alpha(x)$. Вычислим её производную по α:

$$\frac{\mathrm{d}\hat{I}}{\mathrm{d}\alpha} = \mathcal{L}(t,\, x(t,\, \alpha),\, x_t(t,\, \alpha))\Big|_{t=t_2(\alpha)} t'_2(\alpha) -$$

$$- \mathcal{L}(t,\, x(t,\, \alpha),\, x_t(t,\, \alpha))\Big|_{t=t_1(\alpha)} t'_1(\alpha) + \int\limits_{t_1(\alpha)}^{t_2(\alpha)} \mathrm{d}t \Big(\mathcal{L}_x x'_\alpha + \mathcal{L}_v x''_{t\alpha}) =$$

После взятия по частям интеграла, получим

$$= \Big(t'_2\, \mathcal{L} + \mathcal{L}_v x'_\alpha\Big)\Big|_{t=t_2(\alpha)} - \Big(t'_1\, \mathcal{L} + \mathcal{L}_v x'_\alpha\Big)\Big|_{t=t_1(\alpha)} + \int\limits_{t_1(\alpha)}^{t_2(\alpha)} \mathrm{d}t \Big(\mathcal{L}_x - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathcal{L}_v\Big) x'_\alpha = (*)$$

Полные производные на концах равны

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\alpha}\Big(x(t_j(\alpha),\, \alpha)\Big) = x'_t t'_j + x'_\alpha,\ j \in \{1,\, 2\}$$

Для удобства введём обозначения для концов кривой

$$x_j(\alpha) = x(t_j(\alpha),\, \alpha),\ j \in \{1,\, 2\}$$

Следовательно, для частных производных по α

$$x'_\alpha = x'_j - x'_t\, t'_j,\ j \in \{1,\, 2\}$$

С учётом сделанных наблюдений, продолжим вычисление $(*)$. При этом заменять частную производную на полные в интеграле нет никакой нужды.

$$(*) = \Big(\mathcal{L} - \mathcal{L}_v x'_t\Big)\Big|_{t=t_2} t'_2(\alpha) - \Big(\mathcal{L} - \mathcal{L}_v x'_t\Big)\Big|_{t=t_1} t'_1(\alpha) +$$

$$+ \mathcal{L}_v\Big|_{t=t_2} x'_2(\alpha) - \mathcal{L}_v\Big|_{t=t_1} x'_1(\alpha) + \int\limits_{t_1(\alpha)}^{t_2(\alpha)} \mathrm{d}t \Big(\mathcal{L}_x - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathcal{L}_v\Big) x'_\alpha(t)$$

В следующем параграфе возникнут естественные обозначения H и p

$$p(t,\, \alpha) = \mathcal{L}_v(t,\, x(t,\, \alpha),\, x'_t(t,\, \alpha))$$

$$H(t,\, \alpha) = -\mathcal{L}(t,\, x(t,\, \alpha),\, x'_t(t,\, \alpha)) + p(t,\, \alpha) x'_t(t,\, \alpha)$$

В этих обозачениях формула для искомой производной примет вид

$$\frac{\mathrm{d}\hat{I}}{\mathrm{d}\alpha} = \Big(p(t_2(\alpha),\, \alpha)\, x'_2(\alpha) - H(t_2(\alpha),\, \alpha)\, t'_2(\alpha)\Big) -$$

$$- \Big(p(t_1(\alpha),\, \alpha)\, x'_1(\alpha) - H(t_1(\alpha),\, \alpha)\, t'_1(\alpha)\Big) + \int\limits_{t_1(\alpha)}^{t_2(\alpha)} \mathrm{d}t \Big(\mathcal{L}_x - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathcal{L}_v\Big)\, x'_\alpha$$

Для удобства введём ещё одну пару обозначений – для p и H на концах

$$p_j(\alpha) = p(t_j(\alpha),\, \alpha), \quad H_j(\alpha) = H(t_j(\alpha),\, \alpha),\ j \in \{1,\, 2\}$$

И перепишем выражение для производной ещё один последний раз:

$$\frac{\mathrm{d}\hat{I}}{\mathrm{d}\alpha} = \Big(p_2\, x'_2 - H_2 t'_2\Big) - \Big(p_1\, x'_1 - H_1 t'_1\Big) + \int\limits_{t_1(\alpha)}^{t_2(\alpha)} \mathrm{d}t \Big(\mathcal{L}_x - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathcal{L}_v\Big)\, x'_\alpha$$

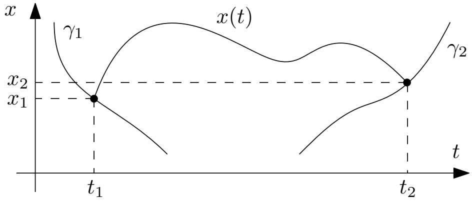


Рис. 3: Концы экстремали лежат на кривых γ_1 и γ_2

Теперь получим сами условия трансверсальности. Для этого сначала будем считать, что концы экстремали $(t_1^o,\ x_1^o)$ и $(t_2^o,\, x_2^o)$ найдены, то есть положим

$$x(t,\alpha) = x^o(t) + \alpha h(t)$$

и будем, как раньше, считать, что $h(t)$ равна нулю на обоих концах. Тогда в формуле для первой вариации обратится в ноль интегральный член (будут справедливы уравнения Лагранжа). Решение уравнения Лагранжа обозначим за $x^o(t)$. Пусть далее x зависит от t и α вот таким образом (под $x_2(\alpha)$ всё так же понимается $x(t_2(\alpha),\alpha)$):

$$x(t,\,\alpha) = x^o(t) + \Big(x_2(\alpha) - x^o(\alpha)\Big)\left(\frac{t - t_1^o}{\alpha - t_1^o}\right),$$

У предложенного $x(t,\,\alpha)$ есть следующие свойства:

- $x(\alpha,\alpha) = x_2(\alpha)$. Иначе говоря, кривая $x(\cdot,\,\alpha)$ пересекает γ_2 в точке $(\alpha,\,x_2(\alpha))$.
- $x(t_1^o,\,\alpha) = x^o(t_1^o) = x_1^o$, то есть левый конец неподвижен
- $x(t,\,t_2^o) = x^o(t)$

Благодаря последнему свойству, условие того, что x_0 – экстремаль функционала I, можно записать в виде

$$\left.\frac{\mathrm{d}\hat{I}}{\mathrm{d}\alpha}\right|_{\alpha=t_2^o} = 0$$

Используя найденную ранее формулу для этой производной, получим условие на втором конце:

$$p_2(t_2^o)\,x_2'(t_2^o) - H(t_2^o) = 0$$

Такое же условие нетрудно получить для второго конца. Это и есть условия трансверсальности.

Пример. Функционал Ферма возникает во многих задачах физики. Например, в задаче о распространении света от одной точки к другой. Принцип

Ферма утверждает, что свет распространяется по пути, время движения по которому минимально. Ясно, что в однородной среде это прямые линии. В среде, в которой скорость света зависит от положения $c = c(x,\, t)$, всё несколько иначе. Время T движения по кривой равно

$$T(x) = \int\limits_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t\, \frac{\sqrt{1+(x')^2}}{c(x,\, t)}$$

Найдём p и H рассматриваемой задачи.

$$p = \frac{x'}{c\sqrt{1+(x')^2}}, \quad H = -\frac{\sqrt{1+(x')^2}}{c} + \frac{(x')^2}{c\sqrt{1+(x')^2}} = -\frac{1}{c\sqrt{1+(x')^2}}$$

Откуда, согласно полученным в параграфе формулам, на конце левом, который может двигаться вдоль кривой $\varphi(t)$, получается условие

$$x'\varphi' = -1$$

Иначе говоря, экстремаль ортогональна кривой φ.

nb. В задачах часто встречаются функционалы в виде криволинейных интегралов (как в этом случае). Условия трансверсальности для таких функционалов, как нетрудно проверить, всегда означают ортогональность экстремали указанной кривой.

6.5 Гамильтоновы системы уравнений

Преобразование Лежандра. Введём вместо стандартных переменных $(t,\, x,\, v)$ новые переменные $(t,\, x,\, p)$, где $p = \mathcal{L}_v(t,\, x,\, v)$. Когда $(t,\, x,\, v)$ пробегает все возможные значения, p пробегает открытое множество. Из множества значений $\mathcal{L}_v(t,\, x,\, v)$ при фиксированных $(t,\, x)$ выберем p. Будем считать, что для любого p существует только одно такое v, что $p = \mathcal{L}_v(t,\, x,\, v)$. Это отображение будет гладким, если не обращается в ноль $\mathcal{L}_{vv}$.

def. **Гамильтониан** H — это функция, определяемая равенством

$$H(t,\, x,\, p) \stackrel{\text{def}}{=} -\mathcal{L}(t,\, x,\, v) + vp$$

Описанная выше процедура имеет называние *преобразование Лежандра*. Пару $(x,\, p)$ принято называть *каноническими переменными*.

th. Свойства преобразования Лежандра. $H_t = -\mathcal{L}_t$, $H_x = -\mathcal{L}_x$, $H_p = v$.

proof. Вычислим дифференциал H двумя способами: с помощью определения H и как дифференциал функции переменных t, x и p, после чего воспользуемся свойством инвариантности первого дифференциала.

$$\begin{aligned} \mathrm{d}H\,(t,\, x,\, p) &= H_t \mathrm{d}t + H_x \mathrm{d}x + H_p \mathrm{d}p \\ &= -\mathcal{L}_t \mathrm{d}t - \mathcal{L}_x \mathrm{d}x - \mathcal{L}_v \mathrm{d}v + v\mathrm{d}p + p\mathrm{d}v \end{aligned}$$

Так как $\mathcal{L}_v = p$, то $-\mathcal{L}_v \mathrm{d}v + p\mathrm{d}v = 0$. Окончательно

$$\mathrm{d}H\,(t,\, x,\, p) = -\mathcal{L}_t \mathrm{d}t - \mathcal{L}_x \mathrm{d}x + v\mathrm{d}p$$

Приравнивая коэффициенты при дифференциалах независимых переменных получим формулы, указанные в формулировке теоремы. □

cor. $H_{pp}\,\mathcal{L}_{vv} = I$

proof. $H_p = v \Rightarrow H_{pp} = v_p \Rightarrow p_v H_{pp} = \mathcal{L}_{vv} H_{pp} = I$. □

cor. Преобразование Лежандра – инволюция[8].

proof. $\tilde{v} = H_p$, $\tilde{\mathcal{L}} = -H + \tilde{v}p$, но $\tilde{v} = v$. □

Наконец прейдём к гамильтоновым системам уравнений.

th. x удовлетворяет уравнениям Лагранжа тогда и только тогда, когда $(x,\, p)$ удовлетворяет уравнениям Гамильтона.

$$\begin{cases} \dot{x} = H_p, \\ \dot{p} = -H_x; \end{cases}$$

proof. Перепишем уравнение Лагранжа, используя введённые выше обозначения.

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathcal{L}_v = \mathcal{L}_x \Leftrightarrow \dot{p} = -H_x$$

[8]Инволюцией называются отображения, двойное применение которых совпадает с тождественным отображением.

При этом ранее доказано, что

$$H_p = v = \dot{x}$$

А это и есть система уравнений Гамильтона. $\square$

<u>**st.**</u> Уравнения Гамильтона – это уравнения Лагранжа для функционала

$$\int\limits_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \left(p\dot{x} - H \right)$$

<u>**proof.**</u> Координатами в данном случае надо считать вектор $(x,\, p)^t$. Соответствующая скорость равна $(v_x,\, v_p)^t = (\dot{x},\, \dot{p})^t$. Лагранжиан при таком выборе координат принимает вид

$$L(t,\, x,\, p,\, v_x,\, v_p) = pv_x - H(t,\, x,\, p)$$

Уравнения Лагранжа для него:

$$\begin{cases} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} L_{v_x} = L_x, \\ \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} L_{v_p} = L_p; \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} \dot{p} = -H_x, \\ \dot{x} = H_p; \end{cases}$$

$\square$

6.6 Уравнения Гамильтона-Якоби

В самой общей постановке задачи требуется найти решение уравнения

$$\mathcal{H}(x,\, S_x) = 0, \text{ где } \mathcal{H} \in C^{(2)}(\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n,\, \mathbb{R}).$$

Прежде чем перейти к решению уравнения, рассмотрим несколько примеров, откуда они возникают.

Пример. Уравнение Гельмгольца описывает стационарные поля.

$$\left(\Delta + \omega^2 k^2\right) u = 0$$

При $k = \mathrm{const}$ есть решения вида $A \exp\Big(i\omega\langle k,\, x\rangle\Big)$, откуда следует, что $\|k\| = 1$. При $k = k(x)$ решения следует искать в виде

$$u(x) \sim e^{i\omega S(x)} \sum_{k=0}^{+\infty} (i\omega)^{-k} A_k(x)$$

nb. Обычно этот ряд не сходится, но описывает асимптотику решения.

Подстановка $u(x)$ в исходное уравнение и приравнивание коэффициентов при одинаковых степенях ω дают несколько соотношений, среди которых так называемое *уравнение эйконала*

$$-\|\mathrm{grad} S\|^2 + k^2 = 0$$

Нетрудно видеть, что это уравнение – уравнение Гамильтона – Якоби для $\mathcal{H} = k^2(x) - p^2$, где $p = S_x = \mathrm{grad}\, S$.

Пример. Уравнение Гамильтона – Якоби в вариационном исчислении и классической механике.

Если рассмотреть функционал

$$I(x) = \int_{t_1}^{t} \mathrm{d}t\, \mathcal{L}(t,\, x,\, x')$$

как функцию $S(t,\, x)$ своего верхнего предела и значения экстремали в нём, то по формуле для первой вариации

$$\mathrm{d}S\,(t,\, x) = p\,\mathrm{d}x\, - H\,\mathrm{d}t$$

Из этого равенства, благодаря свойству инвариантности первого дифференциала, следуют два уравнения:

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -H(t,\, x,\, p), \quad \frac{\partial S}{\partial x} = p$$

Если подставить p из второго уравнения в аргумент гамильтониана и считать t за ещё одну координату[9], то

$$S_t + H(t,\, x,\, S_x) = 0$$

[9]Положить $x_{n+1} = t$

Ясно, что это – уравнение Гамильтона – Якоби.

Задача Коши для уравнения Гамильтона-Якоби Пусть M – гладкая $(n-1)$-мерная поверхность в $\mathbb{R}^n$. Для простоты будем считать, что у неё всего одна карта. Пусть $\{\alpha\} \subset \mathbb{R}^{n-1}$ – локальньные координаты. Кроме того, пусть заданы две непрерывные функции:

- $S_0\colon M \to \mathbb{R}\colon \alpha \mapsto S_0(\alpha) \in \mathbb{R}$
- $p_0\colon M \to \mathbb{R}^n\colon \alpha \mapsto p_0(\alpha) \in \mathbb{R}^n$

Одна из возможных формулировок задачи Коши для уравнения Гамильтона – Якоби выглядит так:

$$\begin{cases} \mathcal{H}(x,\, S_x) = 0, \\ S(x_0(\alpha)) = S_0(\alpha), \\ S_x(x_0(\alpha)) = p_0(\alpha); \end{cases} \tag{1}$$

Ясно, что задать S_0 и p_0 нельзя произвольно. Для разрешимости задачи по крайней мере должны быть выполнены условия согласования

$$\begin{cases} S_{0\alpha}(\alpha) = p_0(\alpha)\, x_{0\alpha}(\alpha), \\ \mathcal{H}(x_0(\alpha),\, p_0(\alpha)) = 0; \end{cases}$$

Для решения задачи (1) рассматривается задача Коши для гамильтоновой системы

$$\begin{cases} \dot{x} = \mathcal{H}_p(x,\, p),\ \dot{p} = -\mathcal{H}_x(x,\, p), \\ x\big|_{t=0} = x_0(\alpha),\ p\big|_{t=0} = p_0(\alpha); \end{cases}$$

Обозначим её решение за $x = x(t)$, $p = p(t)$.

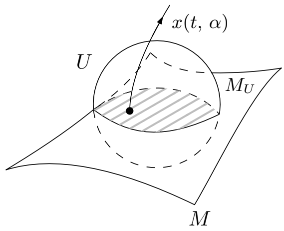


Рис. 4: К определению лучевых координат

Пусть M_U – область на M такая, что

$$\det(x_t,\, x_{\alpha_1},\, \ldots,\, x_{\alpha_{n-1}}) \neq 0 \tag{2}$$

Тогда по теореме об обратной функции отображение $(\alpha,\, t) \mapsto x(t,\, \alpha)$ будет иметь 2-гладкое обратное в некотором множестве U таком, что $M \cap U = M_U$. При этом условие (2) равносильно условию

$$\det\Big(\mathcal{H}_p(x_0(\alpha),\, p_0(\alpha)),\, x_{0\alpha_1},\, \ldots,\, x_{0\alpha_{n-1}}\Big) \neq 0$$

<u>**def.**</u> $(\alpha,\, t)$ — **лучевые координаты**, если отображение $(\alpha,\, t) \mapsto x(t,\, \alpha)$ – диффеоморфизм области U.

<u>**def.**</u> **Луч** — это образ отображения $t \mapsto x(t,\, \alpha)$.

Говорят, что лучи *выстилают* U.

<u>**nb.**</u> Препятствие для введения лучевых координат. Каустика. **todo: картинка и немного текста**

<u>**th.**</u> **Решение уравнения Гамильтона – Якоби.** Пусть U – такая область в $\mathbb{R}^n$, что $U \cap M = M_U$. Тогда на U можно ввести лучевые координаты, и решение задачи Коши (1) для уравнения Гамильтона – Якоби существует в лучевых координатах и имеет вид

$$S(t,\, \alpha) = S_0(\alpha) + \int\limits_0^t \mathrm{d}t'\, p(t', \alpha)\, x'_t(t',\, \alpha)$$

proof. Рассмотрим дифференциал предложенного решения, добавив в подынтегральное выражение $-\mathcal{H}$ (это ничего не изменит, так как он равен нулю).

$$\underbrace{\mathrm{d}S_0(\alpha)}_{=p_0(\alpha)\,x'_{0\alpha}\mathrm{d}\alpha} + p(t,\,\alpha)\,x'_t(t,\,\alpha)\mathrm{d}t +$$

$$+\sum_{j=1}^{n-1}\mathrm{d}\alpha_j\,\frac{\partial}{\partial\alpha_j}\int\limits_0^t \mathrm{d}t'\left(p(t',\,\alpha)\,x'_t(t',\,\alpha) - \underbrace{\mathcal{H}(x(t',\,\alpha),\,p(t',\,\alpha)}_{=0}\right) = (*)$$

Для вычисления слагаемых в сумме воспользуемся формулой для первой вариации. Интегральный член при этом не возникнет, так как по условию $x(t,\,\alpha)$ и $p(t,\,\alpha)$ – решения гамильтоновой системы. Внеинтегральные члены с $\mathrm{d}t$ тоже пропадут. От j-ого слагаемого суммы останется

$$\frac{\partial}{\partial\alpha_j}\int\limits_0^t \mathrm{d}t'\,\mathcal{L}(t,\,(x,\,p)^t,\,(\dot{x},\,\dot{p})^t) = p(t,\,\alpha)\,x_{\alpha_j}(t,\,\alpha) - p_0(\alpha)\,x_{0\alpha_j}(\alpha)$$

Итого,

$$(*) = p_0(\alpha)\,x'_{0\alpha}(\alpha)\,\mathrm{d}\alpha + p(t,\,\alpha)\,x'_\alpha(t,\,\alpha)\,\mathrm{d}\alpha -$$

$$- p_0(\alpha)\,x'_{0\alpha}(\alpha)\,\mathrm{d}\alpha + p(t,\,\alpha)\,x'_t(t,\,\alpha)\,\mathrm{d}t = p(t,\,\alpha)\,\mathrm{d}x\,(t,\,\alpha)$$

Воспользуемся отображением $x \mapsto (t(x),\,\alpha(x))$. Тогда

$$\mathrm{d}S\,(x) = p(t(x),\,\alpha(x))\,\mathrm{d}x \Rightarrow S_x = p(t(x),\,\alpha(x))$$

Полученное решение действительно обращает уравнение Гамильтона – Якоби в тождество:

$$\mathcal{H}(x,\,S_x) = \mathcal{H}(x(t,\,\alpha),\,p(t,\,\alpha)) =$$

Воспользуемся тут сначала законом сохранения энергии ($\dot{\mathcal{H}} = 0$), а затем начальными условиями

$$= \mathcal{H}(x(0,\,\alpha),\,p(0,\,\alpha)) = \mathcal{H}(x_0(\alpha),\,p_0(\alpha)) = 0$$

Тем самым теорема доказана. $\square$

6.7 Уравнение Эйлера. Метод Хартри – Фока

Уравнение Эйлера. В самом начале брошюры мы рассмотрели случай, когда лагранжиан $\mathcal{L}(x, y, y')$ зависел от n-мерных кривых y и одномерного параметра x. В этом параграфе мы рассмотрим случай многомерного x, но, для простоты, одномерного y.

Пусть $(x, u, p) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$ и задано отображение $(x, u, p) \mapsto H(x, u, p)$, где $H \in C^{(2)}(\mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n, \mathbb{R})$, Ω – область в $\mathbb{R}^n$ с кусочно-гладкой границей. Пусть u – дважды непрерывно дифференцируемая функция во внутренности области Ω и непрерывная на границе Ω. При этом значение u на границе фиксированно: $u\big|_{\partial\Omega} = \Phi$. Требуется найти экстремум функционала

$$I(u) = \int\limits_{\Omega} \mathrm{d}x\, H(x, u, p)$$

th. Пусть u – экстремаль поставленной задачи. Тогда u удовлетворяет уравнению Эйлера[10]

$$H_u(x, u, u') = \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial}{\partial x_k} \Big(H_{p_k}(x, u, u') \Big)$$

proof. Доказательство аналогично доказательству одномерного случая. Пусть функция $\delta \in C^2(\Omega, \mathbb{R})$, $\delta = 0$ на $\partial\Omega$ и число $\varepsilon > 0$ так мало, что функционал I имеет смысл на $u + \varepsilon\delta$. Необходимое условие экстремума на x_0 в таком случае – равенство нулю производной $I_\varepsilon(u + \varepsilon\delta)\big|_{\varepsilon=0}$:

$$0 = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varepsilon} \int\limits_{\Omega} \mathrm{d}x\, H(x, u + \varepsilon\delta, u_x + \varepsilon\delta_x) = \int\limits_{\Omega} \mathrm{d}x \left(H_u\delta + \sum_{k=1}^{n} H_{p_k}\delta_{x_k} \right) = (*)$$

[10]Особенно просто это уравнение выглядит в векторных обозначениях:

$$H_u(x, u, u') = \operatorname{div} H_p(x, u, u')$$

Для интегрирования по частям воспользуемся равенством

$$\sum_{k=1}^{n} \frac{\partial}{\partial x_k}\Big(H_{p_k}\delta\Big) = \underbrace{\sum_{k=1}^{n} \delta \frac{\partial H_{p_k}}{\partial x_k}}_{=\mathrm{div}\,(H_p\delta)} + \sum_{k=1}^{n} H_{p_k}\delta_{x_k}$$

и теоремой Остроградского – Гаусса. Первое слагаемое в следующем равенстве равно нулю в силу условия на δ.

$$(*) = \underbrace{\int\limits_{\partial\Omega} \mathrm{d}x\, H_{p_k}\delta}_{=0} + \int\limits_{\Omega} \mathrm{d}x\, \left(H_u - \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial H_{p_k}}{\partial x_k}\right)\, \delta(x)$$

Примем без доказательства тот факт, что в многомерном случае верна аналогичная лемма Дюбуа – Реймона, из которой и следует утверждение теоремы

$$H_u = \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial H_{p_k}}{\partial x_k}$$

□

nb. Для доказательства многомерной леммы Дюбуа – Реймона следует взять такую же функцию, как в одномерном случае, записать её для каждой оси x_k отдельно и перемножить.

$$\Delta\left(\frac{x - x_0}{\varepsilon}\right) = \prod_{k=1}^{n} \Delta_0\left(\frac{x_k - x_{0k}}{\varepsilon}\right)$$

В качестве примера рассмотрим уравнение Хартри – Фока.

Уравнение Хартри – Фока. Уравнение Хартри – Фока — это упрощение уравнения Шрёдингера для атома гелия He. Классический гамильтониан атома гелия имеет вид

$$h(x,\, p) = \frac{p_1^2}{2} + \frac{p_2^2}{2} - \frac{2}{\|x_1\|} - \frac{2}{\|x_2\|} + \frac{1}{\|x_1 - x_2\|},$$

в котором $(x_1,\, p_1)$ и $(x_2,\, p_2)$ имеют смысл координат и импульсов первого и второго электрона соответственно.

Соответствующее уравнение Шрёдингера выглядит так:

$$-\frac{1}{2}\,\Delta_{x_1}\psi - \frac{1}{2}\,\Delta_{x_2}\psi - \left(\frac{2}{\|x_1\|} + \frac{2}{\|x_2\|} - \frac{1}{\|x_1 - x_2\|}\right)\,\psi = E\psi$$

Можно заметить, что это уравнение – суть уравнение Эйлера для функционала с лагранжианом

$$H(x,\, \psi,\, p) = \frac{p_1^2}{2} + \frac{p_2^2}{2} - \left(\frac{2}{\|x_1\|} + \frac{2}{\|x_2\|} - \frac{1}{\|x_1 - x_2\|}\right)\, \psi^2 - E\psi^2$$

Более того, можно считать, что это – изопериметрическая задача, где E играет роль множителя Лагранжа. Будем рассматривать задачу о поиске экстремума интегрального функционала с лагранжианом

$$H_0(x,\, \psi,\, p) = \frac{p_1^2}{2} + \frac{p_2^2}{2} - \left(\frac{2}{\|x_1\|} + \frac{2}{\|x_2\|} - \frac{1}{\|x_1 - x_2\|}\right)\, \psi^2$$

при дополнительном условии

$$\iint\limits_{\mathbb{R}^3\mathbb{R}^3} \mathrm{d}x_1\, \mathrm{d}x_2\, \psi^2 = 1$$

Фок предложил разделить переменные в уравнении и ввести два отдельных условия нормировки, то есть

$$\psi(x_1,\, x_2) = \psi_1(x_1)\, \psi_2(x_2), \quad \int\limits_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}x_1\, \psi_1^2 = \int\limits_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}x_2\, \psi_2^2 = 1$$

Получим систему относительно ψ_1 и ψ_2. Для этого посчитаем сам функционал, предполагая, что ψ_1 уже найдена, а потом повторим то же самое, считая, что найдена ψ_2. Интегралы, содержащие ψ_1 в первом случае можно считать константами, и сложить их всех во всё равно неизвестный множитель E.

$$\int\limits_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}x_1 \int\limits_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}x_2 \left(\frac{1}{2}\, \psi_{1x_1}^2 \psi_2^2 + \frac{1}{2}\, \psi_1^2 \psi_{2x_2}^2 - \right.$$
$$\left. - \left(\frac{2}{\|x_1\|} + \frac{2}{\|x_2\|} - \frac{1}{\|x_1 - x_2\|}\right)\, \psi_1^2 \psi_2^2 - E_2 \psi_2^2\right) =$$

Вычислим все интегралы по x_1

$$= \int\limits_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}x_2 \left(\frac{\psi_2^2}{2} \left(\int\limits_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}x_1\, \psi_{1x_1}^2\right) + \frac{1}{2} \psi_{2x_2}^2 - \frac{2}{\|x_2\|} \psi_2^2 + \right.$$
$$\left. + \psi_2^2 \left(-2 \int\limits_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}x_1\, \frac{\psi_1^2}{\|x_1\|}\right) + \psi_2^2 \int\limits_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}x_1\, \frac{\psi_1^2}{\|x_1 - x_2\|} - E_2 \psi_2^2\right)$$

Как отмечалось выше, можно переопределить E_2, убрав в неё все интегралы, содержащие только ψ_1 и x_1.

$$E_2 := E_2 + \int\limits_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}x_1 \, \frac{\psi_{1x_1}^2}{2} - 2\int\limits_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}x_1 \, \frac{\psi_1^2}{\|x_1\|}$$

Последнее слагаемое в подынтегральном выражении содержит и x_1, и x_2. Это слагаемое называют *потенциалом* второго электрона в поле первого.

$$V_2(x_2) = \int\limits_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}x_1 \, \frac{\psi_1^2}{\|x_1 - x_2\|}$$

В итоге функционал значительно упростился:

$$\int\limits_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}x_2 \, \left(\frac{\psi_{2x_2}^2}{2} - \frac{2}{\|x_2\|} \, \psi_2^2 + (V_2(x_2) - E_2)\psi_2^2 \right)$$

Нетрудно найти уравнение Лагранжа для этого функционала:

$$-\frac{1}{2} \, \Delta_{x_2}\psi_2 + \left(V_2(x_2) - \frac{2}{\|x_2\|} \right) \psi_2 = E_2\psi_2$$

Аналогичное уравнение получается для ψ_1.

6.8 Прямые методы вариационного исчисления и задача Штурма – Лиувилля

Пусть на отрезке $[a,\, b]$ заданы функции $p \in C^{(1)}([a,\, b], \mathbb{R})$ и $q \in C([a,\, b], \mathbb{R})$.

def. Задача Штурма – Лиувилля – это краевая задача (дифференциальное уравнение с граничными условиями) на поиск собственных функций вида[11]

$$\begin{cases} -(p\psi')'(x) + q(x)\,\psi(x) = \lambda\psi(x), \\ \psi(a) = \psi(b) = 0; \end{cases}$$

[11]Ниже приведена краевая задача с граничными условиями Дирихле. Бывают и другие краевые условия, кроме условий Дирихле.

Задача – найти *собственные значения* λ и отвечающие им *собственные функции* – решения дифференциального уравнения.

nb. Если $\lambda \in \mathbb{R}$, то соответствующая ему собственная функция ψ – вещественнозначная.

nb. Можно считать, что $\psi'(a) = 1$.

todo: метод стрельбы, картинка

th. Общие свойства задач Штурма – Лиувилля.

- Собственные значения существуют. Более того, их бесконечно много.
- Любому собственному значению отвечает только одна собственная функция.
- Все собственные значения задачи Штурма – Лиувилля вещественны.
- Собственные значения накапливаются на $+\infty$.
- Собственные функции образуют базис в $L_2([a, b], \mathbb{C})$

proof. Существование собственных значений будет доказано позже. Докажем единственность собственной функции, отвечающей собственному значению, от противного. Для этого предположим, что нашлись две линейно-независимые собственные функции ψ и $\tilde{\psi}$, отвечающие одному собственному значению. Они оба решают краевую задачу с условием $\psi(a) = \tilde{\psi}(a) = 0$. Однако пространство решений такой системы двумерно, следовательно, любое другое решение раскладывается по функциям ψ и $\tilde{\psi}$ и имеет ноль в точке a. Здесь мы сталкиваемся с противоречием, так как можно предъявить задачу с другими условиями в точке a. Вещественность собственных значений проверяется простой проверкой. Действительно,

$$\lambda \int\limits_0^\pi \mathrm{d}x \, |\psi|^2 = \int\limits_0^\pi \mathrm{d}x \Big(-(p\psi')' + q\psi \Big) \, \overline{\psi} =$$

Проинтегрируем по частям дважды, учитывая по пути граничные условия.

$$= \int\limits_0^\pi \mathrm{d}x \Big(-\big(p\overline{\psi'}\big)' + q\overline{\psi}\Big)\, \psi = \overline{\lambda} \int\limits_0^\pi \mathrm{d}x\, |\psi|^2$$

К сожалению, без курса комплексного анализа нельзя доказать последние два утверждения. Однако, легко доказать, что собственные значения не могут накапливаться на $-\infty$. Это видно из следующей выкладки:

$$\lambda = \lambda \int\limits_a^b \mathrm{d}x\, \psi^2 = \int\limits_a^b \mathrm{d}x \Big(-(p\psi')' + q\psi\Big)\, \psi =$$

$$= \int\limits_a^b \mathrm{d}x \Big(p(\psi')^2 + q\psi^2\Big) \geqslant \min_{x\in[a,\, b]} q(x) \int\limits_a^b \mathrm{d}x\, \psi^2 \Rightarrow \lambda \geqslant \min q(x)$$

□

Остальная часть брошюры посвящена вопросу существования одного собственного значения λ. Заменой переменных общий случай сводится к случаю $p(x) = 1$, $a = 0$, $b = \pi$. Рассмотрим этот случай. Заметим, что задача на экстремум функционала I

$$I(\psi) = \int\limits_0^\pi \mathrm{d}x \Big((\psi'(x))^2 + q(x)\, \psi^2(x)\Big)$$

среди функций Ψ

$$\Psi = \left\{ \psi \in C^{(2)}([0,\, \pi],\, \mathbb{R}) \;\middle|\; \psi(0) = \psi(\pi) = 0,\, \int\limits_0^\pi \mathrm{d}x\, \psi^2(x) = 1 \right\}$$

совпадает со сформулированной выше задачей Штурма – Лиувилля. Таким образом из существования минимума I следует существование собственного значения λ задачи Штурма – Лиувилля.

Метод Ритца. Метод Ритца – один из прямых методов вариационного исчисления. Его идея заключается в следующем:

- Выберем базис в L_2

- Возьмём набор из n векторов этого базиса
- Найдём минималь ψ_n функционала I на линейной оболочке указанного набора
- Перейдём к пределу при $n \to \infty$

В данном случае в качестве базиса $L_2([0,\,\pi])$ возьмём $\{\sin kx\}$. Это действительно базис в $L_2([0,\,\pi])$, так как если мы продолжим ψ на $[-\pi,\,\pi]$ нечётным образом, она разложится в ряд Фурье по синусам.

Пусть L_n – линейная оболочка $\{\sin kx \mid k \in 1,\,\ldots,\,n\}$. Все функции из L_n удовлетворяют граничным условиям Дирихле (равны нулю в точках 0 и π). Будем искать минималь ψ в виде функции из L_n:

$$\psi(x) = \sum_{k=1}^{n} a_k \sin kx$$

Для этого подставим $\psi_n(x)$ в функционал I

$$I(\psi) = \int\limits_0^\pi \mathrm{d}x\, \left(\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \sum_{k=1}^{n} a_k \sin kx \right)^2 + q(x) \left(\sum_{k=1}^{n} a_k \sin kx \right)^2 \right)$$

и заметим, что, во-первых, $I(\psi)$ при желании можно посчитать явно, а во-вторых, что это квадратичная форма J коэффициентов a_k.

$$I(\psi) = J(a_1,\,\ldots,\,a_n)$$

st. I имеет минимум на L_n при условии $\int\limits_0^\pi \mathrm{d}x\, |\psi^2(x)| = 1$.

proof. Что следует из условия $\int\limits_0^\pi \mathrm{d}x\, |\psi^2(x)| = 1$ для полинома $J(a_1,\,\ldots,\,a_n)$? Вычислим $\int\limits_0^\pi \mathrm{d}x\, |\psi^2(x)|$ явно.

$$1 = \int\limits_0^\pi \mathrm{d}x\, |\psi^2(x)| = \int\limits_0^\pi \mathrm{d}x\, \left(\sum_{k=1}^{n} a_k \sin kx \right) \overline{\left(\sum_{m=1}^{n} a_m \sin mx \right)} =$$

$$= \sum_{k,\,m=1}^{n} a_k \overline{a}_m \int\limits_0^\pi \mathrm{d}x\, \sin kx\, \sin mx = \frac{\pi}{2} \sum_{k,\,m=1}^{n} a_k \overline{a}_m \delta_{km} = \frac{\pi}{2} \sum_{k=1}^{n} |a_k|^2$$

Иначе говоря, точка $a = (a_1, \ldots, a_n)^t$ лежит на сфере радиуса $\sqrt{2/\pi}$. Остаётся вспомнить, что сфера компактна, а непрерывные функции на компактных множествах достигают своего минимума. $\square$

Обозначим найденную минималь за ψ_n. Нам потребуются следующие её свойства:

- $\psi_n \in C^{(2)}([0, \pi], \mathbb{R})$
- ψ_n удовлетворяет граничным условиям Дирихле
- $\int\limits_0^\pi \mathrm{d}x\, |\psi_n^2(x)| = 1$

Благодаря конечномерному варианту теоремы об изопериметрической задаче[12] найдётся число $\lambda_n \in \mathbb{R}$ такое, что

$$0 = \frac{\partial}{\partial a_k} \int\limits_0^\pi \mathrm{d}x \left(\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \sum_{k=1}^n a_k \sin kx \right)^2 + \Big(q(x) - \lambda_n\Big) \left(\sum_{k=1}^n a_k \sin kx \right)^2 \right) =$$

$$= 2 \int\limits_0^\pi \mathrm{d}x \left(\left(\sum_{k=1}^n a_k \sin kx \right)' (\sin kx)' + \Big(q(x) - \lambda_n\Big) \sin kx \left(\sum_{k=1}^n a_k \sin kx \right) \right) =$$

$$= 2 \int\limits_0^\pi \mathrm{d}x \left(\psi_n'(x) (\sin kx)' + \Big(q(x) - \lambda_n\Big) \psi_n(x) \sin kx \right) \quad (1)$$

Возьмём произвольный набор чисел $\{b_k \in \mathbb{R} \mid k \in 1, \ldots, L\}$. Пусть

$$\zeta_L(x) = \sum_{k=1}^L b_k \sin kx$$

Просуммируем с коэффициентами b_k равенство (1).

$$\int\limits_0^\pi \mathrm{d}x \left(\psi_n'(x)\, \zeta_L'(x) + \Big(q(x) - \lambda_n\Big) \psi_n(x) \zeta_L(x) \right) = 0 \quad (*)$$

Возьмём интеграл по частям, перекинув производную с $\psi_n(x)$ на $\zeta_L(x)$

$$\int\limits_0^\pi \mathrm{d}x\, \psi_n \Big(-\zeta_L''(x) + \Big(q(x) - \lambda_n\Big) \zeta_L(x) \Big) = 0 \quad (**)$$

[12]Мы не доказывали конечномерный вариант.

Из $(*)$ следует наглядный смысл числа λ_n:

$$\int\limits_0^\pi \mathrm{d}x \left((\psi_n')^2 + q(x)\psi^2(x)\right) = \lambda_n \int\limits_0^\pi \mathrm{d}x\,|\psi_n^2(x)| = \lambda_n$$

Таким образом λ_n является минимумом I на L_n. Следовательно, последовательность $\{\lambda_n\}$ монотонно невозрастает и ограничена неравенством $\lambda_n \geqslant \min\limits_{[0,\,\pi]} q(x)$. По известной теореме анализа, эта последовательность сходится. В этот момент можно считать, что существование одного собственного значения доказано. Остаётся доказать, что существует одна собственная функция. Для дальнейших рассуждений нам потребуется достаточное условие компактности подмножества множества непрерывных функций (теорема Арцела).

th. Арцела. Множество $D \subset C([a,\,b],\,\mathbb{R})$ компактно, если оно ограничено и равностепенно-непрерывно.

Ограниченность понимается в смысле ограниченности стандартной нормы C всех элементов $\psi \in D$. Равностепенная непрерывность – это условие равномерной непрерывности при одном ε на все функции из D

$$\forall\,\varepsilon > 0\,\exists\,\delta > 0\colon \forall\,\psi \in D\;|x - x'| < \delta \Rightarrow |\psi(x) - \psi(x')| < \varepsilon$$

Примем эту теорему без доказательства. Покажем, что последовательность $\{\psi_n\}$ компактна в $C([0,\,\pi],\,\mathbb{R})$. Тогда из неё можно будет выделить подпоследовательность, сходящуюся в C.

Так как $\lambda_n \to \lambda$ при $n \to \infty$, то найдётся $C_0 > 0$: для всех n верно $|\lambda_n| \leqslant C_0$. Но для λ_n есть явная формула

$$\lambda_n = \int\limits_0^\pi \mathrm{d}x \left((\psi_n'(x))^2 + q(x)\psi_n^2(x)\right)$$

Из чего следует, что

$$\int\limits_0^\pi \mathrm{d}x\,(\psi_n'(x))^2 \leqslant C_0 + \max_{[0,\,\pi]} |q(x)| = C_1$$

Проверим теперь, что ψ_n ограничена. Воспользуемся неравенством Коши – Буняковского – Шварца.

$$|\psi_n(x)| \leqslant \left|\int\limits_0^\pi \mathrm{d}x\,\psi_n'(x)\right| \leqslant \left(\int\limits_0^\pi \mathrm{d}x\,1^2\right)^{1/2} \left(\int\limits_0^\pi \mathrm{d}x\,(\psi_n'(x))^2\right)^{1/2} \leqslant \sqrt{\pi}\sqrt{C_1}$$

Проверим равностепенную непрерывность

$$|\psi_n(x) - \psi_n(y)| = \left|\int\limits_x^y \mathrm{d}x\,\psi_n'(x)\right| \leqslant$$

$$\leqslant \left(\int\limits_x^y \mathrm{d}x\,1^2\right)^{1/2} \left(\int\limits_0^\pi \mathrm{d}x\,(\psi_n'(x))^2\right)^{1/2} \leqslant \sqrt{|x-y|}\sqrt{C_1}$$

Итого, мы доказали, что последовательность $\{\psi_n\}$ компактна, а значит в ней можно выделить сходящуюся подпоследовательность. Назовём её предел ψ.

nb. На самом деле, к ψ сходится уже сама последовательность $\{\psi_n\}$, но это трудно доказывать и не очень нужно.

Проведём обзор свойств полученного решения

- $\psi \in C([0,\,\pi],\,\mathbb{R})$

  nb. Потеряна гладкость.

- ψ удовлетворяет граничным условиям Дирихле
- $\int\limits_0^\pi \mathrm{d}x\,\psi^2(x) = 1$
- Для определённой выше функции ζ_L верно равенство

$$\int\limits_0^\pi \mathrm{d}x\,\psi(x)\Big(-\zeta_L''(x) + \Big(q(x)-\lambda\Big)\zeta_L(x)\Big) = 0$$

- Предыдущее свойство верно для любой $\zeta \in C^{(2)}([0,\,\pi],\,\mathbb{R})$, удовлетворяющей граничным условиям Дирихле

$$\int\limits_0^\pi \mathrm{d}x\,\psi(x)\Big(-\zeta''(x) + \Big(q(x)-\lambda\Big)\zeta(x)\Big) = 0$$

Докажем, что ψ удовлетворяет исходной задаче Штурма – Лиувилля.

st. Пусть для любой $\zeta \in C^{(2)}([0,\, \pi],\, \mathbb{R})$, удовлетворяющей граничным условиям Дирихле, верно, что

$$\int\limits_0^\pi \mathrm{d}x\, \psi(x)\Big(-\zeta''(x) + \Big(q(x) - \lambda\Big)\zeta(x)\Big) = 0$$

для некоторой функции ψ, удовлетворяющей остальным перечисленным выше свойствам. Тогда $\psi \in C^{(2)}([0,\, \pi],\, \mathbb{R})$ и ψ удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$-\psi''(x) + (q(x) - \lambda)\psi(x) = 0$$

proof. Возьмём интеграл из условия утверждения по частям, но не перекидывая проиводную на ψ, а "зарабатывая" интеграл от $(q(x) - \lambda)\psi(x)$ под интегралом.

$$\int\limits_0^\pi \mathrm{d}x\, \psi(x)\,\Big(-\zeta''(x) + \Big(q(x) - \lambda\Big)\zeta(x)\Big) = \underbrace{\zeta(x)\int\limits_x^\pi \mathrm{d}x_2\,\Big(q(x_2) - \lambda\Big)\psi(x_2)\Big|_0^\pi}_{=0} +$$

$$+\int\limits_0^\pi \mathrm{d}x\,\left(-\zeta''(x)\psi(x) + \left(\int\limits_x^\pi \mathrm{d}x_2\,\Big(q(x_2) - \lambda\Big)\psi(x_2)\right)\,\zeta'(x)\right) =$$

При попытке перекинуть ещё одну производную так, чтобы занулились внеинтегральные члены, неизбежно возникает условие $\zeta'(\pi) = 0$.

$$= \zeta'(x)\int\limits_0^x \mathrm{d}x_1 \int\limits_{x_1}^\pi \mathrm{d}x_2\,\Big(q(x_2) - \lambda\Big)\,\psi(x_2)\Big|_0^\pi -$$

$$-\int\limits_0^\pi \mathrm{d}x\,\zeta''(x)\left(\psi(x) + \int\limits_0^x \mathrm{d}x_1 \int\limits_{x_1}^\pi \mathrm{d}x_2\,\Big(q(x_2) - \lambda\Big)\psi(x_2)\right)$$

Окончательно имеем

$$\int\limits_0^\pi \mathrm{d}x\,\zeta''(x)\left(\psi(x) + \int\limits_0^x \mathrm{d}x_1 \int\limits_{x_1}^\pi \mathrm{d}x_2\,\Big(q(x_2) - \lambda\Big)\psi(x_2)\right) = 0, \quad \zeta'(\pi) = 0$$

Если бы ζ'' было произвольным, из последнего равенства следовало бы равенство (во втором интеграле сменён порядок интегрирования с целью убрать минус)

$$\psi(x) = \int\limits_0^x \mathrm{d}x_1 \int\limits_\pi^{x_1} \mathrm{d}x_2 \left(q(x_2) - \lambda\right)\psi(x_2)$$

Правая часть этого равенства дважды дифференцируема. Следовательно, $\psi \in C^{(2)}([0, \pi], \mathbb{R})$. Дифференцируя это уравнение дважды, получим второе утверждение теоремы. Однако, насколько произвольно ζ'' на самом деле? Для того, чтобы выяснить это, рассмотрим задачу

$$\begin{cases} \zeta'' = \varphi(x), \\ \zeta(0) = \zeta(\pi) = 0, \\ \zeta'(\pi) = 0; \end{cases} \tag{3}$$

st. Указанная задача (3) имеет решение тогда и только тогда, когда $\varphi \in C([0, \pi], \mathbb{R})$ и выполнено условие

$$\int\limits_0^\pi \mathrm{d}x\, x\, \varphi(x) = 0$$

proof. Уравнение $\zeta'' = \varphi(x)$ с первым и последним условием легко решить явно:

$$\zeta' = -\int\limits_x^\pi \mathrm{d}x_2\, \varphi(x_2), \quad \zeta(x) = -\int\limits_0^x \mathrm{d}x_1 \int\limits_{x_1}^\pi \mathrm{d}x_2\, \varphi(x_2)$$

Попробуем удовлетворить условию $\zeta(\pi) = 0$. Сменим порядок интегрирования по теореме Фубини.

$$0 = \int\limits_0^\pi \mathrm{d}x_1 \int\limits_{x_1}^\pi \mathrm{d}x_2\, \varphi(x_2) = \int\limits_0^\pi \mathrm{d}x_2\, \varphi(x_2) \int\limits_0^{x_1} \mathrm{d}x_1 = \int\limits_0^\pi \mathrm{d}x\, x\, \varphi(x)$$

$\square$

Итак, для всех $\varphi \in C([0,\,\pi],\,\mathbb{R})$ таких, что $\int\limits_0^\pi \mathrm{d}x\, x\, \varphi(x) = 0$ верно

$$\int\limits_0^\pi \mathrm{d}x\, \varphi(x) \left(\psi(x) + \int\limits_0^x \mathrm{d}x_1 \int\limits_{x_1}^\pi \mathrm{d}x_2 \, \Big(q(x_2) - \lambda \Big) \psi(x_2) \right) = 0$$

Докажем ещё один вариант леммы Дюбуа – Реймона.

st. (лемма Дюбуа – Реймона). Пусть $\chi \in C([0,\,\pi],\,\mathbb{R})$ и

$$\int\limits_0^\pi \mathrm{d}x\, \chi(x)\, \varphi(x) = 0$$

для всех $\varphi \in C([0,\,\pi],\,\mathbb{R})$ таких, что $\int\limits_0^\pi \mathrm{d}x\, x\varphi(x) = 0$. Тогда $\chi(x) = cx$.

proof. Пусть $\varphi \in C([0,\,\pi],\,\mathbb{R})$. Выберем числа $c(\varphi)$ и c из условий

$$\int\limits_0^\pi \mathrm{d}x\, x\, \Big(\varphi(x) + c(\varphi) \Big) = 0, \quad \int\limits_0^\pi \mathrm{d}x\, (\chi - cx) = 0$$

По условию теоремы

$$\int\limits_0^\pi \mathrm{d}x\, \chi(x)\, \Big(\varphi(x) + c(\varphi) \Big) = 0$$

Тогда

$$0 = \int\limits_0^\pi \mathrm{d}x\, \chi(x)\, \Big(\varphi(x) + c(\varphi) \Big) - c \int\limits_0^\pi \mathrm{d}x\, x\, \Big(\varphi(x) + c(\varphi) \Big) =$$

$$= \int\limits_0^\pi \mathrm{d}x\, \Big(\chi(x) - cx \Big) \varphi(x) + \underbrace{c(\varphi) \int\limits_0^\pi \mathrm{d}x\, (\chi(x) - cx)}_{=0}$$

Из чего, в силу произвольности выбора φ, по предыдущей лемме Дюбуа – Реймона следует, что

$$\chi(x) - cx = 0$$

$\square$

Благодаря лемме Дюбуа – Реймона и найденному выше уравнению для ψ,

$$\psi(x) = cx + \int\limits_0^x \mathrm{d}x_1 \int\limits_\pi^{x_1} \mathrm{d}x_2 \Big(q(x_2) - \lambda\Big)\psi(x_2)$$

Дифференцируя это равенство дважды, получим условие теоремы. $\square$

Таким образом закончено доказательство существования одного собственного значения и одной собственной функции задачи Штурма – Лиувилля.

Для доказательства существования второго надо аналогично рассмотреть изопериметрическую задачу

$$\int\limits_0^\pi \mathrm{d}x \Big((\psi'(x))^2 + q(x)\psi^2(x)\Big), \quad \psi(0) = \psi(\pi) = 0, \quad \int\limits_0^\pi \mathrm{d}x\, \psi^2(x) = 1$$

с дополнительным условием ортогональности

$$\int\limits_0^\pi \mathrm{d}x\, \psi(x)\psi_1(x) = 0, \quad \psi \in C^{(2)}([0,\, \pi],\, \mathbb{R})$$

Список литературы

[1] Гельфанд И. М., Фомин С. В. *Вариационное исчисление*, Государственное издательство физико-математической литературы, 1961