9.4. Вариационные методы

Когда возмущающий член велик, применение методов теории возмущений, описанных в предшествующих параграфах, становится длинным и утомительным, а физический смысл результатов затемнен сложностью получающихся выражений. В случаях такого рода более выгодно применять вариационные методы, потому что, как мы увидим, они допускают использование любых сведений о задаче, которые могут быть получены из чисто интуитивных рассмотрений. Конечно, и здесь имеются ограничения, которые мы укажем в дальнейшем изложении.

В гл. 3 мы видели, как вытекают уравнения физики из вариационных принципов, которые выражаются через плотность лагранжиана

$$L\left(\psi, \frac{\partial\psi}{\partial x_1}, \ldots, \frac{\partial\psi}{\partial x_n}\right):$$

$$\delta J=\delta \int \ldots \int L\left(\psi, \frac{\partial\psi}{\partial x_1}, \ldots, \frac{\partial\psi}{\partial x_n}\right) dx_1 \ldots dx_n = 0. \tag{9.4.1}$$

Получающееся уравнение движения имеет вид

$$\frac{\partial L}{\partial \psi} = \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i}\left[\frac{\partial L}{\partial(\partial\psi/\partial x_i)}\right]. \tag{9.4.2}$$

Содержание уравнения (9.4.1) можно выразить словами следующим образом. Будем подставлять в интеграл J уравнения (9.4.1) все функции φ, которые удовлетворяют тем же граничным и начальным данным, что и ψ. Эти функции называются *функциями сравнения* (или *пробными функциями*). Тогда для тех функций сравнения, которые отличаются на малую величину $\delta\varphi$ от правильной (искомой) функции ψ, величина интеграла J будет отличаться от его точного значения не больше чем на величину, пропорциональную $(\delta\varphi)^2$, так что разность δJ между этими значениями J и его точным значением должна быть малой второго порядка относительно $\delta\varphi$. Если функция сравнения имеет параметры $\alpha_1, \alpha_2, \ldots$, определяющие ее вид, то $J(\varphi)$ будет функцией от α и будет иметь стационарное значение (т. е. max, или min, или седловую точку) для тех значений α, для которых φ является решением (9.4.2). В окрестности стационарной точки интеграл J, конечно, менее чувствителен к деталям строения функции сравнения, чем в каком-либо ином месте.

Вариационный метод имеет целью провести программу вычисления J для всех возможных функций сравнения путем применения функций сравнения, содержащих один или больше параметров, называемых *вариационными параметрами*, значения которых должны быть определены. Конкретная применяемая форма подсказывается какими-нибудь априорными догадками о характере точного решения. Пусть этими параметрами будут α_i. Тогда

$$J = J(\alpha_1, \ldots, \alpha_s). \tag{9.4.3}$$

Условие стационарности интеграла приводит к системе уравнений

$$\frac{\partial J}{\partial \alpha_i} = 0, \qquad i=1, \ldots, s. \tag{9.4.4}$$

Решение этих уравнений определяет различные возможные значения α_i и, следовательно, лучшую возможную при заданной форме функцию сравнения. Точность результата возрастает при введении большего числа параметров в функцию сравнения, так как это увеличивает ее гибкость и тем самым способность представить точное решение ψ.

Очень часто можно так выбрать форму вариационного принципа, что величина J для точного решения ψ будет иметь ясный физический смысл. Например, плотность лагранжиана, соответствующая уравнению Лапласа, равна

$$L = (\nabla\psi)^2.$$

В электростатике $\nabla\psi = -\mathbf{E}$, где $\mathbf{E}$ — электрическое поле. Следовательно, L пропорциональна электростатической плотности энергии, а J — полной электростатической энергии. Для двух проводников с постоянной разностью потенциалов V_0 эта энергия равна $\frac{1}{2}CV_0^2$, где C — емкость. Более точно,

$$\int (\nabla\psi)^2\,dV = 4\pi C V_0^2.$$

Вариационный принцип

$$\delta\left[\frac{1}{4\pi V_0^2}\int(\nabla\psi)^2\,dV\right] = 0$$

сводится к вариационному принципу для C и записывается в виде

$$\delta[C] = 0,$$

где скобки, в которых заключено C, указывают, что величина, подлежащая варьированию, не есть C. Она, конечно, равна C, только если в $[C]$ подставить точное ψ.

Из-за стационарного характера вариационного интеграла (в этом случае он имеет минимум при точном ψ) и вытекающей отсюда нечувствительности к ошибкам в функции сравнения можно очень часто получать превосходные оценки для C при помощи довольно грубой функции сравнения. Ясно, что это свойство имеет большое практическое значение. Очень часто нас интересует главным образом одна величина, такая, как резонансная частота, энергия связи, сдвиг фазы при рассеянии или коэффициент отражения. Для этих величин можно сформулировать вариационные принципы аналогично тому, как это было сейчас сделано для емкости. Как и в первом случае, можно тогда получить хорошие оценки для этих величин, используя довольно грубые функции сравнения и не строя, следовательно, полного решения уравнения.

В большинстве случаев исходную задачу можно свести к задаче на собственные значения, причем собственным значением служит величина, которую желают найти. Поэтому мы обсудим сначала вариационный принцип для задачи на собственные значения.

Вариационный принцип для задачи на собственные значения. Мы будем использовать общие операторные обозначения не только ради их общности, но и потому, что они более отчетливо вскрывают технику получения вариационного принципа. Изучаемая задача на собственные значения имеет вид

$$\mathscr{L}(\psi) = \lambda\mathscr{M}(\psi), \tag{9.4.5}$$

где $\mathscr{L}$ и $\mathscr{M}$ — дифференциальные или интегральные операторы. Мы теперь утверждаем, что уравнение

$$\delta\left[\int\varphi\mathscr{L}(\psi)\,dV \Big/ \int\varphi\mathscr{M}(\psi)\,dV\right] = \delta[\lambda] = 0 \tag{9.4.6}$$

представляет вариационный принцип для λ. Функция φ будет вскоре определена. Интегрирование производится по всему объему, определенному независимыми переменными, от которых зависит ψ, а также φ. Способ, которым получено это уравнение, очевиден. Уравнение (9.4.5) умножено на функцию φ, пока произвольную, и выполнено интегрирование. Полученное уравнение разрешено относительно λ. Таким образом, непосредственно ясно, что если в $[\lambda]$ подставить точное решение ψ, то будет получено точное значение λ.

Чтобы показать, что (9.4.5) вытекает из (9.4.6), рассмотрим уравнение

$$[\lambda]\int \varphi\mathscr{M}(\psi)\,dV = \int \varphi\mathscr{L}(\psi)\,dV.$$

Теперь выполним варьирование, варьируя φ и λ:

$$\delta[\lambda]\int \varphi\mathscr{M}(\psi)\,dV + [\lambda]\int \delta\varphi\,\mathscr{M}(\psi)\,dV = \int \delta\varphi\mathscr{L}(\psi)\,dV.$$

Подставляя условие $\delta[\lambda]=0$ и заменяя $[\lambda]$ на λ во втором члене (так как результат варьирования вычисляется только в первом порядке), мы получаем

$$\int \delta\varphi\,[\mathscr{L}(\psi) - \lambda\mathscr{M}(\psi)]\,dV = 0.$$

Отсюда, поскольку $\delta\varphi$ произвольно, следует (9.4.5).

Обратимся теперь к уравнению, которому удовлетворяет φ (функция φ также должна быть определена из вариационного принципа). С этой целью перепишем интегралы в (9.4.6) следующим образом:

$$\int \varphi\mathscr{L}(\psi)\,dV = \int \widetilde{\mathscr{L}}(\varphi)\,\psi\,dV + \oint P(\varphi,\ \psi)\,dS,$$

$$\int \varphi\mathscr{M}(\psi)\,dV = \int \widetilde{\mathscr{M}}(\varphi)\,\psi\,dV + \oint Q(\varphi,\ \psi)\,dS.$$

Здесь $\widetilde{\mathscr{L}}$ и $\widetilde{\mathscr{M}}$ — операторы, сопряженные соответственно к $\mathscr{L}$ и $\mathscr{M}$; P и Q — соответствующие присоединенные билинейные формы [см. (5.2.10) и (7.5.4)]. Вторые интегралы справа берутся по поверхности, ограничивающей V. Мы выберем теперь φ так, чтобы она удовлетворяла граничным условиям, сопряженным к тем, которым удовлетворяет ψ [см. (7.5.12)], т. е. так, что

$$P(\varphi,\ \psi) = 0 \text{ на } S \quad \text{и} \quad Q(\varphi,\ \psi) = 0 \text{ на } S.$$

При этих условиях (9.4.6) можно записать в виде

$$\delta[\lambda] = \delta\left[\int \psi\widetilde{\mathscr{L}}(\varphi)\,dV \Big/ \int \psi\widetilde{\mathscr{M}}(\varphi)\,dV\right] = 0.$$

Поэтому φ удовлетворяет уравнению

$$\widetilde{\mathscr{L}}(\varphi) = \lambda\widetilde{\mathscr{M}}(\varphi). \tag{9.4.7}$$

Таким образом, φ удовлетворяет уравнению и граничным условиям, сопряженным к тем, которым удовлетворяет ψ. Поскольку φ является сопряженным решением, мы обозначим его через $\widetilde{\psi}$, так что вариационный принцип (9.4.6) будет читаться следующим образом:

$$\delta\left[\int \widetilde{\psi}\mathscr{L}(\psi)\,dV \Big/ \int \widetilde{\psi}\mathscr{M}(\psi)\,dV\right] = 0.$$

Заметим, что если $\mathscr{L}$ — эрмитов оператор, $(\overline{\widetilde{\mathscr{L}}}) = \mathscr{L}$, то $\widetilde{\psi} = \overline{\psi}$. Если операторы $\mathscr{L}$ и $\mathscr{M}$ самосопряженные, то $\varphi = \psi$ и вариационный принцип приобретает простую форму:

$$\delta[\lambda] = \delta\left[\int \psi\mathscr{L}(\psi)\,dV \Big/ \int \psi\mathscr{M}(\psi)\,dV\right] = 0. \tag{9.4.8}$$

Можно получить и другие вариационные принципы для λ; можно многими эквивалентными способами сформулировать одну и ту же задачу. Например, для каждого дифференциального уравнения с граничными условиями обычно можно написать эквивалентное интегральное уравнение. Мы проиллюстрируем это замечание, установив некоторые дополнительные вариационные принципы, которые будут полезны в наших дальнейших рассмотрениях.

Рассмотрим сначала случай, когда $\mathscr{L}$ — оператор, для которого не существует ψ, удовлетворяющего уравнению $\mathscr{L}\psi=0$. Это будет, например, в случае, когда $\mathscr{L}$ — положительно определенный оператор. Тогда можно написать

$$\psi = \lambda\mathscr{L}^{-1}\mathscr{M}(\psi), \tag{9.4.9}$$

где $\mathscr{L}^{-1}$ — оператор, обратный к $\mathscr{L}$. Если $\mathscr{L}$ — дифференциальный оператор, это будет эквивалентное интегральное уравнение. В самосопряженном случае, т. е. когда $\mathscr{L}$ и $\mathscr{M}$ — самосопряженные операторы, форма (9.4.9) неудобна, так как оператор $\mathscr{L}^{-1}\mathscr{M}$, сопряженным к которому служит $\mathscr{M}\mathscr{L}^{-1}$, не обязательно самосопряженный. Эту трудность легко преодолеть применением к обеим частям равенства (9.4.9) оператора $\mathscr{M}$:

$$\mathscr{M}(\psi) = \lambda\, \mathscr{M}\mathscr{L}^{-1}\mathscr{M}(\psi). \tag{9.4.10}$$

Для самосопряженных $\mathscr{M}$ и $\mathscr{L}$ оператор $\mathscr{M}\mathscr{L}^{-1}\mathscr{M}$ также будет самосопряженным.

Вариационный принцип, вытекающий из (9.4.10), запишется в виде

$$\delta[\lambda] = \delta\left[\int \tilde{\psi}\mathscr{M}(\psi)\,dV \Big/ \int \tilde{\psi}\mathscr{M}\mathscr{L}^{-1}\mathscr{M}(\psi)\,dV\right] = 0 \tag{9.4.11}$$

для общего случая, когда один из $\mathscr{L}$ и $\mathscr{M}$ или оба — несамосопряженные операторы. Функция $\tilde{\psi}$ тогда является решением уравнения

$$\tilde{\mathscr{M}}(\tilde{\psi}) = \tilde{\mathscr{M}}\tilde{\mathscr{L}}^{-1}\tilde{\mathscr{M}}(\tilde{\psi}). \tag{9.4.12}$$

В самосопряженном случае

$$\delta[\lambda] = \delta\left[\int \psi\mathscr{M}(\psi)\,dV \Big/ \int \psi\mathscr{M}\mathscr{L}^{-1}\mathscr{M}(\psi)\,dV\right] = 0. \tag{9.4.13}$$

Если существуют решения ψ_0 уравнения $\mathscr{L}\psi_0=0$, то уравнение (9.4.9) следует заменить уравнением

$$\psi = A\psi_0 + \lambda\mathscr{L}^{-1}\mathscr{M}(\psi), \tag{9.4.14}$$

где A — константа. Это можно легко проверить применением к обеим частям равенства оператора $\mathscr{L}$. Постоянная A отлична от нуля, если $\mathscr{L}^{-1}$ выбран так, чтобы член $\lambda\mathscr{L}^{-1}\mathscr{M}(\psi)$ не мог удовлетворять граничным условиям, которым должна удовлетворять ψ. При этом подразумевается, что $\mathscr{L}^{-1}$ не единственен. Это следует из свойств ψ_0, так как мы можем прибавить к разложению $\mathscr{L}^{-1}$ по собственным функциям член, содержащий ψ_0, не нарушая соотношения

$$\mathscr{L}\mathscr{L}^{-1} = 1.$$

Добавление такого члена будет, конечно, менять граничные условия, соответствующие оператору $\mathscr{L}^{-1}$. Факт неединственности $\mathscr{L}^{-1}$ был отмечен раньше в нашем рассмотрении функции Грина, где было показано, что для данного дифференциального оператора имеется много функций Грина, удовлетворяющих разным граничным условиям.

Чтобы образовать вариационный принцип, приводящий к уравнению (9.4.14) и аналогичный уравнению (9.4.13), умножим (9.4.14) на $\mathscr{M}$ и выпишем также сопряженное уравнение:

$$\mathscr{M}(\psi) = A\mathscr{M}(\psi_0) + \lambda\mathscr{M}\mathscr{L}^{-1}\mathscr{M}(\psi),$$
$$\widetilde{\mathscr{M}}(\widetilde{\psi}) = A\widetilde{\mathscr{M}}(\widetilde{\psi}_0) + \lambda\widetilde{\mathscr{M}}(\widetilde{\mathscr{L}})^{-1}\widetilde{\mathscr{M}}(\widetilde{\psi}). \tag{9.4.15}$$

Здесь $\widetilde{\psi}_0$ — решение уравнения $\widetilde{\mathscr{L}}\widetilde{\psi}_0 = 0$, удовлетворяющее граничным условиям, сопряженным к тем, которым удовлетворяет ψ_0. Наш вариационный принцип должен давать оба эти уравнения. Он записывается в виде

$$\delta[J] = \delta\left\{\int [\widetilde{\psi}(\mathscr{M} - \lambda\mathscr{M}\mathscr{L}^{-1}\mathscr{M})\psi - A(\widetilde{\psi}\mathscr{M}\psi_0 + \widetilde{\psi}_0\mathscr{M}\psi)]\, dV\right\} = 0. \tag{9.4.16}$$

Этот вариационный принцип имеет ту неприятную особенность, что он зависит от амплитуд ψ и $\widetilde{\psi}$. Так как исходная задача однородна, то неоднородность уравнения (9.4.14) фиктивна; поэтому можно сформулировать вариационный принцип так, чтобы он не содержал амплитуду ψ. Это достигается использованием вариационного принципа для определения наилучшей величины амплитуды для данной функции сравнения. Подставляем поэтому

$$\psi = \alpha\chi, \quad \widetilde{\psi} = \alpha\widetilde{\chi} \tag{9.4.17}$$

в $[J]$ и рассматриваем α как вариационный параметр. Тогда $[J]$ приобретает вид

$$[J] = \alpha^2 \int [\widetilde{\chi}(\mathscr{M} - \lambda\mathscr{M}\mathscr{L}^{-1}\mathscr{M})\chi]\, dV - A\alpha \int [\widetilde{\chi}\mathscr{M}\psi_0 + \widetilde{\psi}_0\mathscr{M}\chi]\, dV.$$

Стационарные значения J получим при $dJ/d\alpha = 0$, так что

$$\alpha = A\int (\widetilde{\chi}\mathscr{M}\psi_0 + \widetilde{\psi}_0\mathscr{M}\chi)\, dV \Big/ 2\int [\widetilde{\chi}(\mathscr{M} - \lambda\mathscr{M}\mathscr{L}^{-1}\mathscr{M})\chi]\, dV. \tag{9.4.18}$$

Подставляя это значение α в J, мы получим

$$J = -\frac{1}{4}A^2\left\{\left[\int (\widetilde{\chi}\mathscr{M}\psi_0 + \widetilde{\psi}_0\mathscr{M}\chi)\, dV\right]^2 \Big/ \int [\widetilde{\chi}(\mathscr{M} - \lambda\mathscr{M}\mathscr{L}^{-1}\mathscr{M})\chi]\, dV\right\}.$$

Так как мы еще не выполнили варьирование по параметрам, входящим в χ и $\widetilde{\chi}$, то это выражение для $[J]$ все еще должно удовлетворять условию $\delta J = 0$.

Мы можем это проверить, выполнив варьирование и показав, что получающееся уравнение для χ и $\widetilde{\chi}$ можно также получить, подставляя (9.4.17) и (9.4.18) в исходное уравнение. Для удобства заменим постоянную $-\frac{1}{4}A^2$ на $\frac{1}{2}$, обозначив новую величину через $[J']$:

$$[J'] = \left[\int (\widetilde{\chi}\mathscr{M}\psi_0 + \widetilde{\psi}_0\mathscr{M}\chi)\, dV\right]^2 \Big/ 2\int [\widetilde{\chi}(\mathscr{M} - \lambda\mathscr{M}\mathscr{L}^{-1}\mathscr{M})\chi]\, dV. \tag{9.4.19}$$

Условие $\delta[J'] = 0$ приводит к уравнению

$$J'[\mathscr{M} - \lambda\mathscr{M}\mathscr{L}^{-}\mathscr{M}^{1}]\chi = \mathscr{M}\psi_0 \int (\widetilde{\chi}\mathscr{M}\psi_0 + \widetilde{\psi}_0\mathscr{M}\chi)\, dV, \tag{9,4.20}$$

в котором J' есть значение выражения (9.4.19) с подставленными точными значениями χ и $\widetilde{\chi}$. Уравнение для сопряженного $\widetilde{\chi}$ имеет вид

$$J'[\widetilde{\mathscr{M}} - \lambda\widetilde{\mathscr{M}}\widetilde{\mathscr{L}}^{-1}\widetilde{\mathscr{M}}]\widetilde{\chi} = \widetilde{\mathscr{M}}\widetilde{\psi}_0 \int (\widetilde{\chi}\mathscr{M}\psi_0 + \widetilde{\psi}_0\mathscr{M}\chi)\, dV. \tag{9.4.21}$$

Эти уравнения получатся также, если определения (9.4.17) χ и $\widetilde{\chi}$ и величину α из (9.4.18) подставить в (9.4.15).

Заметим, что оба вариационных принципа, основанные на рассмотрении $[J']$ и уравнений для χ и $\tilde{\chi}$, однородны, т. е. если решение χ умножить на константу, то получится снова решение. Это было достигнуто за счет введения дополнительного параметра J' в уравнение. Заметим, что J' можно рассматривать как параметр, так как любая пара точных решений уравнений (9.4.20) и (9.4.21) автоматически удовлетворяет уравнению (9.4.19). На практике неоднородное уравнение (9.4.14) часто встречается в случае непрерывного спектра λ. В этом случае J' оказывается физически интересной величиной. Например, при вариационном рассмотрении рассеяния J' — простая функция сдвига фазы (см. стр. 120).

Мы закончим это рассмотрение тем, что выпишем соответствующее выражение для J' и уравнение (9.4.20) для случая самосопряженного оператора $\mathscr{L}$. В этом случае

$$[J'] = \left[\int \chi \mathscr{M} \psi_0 dV \right]^2 \Big/ \int [\chi (\mathscr{M} - \lambda \mathscr{M} \mathscr{L}^{-1} \mathscr{M}) \chi] \, dV. \tag{9.4.22}$$

Уравнение для χ приобретает вид

$$J' (\mathscr{M} - \lambda \mathscr{M} \mathscr{L}^{-1} \mathscr{M}) \chi = \mathscr{M} \psi_0 \left(\int \chi \mathscr{M} \psi_0 dV \right). \tag{9.4.23}$$

Предшествующие рассмотрения мы провели в очень абстрактной форме, чтобы выявить технику, при помощи которой составляются вариационные принципы в различных интересных случаях. Мы возвращаемся теперь к частным примерам, конкретность которых может помочь пониманию проведенных выше рассмотрений.

Вариационные принципы для резонансных частот и энергетических уровней. Рассмотрим скалярное уравнение Гельмгольца

$$\nabla^2 \psi + k^2 \psi = 0,$$

где ψ удовлетворяет *однородным* условиям *Дирихле* или *Неймана* на поверхности S; само уравнение должно удовлетворяться внутри объема, ограниченного поверхностью S. Оператор ∇^2 вместе с названными граничными условиями является самосопряженным, так что применим вариационный принцип (9.4.8). Собственное значение λ равно k^2, так что оператор $\mathscr{L}$ здесь равен $-\nabla^2$ и, следовательно, уравнение (9.4.8) принимает вид

$$\delta [k^2] = \delta \left\{ - \int \psi \nabla^2 \psi \, dV \Big/ \int \psi^2 \, dV \right\}.$$

Характер числителя становится более ясным после применения теоремы Грина:

$$[k^2] = \int (\nabla \psi)^2 \, dV \Big/ \int \psi^2 \, dV. \tag{9.4.24}$$

Для иллюстрации вывода вариационного принципа проверим непосредственно, что $\delta [k^2] = 0$ приводит к скалярному уравнению Гельмгольца. Мы имеем

$$\delta [k^2] \int \psi^2 \, dV + k^2 \delta \left(\int \psi^2 dV \right) = \delta \left[\int (\nabla \psi)^2 \, dV \right].$$

Подставляя $\delta [k^2] = 0$ и выполняя варьирование, получим

$$2k^2 \int \psi \delta \psi \, dV - 2 \int \nabla \psi \cdot \delta (\nabla \psi) \, dV = 0.$$

Используя соотношение $\delta \nabla \psi = \nabla (\delta \psi)$ и теорему Грина, находим

$$\int \delta \psi (k^2 \psi + \nabla^2 \psi) \, dV - \int \frac{\partial \psi}{\partial n} \delta \psi \, dS = 0. \tag{9.4.25}$$

Если выполнено однородное условие Неймана, то $\partial\psi/\partial n = 0$ на S; если удовлетворяется однородное условие Дирихле, то $\delta\psi$ должно быть равно нулю на S; следовательно, при любом из этих условий интеграл по поверхности в (9.4.25) исчезает, и мы получаем, что ψ удовлетворяет скалярному уравнению Гельмгольца.

Возвращаясь к уравнению (9.4.24), мы непосредственно замечаем, что $[k^2]$ всегда $\geqslant 0$. Следовательно, если подставлять всевозможные функции сравнения, величина $[k^2]$ будет иметь абсолютный минимум. Функция сравнения, дающая этот минимум, является тогда точным решением, а величина $[k^2]$ в минимуме, k_0^2, — соответствующим собственным значением. Этот минимум будет больше нуля для однородных условий Дирихле и равен нулю для условий Неймана (функция ψ, равная постоянной и дающая $k^2 = 0$, допустима при условиях Неймана, но, очевидно, не удовлетворяет условиям Дирихле). Как было выяснено в гл. 6, волновые функции других резонансных частот все ортогональны к ψ_0, так же как и друг к другу. Можно поэтому получить вариационный принцип для k_1^2 — собственного значения, большего k_0^2, но меньшего k_n^2 $(n > 1)$, — если ограничиться функциями сравнения, ортогональными к ψ_0, т. е. удовлетворяющими условию

$$\int \psi\psi_0\, dV = 0.$$

Минимум выражения (9.4.24) для волновых функций сравнения, подчиненных этому условию, равен тогда k_1^2; соответствующая собственная функция есть ψ_1. Этот процесс можно продолжить для получения k_2^2 дальнейшим ограничением выбора функций сравнения, а именно подчинением их условию ортогональности как к ψ_0, так и к ψ_1. Ясно, что (см. т. I, стр. 685)

$$k_0^2 \leqslant k_1^2 \leqslant k_2^2 \leqslant \ldots .$$

Вариационный принцип (9.4.24) не будет иметь места для смешанных граничных условий

$$\frac{\partial\psi}{\partial n} + f\psi = 0$$

на S, так как тогда интеграл по поверхности в (9.4.25) не исчезает. Эту трудность можно легко преодолеть прибавлением такого члена к числителю уравнения (9.4.24), который уничтожает поверхностный интеграл после проведения варьирования. Этот член после варьирования должен давать $2\int f\psi\,\delta\psi\, dS$; следовательно,

$$[k^2] = \left\{ \int (\nabla\psi)^2\, dV + \int f\psi^2\, dS \right\} \Big/ \int \psi^2\, dV. \tag{9.4.26}$$

Тогда уравнение (9.4.25) заменяется уравнением

$$\int \delta\psi\,(k^2\psi + \nabla^2\psi)\, dV - \int \left(f\psi + \frac{\partial\psi}{\partial n}\right)\delta\psi\, dS = 0.$$

Поверхностный интеграл теперь исчезает в силу граничного условия которому удовлетворяет ψ, так что соотношение $\delta[k^2] = 0$ приводит к скалярному уравнению Гельмгольца для ψ.

Прежде чем оставить эту тему, необходимо показать, что после подстановки точного решения ψ формула (9.4.26) дает точное значение k^2. Это, конечно, есть следствие уравнения, которое получится из (9.4.26) после обычного применения теоремы Грина.

Вариационный принцип для уравнения Шредингера

$$\nabla^2\psi + [k^2 - U(r)]\,\psi = 0$$

совершенно аналогичен разобранному выше. Следует заметить, что хотя оператор в этом уравнении самосопряженный, граничные условия в общем случае не будут действительными, так что ψ — часто комплексная функция. Поэтому оператор вместе с граничными условиями уже не самосопряженный. *Тем не менее он* эрмитов, так что уравнение (9.4.6) применимо с $\varphi = \bar{\psi}$. Следовательно,

$$\delta [k^2] = \delta \left\{ \int \bar{\psi} (U - \nabla^2) \psi \, dV \Big/ \int |\psi|^2 \, dV \right\} = 0. \tag{9.4.27}$$

Интегралы в этом выражении, например нормирующий интеграл в знаменателе, будут конечны только для связанных состояний системы, для которых ψ стремится к нулю при неограниченно возрастающем r. В другой форме, которая может быть получена применением формулы Грина, $[k^2]$ определяется следующим образом:

$$[k^2] = \int (|\nabla\psi|^2 + U|\psi|^2) \, dV \Big/ \int |\psi|^2 \, dV. \tag{9.4.28}$$

Отсюда непосредственно видно, что если выбирать функции сравнения ψ так, чтобы интеграл от $U|\psi|^2$ был ограничен, то $[k^2]$ будет иметь абсолютный минимум. Соответствующее состояние системы называется *основным состоянием*. Мы можем опять получить первое состояние с бо́льшим k^2: первое *возбужденное состояние* получится, если рассматривать волновые функции сравнения, ортогональные к волновой функции основного состояния. Второе возбужденное состояние получится, если волновые функции сравнения ортогональны к волновым функциям основного и первого возбужденного состояния и т. д.

Колебания круглой мембраны. Мы разберем теперь детально пример применения вариационного принципа (9.4.24) для скалярного уравнения Гельмгольца. Задача о колебаниях закрепленной круглой мембраны выбрана из-за ее алгебраической простоты. Пусть радиус мембраны равен a. Граничное условие для ψ имеет вид $\psi(a) = 0$, а внутри границы мы предполагаем ψ непрерывной вместе с ее градиентом. Мы еще упростим наши рассмотрения, ограничившись изучением только состояний с круговой симметрией, так что ψ будет функцией только от r. С этим упрощением формула (9.4.24) приобретает вид

$$[k^2] = \int_0^a \left(\frac{d\psi}{dr}\right)^2 r \, dr \Big/ \int_0^a \psi^2 r \, dr.$$

Ясно, что удобно ввести безразмерную независимую переменную $x = r/a$. Тогда

$$[(ka)^2] = \int_0^1 \left(\frac{d\psi}{dx}\right)^2 x \, dx \Big/ \int_0^1 \psi^2 x \, dx. \tag{9.4.29}$$

Рассмотрим теперь возможные функции сравнения. Простейшим выражением, которое обращается в нуль при $x = 1$ и в то же время имеет непрерывный градиент при $x = 0$, является $1 - x^2$. (Функция $1 - x$ непригодна, так как она имеет производную -1 в начале координат, порождающую острие в этой точке.) Подставляя $1 - x^2$ в формулу (9.4.29), мы получаем $[(ka)^2] = 6$. Точное значение 5,7836, так что уже эта чрезвычайно грубая функция сравнения дает результат, довольно близкий к точному. Заметим, что приближенное значение больше точного.

Чтобы получить более точное приближение, мы должны улучшить функцию сравнения. Мы используем два различных подхода. В первом из них мы выбираем в качестве функции сравнения

$$\psi = A(1-x^2)+B(1-x^2)^2, \tag{9.4.30}$$

где A и B — вариационные параметры. Этот выбор основывается на том факте, что всякая функция, равная нулю при $x=1$ и имеющая нулевой наклон при $x=0$, может быть разложена по степеням $1-x^2$. Подставляя эту новую функцию сравнения в (9.4.29), получаем

$$\left[A^2\int_0^1 (1-x^2)^2 x\,dx + 2AB\int_0^1 (1-x^2)^3 x\,dx + B^2\int_0^1 (1-x^2)^4 x\,dx\right][k^2a^2] =$$
$$= A^2\int_0^1 \left[\frac{d(1-x^2)}{dx}\right]^2 x\,dx + 2AB\int_0^1 \frac{d(1-x^2)}{dx}\,\frac{d(1-x^2)^2}{dx}\,x\,dx +$$
$$+B^2\int_0^1\left[\frac{d(1-x^2)^2}{dx}\right]^2 x\,dx.$$

Продифференцируем теперь по A и B, полагая $\partial[k^2a^2]/\partial A$ и $\partial[k^2a^2]/\partial B$ равными нулю в соответствии с требованиями вариационного принципа [см. уравнение (9.4.4)]. Получим

$$\begin{gathered}
A\left\{[k^2a^2]\int_0^1 (1-x^2)^2 x\,dx - \int_0^1\left[\frac{d(1-x^2)}{dx}\right]^2 x\,dx\right\} + \\
+B\left\{[k^2a^2]\int_0^1 (1-x^2)^3 x\,dx - \int_0^1 \frac{d(1-x^2)}{dx}\,\frac{d(1-x^2)^2}{dx}\,x\,dx\right\} = 0, \\
A\left\{[k^2a^2]\int_0^1 (1-x^2)^3 x\,dx - \int_0^1 \frac{d(1-x^2)}{dx}\,\frac{d(1-x^2)^2}{dx}\,x\,dx\right\} + \\
+B\left\{[k^2a^2]\int_0^1 (1-x^2)^4 x\,dx - \int_0^1\left[\frac{d(1-x^2)^2}{dx}\right]^2 x\,dx\right\} = 0.
\end{gathered} \tag{9.4.31}$$

Это два линейных однородных уравнения для A и B, и они имеют ненулевое решение, только если определитель, составленный из коэффициентов при A и B, равен нулю. Этот определитель подобен тем, которые появляются в теории возмущений, когда неизвестная функция разлагается по неортогональной системе функций [см. уравнение (9.1.96)]. Мы увидим позже [см. уравнение (9.4.38) и далее], что это не случайно. Подставляя в определитель значения интегралов, получаем

$$\begin{vmatrix} \frac{1}{6}[k^2a^2]-1 & \frac{1}{8}[k^2a^2]-\frac{2}{3} \\ \frac{1}{8}[k^2a^2]-\frac{2}{3} & \frac{1}{10}[k^2a^2]-\frac{2}{3} \end{vmatrix} = 0. \tag{9.4.32}$$

Это квадратное уравнение для $[k^2a^2]$. Его меньший корень равен 5,7837, что очень близко к точной величине 5,7832. Отношение B/A в силу второго уравнения (9.4.31) равно

$$\frac{B}{A} = -\frac{\frac{2}{3}-\frac{1}{8}[k^2a^2]}{\frac{2}{3}-\frac{1}{10}[k^2a^2]} = 0{,}637.$$

Волновая функция ψ, согласно формуле (9.4.30), равна

$$\psi=(1-x^2)+0{,}637\,(1-x^2)^2. \qquad (9.4.33)$$

Сопоставление этого приближенного результата, первой функции сравнения $1-x^2$ и точного решения $J_0\,(2{,}4048x)$ даны в таблице ниже. Мы нормировали функцию ψ так, что она равна единице при $x=0$, умножением последнего выражения на 1/1,637. Заметим, что функция $1-x^2$ дает ошибку в некоторых областях до 30%; предсказываемое же ею собственное значение $k^2a^2=6$ имеет ошибку только в 3%.

Второй корень уравнения (9.4.32) также имеет значение. Здесь важно, что приближенная волновая функция, соответствующая этому второму корню, ортогональна волновой функции, определяемой первым корнем и выражаемой формулой (9.4.33).

Собственные функции для круглой мембраны

x	Точное	(9.4.33)	$1-x^2$
0,1	0,986	0,986	0,990
0,2	0,943	0,944	0,960
0,3	0,875	0,878	0,910
0,4	0,783	0,788	0,840
0,5	0,671	0,677	0,750
0,6	0,545	0,550	0,640
0,7	0,410	0,413	0,510
0,8	0,270	0,270	0,360
0,9	0,133	0,130	0,190
1,0	0	0	0

Поэтому из рассмотрения, следующего за формулой (9.4.28), мы видим, что этот второй корень и соответствующая ему функция сравнения приближают второе решение исходной задачи, если, конечно, опять ограничиться рассмотрением состояний с круговой симметрией. Первое решение с низшим собственным значением не имеет узловой линии; второе решение с ближайшим высшим собственным значением имеет одну узловую линию. Точное значение для этого второго собственного значения $k^2a^2=27{,}3$, в то время как второй корень уравнения (9.4.32) равен 36,9. Ошибка значительна и указывает на то, что для получения удовлетворительного результата следует ввести зависимость, более сложную, чем предусмотренная формулой (9.4.30). Высшие состояния обычно оказываются более сложными для вычисления по вариационному методу, так как их волновые функции быстро осциллируют.

Нелинейные вариационные параметры. Функция сравнения (9.4.30) линейна по своим вариационным параметрам. Параметры могут, конечно, входить и нелинейно; это будет, например, у следующей функции сравнения для круглой мембраны:

$$\psi=\cos\alpha-\cos\alpha x.$$

Здесь α — вариационный параметр, который нужно определить вариационным методом. Мы не будем доводить это вычисление до конца, так как уравнение для α довольно сложно. В этой задаче нет особой выгоды от введения нелинейных параметров, но во многих случаях очень полезно сделать это. Для иллюстрации рассмотрим уравнение Шредингера

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+(-\alpha^2+U_0e^{-x^2})\,\psi=0, \quad -\infty<x<+\infty.$$

Вариационный принцип гласит:

$$[\alpha^2]=-\int\left[\left(\frac{d\psi}{dx}\right)^2-U_0e^{-x^2}\psi^2\right]dx\Big/\int\psi^2dx.$$

Подставляя волновую функцию сравнения $e^{-\beta x^2/2}$, находим

$$[\alpha^2]=-\left[\frac{\beta}{2}-U_0\sqrt{\beta/(\beta+1)}\right].$$

Уравнение для определения β, $\partial[\alpha^2]/\partial\beta=0$, сводится к

$$\beta^{1/2}(\beta+1)^{3/2}=U_0.$$

Для этой величины β

$$[\alpha^2]=\beta\left(\beta+\frac{1}{2}\right).$$

Полученный результат очень прост; в этом случае нелинейная форма удобнее для вычислений, чем какая-либо линейная комбинация функций сравнения.

Метод Рэлея — Ритца. Вариационный метод дает результат, который для случая положительно определенного оператора всегда больше точного значения. Чтобы определить точность подсчета по вариационному методу, необходимо иметь систематический способ улучшения исходной функции сравнения. Метод введения дополнительных нелинейных параметров, конечно, несколько увеличивает точность, но не дает уверенности, что обязательно получится точное решение, так как неясно, что будут включены всевозможные функции со всеми видами симметрии и поведения. Другой способ, в котором обходится эта трудность, состоит в рассмотрении линейных комбинаций функций, образующих полную систему, причем коэффициенты этих комбинаций образуют множество линейных вариационных параметров. Например, в случае колебания круглой мембраны мы положим

$$\psi=\sum_{n=0}^{\infty}A_n(1-x^2)^n.$$

Для рассмотренного выше уравнения Шредингера удобно взять ψ в форме

$$\psi=\sum_{n=0}^{\infty}A_nx^ne^{-\beta x^2/2}.$$

Мы можем, конечно, предпочесть ортогональные системы. Во втором случае, например, легче разлагать по полиномам Эрмита:

$$\psi=\sum_{n=1}^{\infty}B_nH_n(\sqrt{\beta}x)\,e^{-\beta x^2/2}. \tag{9.4.34}$$

Эти функции сравнения приводят к бесконечной системе уравнений для коэффициентов A_n или B_n. Уравнения мы теперь найдем в явной форме. Пусть волновая функция сравнения имеет вид

$$\psi=\sum A_n\varphi_n. \tag{9.4.35}$$

Уравнение, которое нужно решить, — это общее уравнение (9.4.5) с самосопряженными $\mathscr{L}$ и $\mathscr{M}$. Применим вариационный принцип для λ в форме

$$\delta J=\delta\left\{\int\psi\mathscr{L}(\psi)\,dV-[\lambda]\int\psi\mathscr{M}(\psi)\,dV\right\}=0,\qquad \delta[\lambda]=0.$$

Подставляя волновую функцию сравнения (9.4.35), мы находим

$$J=\sum_{nm}A_nA_m\{L_{nm}-[\lambda]M_{nm}\}=0,$$

где

$$L_{nn}=\int\varphi_n\mathscr{L}(\varphi_m)\,dV,\quad M_{nm}=\int\varphi_n\mathscr{M}(\varphi_m)\,dV. \tag{9.4.36}$$

Если функции φ_n ортогональны по отношению к оператору $\mathscr{M}$, то M_{nm} отличны от нуля только при $n=m$. Вариационный метод требует, чтобы $\partial J/\partial A_i = 0$. Следовательно,

$$\sum_j A_j (L_{ji} - \lambda M_{ji}) = 0 \quad \text{для каждого } i. \tag{9.4.37}$$

Мы использовали самосопряженность операторов $\mathscr{L}$ и $\mathscr{M}$ и отбросили квадратные скобки вокруг λ, так как решение системы этих уравнений должно давать точное значение λ. Решение системы (9.4.37) существует только в том случае, когда определитель из коэффициентов при A_j равен нулю:

$$|L_{ji} - \lambda M_{ji}| = 0. \tag{9.4.38}$$

Уравнение (9.4.38) — это знакомое нам вековое уравнение, разобранное в § 9.1. Там предполагалось, что заранее имеется достаточно точное значение первого члена.

В вариационном методе первый член, так же как некоторые характерные параметры [например, параметр β в ряде (9.4.34)], определяются вариационно.

Решение векового уравнения (9.4.38) может быть проведено по методу, намеченному в § 9.1. Часто, однако, первый член φ_0 содержит достаточное число вариационных параметров, так что можно ожидать, что он весьма близок к точному решению. Дальнейший процесс, которому в общем случае надо следовать, состоит в точном решении векового уравнения для небольшого числа первых членов разложения (9.4.35), увеличении количества этих членов, повторном решении и т. д., причем вычисления прекращаются, если значение λ не изменяется при добавлении новых членов. Окончательное значение λ получается тогда экстраполяцией. Часто такой процесс диктуется, конечно, практическими соображениями. Ясно, что он является рискованным ввиду отсутствия каких-либо точных оснований для сходимости. В литературе имеется немало примеров кажущегося стремления к неверному пределу, вызванного, по-видимому, систематическим пропуском членов определенного вида. Поэтому важно дать точные оценки ошибки в вариационном методе, что мы сделаем позже в этом параграфе.

Приложения к теории возмущений. Используя волновые функции, полученные в теории возмущений в качестве волновых функций сравнения, можно глубже понять смысл этой теории. Пусть χ_m — нормированные собственные функции оператора $\mathscr{L}_0$, удовлетворяющие соотношениям

$$\mathscr{L}_0\chi_m = \lambda_m \mathscr{M}\chi_m, \quad \int \chi_n \mathscr{M}\chi_m dV = \delta_{nm}.$$

Тогда решение ψ задачи

$$\mathscr{L}\psi = \lambda\mathscr{M}\psi, \quad \mathscr{L} = \mathscr{L}_0 + \mathscr{L}_1,$$

с точностью до малых первого порядка равно

$$\psi = \chi_0 + \sum_{m\neq 0} \frac{L_{m0}^{(1)}}{\lambda - \lambda_m}\chi_m, \quad L_{m0}^{(1)} = \int \chi_m \mathscr{L}_1 \chi_0 dV.$$

Вариационный принцип (9.4.8) требует вычисления отношения

$$[\lambda] = \int \psi\mathscr{L}\psi\, dV \Big/ \int \psi\mathscr{M}\psi\, dV.$$

Если взять χ_0 в качестве функции сравнения, то мы получим

$$[\lambda] = \lambda_0 + L_{00}^{(1)}.$$

Это в точности совпадает с результатом теории возмущений в первом приближении. Для положительно определенного самосопряженного оператора $\mathscr{L}$ из вариационного принципа можно немедленно заключить, что

$$\lambda \leqslant \lambda_0 + L_{00}^{(1)}. \qquad (9.4.39)$$

Заметим также, что выражение первого порядка точности для λ было получено при помощи функции сравнения нулевого приближения. Это еще раз показывает относительную нечувствительность вариационного выражения для $[\lambda]$ к ошибкам в волновой функции.

Подставим теперь волновую функцию первого порядка точности. Тогда

$$[\lambda] = \frac{\lambda_0 + L_{00}^{(1)} + 2\sum\limits_m \frac{(L_{m0}^{(1)})^2}{\lambda - \lambda_m} + \sum\limits_m \frac{\lambda_m (L_{m0}^{(1)})^2}{(\lambda - \lambda_m)^2} + \sum\limits_{mn} \frac{L_{0n}^{(1)} L_{nm}^{(1)} L_{m0}^{(1)}}{(\lambda - \lambda_m)(\lambda - \lambda_n)}}{1 + \sum\limits_m \frac{(L_{m0}^{(1)})^2}{(\lambda - \lambda_m)^2}}.$$

Во всех суммах в этом выражении опущены члены, в которых хотя бы один из индексов m и n равен нулю. Вычисляя это отношение с точностью до третьего порядка относительно возмущения, мы получим

$$[\lambda] = \lambda_0 + L_{00}^{(1)} + \sum_{m \neq 0} \frac{(L_{m0}^{(1)})^2}{\lambda + L_{00}^{(1)} - \lambda_m} + \sum_{m, n \neq 0} \frac{L_{0n}^{(1)} L_{nm}^{(1)} L_{m0}^{(1)}}{(\lambda - \lambda_m)(\lambda - \lambda_n)}. \qquad (9.4.40)$$

Это как раз результат теории возмущений [уравнение (9.1.15)] третьего порядка точности. Заметим, что он был получен с помощью волновой функции всего лишь первого порядка точности. Если мы используем волновую функцию второго порядка точности, то результат получится пятого порядка точности и т. д. Таким образом, результат теории возмущений нечетного порядка может быть получен из вариационного принципа, и он должен поэтому давать величину, которая больше точного значения λ. Соответствующее определенное суждение для четного порядка высказать нельзя.

Интегральное уравнение и соответствующий вариационный принцип. Проиллюстрируем теперь вариационный принцип (9.4.13) и уравнение (9.4.9) для ψ, содержащее обратный оператор $\mathscr{L}^{-1}$. Рассмотрим снова скалярное уравнение Гельмгольца, которое мы перепишем в более удобной форме

$$\nabla^2\psi = -k^2\psi.$$

Рассмотрим ограниченную область, на границе которой для ψ поставлены однородные граничные условия. Интегральное уравнение для ψ можно сразу получить, используя функцию Грина $G_0(\mathbf{r} \mid \mathbf{r}_0)$:

$$\nabla^2 G_0(\mathbf{r} \mid \mathbf{r}_0) = -4\pi\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0).$$

Мы выберем функцию Грина, удовлетворяющую тем же граничным условиям, что и ψ. Тогда

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{k^2}{4\pi} \int G_0(\mathbf{r} \mid \mathbf{r}_0)\, \psi(\mathbf{r}_0)\, dv_0. \qquad (9.4.41)$$

Это интегральное уравнение, соответствующее уравнению (9.4.9). Обратный оператор $\mathscr{L}^{-1}$ есть $-\frac{1}{4\pi}\int G(\mathbf{r}\,|\,\mathbf{r}_0)$. Вариационный принцип (9.4.13) принимает вид

$$\delta\,[k^2]=\delta\left[\frac{\int \psi^2(\mathbf{r})\,dv}{\frac{1}{4\pi}\int\int \psi(\mathbf{r})\,G_0(\mathbf{r}\,|\,\mathbf{r}_0)\,\psi(\mathbf{r}_0)\,dv\,dv_0}\right]=0. \qquad (9.4.42)$$

Проверим теперь непосредственно, что этот вариационный принцип приводит к уравнению (9.4.41). Для этой цели проще рассматривать такую вариацию:

$$\delta\left\{\frac{[k^2]}{4\pi}\int\int \psi(\mathbf{r})\,G_0(\mathbf{r}\,|\,\mathbf{r}_0)\,\psi(\mathbf{r}_0)\,dv\,dv_0-\int \psi^2(\mathbf{r})\,dv\right\}=0.$$

Вспоминая, что $\delta[k^2]=0$, получаем

$$\frac{k^2}{4\pi}\int\int [\delta\psi(\mathbf{r})\,\psi(\mathbf{r}_0)+\psi(\mathbf{r})\,\delta\psi(\mathbf{r}_0)]\,G_0(\mathbf{r}\,|\,\mathbf{r}_0)\,dv\,dv_0-2\int \psi\,\delta\psi\,dv=0.$$

Чтобы получить общий множитель при $\delta\psi$, необходимо изменить порядок интегрирования для члена, содержащего $\delta\psi(\mathbf{r}_0)$. Для того чтобы это было возможно без появления дополнительных членов, необходимо, чтобы G_0 была симметричной функцией от $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r}_0$ и чтобы пределы интегрирования были одинаковы. В нашей задаче эти условия, конечно, выполнены так что

$$\int\int \psi(\mathbf{r})\,\delta\psi(\mathbf{r}_0)\,G_0(\mathbf{r}\,|\,\mathbf{r}_0)\,dv\,dv_0=\int\int \psi(\mathbf{r}_0)\,\delta\psi(\mathbf{r})\,G_0(\mathbf{r}\,|\,\mathbf{r}_0)\,dv\,dv_0.$$

Следовательно,

$$\int \delta\psi(\mathbf{r})\left[\frac{k^2}{4\pi}\int G_0(\mathbf{r}\,|\,\mathbf{r}_0)\,\psi(\mathbf{r}_0)\,dv_0-\psi(\mathbf{r})\right]dv=0.$$

Это уравнение приводит, конечно, к интегральному уравнению (9.4.41).

Вариационный принцип (9.4.42) применим также к уравнению Шредингера; в этом случае функция G_0 определяется уравнением

$$\nabla^2 G_0(\mathbf{r}\,|\,\mathbf{r}_0)-U(\mathbf{r})\,G_0(\mathbf{r}\,|\,\mathbf{r}_0)=-4\pi\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0).$$

Это уравнение используется не часто, так как отыскание G_0 в случае уравнения Шредингера очень затруднено. Чаще интегральное уравнение для уравнения Шредингера получается другим способом, при котором интенсивность потенциала рассматривается как параметр. Мы пишем поэтому потенциальную энергию в виде $-\lambda f(r)$, а уравнение Шредингера в виде

$$\nabla^2\psi-\alpha^2\psi=-\lambda f(r)\,\psi.$$

Соответствующим интегральным уравнением будет уравнение

$$\psi=\frac{\lambda}{4\pi}\int G_{i\alpha}(\mathbf{r}\,|\,\mathbf{r}_0)\,f(\mathbf{r}_0)\,\psi(\mathbf{r}_0)\,dv_0, \qquad (9.4.43)$$

где

$$\nabla^2 G_{i\alpha}-\alpha^2 G_{i\alpha}=-4\pi\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0). \qquad (9.4.44)$$

Во многих задачах требуется найти $G_{i\alpha}$, соответствующее бесконечной области; тогда

$$G_{i\alpha}(\mathbf{r}\,|\,\mathbf{r}_0)=\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|}\,e^{-\alpha\,|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|}.$$

Вариационный принцип для λ можно теперь получить из уравнения (9.4.13):

$$\delta[\lambda]=\delta\left[\frac{\int f(\mathbf{r})\,\psi^2\,dv}{\int\int \psi(\mathbf{r})\,f(\mathbf{r})\,G_{i\alpha}(\mathbf{r}\,|\,\mathbf{r}_0)\,f(\mathbf{r}_0)\,\psi(\mathbf{r}_0)\,dv\,dv_0}\right]=0. \qquad (9.4.45)$$

Заметим, что это введение $f(\mathbf{r})$ было необходимо для того, чтобы функция от $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r}_0$, которая стоит в знаменателе формулы (9.4.45) между $\psi(\mathbf{r})$ и $\psi(\mathbf{r}_0)$, была симметричной. Только тогда варьирование приводит к интегральному уравнению для ψ, что можно усмотреть из рассуждения, следующего за формулой (9.4.42).

Этот вариационный принцип исходит из известного значения α — уровня энергии системы — и дает значение λ — интенсивности потенциала, нужной для получения данного α. Такой вариационный принцип применим, в частности, если закон сил еще не известен, а уровни энергии известны из эксперимента. Если, с другой стороны, λ известно и нужно определить α, то уравнение (9.4.45) необходимо использовать для множества значений α, тогда как в скобки заключена известная величина λ. Соответствующее значение α получается при этом обратной интерполяцией.

Отметим важную практически особенность уравнения (9.4.45): в нем фигурируют только те значения $\psi(\mathbf{r})$, для которых $f(\mathbf{r})$ отлично от нуля. Правильная зависимость при очень больших значениях r обеспечивается функцией Грина.

Подобные вариационные принципы можно построить и для задач с возмущением граничных условий. Мы видели в § 9.2, как такая задача сводится к решению интегрального уравнения, в котором играют роль значения ψ (или ее нормальной производной, в зависимости от типа граничных условий) только на возмущенной поверхности. Вариационный принцип формулируется тогда для параметра, измеряющего величину возмущения (соответственно величине потенциала для случая уравнения Шредингера). Если желательно сформулировать вариационный принцип для k^2, то нужно использовать формулу (9.4.26). В § 12.3 мы разберем примеры применения этой техники, в которых более полно выясним физический смысл различных членов.

Пример. Мы еще раз рассмотрим колебания круглой мембраны и вычислим резонансную частоту низшего симметричного состояния. В этом случае ψ является функцией только от r. Ее можно подставить в уравнения (9.4.41) и (9.4.42), или можно обратиться прямо к обыкновенному дифференциальному уравнению для ψ. И тот и другой путь приводят к получению следующего интегрального уравнения и вариационного принципа, которые мы напишем, введя безразмерную переменную $x=\frac{r}{a}$:

$$\psi=\frac{(ka)^2}{4\pi}\int_0^1 G_0(x\,|\,x_0)\,\psi(x_0)\,x_0\,dx_0 \qquad (9.4.46)$$

и

$$\delta\left[(ka)^2\right]=\delta\left\{\int_0^1 \psi^2 x\,dx\Big/\int_0^1\int_0^1 \psi(x)\,x\,G_0(x\,|\,x_0)\,x_0\psi(x_0)\,dx\,dx_0\right\}=0. \qquad (9.4.47)$$

Здесь

$$G_0(x\,|\,x_0)=-4\pi\begin{cases}\ln x & \text{для } x\geqslant x_0,\\ \ln x_0 & \text{для } x\leqslant x_0.\end{cases}$$

Мы воспользуемся теперь той же самой функцией сравнения $1-x^2$, которая была применена раньше. Если ψ_1 — функция, получающаяся при подстановке $1-x^2$ в правую часть уравнения (9.4.46), то, опуская множитель, содержащий k^2, который (как и любой постоянный множитель) сократится при подстановке в вариационный принцип (9.4.47), получим

$$\psi_1=\frac{3}{16}-\frac{1}{4}x^2+\frac{1}{16}x^4.$$

Соответствующая величина $(ka)^2$ из (9.4.47) равна

$$[(ka)^2]=\int_0^1 \psi^2 x\,dx\Big/\int_0^1 \psi(x)\,\psi_1(x)\,x\,dx.$$

Подставляя ψ и ψ_1, мы находим, что $[(ka)^2]$ приблизительно равно 5,8182, в то время как точное значение 5,7832. Заметим, что это приближение значительно лучше, чем величина 6, полученная прямой подстановкой $1-x^2$ в формулу (9.4.29). Это достигается благодаря тому, что ψ_1 ближе к точной волновой функции, чем ψ, так как ψ_1 получается из ψ применением оператора Грина. Эта процедура, как мы видим, приводит к уменьшению ошибки в ψ и будет поэтому базисом вариационно-итерационного метода.

Вариационный принцип для сдвигов фаз. Вариационные принципы, разобранные до сих пор, соответствуют задачам, в которых уровни энергии образуют дискретный спектр. Мы имели дело либо с конечной областью, на границе которой волновая функция удовлетворяла граничным условиям, либо с бесконечной областью при условии, что волновая функция должна стремиться к нулю на бесконечности (более подробно об этом см. в § 12.3). Теперь мы обращаемся к задачам с непрерывным спектром собственных значений. Решения, удовлетворяющие соответствующим граничным условиям, существуют здесь для всех собственных значений из некоторого интервала. Волновые функции уже не будут интегрируемыми с квадратом, так что вариационные принципы, соответствующие связанным системам, здесь непосредственно не применимы.

В качестве первого примера изменений, которые необходимо ввести, рассмотрим вариационный принцип для сдвига фазы η_0. Радиальное дифференциальное уравнение, определяющее этот сдвиг, было рассмотрено раньше [уравнение (9.3.12)]:

$$\frac{d^2u}{dr^2}+[k^2-U(r)]\,u=0; \tag{9.4.48}$$

оно снова будет рассмотрено в § 12.3. Здесь мы рассмотрим только схему вариационной техники решения этого уравнения. Функция u удовлетворяет граничным условиям

$$u(0)=0,\quad u(r)\simeq\sin(kr-\eta)\ \text{при}\ r\to\infty.$$

Заметим, что интеграл от u^2 бесконечен. Если бы это было не так, то выражение

$$\int_0^\infty [(u')^2-(k^2-U)\,u^2]\,dr$$

привело бы после варьирования по u к уравнению (9.4.48). Чтобы обойти расходимость интеграла на бесконечности, мы рассмотрим разность между этим интегралом и некоторым интегралом, который расходится точно таким же образом на бесконечности. Рассмотрим поэтому функцию v — решение уравнения

$$\frac{d^2v}{dr^2}+k^2v=0,$$

удовлетворяющую граничным условиям

$$v(r) \simeq u(r) \text{ при } r \to \infty, \tag{9.4.49}$$

так что v с точностью до нормирующего множителя равно $\sin(kr-\eta)$.

Вариационный принцип для v, если вновь пренебречь указанной выше расходимостью, должен получаться из выражения

$$\int_0^\infty [(v')^2 - k^2v^2]\,dr.$$

Это выражение расходится точно так же, как соответствующий интеграл, содержащий u, так как u и v для больших r близки друг к другу.

Это подсказывает идею рассмотреть разность двух интегралов

$$J = \int_0^\infty [(u')^2 - (v')^2 - k^2(u^2 - v^2) + Uu^2]\,dr, \tag{9.4.50}$$

где варьирование выполняется независимо как по u, так и по v, подчиненным, однако, дополнительному условию (9.4.49). Интеграл J конечен. Используя уравнение для u и v, можно показать, что его величина для точных u и v равна

$$J = \int_0^\infty \frac{d}{dr}[uu' - vv']\,dr = v'(0)\,v(0),$$

так как $u \to 0$ при $r \to 0$ и $u \simeq v$ при $r \to \infty$. Вариацию интеграла J мы запишем следующим образом по причине, которая вскоре выяснится:

$$\delta J = \delta\left[\frac{v'(0)}{v(0)}v^2(0)\right] = v^2(0)\,\delta\left[\frac{v'(0)}{v(0)}\right] + 2v'(0)\,\delta[v(0)]. \tag{9.4.51}$$

Нетрудно показать, что условие

$$\delta\left[\frac{v'(0)}{v(0)}\right] = 0$$

приводит к правильным дифференциальным уравнениям для u и v.

Заметим прежде всего, что

$$\frac{v'(0)}{v(0)} = -k\operatorname{ctg}\eta,$$

так что вариационный принцип формулируется для $k\operatorname{ctg}\eta$. Мы вычислим сначала δJ из формулы (9.4.50), варьируя u и v и имея в виду соотношение (9.4.49) между ними:

$$\delta J = 2\int_0^\infty [\delta u(-u'' - k^2u + Uu) + \delta v(v'' + k^2v)]\,dr + 2\delta[v(0)]\,v'(0).$$

Подставляя выражение (9.4.51), получаем

$$v^2(0)\,\delta[k\operatorname{ctg}\eta] = 2\int_0^\infty [\delta u[u'' + k^2u - Uu] - \delta v(v'' + k^2v)]\,dr.$$

Из условия $\delta[k\operatorname{ctg}\eta] = 0$ мы непосредственно находим уравнения для u и v.

Мы выбрали эту специальную форму вывода для того, чтобы подчеркнуть независимость вариационного принципа для $k\operatorname{ctg}\eta$ от амплитуды v. Однако в приложениях удобнее выбирать $v(0) = 1$. Вариационный интеграл J равен $-k\operatorname{ctg}\eta$ для точных u и v и должен быть проварьирован при условиях (9.4.49) и $v(0)=1$. Окончательно

$$\delta[-k\operatorname{ctg}\eta]=0,$$

где

$$[-k\operatorname{ctg}\eta]=\int_0^\infty [(u')^2-(v')^2-k^2(u^2-v^2)+Uu^2]\,dr, \tag{9.4.52}$$

$$u(r)\simeq v(r) \text{ при } r\to\infty; \quad v(0)=1.$$

Как простое приложение этой формулы, мы получим производную по k^2 от $-k\operatorname{ctg}\eta$, вычисленную для некоторого частного значения k (например, k_0). Подставляем с этой целью решения, соответствующие $k=k_0$, в качестве волновых функций сравнения в вариационный принцип (9.4.52). Тогда зависимость $[-k\operatorname{ctg}\eta]$ от k^2 становится явной и мы можем вычислить производную:

$$\frac{d(-k\operatorname{ctg}\eta)}{d(k^2)}=\int_0^\infty (v_k^2-u_k^2)\,dr, \tag{9.4.53}$$

где u_k и v_k — функции u и v для волнового числа k. Если положить k равным нулю, то результат эквивалентен формуле (9.3.67), полученной методом теории возмущений.

Вариационный принцип (9.4.52) для сдвига фазы может быть использован почти таким же образом, как и соответствующий принцип (9.4.28) для k^2. Подставляя в (9.4.52) волновые функции сравнения для u и v, удовлетворяющие дополнительным условиям, определяем значения вариационных параметров, входящих в u и v, из требования стационарности вариационного интеграла. Заметим, что так как подинтегральная функция в (9.4.52) не дефинитна, то стационарное значение может быть максимумом, минимумом, а также точкой перегиба.

Функцию сравнения для v можно взять в виде $\sin(kr-\eta)/\sin(-\eta)$, где, однако, нужно рассматривать η как вариационный параметр или, как это часто делают, подставить как-нибудь угаданное значение η. Ясно, что было бы удобнее, если бы можно было найти такой вариационный принцип для $k\operatorname{ctg}\eta$, который не содержит явной зависимости от η, как теперь в v. Для того чтобы это сделать, введем разность v и u:

$$w=v-u, \quad v=-\frac{\sin(kr-\eta)}{\sin\eta}, \tag{9.4.54}$$

$$w\to 0 \text{ при } r\to\infty, \quad w(0)=1.$$

Дифференциальное уравнение для w имеет вид

$$w''+[k^2-U]\,w=-Uv. \tag{9.4.55}$$

Подставляя w в вариационный интеграл и используя свойства v, находим

$$AR^2+BR+C=0, \quad R=-k\operatorname{ctg}\eta,$$

$$A=\int_0^\infty \frac{U\sin^2(kr)}{k^2}\,dr,$$

$$B=1+\frac{2}{k}\int_0^\infty U\sin(kr)\cos(kr)\,dr-\frac{2}{k}\int_0^\infty Uw\sin(kr)\,dr, \tag{9.4.56}$$

$$C=\int_0^\infty [(w')^2-(k^2-U)\,w^2]\,dr+\int_0^\infty U[\cos^2(kr)-2w\cos(kr)]\,dr.$$

Мы решим теперь квадратное уравнение для R, выбирая корень, который ведет себя правильно в предельном случае очень малых U:

$$R = -\frac{B+\sqrt{B^2-4AC}}{2A}. \tag{9.4.57}$$

Это точное выражение для R, которое не годится, конечно, в качестве вариационного принципа для R. Тем не менее нам здесь повезло; мы сейчас покажем, что требование $\delta(R)=0$ для вариации w, подчиненной граничным условиям, указанным в (9.4.54), приводит к нужному дифференциальному уравнению (9.4.55) для w.

Обозначая правую часть уравнения (9.4.57) через $[R]$, мы находим, что

$$\delta[R] = 0 = \delta C + R\,\delta B, \tag{9.4.58}$$

где мы отбросили некоторые постоянные множители. Далее,

$$\delta B = -\frac{2}{k}\int_0^\infty \delta w\, U \sin(kr)\, dr,$$

$$\delta C = -2\int_0^\infty \delta w\, U \cos(kr)\, dr - 2\int_0^\infty \delta w\,(w'' + k^2 w - Uw)\, dr.$$

Подстановка этих выражений для δB и δC в уравнение (9.4.58) непосредственно приводит к правильному дифференциальному уравнению для w.

Вариационный принцип, основанный на формуле (9.4.57), часто легче использовать, чем принцип, основанный на формуле (9.4.50). Подставляют волновую функцию сравнения для w, равную единице в нуле и нулю в бесконечности, содержащую один или несколько вариационных параметров, таких, как γ в функции $e^{-\gamma r}$. Затем определяют значения параметров, для которых R стационарно, или прямым табулированием R, или полагая дифференциал R по этим параметрам равным нулю, смотря по тому, что удобнее.

Этот вариационный принцип дает борновское приближение (9.3.37), если использовать $w = \cos(kr)$ как волновую функцию сравнения, так как тогда $C=0$ и $B=1$. Соответствующее u есть $\sin(kr)$ — падающая волна. На самом деле $\cos(kr)$ не удовлетворяет нужным условиям на бесконечности, так что мы должны рассматривать этот результат, как полученный предельным переходом. Мы могли, например, использовать $e^{-\varepsilon r}\cos kr$ в качестве волновой функции сравнения и определить поведение R при ε, стремящемся к нулю.

Можно развить вариационные принципы описанного типа для высших сдвигов фаз η_l, $l \geqslant 1$, которые так же удобны и точны, как уравнение (9.4.57). Они сформулированы в задаче 9.8.

Вариационный принцип для сдвига фазы, основанный на интегральном уравнении. Интегральное уравнение для u_l выведено раньше [см. (9.3.34)]:

$$u_l = Akrj_l(kr) - \frac{1}{4\pi}\int_0^\infty G_k^{(l)}(r \mid r_0)\, U(r_0)\, u_l(r_0)\, dr_0. \tag{9.4.59}$$

Здесь A — постоянная, j_l — сферическая функция Бесселя [см. (5.3.67) и далее], $G_k^{(l)}$ определена в (9.3.33). Уравнение (9.4.59) — неоднородное интегральное уравнение, так что применим метод, приводящий к формуле (9.4.22). Тем не менее мы предпочтем прямой подход, чтобы выяснить физический смысл.

Метод состоит в замене уравнения (9.4.59) однородным уравнением, в котором сдвиг фазы η_l входит явным образом, а постоянная A исключена. Соотношение между A и η_l выводится исследованием уравнения (9.4.59) при больших значениях r. Следуя анализу, приводящему к формуле (9.3.36), мы приходим к точному соотношению

$$\operatorname{tg}\eta_l = \frac{1}{A}\int_0^\infty j_l(kr_0)\,U(r_0)\,u_l(r_0)\,r_0\,dr_0.$$

Исключая A из уравнения (9.4.59), мы получаем теперь однородное уравнение

$$u_l(r) = krj_l(kr)\operatorname{ctg}\eta_l\int_0^\infty j_l(kr_0)\,U(r_0)\,u_l(r_0)\,r_0\,dr_0 - \\ - \frac{1}{4\pi}\int_0^\infty G_k^{(l)}(r\,|\,r_0)\,U(r_0)\,u_l(r_0)\,dr_0. \quad (9.4.60)$$

Соответствующий вариационный интеграл имеет вид

$$[\operatorname{ctg}\eta_l] = k\,\frac{\int_0^\infty Uu_l^2\,dr + \frac{1}{4\pi}\int_0^\infty\int_0^\infty u_l(r)\,U(r)\,G_k^{(l)}(r\,|\,r_0)\,U(r_0)\,u_l(r_0)\,dr_0\,dr}{\left(\int_0^\infty krj_lUu_l\,dr\right)^2}. \quad (9.4.61)$$

Варьирование этого выражения приводит к написанному выше интегральному уравнению. Заметим, что так как $G_k^{(l)}$ — не дефинитная функция, то стационарное значение $[\operatorname{ctg}\eta_l]$ не обязательно будет максимумом или минимумом. Подставляя представление (9.3.33) вместо $G_k^{(l)}$, можем несколько упростить уравнение (9.4.61):

$$[\operatorname{ctg}\eta_l] = \frac{k\int_0^\infty Uu_l^2\,dr - 2\int_0^\infty krn_l(kr)\,U(r)\,u_l(r)\int_0^r kr_0j_l(kr_0)\,U(r_0)\,u_l(r_0)\,dr_0\,dr}{\left[\int_0^\infty krj_lUu_l\,dr\right]^2}. \quad (9.4.62)$$

Борновское приближение для η_l может быть немедленно получено подстановкой падающей волны $krj_l(kr)$ в качестве волновой функции сравнения и отбрасыванием второго члена в числителе, так как он более высокого порядка по U, чем первый. Часто очень существенное улучшение борновского приближения получается, если не отбрасывать второго члена:

$$[\operatorname{ctg}\eta_l] \simeq \operatorname{ctg}[\eta_l^B]\left[1 - 2\,\frac{\int_0^\infty krn_lU(krj_l)\int_0^r (kr_0j_l)^2\,U\,dr_0\,dr}{k\int_0^\infty U(krj_l)^2\,dr}\right]. \quad (9.4.63)$$

Здесь η_l^B — борновское приближение для сдвига фазы.

Мы не будем здесь приводить конкретных примеров использования этого вариационного принципа, так как он будет разобран детально в гл. 12. Как обычно, вместо u_l подставляются функции сравнения, содержащие вариационные параметры. Лучшие значения этих параметров те, для которых $[\operatorname{ctg}\eta_l]$ стационарен. Заметим, что играют роль только значения u_l внутри области, где U не равно нулю. Мы можем поэтому не заботиться о поведении u_l в остальных областях.

Вариационный принцип для амплитуды прохождения. Задача о прохождении и отражении волн для потенциального барьера исследуется почти таким же образом, как рассмотренная выше задача о сдвиге фазы. Есть, однако, одно важное различие, которое требует детального разбора. Уравнение имеет вид

$$\psi''+[k^2+U(x)]\psi=0,$$

где U предполагается имеющей наибольшее значение при малых $|x|$ и стремящейся к нулю при $|x|\to\infty$. Соответствующее интегральное уравнение для падающей волны амплитуды A, идущей из $-\infty$, запишется в виде

$$\psi=Ae^{ikx}+\frac{1}{4\pi}\int_{-\infty}^{\infty}G_k(x\,|\,x_0)\,U(x_0)\,\psi(x_0)\,dx_0. \qquad (9.4.64)$$

Мы преобразуем это неоднородное уравнение в однородное, выражая A через величину амплитуды прохождения f. Чтобы получить это соотношение, необходимо подставить явное выражение для G_k [см. формулу (9.3.29)]:

$$\psi=Ae^{ikx}+\frac{i}{2k}\int_{-\infty}^{\infty}e^{ik|x-x_0|}\,U(x_0)\,\psi(x_0)\,dx_0.$$

Для больших положительных значений x мы получаем проходящую волну:

$$\psi\simeq e^{ikx}\left[A+\frac{i}{2k}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-ikx_0}U(x_0)\,\psi(x_0)\,dx_0\right]\ \text{при}\ x\to\infty.$$

Следовательно, амплитуда волны, проходящей через потенциальный барьер U, рассчитанная на единицу амплитуды падающей волны, равна

$$f=1+\frac{i}{2kA}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-ikx_0}U(x_0)\,\psi(x_0)\,dx_0.$$

Подставив в (9.4.64) найденное отсюда значение A, получим однородное уравнение

$$\psi=\frac{i}{2k(f-1)}\,e^{ikx}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-ikx_0}\,U(x_0)\,\psi(x_0)\,dx_0+\frac{1}{4\pi}\int_{-\infty}^{\infty}G_k(x\,|\,x_0)\,U(x_0)\,\psi(x_0)\,dx_0. \qquad (9.4.65)$$

Из-за наличия комплексных величин мы вынуждены ввести сопряженную функцию $\tilde{\psi}$, свойства которой будут определены из вариационного принципа для f:

$$\frac{1}{f-1}=\frac{2k}{i}\,\frac{\int_{-\infty}^{\infty}\tilde{\psi}U\psi\,dx-\frac{1}{4\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\tilde{\psi}(x)\,U(x)\,G_k(x\,|\,x_0)\,U(x_0)\,\psi(x_0)\,dx_0\,dx}{\left(\int_{-\infty}^{\infty}\tilde{\psi}Ue^{ikx}\,dx\right)\left(\int_{-\infty}^{\infty}e^{-ikx}\,U\psi\,dx\right)}. \qquad (9.4.66)$$

Выполняя варьирование по $\tilde{\psi}$, получаем правильное уравнение для ψ. Уравнение для $\tilde{\psi}$ получается, если проварьировать это уравнение по ψ:

$$\tilde{\psi}=\frac{i}{2k(f-1)}e^{-ikx}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\tilde{\psi}Ue^{ikx}dx+\frac{1}{4\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\tilde{\psi}U(x_0)G_k(x\,|\,x_0)\,dx_0. \qquad (9.4.67)$$

Сравнивая с уравнением (9.4.65), мы видим, что $\tilde{\psi}$ является решением задачи, в которой падающая волна распространяется в отрицательном направлении. Падающая волна имеет вид e^{-ikx}, и когда x принимает большие отрицательные значения, мы находим только волны формы e^{-ikx}. Заметим также, что f является амплитудой прохождения для падающих волн, идущих через барьер в обоих направлениях. Это, конечно, частный случай принципа взаимности.

При использовании вариационного принципа (9.4.66) нужно вместо ψ подставить функцию сравнения, которую мы обозначим через ψ_k. Вместо $\tilde{\psi}$ нужно подставить функцию ψ_{-k}, которая представляет собой ту же функцию сравнения, только с переменой знака направления движения падающей волны. Далее можно применить обычный метод определения вариационных параметров. В качестве простого примера мы получаем борновское приближение, если подставить $\psi_k=e^{ikx}$ и $\psi_{-k}=e^{-ikx}$. Тогда

$$\left[\frac{1}{f-1}\right]\simeq\frac{\frac{2k}{i}}{\int\limits_{-\infty}^{\infty}U\,dx}\left\{1-\frac{\int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\infty}^{\infty}e^{-ikx}U(x)\,e^{ik\,|\,x-x_0}\,U(x_0)\,e^{ikx_0}\,dx_0\,dx}{\frac{2k}{i}\int\limits_{-\infty}^{\infty}U\,dx}\right\}. \qquad (9.4.68)$$

Вариационный принцип для трехмерных задач рассеяния. Процедура, рассмотренная выше, позволяет вывести вариационный принцип для амплитуды рассеяния. Мы начнем с уравнения Шредингера

$$\nabla^2\psi+(k^2-U)\,\psi=0,$$

где U велико только в области вблизи начала координат и стремится к нулю при $r\to\infty$. Соответствующее интегральное уравнение для плоской падающей волны имеет вид

$$\psi=Ae^{i\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{r}}-\frac{1}{4\pi}\int\frac{e^{ikR}}{R}U(\mathbf{r}_0)\,\psi(\mathbf{r}_0)\,dV_0,$$

где $R=|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|$, $\mathbf{k}_i$ — вектор, идущий в направлении распространения падающей волны, и k — величина вектора $\mathbf{k}_i$, $k=|\mathbf{k}_i|$. Исключением A это уравнение можно сделать однородным. Для больших расстояний от начала

$$\psi\simeq Ae^{i\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{r}}-\frac{e^{ikr}}{4\pi r}\int e^{-i\mathbf{k}_s\cdot\mathbf{r}_0}U(\mathbf{r}_0)\,\psi(\mathbf{r}_0)\,dV_0,$$

где $\mathbf{k}_s$ — вектор длины k, идущий в направлении наблюдения, т. е. в направлении рассеянной волны [см. также уравнение (12.3.68)]. Если амплитуду рассеянной волны записать в форме $-\frac{1}{4\pi}T(\mathbf{k}_s\,|\,\mathbf{k}_i)$, то

$$T(\mathbf{k}_s\,|\,\mathbf{k}_i)=\frac{1}{A}\int e^{-i\mathbf{k}_s\cdot\mathbf{r}_0}U(\mathbf{r}_0)\,\psi(\mathbf{r}_0)\,dV_0$$

и интегральное уравнение примет вид

$$\psi = \frac{1}{T(\mathbf{k}_s \mid \mathbf{k}_i)} e^{i\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{r}} \int e^{-i\mathbf{k}_s\cdot\mathbf{r}_0} U(\mathbf{r}_0)\,\psi(\mathbf{r}_0)\,dV_0 - \frac{1}{4\pi}\int \frac{e^{ikR}}{R} U(\mathbf{r}_0)\,\psi(\mathbf{r}_0)\,dV_0.$$

Соответствующий вариационный принцип для $T(\mathbf{k}_s \mid \mathbf{k}_i)$ основан на варьировании выражения

$$[T(\mathbf{k}_s \mid \mathbf{k}_i)] = \frac{\left[\int \tilde{\psi} U e^{i\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{r}} dV\right]\left[\int e^{-i\mathbf{k}_s\cdot\mathbf{r}} U\psi\,dV\right]}{\int \tilde{\psi} U\psi\,dV + \frac{1}{4\pi}\int\int \tilde{\psi}(\mathbf{r})\,U(\mathbf{r})\,\frac{e^{ikR}}{R}\,U(\mathbf{r}_0)\,\psi(\mathbf{r}_0)\,dV_0\,dV}, \qquad (9.4.69)$$

где $\tilde{\psi}$ — снова сопряженная к ψ функция. Варьируя $[T]$ по $\tilde{\psi}$, получим точное уравнение для ψ, тогда как варьируя $[T]$ по ψ, придем к аналогичному уравнению для $\tilde{\psi}$, в котором, однако, падающая плоская волна распространяется в направлении $-\mathbf{k}_s$. Если мы поэтому более явно введем в ψ направление падения при помощи обозначения $\psi(\mathbf{k}_i)$, то $\tilde{\psi} = \psi(-\mathbf{k}_s)$. Теорема взаимности

$$T(\mathbf{k}_s \mid \mathbf{k}_i) = T(-\mathbf{k}_i \mid -\mathbf{k}_s)$$

непосредственно вытекает из уравнения (9.4.69).

Приложения этого вариационного принципа будут подробно разобраны в § 12.3. Процедура снова включает выбор функций сравнения для $\psi(\mathbf{k}_i)$ и для соответствующей $\psi(-\mathbf{k}_s)$, подстановку их в уравнение (9.4.69) и варьирование. Мы здесь отметим только, что борновское приближение автоматически получится, если положить

$$\psi = \exp(i\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{r}) \quad \text{и} \quad \tilde{\psi} = \exp(-i\mathbf{k}_s\cdot\mathbf{r})$$

и отбросить второй член в знаменателе.

Мы могли бы также получить вариационный принцип для T, используя интегральное уравнение для T, выведенное в § 9.3 [см. уравнение (9.3.48)]. Это интегральное уравнение есть в точности преобразование Фурье интегрального уравнения для ψ, и соответствующий вариационный принцип может быть получен прямо из (9.4.69), если ввести преобразования Фурье встречающихся в этом уравнении функций.

Вариационные принципы для поверхностных возмущений. Вариационные принципы, развитые до сих пор в этом параграфе, касались объемных возмущений (применительно к уравнению Шредингера или к рассеянию волн при изменении показателя преломления). Теперь мы обращаемся к задачам, в которых или граница или граничные условия таковы, что обычные методы разделения переменных оказываются несостоятельными. Мы рассмотрим сперва вариационные принципы, основанные на дифференциальной форме, ограничившись для начала задачами, в которых возмущена граничная поверхность, а граничные условия остаются однородными условиями Неймана или Дирихле. Мы уже писали вариационный принцип для k^2, в котором варьируемой величиной является $[k^2]$:

$$[k^2] = \int (\nabla\psi)^2\,dV \Big/ \int \psi^2\,dV, \qquad (9.4.70)$$

причем мы особенно подробно останавливались на уравнении Гельмгольца. Наши замечания могут быть, однако, легко распространены и на более общий случай. Функции сравнения, которые можно подставлять в $[k^2]$, должны быть определенного типа, что можно видеть при образовании вариации $[k^2]$:

$$\int \delta\psi\,(\nabla^2\psi + k^2\psi)\,dV - \oint \frac{\partial\psi}{\partial n}\,\delta\psi\,dS = 0.$$

Мы замечаем, что если $\partial\psi/\partial n = 0$, то для ψ немедленно получается скалярное уравнение Гельмгольца. Для условий Дирихле оно получается, только если $\delta\psi = 0$ на S, т. е. если функции сравнения, подставляемые в $[k^2]$, совпадают на S. Это ограничение для более сложных граничных условий практически бывает трудно сформулировать. Мы поэтому придумаем такой вариационный принцип, в котором функции сравнения могут быть произвольными, как в случае условий Неймана. Это достигается тем, что к вариационному принципу (9.4.70) добавляется член, изменяющий поверхностный член так, что подинтегральная функция становится пропорциональной ψ, а не $\partial\psi/\partial n$. Легко проверить, что соответствующее выражение для $[k^2]$ имеет вид

$$[k^2] = \left\{ \int (\nabla\psi)^2\,dV - 2\oint \psi\frac{\partial\psi}{\partial n}\,dS \right\} \Big/ \int \psi^2\,dV. \tag{9.4.71}$$

Теперь в (9.4.71), так же как и в (9.4.70), мы можем подставить любую функцию сравнения. Уравнение (9.4.70) соответствует однородным условиям Неймана, а (9.4.71) применяется в случае условий Дирихле. Эти два уравнения приобретают более симметричную форму, если применить теорему Грина. Они принимают вид

$$[k^2] = \left\{ -\int \psi\nabla^2\psi\,dV + \oint \psi\,\frac{\partial\psi}{\partial n}\,dS \right\} \Big/ \int \psi^2\,dV \quad \text{(условия Неймана)} \tag{9.4.72}$$

и

$$[k^2] = \left\{ -\int \psi\nabla^2\psi\,dV - \oint \psi\,\frac{\partial\psi}{\partial n}\,dS \right\} \Big/ \int \psi^2\,dV \quad \text{(условия Дирихле).} \tag{9.4.73}$$

Эти выражения можно теперь употреблять в обычном вариационном способе, уже неоднократно описанном. Если, например, в одномерной задаче, в которой условия Дирихле удовлетворяются при $x = 0$ и $x = 1$, пробная волновая функция $\sin(\varkappa x)$ ($\varkappa$ — вариационный параметр) подставлена в (9.4.73) и полученное выражение продифференцировано по $\varkappa$, то наилучшие значения $\varkappa$ получаются при $\sin\varkappa$, равном нулю. Мы можем также получить пертурбационную формулу первого порядка, выведенную в § 9.2, используя нормализованные решения φ уравнения Гельмгольца в уравнениях (9.4.72) и (9.4.73):

$$k^2 \simeq k_0^2 + \oint \varphi\,\frac{\partial\varphi}{\partial n}\,dS \Big/ \int \varphi^2\,dV \simeq k_0^2 + \oint \varphi\,\frac{\partial\varphi}{\partial n}\,dS \quad \text{(условия Неймана),}$$

$$k^2 \simeq k_0^2 - \oint \varphi\,\frac{\partial\varphi}{\partial n}\,dS \quad \text{(условия Дирихле).}$$

В случае смешанных граничных условий, $(\partial\psi/\partial n) + f\psi = 0$, соответствующей варьируемой величиной, в которой функция сравнения произвольна, является

$$[k^2] = \left\{ \int (\nabla\psi)^2\,dV + 2\oint f\psi^2\,dS \right\} \Big/ \int \psi^2\,dV.$$

После варьирования это выражение дает

$$\int \delta\psi\,[\nabla^2\psi + k^2\psi]\,dV - \oint \delta\psi\left(\frac{\partial\psi}{\partial n} + f\psi\right)dS = 0.$$

В симметричной форме, аналогичной (9.4.72),

$$[k^2] = \left\{ -\int \psi \nabla^2 \psi \, dV + \oint f \psi^2 \, dS \right\} \Big/ \int \psi^2 \, dV. \tag{9.4.74}$$

Подставляя сюда невозмущенную пронормированную волновую функцию φ, получаем

$$[k^2] \simeq k_0^2 + \int f \varphi^2 \, dS.$$

Вариационный принцип, основанный на интегральном уравнении для граничных возмущений. Интегральные уравнения для ψ при различного рода граничных условиях были выведены в § 9.2 [см. уравнения (9.2.4), (9.2.16), (9.2.22) и (9.2.47)]. Простейшим случаем для настоящих рассмотрений является случай смешанного граничного условия. Проведем для иллюстрации одно из них. Уравнение имеет вид

$$\psi(S) = -\frac{1}{4\pi} \oint f(S_0)\, \psi(S_0)\, G_k(S \mid S_0)\, dS_0, \tag{9.4.75}$$

где G_k — функция Грина, удовлетворяющая однородным условиям Неймана. Параметр k слишком основательно спрятан в G_k и f, чтобы для него можно было получить явный вариационный принцип, исходя из уравнения (9.4.75). Удобнее принять k^2 за известную величину, а величину f использовать в качестве собственного значения. Чтобы сделать этот подход более явным, положим

$$f(S) = \mu F(S).$$

Тогда вариационный принцип для μ состоит в том, что вариация $[\mu]$ полагается равной нулю, где

$$[\mu] = -\frac{\oint \psi^2(S)\, F(S)\, dS}{\frac{1}{4\pi} \oint \oint \psi(S)\, F(S)\, G_k(S \mid S_0)\, F(S_0)\, \psi(S_0)\, dS\, dS_0}. \tag{9.4.76}$$

Для того чтобы сопряженная функция равнялась ψ, существенно, конечно, что G_k симметрична по S и S_0. Этот принцип дает μ как функцию от k, что соответствует акустической задаче о том, какое количество вещества данного вида необходимо для получения данного поглощения. Чтобы получить резонансную частоту и поглощение для данного распределения вещества, необходимо найти — путем интерполяции, например, — обратную функцию $k = k(\mu)$ из $\mu = \mu(k)$.

Интегральное уравнение для возмущений в граничной поверхности, скажем в случае, когда ψ удовлетворяет однородным условиям Неймана, имеет вид

$$\psi = -\frac{1}{4\pi} \oint \psi \frac{\partial G_k}{\partial n_0} \, dS_0. \tag{9.4.77}$$

Ядро $\partial G_k / \partial n_0$ не симметрично. Чтобы сделать его симметричным, возьмем от обеих частей равенства производную $\partial / \partial n$. Имеем

$$\oint \psi \frac{\partial^2 G_k}{\partial n \, \partial n_0} \, dS_0 = 0.$$

Отметим вновь [ср. уравнение (9.2.18) и далее], что $\partial^2 G_k / \partial n \, \partial n_0$ следует вычислять осторожно, не разрешая переменной $\mathbf{r}$ приближаться к поверхности S при вычислении производной по второй переменной. Это вычисление в соответствии с нашими прежними рассуждениями можно провести непосредственно, сделав подстановку

$$G_k \to \Gamma_k = G_k - G_0. \tag{9.4.78}$$

Интегральное уравнение принимает тогда вид

$$\oint \psi \frac{\partial^2 \Gamma_k}{\partial n\, \partial n_0} dS_0 = 0. \tag{9.4.79}$$

Величиной, вариация которой равна нулю, будет интеграл

$$J = \oint\oint \psi(S) \frac{\partial^2 \Gamma_k}{\partial n\, \partial n_0} \psi(S_0)\, dS_0\, dS. \tag{9.4.80}$$

При варьировании величина k^2 (или величина возмущения) остается произвольной. Вариационные параметры в функции сравнения выбираются так, чтобы $\delta J = 0$. Затем уравнение (9.4.79) решается относительно k^2. В более простых случаях, рассмотренных ранее, для k^2 можно получить явное решение, так что вариационный интеграл не зависит явно от k^2. К сожалению, это не имеет места в рассматриваемой задаче. Взамен необходимо совместно решать уравнения (9.4.79) и $\delta J = 0$. Мы не будем рассматривать случай условий Дирихле, так как интегральное уравнение (9.2.64) не отличается существенно от уравнения (9.4.79).

Рассеяние поверхностями. Можно разработать вариационный метод для рассеяния таким объектом, на котором ψ удовлетворяет однородным граничным условиям. Рассмотрим сначала условия Неймана. Тогда интегральное уравнение для ψ имеет вид

$$\psi = Ae^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} - \frac{1}{4\pi} \oint \frac{\partial}{\partial n_0} \left(\frac{e^{ikR}}{R} \right) \psi(S_0)\, dS_0,$$

где A — постоянная, $\mathbf{k}_i$ — вектор в направлении распространения падающей волны, имеющий длину k, и $R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|$, где $\mathbf{r}_0$ находится на рассеивающей поверхности. Мы можем сделать это уравнение однородным, выразив A через амплитуду рассеяния. Для больших r

$$\psi \simeq Ae^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} + \frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \oint i(\mathbf{n}_0 \cdot \mathbf{k}_s)\, \psi(S_0)\, e^{-i\mathbf{k}_s \cdot \mathbf{r}_0} dS_0,$$

где $\mathbf{k}_s$ — вектор длины k в направлении рассеяния. Амплитуда рассеяния f равна

$$f(\vartheta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} T(\mathbf{k}_s | \mathbf{k}_i) = +\frac{1}{4\pi A} \oint i(\mathbf{n}_0 \cdot \mathbf{k}_s)\, \psi(S_0)\, e^{-i\mathbf{k}_s \cdot \mathbf{r}_0} dS_0.$$

Решая это уравнение относительно A и подставляя результат в уравнение для ψ, получаем

$$\psi = -\frac{1}{T} e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} \oint i(\mathbf{n}_0 \cdot \mathbf{k}_s)\, \psi(S_0)\, e^{-i\mathbf{k}_s \cdot \mathbf{r}_0} dS_0 - \frac{1}{4\pi} \oint \frac{\partial}{\partial n_0} \left(\frac{e^{ikR}}{R} \right) \psi(S_0)\, dS_0. \tag{9.4.81}$$

Для образования вариационного принципа для ψ это уравнение неудобно, так как ядро интегрального уравнения не симметрично. Как и раньше, возьмем нормальную производную от обеих частей равенства (9.4.81) и вычислим ее значение на S. Тогда будем иметь

$$0 = \frac{1}{T} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{k}_i)\, e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} \oint (\mathbf{n}_0 \cdot \mathbf{k}_s)\, \psi(S_0)\, e^{-i\mathbf{k}_s \cdot \mathbf{r}_0} dS_0 - \\ - \frac{1}{4\pi} \oint \frac{\partial^2}{\partial n_0\, \partial n} \left(\frac{e^{ikR}}{R} \right) \psi(S_0)\, dS_0. \tag{9.4.82}$$

Мы снова отмечаем, что при вычислении $(\partial^2/\partial n\,\partial n_0)(e^{ikR}/R)$ сначала вычисляется нормальная производная, скажем, по $\mathbf{n}_0$ при $\mathbf{r}$, не лежащем на S, а затем берется производная по $\mathbf{n}$. Теперь можно получить вариационный принцип для T. Мы требуем, чтобы $\delta[T]=0$, где

$$[T]=\frac{\oint(\mathbf{n}\cdot\mathbf{k}_i)\tilde{\psi}e^{i\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{r}}dS\oint e^{-i\mathbf{k}_s\cdot\mathbf{r}_0}(\mathbf{n}_0\cdot\mathbf{k}_s)\psi(S_0)\,dS_0}{\frac{1}{4\pi}\oint\oint\tilde{\psi}(S)\frac{\partial^2}{\partial n\,\partial n_0}\left(\frac{e^{ikR}}{R}\right)\psi(S_0)\,dS_0\,dS}. \qquad (9.4.83)$$

Выполняя варьирование по ψ, мы получаем интегральное уравнение для $\tilde{\psi}$. Как и следовало ожидать,

$$\tilde{\psi}=\psi(-\mathbf{k}_s). \qquad (9.4.84)$$

Другими словами, сопряженное решение является решением первоначальной задачи, но только падающая на рассеиватель волна имеет направление $-\mathbf{k}_s$. Снова получается, что $T(\mathbf{k}_s\,|\,\mathbf{k}_i)=T(-\mathbf{k}_i\,|\,-\mathbf{k}_s)$.

Подобным же образом получается вариационный принцип для T, когда на поверхности рассеивателя удовлетворяются условия Дирихле. Мы находим, что $[T]$ выражается формулой

$$[T]=-\frac{\oint e^{-i\mathbf{k}_s\cdot\mathbf{r}_0}\frac{\partial\psi}{\partial n_0}dS_0\oint e^{i\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{r}}\frac{\partial\tilde{\psi}}{\partial n}dS}{\frac{1}{4\pi}\oint\oint\frac{\partial\tilde{\psi}}{\partial n}\frac{e^{ikR}}{R}\frac{\partial\psi}{\partial n_0}dS\,dS_0}. \qquad (9.4.85)$$

Здесь $\tilde{\psi}$ снова выражается формулой (9.4.84).

Мы замечаем, что оба вариационных принципа (9.4.83) и (9.4.85) содержат соответственно значения ψ и $\partial\psi/\partial n$ только на поверхности. Поэтому необходимо получить волновую функцию сравнения, которая бы приближала ψ или $\partial\psi/\partial n$ только на поверхности S. Примеры, содержащие эти вариационные принципы, так же как и весьма близкие к ним для диффракционных задач, разбираются в § 11.4.

Вариационный принцип для задач излучения. Физическая ситуация выражается здесь неоднородным граничным условием, в котором или нормальная производная от ψ или величина ψ задана на поверхности излучающей системы. Здесь мы рассмотрим пример, в котором ψ удовлетворяет уравнению Гельмгольца и задана нормальная производная ψ на поверхности S. В акустике это соответствует нормальной скорости сжатия, которая, конечно, синусоидальна по времени. Интегральное уравнение получается сразу. Мы будем исходить из общего соотношения

$$\psi=\frac{1}{4\pi}\oint\left[\frac{e^{ikR}}{R}\frac{\partial\psi}{\partial n_0}-\psi(S_0)\frac{\partial}{\partial n_0}\left(\frac{e^{ikR}}{R}\right)\right]dS_0.$$

Подставив заданное значение $\partial\psi/\partial n$, которое мы обозначим через $N(S)$, мы получим

$$\psi=\frac{1}{4\pi}\oint\left[\frac{e^{ikR}}{R}N-\psi(S_0)\frac{\partial}{\partial n_0}\left(\frac{e^{ikR}}{R}\right)\right]dS_0. \qquad (9.4.86)$$

Для простоты выберем N действительным. Чтобы получить интегральное уравнение с симметричным ядром, мы вычислим нормальную производную $\partial\psi/\partial n$, так что

$$-N(S)+\frac{1}{4\pi}\oint N(S_0)\frac{\partial}{\partial n}\left(\frac{e^{ikR}}{R}\right)dS_0=\oint\psi(S_0)\frac{\partial^2}{\partial n\,\partial n_0}\left(\frac{e^{ikR}}{R}\right)dS_0. \qquad (9.4.87)$$

Левая часть этого равенства является известной функцией, которую мы обозначим через φ, а уравнение (9.4.87) является, таким образом, неоднородным интегральным уравнением.

Функция φ противоположна по знаку разности между фактическим значением нормальной производной N и нормальной производной, вычисленной из первого приближения для ψ, полученного из уравнения (9.4.86), если отбросить второй член. Обозначая эту последнюю нормальную производную через $N^{(0)}$, мы имеем

$$\varphi = N^{(0)} - N. \tag{9.4.88}$$

Физически интересной величиной является излучаемая мощность, которая пропорциональна мнимой части интеграла $\oint \bar{\psi} N\, dS$, как указано в формулах (3.3.15) и (11.2.27). Однако для действительных N она пропорциональна также $\oint \psi N\, dS$. Действительной части $\oint \bar{\psi} N\, dS$ также можно дать интерпретацию, так как дробь $\psi/(\partial\psi/\partial n)$ пропорциональна акустическому импедансу. Следовательно, действительная часть выражения

$$\oint N\psi\, dS = \oint N^2 \frac{\psi}{\partial\psi/\partial n}\, dS$$

пропорциональна «реактивной» мощности, т. е. мощности, которая не покидает излучающую систему, навсегда уходя в бесконечность, а возвращается к излучателю, влияя тем самым на характер излучения.

Варьируемая величина J, которая должна быть стационарной, может быть найдена по общему методу для рассматриваемых неоднородных интегральных уравнений, как это показано в начале этого параграфа. Из уравнения (9.4.8) мы имеем

$$[J] = \frac{\left[\oint \psi\varphi\, dS\right]^2}{\frac{1}{4\pi} \oint\oint \psi(S) \frac{\partial^2 G_k}{\partial n\, \partial n_0} \psi(S_0)\, dS\, dS_0}. \tag{9.4.89}$$

Вариационный принцип состоит в том, что $\delta[J] = 0$. Теперь мы исследуем величину J для точного ψ. Из уравнений (9.4.87) и (9.4.88) имеем

$$J = \oint \psi\varphi\, dS; \quad J = \oint \psi (N^{(0)} - N)\, dS. \tag{9.4.90}$$

Мы можем преобразовать это выражение дальше, используя определение $N^{(0)}$:

$$\oint \psi N^{(0)}\, dS = \frac{1}{4\pi} \oint\oint \psi(S) \frac{\partial}{\partial n}\left(\frac{e^{ikR}}{R}\right) N(S_0)\, dS_0\, dS.$$

Применяя уравнение (9.4.86), имеем

$$\oint \psi N^{(0)}\, dS = \frac{1}{4\pi} \oint\oint N(S) \frac{e^{ikR}}{R} N(S_0)\, dS\, dS_0 - \oint \psi N\, dS.$$

Следовательно,

$$J = \frac{1}{4\pi} \oint\oint N(S) \frac{e^{ikR}}{R} N(S_0)\, dS\, dS_0 - 2 \oint \psi N\, dS. \tag{9.4.91}$$

Поэтому мы можем заключить, что формула (9.4.89) является основой вариационного принципа для $\oint \psi N\, dS$. Этот результат побуждает нас ввести подлежащую варьированию величину $[K]$, такую, что $K=\oint \psi N\,dS$:

$$[K]=-\frac{1}{2}\frac{\left[\oint \psi\varphi\,dS\right]^2}{\frac{1}{4\pi}\oint\oint \psi(S)\frac{\partial^2 G_k}{\partial n\,\partial n_0}\psi(S_0)\,dS\,dS_0}+ \tag{9.4.92}$$

$$+\frac{1}{8\pi}\oint\oint N(S)\frac{e^{ikR}}{R}N(S_0)\,dS\,dS_0,$$

где $\delta[K]=0$.

Вариационно-итерационный метод. Вариационные методы, описанные выше, не дают простого способа оценки точности получающихся результатов. Вообще, при их применении просто увеличивают гибкость волновой функции сравнения, вводя дополнительные вариационные параметры и наблюдая сходимость интересующей нас величины с изменением числа этих параметров. В принципе такой метод должен привлекать бесконечное число параметров, так как уверенность в ответе есть только тогда, когда используется вся полная система функций в качестве волновых функций сравнения в вариационных интегралах. Вариационно-итерационная техника, которую мы рассматривали в § 9.1 (стр. 29—34), не только обеспечивает оценку ошибки, давая как верхнюю, так и нижнюю грань варьируемой величины, но дает также и способ систематического улучшения волновых функций сравнения. Так как мы уже рассматривали эту технику, то здесь мы остановимся лишь на ее существенных особенностях и дадим доказательства некоторых теорем, которые были отложены, пока мы разбирали вариационные задачи.

Мы будем снова употреблять для описания результатов формальный операторный язык, ограничившись сначала положительно определенными самосопряженными операторами. Пусть

$$\mathscr{L}\psi=\lambda\mathscr{M}\psi. \tag{9.4.93}$$

Итерационный процесс состоит в следующем. Пусть φ_0 — исходная волновая функция сравнения. Ее можно получить одним из тех вариационных методов, которые были описаны в этом параграфе. Первой *итерацией* φ_1 будет

$$\varphi_1=\mathscr{L}^{-1}\mathscr{M}\varphi_0,$$

и вообще n-я итерация выражается через $(n-1)$-ю по формуле

$$\varphi_n=\mathscr{L}^{-1}\mathscr{M}\varphi_{n-1}. \tag{9.4.93'}$$

Мы предполагаем при этом, что $\mathscr{L}^{-1}\mathscr{M}$ — интегральный оператор, поскольку процесс интегрирования, зависящий от многих значений φ_{n-1}, вообще говоря, действует в сторону улучшения волновой функции, так что φ_n меньше отличается от ψ, чем φ_{n-1}. В более общих терминах, $\mathscr{L}$ и $\mathscr{M}$ должны быть такими, чтобы возможные значения λ были ограничены снизу и простирались до $+\infty$. Если бы мы были так неуклюжи в своих построениях, что появилось бы $1/\lambda$ вместо λ, то спектр должен был бы располагаться от нуля до некоторого максимального значения, и сходимость итерационного процесса была бы соответственно слабее.

Качественную картину итерационного процесса можно получить следующим образом. Пусть собственными функциями уравнения (9.4.93) будут χ_n и соответствующими собственными значениями будут λ_n:

$$\mathscr{L}\chi_n=\lambda_n\mathscr{M}\chi_n,\qquad \lambda_0\leqslant\lambda_1\leqslant\lambda_2\leqslant\ \ldots.$$

Эти функции образуют полную ортогональную систему, по которой мы можем разложить φ_0:

$$\varphi_0 = \sum_{p=0}^{\infty} a_p \chi_p.$$

Мы немедленно находим, что

$$\varphi_n = \sum_{p=0}^{\infty} \frac{a_p}{\lambda_p^n} \chi_p.$$

Теперь можно видеть, что последовательность φ_n сходится к χ_0, если λ_0 меньше чем λ_1. Сходимость тем лучше, чем больше отношение λ_1/λ_0. Если имеет место вырождение, т. е. $\lambda_0 = \lambda_1$, то тогда φ_n сходятся к линейной комбинации χ_0 и χ_1.

Различные итерации можно подставлять в два вариационных выражения для λ, данные в (9.4.8) и (9.4.13). При этом получаются следующие приближения для λ_0, если в качестве функции сравнения используется φ_n:

$$\lambda_0^{(n)} = \frac{\int \varphi_n \mathscr{L} \varphi_n \, dV}{\int \varphi_n \mathscr{M} \varphi_n \, dV} = \frac{\int \varphi_n \mathscr{M} \varphi_{n-1} dV}{\int \varphi_n \mathscr{M} \varphi_n \, dV}, \tag{9.4.94}$$

$$\lambda^{(n+1/2)} = \frac{\int \varphi_n \mathscr{M} \varphi_n \, dV}{\int \varphi_n \mathscr{M} \mathscr{L}^{-1} \mathscr{M} \varphi_n dV} = \frac{\int \varphi_n \mathscr{M} \varphi_n \, dV}{\int \varphi_n \mathscr{M} \varphi_{n+1} dV}. \tag{9.4.95}$$

Причины особого выбора верхнего индекса для λ_0 в (9.4.95) вскоре станут ясны.

Ввиду формы выражений (9.4.94) и (9.4.95) удобно ввести символ $[n, m]$:

$$[n, m] = \int \varphi_n \mathscr{M} \varphi_m \, dV. \tag{9.4.96}$$

Величины $\lambda_0^{(n)}$ и $\lambda_0^{(n+1/2)}$ можно выразить через эти матричные элементы:

$$\lambda_0^{(n)} = \frac{[n, n-1]}{[n, n]}; \quad \lambda_0^{(n+1/2)} = \frac{[n, n]}{[n, n+1]}. \tag{9.4.97}$$

Отметим, между прочим, что

$$[n, m] = [m, n] = [n-s, m+s], \tag{9.4.98}$$

где s целое.

Мы можем теперь показать, что $\lambda_0^{(a)}$, включая как целые, так и полуцелые значения a, образуют монотонную последовательность уменьшающихся величин, приближающихся к точному собственному значению λ_0 сверху, т. е.

$$\lambda_0^{(n)} \geqslant \lambda_0^{(n+1/2)} \geqslant \lambda_0^{(n+1)} \geqslant \ldots \geqslant \lambda_0, \tag{9.4.99}$$

$$\left.\begin{matrix} \lambda_0^{(n)} \\ \lambda_0^{(n+1/2)} \end{matrix}\right\} \xrightarrow[n\to\infty]{} \lambda_0, \text{ если } \int \chi_0 \mathscr{M} \varphi_0 \, dV \neq 0. \tag{9.4.100}$$

Условие в (9.4.100) включено для того, чтобы обеспечить наличие составляющей по χ_0 в первоначальной функции сравнения. Если этого нет, то последовательность $\lambda_0^{(n)}$ будет сходиться к λ_1 — второму собственному значению уравнения (9.4.93). Неравенства (9.4.99) следуют из неравенства Шварца (1.6.31), которое можно получить из положительной определенности $\mathscr{L}$ и $\mathscr{M}$. Мы имеем

$$\left(\int \psi\mathscr{M}\chi\, dV\right)^2 \leqslant \left(\int \psi\mathscr{M}\psi\, dV\right)\left(\int \chi\mathscr{M}\chi\, dV\right)$$

и аналогичное неравенство, если здесь заменить $\mathscr{M}$ на $\mathscr{L}$. Функции ψ и χ произвольны. Если мы возьмем φ_n за ψ и φ_{n-1} за χ, то неравенство Шварца ввиду положительной определенности $\mathscr{M}$ приводит к неравенству

$$\lambda_0^{(n-1/2)} \geqslant \lambda_0^{(n)}. \tag{9.4.101}$$

Аналогично, на основании положительной определенности $\mathscr{L}$ неравенство Шварца дает

$$\lambda_0^{(n-1)} \geqslant \lambda_0^{(n-1/2)}.$$

Комбинация этих двух неравенств немедленно приводит к (9.4.99).

Соотношение (9.4.100) мы докажем *от противного*. Отметим, что это доказательство не вытекает непосредственно из вариационного принципа, пока не доказана полнота системы φ_n. Итак, предположим, что последовательность $\lambda_0^{(a)}$ ограничена снизу величиной ν, не равной λ_0 и (на основании вариационного принципа) большей, чем λ_0. Покажем теперь, что это предположение противоречит поставленному требованию, чтобы

$$\int \chi_0\mathscr{M}\varphi_0\, dV \neq 0.$$

Рассмотрим функцию

$$f = \sum_{n=0}^{\infty} (\lambda_0)^n \varphi_{n+1}. \tag{9.4.101'}$$

Этот ряд сходится в среднем, если $\nu > \lambda_0$. Это следует из ограниченности $\int f\mathscr{M}f\, dV$:

$$\left[\int f\mathscr{M}f\, dV\right]^{1/2} = \left[\int \left(\sum_n (\lambda_0)^n \varphi_{n+1}\right)\mathscr{M}\left(\sum_p (\lambda_0)^p \varphi_{p+1}\right) dV\right]^{1/2} \leqslant$$
$$\leqslant \sum_n (\lambda_0)^n [n+1,\ n+1]^{1/2}.$$

Это неравенство является частным случаем неравенства Бесселя (1.6.32). Согласно критерию сходимости Даламбера, этот последний ряд сходится, если

$$\frac{(\lambda_0)^{n+1}[n+2,\ n+2]^{1/2}}{(\lambda_0)^n[n+1,\ n+1]^{1/2}} < 1 \quad \text{при } n \to \infty,$$

или

$$\frac{\lambda_0^2}{\lambda_0^{(n+3/2)}\lambda_0^{(n+2)}} < 1 \quad \text{при } n \to \infty.$$

Ввиду нашей гипотезы это условие имеет место, так как $\lambda_0^{(n+3/2)}$ и $\lambda_0^{(n+2)}$ оба больше числа ν, которое в свою очередь больше λ_0. Следовательно. ряд (9.4.101') сходится в среднем.

Ввиду сходимости ряда можно теперь вычислить

$$(\mathscr{L} - \lambda_0\mathscr{M}) f = \mathscr{M}\varphi_0$$

при помощи перегруппировки членов ряда. Мы видим, что

$$\int \chi_0\mathscr{M}\varphi_0\, dV = \int \chi_0 (\mathscr{L} - \lambda_0\mathscr{M}) f\, dV = 0,$$

что противоречит условию в (9.4.100). Следовательно, предположение, что ν отличается от λ_0, неверно, поэтому $\lambda_0^{(a)}$ приближается к λ_0 сверху и имеет λ_0 своим пределом; это указывает на то, что в принципе (т. е. если можно осуществить все интегрирования и если взять достаточно итераций) вариационно-итерационный метод даст достаточно точный ответ.

Нашей ближайшей задачей будет оценка скорости сходимости и определение нижней границы для λ_0, которая совместно с верхними границами, даваемыми членами последовательности $\lambda_0^{(a)}$, указывает ошибку в методе, так как λ_0 должно лежать между верхней и нижней границами. Нам уже известно, что сходимость улучшается при уменьшении отношения λ_0/λ_1. Более точная количественная оценка будет следовать из рассмотрения неравенства

$$\int [\varphi (1 - \mathcal{M}\mathcal{L}^{-1}\lambda_1)\, \mathcal{M}\, (1 - \mathcal{L}^{-1}\mathcal{M}\lambda_0)\, \varphi]\, dV \geqslant 0, \tag{9.4.102}$$

где φ произвольно. Это неравенство, как мы сейчас покажем, является следствием вариационного принципа. Заметим, что оператор

$$1 - \lambda_0 \mathcal{L}^{-1}\mathcal{M}$$

положительно определен, так как неравенство

$$\int \varphi \mathcal{M}\, (1 - \lambda_0 \mathcal{L}^{-1}\mathcal{M})\, \varphi\, dV \geqslant 0$$

вытекает из вариационного принципа для λ_0,

$$\lambda_0 \leqslant \int \varphi\mathcal{M}\varphi\, dV \Big/ \int \varphi\mathcal{M}\mathcal{L}^{-1}\mathcal{M}\varphi\, dV$$

Мы можем поэтому ввести несингулярный оператор, равный квадратному корню из $(1 - \lambda_0\mathcal{L}^{-1}\mathcal{M})$. Отметим, кроме того, что функция $\sqrt{1 - \lambda_0\mathcal{L}^{-1}\mathcal{M}}\,\varphi$ ортогональна к функции χ_0 и годится поэтому в качестве функции сравнения в вариационном принципе для λ_1. Следовательно,

$$\lambda_1 \leqslant \frac{\int (\sqrt{1-\lambda_0\mathcal{L}^{-1}\mathcal{M}}\,\varphi)\, \mathcal{M}\, (\sqrt{1-\lambda_0\mathcal{L}^{-1}\mathcal{M}}\,\varphi)\, dV}{\int (\sqrt{1-\lambda_0\mathcal{L}^{-1}\mathcal{M}}\,\varphi)\mathcal{M}\mathcal{L}^{-1}\mathcal{M}\, (\sqrt{1-\lambda_0\mathcal{L}^{-1}\mathcal{M}}\,\varphi)\, dV}\,.$$

Мы можем существенно упростить как числитель, так и знаменатель этого отношения. Проиллюстрируем это на числителе, который ввиду самосопряженности $\mathcal{L}$ и $\mathcal{M}$ можно записать в виде

$$\int \varphi \left[\sqrt{1 - \lambda_0\mathcal{M}\mathcal{L}^{-1}}\, \mathcal{M}\, \sqrt{1 - \lambda_0\mathcal{L}^{-1}\mathcal{M}}\right] \varphi\, dV.$$

Кроме того,

$$\sqrt{1 - \lambda_0\mathcal{M}\mathcal{L}^{-1}}\, \mathcal{M} = \mathcal{M}\sqrt{1 - \lambda_0\mathcal{L}^{-1}\mathcal{M}}\,. \tag{9.4.103}$$

Это легко показать, если обе части равенства разложить в степенной ряд; например, общий член разложения в степенной ряд левой части можно записать так:

$$(\mathcal{M}\mathcal{L}^{-1})^n \mathcal{M} = \mathcal{M}\mathcal{L}^{-1}\mathcal{M}\mathcal{L}^{-1} \;\ldots\; \mathcal{M}\mathcal{L}^{-1}\mathcal{M} =$$
$$= \mathcal{M}\, (\mathcal{L}^{-1}\mathcal{M}\mathcal{L}^{-1}\mathcal{M} \;\ldots) = \mathcal{M}\, (\mathcal{L}^{-1}\mathcal{M})^n.$$

Подстановка (9.4.103) в числитель дает

$$\int \varphi\mathcal{M}\, (1 - \lambda_0\mathcal{L}^{-1}\mathcal{M})\, \varphi\, dV,$$

и тогда неравенство для λ_1 принимает вид

$$\lambda_1 \leqslant \frac{\int \varphi \mathcal{M} (1 - \lambda_0 \mathcal{L}^{-1} \mathcal{M}) \varphi \, dV}{\int \varphi \mathcal{M} \mathcal{L}^{-1} \mathcal{M} (1 - \lambda_0 \mathcal{L}^{-1} \mathcal{M}) \varphi \, dV};$$

последнее неравенство совпадает с (9.4.102).

Несколько более простое и соблазнительное доказательство, содержащее, однако, бесконечный процесс, получается, если подставить вместо φ его разложение по членам полной ортогональной системы χ_m, которую мы в соответствии с нашими целями пронормируем следующим образом:

$$\int \chi_n \mathcal{M} \chi_m \, dV = \delta_{nm}.$$

Если

$$\varphi = \sum_{p=0}^{\infty} C_p \chi_p,$$

то

$$\int [\varphi (1 - \mathcal{M} \mathcal{L}^{-1} \lambda_1) \mathcal{M} (1 - \mathcal{L}^{-1} \mathcal{M} \lambda_0) \varphi] \, dV = \sum C_p^2 \left(1 - \frac{\lambda_1}{\lambda_p}\right)\left(1 - \frac{\lambda_0}{\lambda_p}\right),$$

что, очевидно, больше нуля.

Если мы подставим теперь в неравенство (9.4.102) φ_n вместо φ и используем определение (9.4.96), мы найдем, что

$$[n, n] - (\lambda_1 + \lambda_0)[n+1, n] + \lambda_0 \lambda_1 [n+1, n+1] \geqslant 0,$$

или, разделив на $[n+1, n+1]$, что

$$\lambda_0^{(n+1/2)} \lambda_0^{(n+1)} - (\lambda_1 + \lambda_0) \lambda_0^{(n+1)} + \lambda_0 \lambda_1 \geqslant 0. \qquad (9.4.104)$$

Такое же неравенство, только с увеличенными на 1/2 всеми верхними индексами, следует из неравенства

$$\int [\varphi (1 - \mathcal{M} \mathcal{L}^{-1} \lambda_1) \mathcal{M} \mathcal{L}^{-1} \mathcal{M} (1 - \lambda_0 \mathcal{L}^{-1} \mathcal{M}) \varphi] \, dV \geqslant 0. \qquad (9.4.105)$$

В этом можно убедиться почти таким же путем, как в случае неравенства (9.4.102). Например, выражение для интеграла через коэффициенты разложения φ по χ_p будет таким:

$$\sum_p \frac{C_p^2}{\lambda_p} \left(1 - \frac{\lambda_1}{\lambda_p}\right)\left(1 - \frac{\lambda_0}{\lambda_p}\right) \geqslant 0.$$

Мы используем неравенство (9.4.104) сначала для получения оценки скорости сходимости, так как члены в неравенстве можно сгруппировать следующим образом:

$$\lambda_0^{(n+1)} [\lambda_0^{(n+1/2)} - \lambda_0] - \lambda_1 [\lambda_0^{(n+1)} - \lambda_0] \geqslant 0,$$

или

$$\frac{\lambda_0^{(n+1)} - \lambda_0}{\lambda_0^{(n+1/2)} - \lambda_0} \leqslant \frac{\lambda_0^{(n+1)}}{\lambda_1} \simeq \frac{\lambda_0}{\lambda_1}. \qquad (9.4.106)$$

Это неравенство прямо показывает, что $\lambda_0^{(n+1)}$ ближе к λ_0, чем $\lambda_0^{(n+1/2)}$, причем отношение их расстояний до λ_0 меньше величины $\lambda_0^{(n+1)}/\lambda_1$, которая для достаточно больших n близка к λ_0/λ_1. Поэтому отношение λ_0/λ_1 является верхней гранью скорости сходимости, к которой эта скорость приближается с увеличением n. Это можно видеть прямо из разложения в ряд φ_n и, наконец, $\lambda_0^{(n)}$. Если λ_1 существенно больше λ_0, то сходимость очень быстрая. Она плохая в случае, близком к вырождению, когда $\lambda_0 \simeq \lambda_1$. В этом случае для того, чтобы сделать процесс более эффективным, применяется следующая специальная техника (она применима, даже когда $\lambda_0 \ll \lambda_1$, так как дает метод экстраполяции на точное значение).

Экстраполяционный метод. Предположим, что итерации продвинуты так далеко, что φ_n является линейной комбинацией собственных функций χ_0 и χ_1, так что дальнейшие итерации должны привести просто к постепенному исключению χ_1. Это, конечно, медленный процесс, если $\lambda_0 \simeq \lambda_1$. Положив тогда

$$\varphi_n = \chi_0 + b\chi_1,$$

мы можем вычислить последовательные итерации

$$\varphi_{n+1} = (\chi_0/\lambda_0) + b(\chi_1/\lambda_1), \quad \varphi_{n+2} = (\chi_0/\lambda_0^2) + b(\chi_1/\lambda_1^2).$$

Из этих волновых функций мы можем получить величины $\lambda_0^{(n+1/2)}$, $\lambda_0^{(n+1)}$ и $\lambda_0^{(n+3/2)}$, которые мы теперь запишем в предположении, что $b^2 \ll 1$:

$$\lambda_0^{(n+1/2)} \simeq \lambda_0 + b^2\lambda_0[1-(\lambda_0/\lambda_1)],$$

$$\lambda_0^{(n+1)} \simeq \lambda_0 + b^2\lambda_0[1-(\lambda_0/\lambda_1)](\lambda_0/\lambda_1),$$

$$\lambda_0^{(n+3/2)} \simeq \lambda_0 + b^2\lambda_0[1-(\lambda_0/\lambda_1)](\lambda_0/\lambda_1)^2.$$

Эти формулы явным образом показывают, что сходимость $\lambda_0^{(a)}$ к λ_0 определяется отношением λ_0/λ_1. Заметим также, что три написанных выше равенства можно рассматривать как три уравнения с тремя неизвестными λ_0, $b^2\lambda_0[1-(\lambda_0/\lambda_1)]$ и λ_0/λ_1, так что из них можно найти λ_0. Так как это замечание относится к любой величине, которая является отношением двух билинейных функций от ψ, то мы сможем записать результат этой экстраполяции довольно общим образом.

Пусть $F^{(0)}$, $F^{(1)}$ и $F^{(2)}$ — члены последовательности, сходящейся к величине F, которая получается, как и λ_0, методом итераций. Например, $F^{(0)} = \lambda_0^{(n+1/2)}$, $F^{(1)} = \lambda_0^{(n+1)}$, $F^{(2)} = \lambda_0^{(n+3/2)}$. Следуя сказанному выше и считая, что итерации на стадии $F^{(0)}$ достаточно далеко продвинуты, мы можем предположить, что

$$F^{(0)} = F + f, \quad F^{(1)} = F + \varepsilon f, \quad F^{(2)} = F + \varepsilon^2 f,$$

где f — ошибка на стадии $F^{(0)}$, а ε — параметр, определяющий скорость сходимости. — есть λ_0/λ_1. Отсюда можно найти F:

$$F = F^{(0)} - \{[F^{(0)} - F^{(1)}]^2/[F^{(0)} - 2F^{(1)} + F^{(2)}]\}. \tag{9.4.107}$$

Если имеются два множества чисел $F^{(n)}$ и $G^{(n)}$, зависящих от ε одинаковым образом, то можно получить ε из одной последовательности и использовать для экстраполяции другой, так что

$$F = F^{(0)} - \{[F^{(0)} - F^{(1)}][G^{(0)} - G^{(1)}]/[G^{(0)} - 2G^{(1)} + G^{(2)}]\} \tag{9.4.108}$$

с

$$\varepsilon = [G^{(2)} - G^{(1)}]/[G^{(1)} - G^{(0)}]. \tag{9.4.109}$$

Как мы увидим дальше на примере, экстраполяционный метод обладает замечательной точностью.

Этот метод можно также использовать для экстраполяции φ_n на χ_0. Здесь, однако, за $F^{(0)}$, $F^{(1)}$ и $F^{(2)}$ следует принять φ_n, $\lambda_0\varphi_{n+1}$ и $\lambda_0^2\varphi_{n+2}$, где λ_0 можно получить по экстраполяционному методу.

Нижние границы для λ_0. Неравенство (9.4.104) можно также использовать для получения нижней границы величины λ_0. Сгруппируем члены следующим образом:

$$\lambda_0 [\lambda_1 - \lambda_0^{(n+1)}] - \lambda_0^{(n+1)} [\lambda_1 - \lambda_0^{(n+1/2)}] \geqslant 0.$$

Если итерации продвинуты достаточно далеко, так что

$$\lambda_1 > \lambda_0^{(n+1)},$$

то

$$\lambda_0^{(n+1)} \geqslant \lambda_0 \geqslant \lambda_0^{(n+1)} \left[1 - \frac{\lambda_0^{(n+1/2)} - \lambda_0^{(n+1)}}{\lambda_1 - \lambda_0^{(n+1)}} \right]. \tag{9.4.110}$$

Мы снова замечаем, что это неравенство остается в силе, если всюду заменить n на $n+1/2$. Можно поэтому заключить, что λ_0 лежит между двумя числами, причем точность этого ограничения зависит от близости между ними, т. е. от малости отношения $[\lambda_0^{(n+1/2)} - \lambda_0^{(n+1)}]/[\lambda_1 - \lambda_0^{(n+1)}]$. Мы еще должны найти путь для оценки λ_1, но, прежде чем перейти к этому, отметим, что существует много неравенств, аналогичных (9.4.104), и что поэтому можно вывести, кроме (9.4.110), много других оценок снизу для λ_0. Какая из них дает лучшее приближение, зависит от конкретных обстоятельств, возникающих из частных свойств величин $\lambda_0^{(a)}$. Оценку снизу можно, например, получить из неравенства

$$\int \varphi [1 - \lambda_1^2 (\mathscr{M}\mathscr{L}^{-1})^2] \mathscr{M} [1 - \lambda_0 \mathscr{L}^{-1}\mathscr{M}] \varphi dV \geqslant 0 \tag{9.4.111}$$

Доказательство почти такое же, как для неравенства (9.4.102). Подставляя в (9.4.111) φ_n вместо φ, имеем

$$[n, n] - \lambda_0 [n+1, n] - \lambda_1^2 [n+1, n+1] + \lambda_0 \lambda_1^2 [n+1, n+2] \geqslant 0,$$

или

$$\lambda_0^{(n+1/2)} \lambda_0^{(n+1)} - \lambda_0 \lambda_0^{(n+1)} - \lambda_1^2 + [\lambda_0 \lambda_1^2 / \lambda_0^{(n+3/2)}] \geqslant 0.$$

Отсюда вытекает оценка снизу, если $\lambda_1^2 > \lambda_0^{(n+1)} \lambda_0^{(n+3/2)}$:

$$\lambda_0 \geqslant \lambda_0^{(n+3/2)} \left\{ 1 - \frac{\lambda_0^{(n+1)} [\lambda_0^{(n+1/2)} - \lambda_0^{(n+3/2)}]}{\lambda_1^2 - \lambda_0^{(n+3/2)} \lambda_0^{(n+1)}} \right\}. \tag{9.4.112}$$

Для пользования этой формулой необходимо знать величины трех последовательных приближений λ_0, в то время как нижняя граница (9.4.110) требует знания только двух приближений.

Обратимся теперь к задаче об оценке λ_1. Важно заметить, что оценивающая величина должна быть меньше или равна λ_1, но больше $\lambda_0^{(n+1)}$. При обычном способе применяется следующее соотношение:

$$\mathrm{Spur}\, (\mathscr{L}^{-1}\mathscr{M})^2 = \sum_m \int \chi_m \mathscr{M} (\mathscr{L}^{-1}\mathscr{M})^2 \chi_m \, dV = \sum_m \frac{1}{\lambda_m^2}. \tag{9.4.113}$$

Это соотношение имеет ценность, потому что нередко след можно вычислить непосредственно, как мы увидим на примере, который вскоре рассмотрим (см. также § 12.3). Из формулы (9.4.113) вытекает, что

$$\mathrm{Spur}\, (\mathscr{L}^{-1}\mathscr{M})^2 - \frac{1}{\lambda_0^2} = \frac{1}{\lambda_1^2} + \sum_{m=2}^{\infty} \frac{1}{\lambda_m^2}.$$

Поэтому

$$\lambda_1^2 > 1/[\mathrm{Spur}\,(\mathscr{L}^{-1}\mathscr{M})^2-(1/\lambda_0^2)] > 1/[\mathrm{Spur}\,(\mathscr{L}^{-1}\mathscr{M})^2-(1/\lambda_0^{(n+1)})^2]. \quad (9.4.114)$$

Следовательно, правую часть этого неравенства можно использовать в качестве λ_1 или в соотношении (9.4.110) или в (9.4.112). Мы можем, конечно, употреблять следы более высоких степеней $\mathscr{L}^{-1}\mathscr{M}$, причем сходимость будет лучше, но зато их значительно труднее вычислять. Мы должны использовать след по крайней мере второй степени, потому что след $\mathscr{L}^{-1}\mathscr{M}$ бесконечен и для двух и для трех измерений.

Другие методы получения грубых оценок для λ_1 (подчеркиваем: *грубых*) используют какие-нибудь особенности задачи. Можно, например, использовать экспериментальные данные. Ниже мы рассмотрим другие аналитические методы получения нижних границ, которые требуют меньше или даже вовсе не требуют данных, касающихся λ_1.

Первый из них, который мы рассмотрим, начинается с изучения величины

$$[\beta^2] = \int [(\mathscr{M}^{-1}\mathscr{L}-\alpha)\,\varphi]\,\mathscr{M}\,[(\mathscr{M}^{-1}\mathscr{L}-\alpha)\,\varphi]\,dV \Big/ \int \varphi\mathscr{M}\varphi\,dV,$$

где α — произвольный параметр. Величина $[\beta^2]$ положительна. Найдем ее минимальное значение для данного α, полагая $\delta[\beta^2]=0$. Мы находим, что φ, для которого β^2 стационарна, удовлетворяет уравнению

$$(\mathscr{M}^{-1}\mathscr{L}-\alpha)^2\,\varphi=\beta^2\varphi, \text{ или } (\mathscr{M}^{-1}\mathscr{L}-\alpha-\beta)(\mathscr{M}^{-1}\mathscr{L}-\alpha+\beta)\,\varphi=0.$$

Мы видим, что β^2 равно $(\lambda_n-\alpha)^2$ для тех φ, для которых β^2 стационарна. Для того чтобы наименьшее из этих стационарных значений получалось при $\lambda_n=\lambda_0$, мы требуем, чтобы

$$\lambda_0 \leqslant \alpha \leqslant \frac{1}{2}(\lambda_0+\lambda_1), \quad (9.4.115)$$

и тогда наименьшее значение β^2 будет равно $(\alpha-\lambda_0)^2$. Следовательно, для α, удовлетворяющего неравенствам (9.4.115),

$$(\alpha-\lambda_0)^2 \leqslant \int [(\mathscr{M}^{-1}\mathscr{L}-\alpha)\,\varphi]\,\mathscr{M}\,[(\mathscr{M}^{-1}\mathscr{L}-\alpha)\,\varphi]\,dV \Big/ \int \varphi\mathscr{M}\varphi\,dV.$$

Если мы положим φ равным φ_{n+1}, это неравенство примет вид

$$(\alpha-\lambda_0)^2 \leqslant \alpha^2-2\alpha\lambda_0^{(n+1)}+\lambda_0^{(n+1/2)}\lambda_0^{(n+1)}, \quad (9.4.116)$$

или

$$\lambda_0 \geqslant \alpha-\sqrt{\alpha^2-2\alpha\lambda_0^{(n+1)}+\lambda_0^{(n+1)}\lambda_0^{(n+1/2)}},$$

или же

$$\lambda_0 \geqslant \lambda_0^{(n+1)}-\left[\sqrt{(\alpha-\lambda_0^{(n+1)})^2+\lambda_0^{(n+1)}(\lambda_0^{(n+1/2)}-\lambda_0^{(n+1)})}-(\alpha-\lambda_0^{(n+1)})\right]. \quad (9.4.117)$$

Неравенство (9.4.116) и нижняя граница (9.4.117) являются обобщениям неравенств (9.4.104) и (9.4.110), в чем можно убедиться, подставив $\alpha=(\lambda_0+\lambda_1)/2$ в (9.4.116). Кроме того, так как нижняя граница (9.4.117) является монотонно возрастающей функцией от α, то наилучшая оценка нижней границы получается при значении $\alpha=(\lambda_0+\lambda_1)/2$, которое в соответствии с (9.4.115) является для α максимальным значением. Следовательно, нижняя граница (9.4.110) является наилучшей нижней границей.

которую можно получить с помощью только что проведенного анализа. Его основное значение состоит в отсутствии явной зависимости от λ_1. Нам необходимо только грубо знать положение λ_1, чтобы быть уверенными, что выполняется неравенство (9.4.115).

Прежде чем перейти к следующему виду нижней границы, который довольно сильно отличается по своей природе от рассмотренного выше, следует указать на другую трудность при использовании нижних границ, данных выше в неравенствах (9.4.110) и (9.4.117). Она состоит в необходимости вычислять $\mathscr{L}^{-1}\mathscr{M}\varphi_n$. Не всегда легко получить оператор, обратный к $\mathscr{L}$, и поэтому важно показать, что нет необходимости делать это, если только не требуется получить более точную оценку для λ_0.

Однако имеется возможность заменить задачу отыскания $\mathscr{L}^{-1}$ на задачу отыскания $\mathscr{M}^{-1}$. Эта последняя часто значительно проще, так как $\mathscr{M}$ часто бывает константой или функцией координат, а не дифференциальным оператором. Процедура состоит в следующем. Предположим, что мы нашли (вариационным или другим методом) оценку для χ_0. Назовем эту оценку φ_{n+1}. Как вытекает из (9.4.93′), φ_{n+1} и φ_n связаны следующим соотношением:

$$\mathscr{L}\varphi_{n+1}=\mathscr{M}\varphi_n.$$

Теперь можно выразить $\lambda_0^{(n+1/2)}$ и $\lambda_0^{(n+1)}$ через φ_{n+1} и операторы $\mathscr{L}$ и $\mathscr{M}$, избежав появления $\mathscr{L}^{-1}$:

$$\lambda_0^{(n+1/2)}=\frac{[n,n]}{[n,n+1]}=\frac{\int \varphi_n\mathscr{M}\varphi_n\,dV}{\int \varphi_n\mathscr{M}\varphi_{n+1}\,dV}=\frac{\int \varphi_{n+1}\mathscr{L}\mathscr{M}^{-1}\mathscr{L}\varphi_{n+1}\,dV}{\int \varphi_{n+1}\mathscr{L}\varphi_{n+1}\,dV},\tag{9.4.118}$$

$$\lambda_0^{(n+1)}=\frac{[n+1,n]}{[n+1,n+1]}=\frac{\int \varphi_{n+1}\mathscr{L}\varphi_{n+1}\,dV}{\int \varphi_{n+1}\mathscr{M}\varphi_{n+1}\,dV}.\tag{9.4.119}$$

В этих выражениях, как было указано, появляется только известная функция φ_{n+1}. Частная форма нижней границы, указанная в (9.4.117), вместе с равенствами (9.4.118) и (9.4.119) может быть использована для получения нижней границы энергии атома гелия в основном состоянии.

Метод сравнения для нижних границ. Несколько иной метод получения нижних границ основывается на теоремах сравнения, вполне аналогичных теоремам, употребляемым в штурмовской теории дифференциальных уравнений (см. § 6.3). Физический смысл этого метода очень простой. Пусть нужно решить уравнение Шредингера с потенциалом $-U(x)$. Мы будем сравнивать собственные значения этой задачи с собственными значениями, которые можно вычислить точно и для которых потенциал $-U'(x)$ всюду больше U, как показано на рис. 9.20, где мы изобразили два возможных потенциала сравнения $U_1'(x)$ и $U_2'(x)$. Из физических соображений ясно, что энергия основного состояния как для U_1', так и для U_2' будет ниже, чем для $U(x)$, и является поэтому нижней границей для последнего случая.

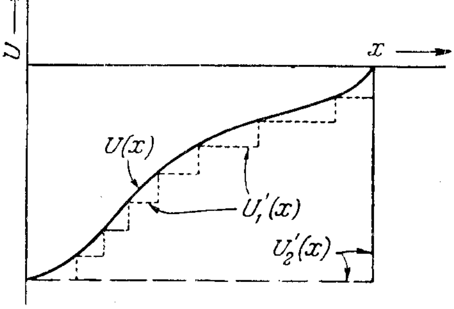

Рис. 9.20. Потенциальная функция $U(x)$ и сравниваемые с ней функции U_1' и U_2', удовлетворяющие условию $U_2'\leqslant U_1'\leqslant U(x)$ для всех x.

Сформулируем теперь этот принцип сравнения в более точной форме. Пусть

$$\mathscr{L}\chi = \lambda\mathscr{M}\chi \text{ и } \mathscr{L}\varphi = \lambda'\mathscr{M}'\varphi,$$

где

$$\int \psi\mathscr{M}'\psi\, dV \geqslant \int \psi\mathscr{M}\psi\, dV \tag{9.4.120}$$

для любого ψ. Мы хотим получить нижнюю границу для λ_0, первого собственного значения «нештрихованной» задачи, с собственной функцией χ_0. Из вариационного принципа для λ'_0 имеем

$$\lambda'_0 \leqslant \int \chi_0\mathscr{L}\chi_0\, dV \Big/ \int \chi\mathscr{M}'\chi_0\, dV,$$

или

$$\lambda'_0 \leqslant \lambda_0 \int \chi_0\mathscr{M}\chi_0\, dV \Big/ \int \chi_0\mathscr{M}'\chi_0\, dV.$$

Из неравенства (9.4.120)

$$\lambda_0 \geqslant \lambda'_0. \tag{9.4.121}$$

Общая пригодность этого метода получения нижних границ зависит от возможности точно сформулировать разрешимую задачу, удовлетворяющую неравенству (9.4.120). Чем ближе задача сравнения к исходной задаче, тем ближе значение нижней границы к λ_0. На рис. 9.20 мы показали два возможных потенциала сравнения для одномерного уравнения Шредингера. Аналогичные возможности имеются и в трехмерных задачах. Для уравнения Шредингера в задаче о многих частицах можно получить задачи сравнения, отбросив взаимодействие между частицами, если они отталкиваются, или заменив его осцилляторным потенциалом, если они притягиваются. Применяя такой способ, можно также получить следующие грубые границы для λ_0:

$$\min(\mathscr{M}\varphi_{n-1}/\mathscr{M}\varphi_n) < \lambda_0 < \max(\mathscr{M}\varphi_{n-1}/\mathscr{M}\varphi_n), \tag{9.4.122}$$

где под min и max мы понимаем наименьшее и наибольшее значения отношения этих функций.

Обозначим минимальное значение отношения $\mathscr{L}\varphi_n/\mathscr{M}\varphi_n$ через $\underline{\lambda}$, а максимальное через $\overline{\lambda}$. Тогда φ_n должно удовлетворять вариационному принципу $\delta[\underline{\lambda}] = 0$ и $\delta[\overline{\lambda}] = 0$, где

$$[\underline{\lambda}] = \int \varphi\mathscr{L}\varphi\, dV \Big/ \int \varphi f\mathscr{M}\varphi\, dV, \quad [\overline{\lambda}] = \int \varphi\mathscr{L}\varphi\, dV \Big/ \int \varphi g\mathscr{M}\varphi\, dV$$

и предполагается, что f и g — положительные функции, которые везде обязательно больше и соответственно меньше единицы. Они соответственно равны $\mathscr{L}\varphi_n/\underline{\lambda}\mathscr{M}\varphi_n$ и $\mathscr{L}\varphi_n/\overline{\lambda}\mathscr{M}\varphi_n$.

Так как f больше единицы, то если χ_0 использовать в качестве пробной волновой функции, немедленно получается, что

$$\underline{\lambda} \leqslant \int \chi_0\mathscr{L}\chi_0\, dV \Big/ \int \chi_0 f\mathscr{M}\chi_0\, dV \leqslant \int \chi_0\mathscr{L}\chi_0\, dV \Big/ \int \chi_0\mathscr{M}\chi_0\, dV = \lambda_0.$$

Это доказывает теорему, так как $\mathscr{L}\varphi_n/\mathscr{M}\varphi_n$ равно как раз $\mathscr{M}\varphi_{n-1}/\mathscr{M}\varphi_n$.

Вторая часть неравенства (9.4.122), относящаяся к $\overline{\lambda}$, может быть доказана на основании вариационного принципа для λ_0:

$$\lambda_0 \leqslant \int \varphi_n\mathscr{L}\varphi_n\, dV \Big/ \int \varphi_n\mathscr{M}\varphi_n\, dV \leqslant \int \varphi_n\mathscr{L}\varphi_n\, dV \Big/ \int \varphi_n g\mathscr{M}\varphi_n\, dV = \overline{\lambda}.$$

Заметим, что эта теорема, как доказано, имеет место только, когда $\mathcal{M}\varphi_{n-1}/\mathcal{M}\varphi_n$ является положительной функцией. Это почти всегда случай колебаний наинизшего тона, которые вообще не имеют узлов.

Аналогичный вид нижней границы собственного значения можно получить для задач, содержащих возмущение границ. Например, можно ожидать, что резонансная частота для круглой области, изображенной на рис. 9.21, будет больше, чем соответствующая частота для описанной области. Это замечание можно уточнить для условий Дирихле, используя вариационный принцип (9.4.70). Пусть собственным значением, которое соответствует вписанной области, будет k^2, а соответствующей волновой функцией ψ. Собственным значением для описанной области пусть будет $(k')^2$. Тогда в вариационный принцип для $(k')^2$ мы подставим в качестве пробной функции функцию ψ, полагая ее равной нулю в области между двумя границами. Теперь из равенства (9.4.70) немедленно следует, что

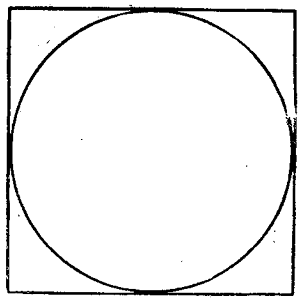

Рис. 9.21. Сравнение резонансных частот для двух различных границ.

$$(k')^2 \leqslant \int (\nabla\psi)^2 dV \Big/ \int \psi^2 dV = k^2,$$

или

$$k^2 \geqslant (k')^2. \tag{9.4.123}$$

Можно было бы добавить, что так как само k^2 должно быть меньше, чем соответствующая величина для области, содержащейся внутри первоначальной границы, то для области, имеющей объем (площадь), одинаковый с объемом исходной области, k^2 будет довольно близким к точному значению. Например, если граничная окружность имеет радиус a, то длина стороны равновеликого квадрата будет равна $a\sqrt{\pi}$. Величина k^2 для состояния с такой же симметрией, как круговая симметрия для круглой области, равна

$$k^2 = 2\left(\pi/\sqrt{\pi}a\right)^2, \quad \text{или} \quad (ka)^2 = 2\pi,$$

что является неплохим приближением к точному значению, равному 5,7832.

Пример. Прежде чем продолжать применение вариационно-итерационного метода к задачам другого типа, разберем поясняющий пример. Рассмотрим еще раз колебания круглой мембраны радиуса a, снова касаясь подробно колебаний наинизшего состояния с круговой симметрией. Соответствующее дифференциальное уравнение имеет вид

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{x}\frac{d\psi}{dx} + \lambda\psi = 0,$$

где $x = kr$ и $\lambda = (ka)^2$. Положительно определенными операторами $\mathcal{L}$ и $\mathcal{M}$ являются операторы

$$\mathcal{L} = -\left(x\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d}{dx}\right) \quad \text{и} \quad \mathcal{M} = x,$$

а оператор $\mathcal{L}^{-1}\mathcal{M}$ равен

$$\mathcal{L}^{-1}\mathcal{M} = \frac{1}{4\pi}\int G_k(x \mid x_0)\, x_0,$$

как это можно видеть из интегрального уравнения (9.4.46). Функция Грина написана после уравнения (9.4.47). Мы полагаем $\varphi_0 = 1 - x^2$ и итерируем, получая

$$\varphi_0 = 1 - x^2,$$
$$\varphi_1 = \frac{1}{16}(3 - 4x^2 + x^4),$$
$$\varphi_2 = [1/(16 \cdot 576)](19 - 27x^2 + 9x^4 - x^6).$$

Элементы $[n, m]$ можно теперь быстро подсчитать и получить следующие значения $\lambda_0^{(a)}$:

$$\lambda_0^{(0)} = 6; \quad \lambda_0^{(1/2)} = 5{,}818182; \quad \lambda_0^{(1)} = 5{,}789474; \quad \lambda_0^{(3/2)} = 5{,}784355. \quad (9.4.124)$$

Сравнивая их с точным значением 5,783186, мы видим, что $\lambda_0^{(3/2)}$ имеет ошибку всего около 1/5000. Конечно, на практике мы при оценке ошибки должны полагаться на нижнюю границу (9.4.110). Нам нужна для этого нижняя граница для λ_1, которую можно получить из формулы (9.1.114). След $(\mathcal{L}^{-1}\mathcal{M})^2$ выражается интегралом

$$\mathrm{Spur}\,(\mathcal{L}^{-1}\mathcal{M})^2 = \int_0^1 \int_0^1 G_k(x_0 \mid x)\, x\, G_k(x \mid x_0)\, x_0\, dx_0\, dx = \frac{1}{32}.$$

Следовательно, λ_1 больше 27,2126. В действительности λ_1 равно 30,4713. Подставляя эту нижнюю границу для λ_1 в нижнюю границу (9.4.110), мы получаем

$$5{,}782972 < \lambda_0 < 5{,}784355.$$

Мы можем улучшить этот результат, используя экстраполяционный метод согласно формуле (9.4.107). Это дает величину 5,783244, которая имеет относительную ошибку всего в одну стотысячную.

Другие примеры на вариационно-итерационный метод будут приведены в гл. 12.

Не положительно определенный оператор $\mathcal{L}$. Мы сохраним предположение, что $\mathcal{M}$ — положительно определенный оператор, а $\mathcal{L}$ — самосопряженный. Задачи такого типа возникают при применении вариационно-итерационного метода к определению сдвига фазы при рассеянии. Как можно видеть из соотношения (9.3.35), ядра интегрального уравнения содержат синусоидальные функции, которые принимают как положительные, так и отрицательные значения. В некоторых задачах, например в задаче об энергии связи дейтрона с включением тензорных сил, $\mathcal{L}$ является положительно определенным оператором, а $\mathcal{M}$ — нет. Результаты в этом случае вполне аналогичны результатам, изложенным здесь.

При упомянутых выше предположениях собственные значения λ_n действительны, но могут принимать как положительные, так и отрицательные значения, т. е. спектр собственных значений не ограничен теперь в обоих направлениях. Расположим собственные значения в порядке возрастания их абсолютных величин: $\lambda_0, \lambda_1, \ldots$. Кроме того, выберем знак у $\mathcal{L}$ так, чтобы λ_0 было положительно. Итерационную процедуру (9.4.93′) и определения $\lambda_0^{(n)}$ и $\lambda_0^{(n+1/2)}$ выражениями (9.4.97) можно построить, как прежде. Однако теперь необходимо пересмотреть теоремы, относящиеся к последовательности $\lambda_0^{(a)}$, выраженные в соотношениях (9.4.99), (9.4.100) и следующих.

Некоторые сведения можно получить, преобразуя исходную задачу (9.4.93) на собственные значения таким образом, чтобы получить задачу, в которой все операторы положительно определены. Простейшей из таких задач является задача

$$[\mathcal{L}\mathcal{M}^{-1}\mathcal{L}]\psi = \lambda^2\mathcal{M}\psi. \qquad (9.4.124')$$

Теперь можно применять *целиком* все предыдущие теоремы для положительно определенного случая. Последовательными приближениями к χ_0, начиная с φ_0, являются $\varphi_0, \varphi_2, \ldots, \varphi_{2n}$. Следовательно, величины, соответствующие $\lambda_0^{(n)}$ и $\lambda_0^{(n+1/2)}$ и полученные подстановкой φ_{2n} в вариационные принципы для λ_0, соответствующие (9.4.94) и (9.4.95), имеют вид

$$\lambda_0^{(n)} \longrightarrow \lambda_0^{(2n-1/2)}\lambda_0^{(2n)}, \quad \lambda_0^{(n+1/2)} \longrightarrow \lambda_0^{(2n+1/2)}\lambda_0^{(2n+1)}.$$

Их можно теперь подставить в соотношения (9.4.99) и (9.4.100), что дает

$$[\lambda_0^{(2n-1/2)}\lambda_0^{(2n)}] \geqslant [\lambda_0^{(2n+1/2)}\lambda_0^{(2n+1)}] \geqslant [\lambda_0^{(2n+3/2)}\lambda_0^{(2n+2)}] \geqslant \ldots \geqslant \lambda_0^2, \qquad (9.4.125)$$

$$\left.\begin{matrix}\lambda_0^{(2n-1/2)}\lambda_0^{(2n)} \\ \lambda_0^{(2n+1/2)}\lambda_0^{(2n+1)}\end{matrix}\right\} \underset{n\to\infty}{\longrightarrow} \lambda_0^2, \quad \text{если} \quad \int \chi_0\mathcal{M}\varphi_0\,dV \neq 0.$$

Теперь можно установить аналог неравенства (9.4.104), откуда получаются критерий сходимости и нижняя граница. Сходимость регулируется величиной $(\lambda_0/\lambda_1)^2$ следующим образом:

$$\frac{\lambda_0^{(2n+3/2)}\lambda_0^{(2n+2)} - \lambda_0^2}{\lambda_0^{(2n+1/2)}\lambda_0^{(2n+1)} - \lambda_0^2} \leqslant \frac{\lambda_0^{(2n+3/2)}\lambda_0^{(2n+2)}}{\lambda_1^2} \simeq \left(\frac{\lambda_0}{\lambda_1}\right)^2,$$

а нижняя граница (9.4.110) приобретает вид

$$\lambda_0^2 \geqslant \lambda_0^{(2n+3/2)}\lambda_0^{(2n+2)}\left[1 - \frac{\lambda_0^{(2n+1/2)}\lambda_0^{(2n+1)} - \lambda_0^{(2n+3/2)}\lambda_0^{(2n+2)}}{\lambda_1^2 - \lambda_0^{(2n+3/2)}\lambda_0^{(2n+2)}}\right].$$

Важно отметить, что сходимость зависит от абсолютной величины отношения λ_0/λ_1. Таким образом, если существуют два собственных значения, которые равны по величине, но противоположны по знаку, то сходимости не будет, потому что итерированная задача (9.4.124') имеет вырождение.

Ясно, что указанные выше соотношения не дают нам исчерпывающих сведений. Это легче всего увидеть, если соотношения (9.4.125) выразить непосредственно через $\lambda_0^{(a)}$ (используя $\varphi_1, \varphi_3, \ldots$ наряду с $\varphi_0, \varphi_2, \ldots$):

$$\lambda_0^{(n-1/2)}\lambda_0^{(n)} \geqslant \lambda_0^{(n+1/2)}\lambda_0^{(n+1)} \geqslant \ldots \geqslant \lambda_0^2, \qquad (9.4.126)$$

$$\lambda_0^{(n-1/2)}\lambda_0^{(n)} \underset{n\to\infty}{\longrightarrow} \lambda_0^2, \quad \text{если} \quad \int \chi_0\mathcal{M}\varphi_0\,dV \neq 0.$$

Поведение индивидуального $\lambda_0^{(a)}$, или, что равносильно, произведения $\lambda_0^{(n)}\lambda_0^{(n+1/2)}$ не установлено. Поэтому мы обратимся к свойствам индивидуальных значений $\lambda_0^{(a)}$.

Так как оператор $\mathcal{M}$ является положительно определенным, то неравенство (9.4.101) все еще имеет силу:

$$\lambda_0^{(n-1/2)} \geqslant \lambda_0^{(n)}.$$

Комбинируя его с соотношением (9.4.126), мы получаем

$$\lambda_0^{(n-1/2)} \geqslant \lambda_0. \qquad (9.4.127)$$

Покажем теперь, что последовательность $\lambda_0^{(n-1/2)}$ монотонно приближается к λ_0 сверху, если процесс итерации продолжить достаточно далеко, так что

$$\lambda_1^2 > \lambda_0^{(n+1)}\lambda_0^{(n+3/2)}.$$

Когда оба оператора были положительны, обе последовательности монотонно приближались к λ_0 сверху. В настоящем случае это верно только для одной последовательности. Доказательство основано на неравенстве (9.4.111), которое справедливо независимо от положительной определенности $\mathcal{L}$. Оно приводит к неравенству

$$\lambda_0^{(n+1/2)}\lambda_0^{(n+1)} - \lambda_0\lambda_0^{(n+1)} - \lambda_1^2 + (\lambda_0\lambda_1^2/\lambda_0^{(n+3/2)}) \geqslant 0.$$

Перегруппировывая члены и используя наше предположение относительно λ_1^2, мы получаем

$$[\lambda_0^{(n+3/2)} - \lambda_0]/[\lambda_0^{(n+1/2)} - \lambda_0] \leqslant \lambda_0^{(n+1)}\lambda_0^{(n+3/2)}/\lambda_1^2 < 1. \qquad (9.4.128)$$

Для того чтобы это неравенство было верным, необходимо, чтобы

$$\lambda_0^{(n+1/2)} > \lambda_0^{(n+3/2)}, \qquad (9.4.129)$$

что и доказывает монотонность последовательности $\lambda_0^{(n+1/2)}$.

Относительно последовательности $\lambda_0^{(n)}$ такого утверждения сделать нельзя. Ее поведение может быть весьма неустойчивым; $\lambda_0^{(n)}$ может быть больше λ_0 для одних значений n и меньше λ_0 для других. Более определенное утверждение можно высказать, если процесс итерации продвинут настолько далеко, что главной частью поправки в φ_n является χ_1. Тогда, если $\varphi_n = \chi_0 + b\chi_1$,

$$\lambda_0^{(n+1)} \simeq \lambda_0 + b^2\lambda_0 [1 - (\lambda_0/\lambda_1)] (\lambda_0/\lambda_1),$$
$$\lambda_0^{(n+2)} \simeq \lambda_0 + b^2\lambda_0 [1 - (\lambda_0/\lambda_1)] (\lambda_0/\lambda_1)^3.$$

Мы видим, что в пределе (т. е. при $n \to \infty$) последовательность $\lambda_0^{(n)}$ монотонно приближается к λ_0 снизу или сверху, в зависимости от знака отношения λ_0/λ_1. Если λ_0/λ_1 положительно, $\lambda_0^{(n)}$ приближается к λ_0 сверху, если отрицательно — снизу.

Мы можем теперь перейти к обсуждению сходимости и оценке нижних границ. Скорость сходимости дается формулой (9.4.128) и определяется, как было предсказано, величиной $(\lambda_0/\lambda_1)^2$. Можно придумать различные нижние границы, подобные (9.4.110). Некоторые из них мы теперь укажем.

Неравенство (9.4.110) остается справедливым, если λ_1 заменить его абсолютной величиной. Это следует из справедливости неравенства

$$\int \varphi \left(1 - \mathcal{M}\mathcal{L}^{-1} |\lambda_1|\right)\mathcal{M}(1 - \mathcal{L}^{-}\mathcal{M}^{1}\lambda_0)\, \varphi\, dV \geqslant 0.$$

Это особенно легко увидеть, если подставить общее разложение для φ по функциям χ_p. Отсюда

$$\lambda_0 \geqslant \lambda_0^{(n+1)}\left[1 - \frac{\lambda_0^{(n+1/2)} - \lambda_0^{(n+1)}}{|\lambda_1| - \lambda_0^{(n+1)}}\right]. \qquad (9.4.130)$$

Неравенство (9.4.111), очевидно, применимо в настоящей задаче, так как в него входит только λ_1^2 и, следовательно, знак λ_1 не важен. Из этого можно сделать тот вывод, что неравенство (9.4.112) сохраняется и для не положительно определенного $\mathcal{L}$.

Индефинитный характер $\mathcal{L}$ приводит как к преимуществам, так и к недостаткам, как указывалось выше. Например, то, что $\lambda_0^{(n)}$ (n целое) может быть меньше λ_0, позволяет вывести верхнюю границу для λ_0, которая может оказаться меньше $\lambda_0^{(n+1/2)}$. Мы исходим из неравенства

$$\int \varphi \left(1 + \mathcal{M}\mathcal{L}^{-1} |\lambda_1|\right) \mathcal{M} (1 - \lambda_0\mathcal{L}^{-1}\mathcal{M})\, \varphi\, dV \geqslant 0.$$

Полагая φ равным φ_n, мы получаем верхнюю границу для λ_0:

$$\lambda_0 \leqslant \lambda_0^{(n+1)}\left[1+\frac{\lambda_0^{(n+1/2)}-\lambda_0^{(n+1)}}{|\lambda_1|+\lambda_0^{(n+1)}}\right]. \qquad (9.4.131)$$

Во втором примере мы покажем, что если каким-нибудь способом можно показать, что λ_1 меньше нуля, то неравенство (9.4.130) можно улучшить. Действительно, в этом случае справедливо неравенство

$$\int \varphi\,(1-\mathscr{M}\mathscr{L}^{-1}\,|\lambda_2|)\,\mathscr{M}\,(1-\mathscr{L}^{-1}\mathscr{M}\lambda_0)\,\varphi\,dV \geqslant 0. \qquad (9.4.132)$$

Если сюда подставить общее разложение φ по функциям χ_p, то получится эквивалентное неравенство

$$\sum a_p^2\left(1-\frac{|\lambda_2|}{\lambda_p}\right)\left(1-\frac{\lambda_0}{\lambda_p}\right)\geqslant 0.$$

Это неравенство приводит к следующей нижней границе:

$$\lambda_0 \geqslant \lambda_0^{(n+1)}\left[1-\frac{\lambda_0^{(n+1/2)}-\lambda_0^{(n+1)}}{|\lambda_2|-\lambda_0^{(n+1)}}\right]. \qquad (9.4.133)$$

Нужно, конечно, получить нижнюю границу для λ_2. Ее дает следующая формула, которая является простым обобщением неравенства (9.4.114):

$$\lambda_2^2 > 1/[\mathrm{Spur}\,(\mathscr{L}^{-1}\mathscr{M})^2-(1/\lambda_0^2)-(1/\lambda_1^2)]. \qquad (9.4.134)$$

Если подставить сюда верхние границы для λ_0^2 и λ_1^2, то получится нижняя граница для $|\lambda_2|$. Конечно, может быть также применена несколько более специальная процедура, описанная после (9.4.120).

Эти теоремы до сих пор использованы лишь в немногих задачах. Их, может быть, самым важным приложением является приложение к интегральным уравнениям для рассеяния, таким, как (9.4.60), в которых используется как вариационный параметр интенсивность потенциала U, а η_l задано. Однако конкретные случаи еще недостаточно исследованы.

Вариационные методы для высших собственных значений. Описанные до сих пор вариационные методы применимы только для вычисления наименьшего по абсолютной величине собственного значения. Мы обратимся теперь к задаче применения аналогичных методов к другим собственным значениям. Бо́льшая часть из развитых ранее методов связана с тем, что волновая функция высшего состояния ортогональна к волновой функции низшего состояния. Если волновая функция для низшего состояния доступна, то используют волновые функции сравнения, которые ортогональны к ней Это ведет к определению следующего собственного значения λ_1 и соответствующей собственной функции χ_1. Если желают найти λ_2, то используют пробные волновые функции, которые ортогональны к χ_0 и χ_1, и т. д. На практике точная функция χ_0 обычно неизвестна и требование ортогональности к приближенной функции не может полностью исключить χ_0 из функции сравнения. Это приводит к некоторой неизбежной ошибке в определении λ_1, которую мы теперь рассмотрим.

Для этой цели лучше всего подходит вариационно-итерационный метод. Мы начинаем с исходной пробной функции ψ_0, ортогональной к χ_0' — приближению, которое мы получили для собственной функции χ_0 низшего состояния. Затем мы итерируем ψ_0, снова ортогонализируем, опять итерируем и т. д. Если χ_0' разложить по собственным функциям χ_n, то величины коэффициентов при всех χ_n, кроме χ_0, будут малы:

$$\chi_0' = \chi_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \varepsilon_n \chi_n, \quad \varepsilon_n \ll 1.$$

Приближенное значение λ_0, получающееся при подстановке этой функции в вариационный принцип, отличается от λ_0 на $\Delta\lambda_0$:

$$\Delta\lambda_0 \simeq \sum_{n=1}^{\infty} \varepsilon_n^2 (\lambda_n - \lambda_0). \tag{9.4.135}$$

Пробная функция, ортогональная к χ_0' с точностью до первого порядка по ε_n, дается выражением

$$\psi_0 = -\left(\sum_{n=1}^{\infty} \varepsilon_n a_n\right)\chi_0 + \sum_{n=1}^{\infty} a_n (1 - \varepsilon_n) \chi_n.$$

Если ее проитерировать, мы получим ψ_0':

$$\psi_0' = -\left(\sum_{n=1}^{\infty} \varepsilon_n a_n\right)\frac{\chi_0}{\lambda_0} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n (1 - \varepsilon_n) \frac{\chi_n}{\lambda_n}.$$

Ортогонализация к χ_0' дает

$$\psi_1 = -\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\varepsilon_n a_n}{\lambda_n} \chi_0 + \sum_{n=1}^{\infty} a_n (1 - \varepsilon_n) \frac{\chi_n}{\lambda_n}.$$

Ясно, что p-я итерация, ортогональная к χ_0', имеет вид

$$\psi_p = -\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\varepsilon_n a_n}{\lambda_n^p} \chi_0 + \sum_{n=1}^{\infty} a_n (1 - \varepsilon_n) \frac{\chi_n}{\lambda_n^p}. \tag{9.4.136}$$

Отметим следующую очень важную особенность: отношение коэффициента при χ_0 к коэффициенту при χ_1 стремится к постоянной, когда число p итераций возрастает, в то время как отношение коэффициентов при других функциях χ_n к коэффициенту при χ_1 стремится к нулю. Подстановка формулы (9.4.136) в вариационный принцип для собственного значения дает

$$\frac{\lambda_0 \left[\sum_n (a_n \varepsilon_n / \lambda_n^p)\right]^2 + \sum_n \left[a_n^2 (1-\varepsilon_n)^2 / \lambda_n^{2p-1}\right]}{\left[\sum_n (a_n \varepsilon_n / \lambda_n^p)\right]^2 + \sum_n \left[a_n^2 (1-\varepsilon_n)^2 / \lambda_n^{2p}\right]}.$$

Возьмем теперь предел этого отношения при числе итераций, стремящемся к бесконечности, т. е. когда $p \to \infty$. Он равен числу λ_1', которое отличается от λ_1:

$$\lambda_1' = \lambda_1 \{1 - [1 - (\lambda_0/\lambda_1)] \varepsilon_1^2\}. \tag{9.4.137}$$

Следовательно, существует неизбежная ошибка в определении λ_1, которая остается, даже если проведено бесконечное число итераций. Окончательное значение λ_1' меньше λ_1, причем отклонение пропорционально квадрату составляющей по χ_1, имеющейся в χ_0'. Можно выразить верхнюю границу ошибки через $\Delta\lambda_0$, так как из соотношения (9.4.135) вытекает, что

$$\varepsilon_1^2 \leqslant \Delta\lambda_0 / (\lambda_1 - \lambda_0).$$

Поэтому
$$\lambda_1' \geqslant \lambda_1\{1-(\Delta\lambda_0/\lambda_1)\}, \qquad (9.4.138)$$
так что $\Delta\lambda_0/\lambda_1$ измеряет максимальное значение возможной относительной ошибки; этот результат является главным выводом из нашего рассмотрения. Следовательно, если ошибка в определении λ_0 достаточно мала, то в получении λ_1 при помощи описанного выше процесса итераций и ортогонализации трудностей нет. Сходимость итерационной схемы определяется отношением λ_1/λ_2. В заключение мы выпишем линейную комбинацию ψ_n' (функции, получающейся итерацией из ψ_n) и χ_0', ортогональную к χ_0':
$$\psi_{n+1} = \psi_n' - \left(\int \psi_n' \mathcal{M} \chi_0' \, dV \Big/ \int \chi_0' \mathcal{M} \chi_0' dV \right) \chi_0'. \qquad (9.4.139)$$

Эту процедуру легко приспособить для вычисления λ_2 и высших собственных значений. Как только λ_1' (с описанной выше ошибкой) и соответствующая собственная функция χ_1' определены, мы выбираем функцию сравнения, ортогональную к χ_0' и χ_1', итерируем, ортогонализируем и т. д. Ясно, что по мере перехода к более высоким собственным значениям неизбежные ошибки будут накапливаться. Кроме того, для получения какого-нибудь собственного значения необходимо найти все низшие собственные значения и собственные функции. Мы обратимся поэтому к другому методу; в нем нет этих трудностей, и он приводит к уравнению, из которого можно вычислить любое индивидуальное собственное значение.

Метод минимизированных итераций. Описанные выше итерационные схемы предназначены для выделения одного собственного значения за счет остальных, так что после нескольких итераций функция сравнения составлена главным образом из одной собственной функции и содержит поэтому очень малую информацию о других собственных функциях. Мы разовьем здесь итерационный метод, состоящий в итерационном построении семейства ортогональных функций, каждая из которых содержит довольно полную информацию обо всех или о некоторых собственных функциях. Это семейство образует базис для разложения решения задачи и приводит, как мы увидим, к уравнению в непрерывных дробях для собственных значений.

Мы обозначим функции этого семейства через ψ_n, а первую итерацию функции ψ_n через ψ_n':
$$\mathcal{L}\psi_n' = \mathcal{M}\psi_n. \qquad (9.4.140)$$

Будут использованы следующие сокращенные обозначения для интегралов, включающих $\mathcal{M}$:
$$\{n, m\} = \int \psi_n \mathcal{M} \psi_m dV, \qquad (9.4.114)$$
$$\{n', m\} = \int \psi'_n \mathcal{M} \psi_m dV. \qquad (9.4.142)$$

Пусть исходной функцией сравнения служит ψ_0. Функция ψ_1 определяется из условия, что она является линейной комбинацией функций ψ_0 и ψ_0', ортогональной к ψ_0:
$$\psi_1 = \psi_0' - [\{0', 0\}/\{0, 0\}]\, \psi_0. \qquad (9.4.143)$$

Функция ψ_2 определяется из условия, что она должна быть составленной из ψ_1', ψ_1, ψ_0 и ортогональной к ψ_1 и ψ_0. Следовательно,
$$\psi_2 = \psi_1' - [\{1', 1\}/\{1, 1\}]\, \psi_1 - [\{1', 0\}/\{0, 0\}]\, \psi_0. \qquad (9.4.144)$$

Хотелось бы по аналогии написать подобное выражение для ψ_3. Однако, как мы покажем, она и все остальные ϕ_n содержат только три члена. Например,

$$\psi_3 = \phi_2' - [\{2', 2\}/\{2, 2\}]\,\phi_2 - [\{2', 1\}/\{1, 1\}]\,\phi_1. \tag{9.4.145}$$

Член ψ_0 умножается на коэффициент $\{2', 0\}/\{0, 0\}$, который равен нулю, потому что

$$\{2', 0\} = \int (\mathcal{L}^{-1}\mathcal{M}\psi_2)\mathcal{M}\psi_0\, dV = \int \psi_2 \mathcal{M}\mathcal{L}^{-1}\mathcal{M}\psi_0\, dV = \{2, 0'\}.$$

А так как функция ϕ_0' может быть выражена из равенства (9.4.143) через ψ_1 и ψ_0, которые обе ортогональны к ψ_2, то $\{2, 0'\}$ равна нулю. Вообще, мы находим, что

$$\psi_{n+1} = \phi_n' - \frac{\{n', n\}}{\{n, n\}}\phi_n - \frac{\{n', n-1\}}{\{n-1, n-1\}}\phi_{n-1}. \tag{9.4.146}$$

Коэффициенты при ϕ_{n-2} и остальных функциях равны нулю. Например, коэффициент при ϕ_{n-2} пропорционален

$$\{n', n-2\} = \{n, (n-2)'\}.$$

Но так как функция ψ_{n-2}' может быть выражена через функции ϕ_{n-1}, ϕ_{n-2} и т. д., каждая из которых ортогональна к ϕ_n, то $\{n, (n-2)'\}$ равно нулю.

Заметим, что формула (9.4.146), примененная к ϕ_1, дает (9.4.143), если мы примем условие, что функции ϕ с отрицательными индексами, в частности ϕ_{-1}, равны нулю. Мы развили, таким образом, схему получения ортогональной системы функций при помощи сравнительно простой трехчленной рекуррентной формулы. Отметим небольшое упрощение:

$$\{n', n-1\} = \{n, n\}. \tag{9.4.147}$$

Если бы мы имели дело с задачей, содержащей конечное число, скажем $N+1$, собственных функций и собственных значений, то ϕ_{N+1} была бы нулем. Действительно, ясно, что все собственные функции от χ_0 до χ_N уравнения $\mathcal{L}\chi = \lambda\mathcal{M}\chi$ должны быть линейными комбинациями функций ортогонального семейства $\psi_0, \ldots, \psi_N$, и так как функция ϕ_{N+1} выражается через χ_i, то она должна быть линейной комбинацией функций ψ_k. Но так как ϕ_{N+1} должна быть, кроме того, ортогональна к каждой из функций ϕ_k, то она должна быть нулем. (Это верно, конечно, только в случае, если ϕ_0 — исходная пробная функция — содержит все собственные функции. Если же это не так, то первая функция ϕ_n, равная нулю, появится для n, меньшего $N+1$. За исключением этого случая, множество функций ϕ_n образует полное ортогональное семейство.)

Мы можем тогда разложить χ, решение уравнения

$$\mathcal{L}\chi = \lambda\mathcal{M}\chi,$$

в ряд по ϕ_n:

$$\chi = \sum_n a_n\phi_n.$$

Подставляя это разложение в уравнение, получаем

$$\sum a_n\phi_n = \lambda \sum a_n\phi_n' = \lambda \sum a_n \left[\phi_{n+1} + \frac{\{n', n\}}{\{n, n\}}\phi_n + \frac{\{n', n-1\}}{\{n-1, n-1\}}\phi_{n-1}\right].$$

Отсюда мы получаем для a_n трехчленную рекуррентную формулу

$$a_{n-1} + \left[\frac{\{n', n\}}{\{n, n\}} - \frac{1}{\lambda}\right]a_n + \left[\frac{\{(n+1)', n\}}{\{n, n\}}\right]a_{n+1} = 0. \tag{9.4.148}$$

Уравнение, определяющее λ, может быть получено при помощи техники, развитой для работы с трехчленной рекуррентной формулой в гл. 5 в разделе о функциях Матье [формула (5.2.77) и следующие]. После введения новых неизвестных

$$R_n = \frac{a_{n-1}}{a_n}$$

уравнение (9.4.148) приобретает вид

$$R_n = \left[\frac{1}{\lambda} - \frac{\{n', n\}}{\{n, n\}} \right] - \left[\frac{\{n+1, n+1\}}{\{n, n\}} \right] \frac{1}{R_{n+1}} .$$

Последовательными подстановками получаем

$$R_1 = (1/\lambda) - [\{1', 1\}/\{1,1\}] - \\ - \cfrac{\{2,2\}/\{1,1\}}{\cfrac{1}{\lambda} - \cfrac{\{2', 2\}}{\{2,2\}} - \cfrac{\{3,3\}/\{2,2\}}{\cfrac{1}{\lambda} - \cfrac{\{3',3\}}{\{3,3\}} - \cfrac{\{4,4\}/\{3,3\}}{\cfrac{1}{\lambda} - \cfrac{\{4',4\}}{\{4,4\}} - \cdots}}} \qquad (9.4.149)$$

Однако из соотношения

$$a_0 [(\{0', 0\}/\{0, 0\}) - (1/\lambda)] + a_1(\{1', 0\}/\{0, 0\}) = 0$$

мы также имеем

$$R_1 = \frac{\{1', 0\}/\{0, 0\}}{(1/\lambda) - (\{0', 0\}/\{0, 0\})} . \qquad (9.4.150)$$

Подстановка этого результата в (9.4.149) дает уравнение относительно $1/\lambda$. Различные методы решения уравнения с непрерывной дробью такого рода были разобраны в гл.5 после формулы (5.2.78). Это разложение в непрерывную дробь есть точное представление векового уравнения для $1/\lambda$, которое может быть получено из формул (9.4.148). Кроме того, оно обрывается, если операторы $\mathcal{L}$ и $\mathcal{M}$ таковы, что существует лишь конечное число собственных функций и собственных значений.

Сравнивая метод минимизированных итераций с описанным выше вариационно-итерационным методом, мы замечаем, что функции ψ_n являются просто взаимно ортогональными линейными комбинациями итераций φ_n. Эти комбинации могут быть определены прямо по методу ортогонализации Шмидта (см. гл. 8). Указанный здесь процесс имеет, однако, преимущество в численных приложениях, где метод Шмидта быстро становится неточным из-за ошибок округления. В методе минимизированных итераций ошибки можно исправлять проверкой ортогональности нового ψ_n ко всем предыдущим. Накопившуюся ошибку можно тогда исправить вычитанием соответствующей составляющей по каждой из предыдущих ψ_n, как это указано в формуле (9.4.139).

Как следствие мы можем вывести, что отношения $\{n', n\}/\{n, n\}$ и также $\{n, n\}/\{n+1, n+1\}$ могут быть выражены через $\lambda_0^{(n)}$ и $\lambda_0^{(n+1/2)}$. Например,

$$\frac{\{0', 0\}}{\{0, 0\}} = \frac{1}{\lambda_0^{(1/2)}}, \quad \frac{\{1', 0\}}{\{0, 0\}} = \frac{1-(\lambda_0^{(1)}/\lambda_0^{(1/2)})}{\lambda_0^{(1)}\lambda_0^{(1/2)}},$$
$$\frac{\{1', 1\}}{\{1, 1\}} = \frac{1}{\lambda_0^{(3/2)}} \frac{1-(\lambda_0^{(3/2)}/\lambda_0^{(1/2)})}{1-(\lambda_0^{(1)}/\lambda_0^{(1/2)})} - \frac{1}{\lambda_0^{(1/2)}} . \qquad (9.4.151)$$

Используя данные, полученные ранее [см. (9.4.124)], относительно значений $\lambda_0^{(n)}$ в приложении вариационно-итерационного метода к колебаниям мембраны с круговой симметрией, можно вычислить различные отношения, фигурирующие в (9.4.151), и подставить их в уравнения (9.4.150) и (9.4.149), отбрасывая в последнем все члены, содержащие индекс 2 и более высокие индексы. Мы получим тогда квадратное уравнение для λ, из которого можно найти λ_0 и λ_1. Мы получаем 5,78325 для λ_0 (точное значение 5,78319), в то время как λ_1 получается равным 32,5, что следует сравнить с точным значением 30,471. Нужно включить в уравнение по крайней мере еще один член непрерывной дроби, чтобы получить значение λ_1 с такой же точностью, как и λ_0.

В заключение мы хотели бы отметить еще одно преимущество метода минимизированных итераций. Если мы имеем дело с данным отрезком интегрирования, то для данной весовой функции $\mathcal{M}$ существует только одно семейство ортогональных функций, удовлетворяющих граничным условиям. Если эти функции будут известны заранее, то нет надобности проводить ортогонализацию (9.4.146). Нужно только определить постоянные, на которые нужно умножить каждую из ортогональных функций для того, чтобы было выполнено соотношение (9.4.146).

Задачи к главе 9

9.1. У эллиптической мембраны массы σ на единицу площади, находящейся под натяжением T, жестко закреплен край — эллипс с большой осью a и малой осью b. Показать, что решение уравнения свободных поперечных колебаний этой мембраны можно выразить в виде ряда

$$\psi = \sum_{m,n=1}^{\infty} A_{mn} x^{2m} y^{2n}.$$

Получить вековой определитель, дающий волновое число k, подставляя это выражение в формулу (9.4.71) и выполняя нужные вариации. Получить возмущенное решение для низшего колебания, используя главный член A_{11}. Получить вариационное решение при условии, что в пробную волновую функцию включены только члены A_{11}, A_{02} и A_{20}. Получить оценку снизу из соотношения (9.4.117).

9.2. Частица массы m движется в поле с потенциалом $-V_0 \exp(-\beta r)$, где β и V_0 — постоянные. Показать, что решение уравнения Шредингера для сферически симметричного связанного состояния можно преобразовать к виду $u(x)$, где u — решение уравнения

$$\frac{d^2u}{dx^2} + (-1 + \lambda e^{-x/2})u = 0; \quad u = 0 \text{ при } x = 0 \text{ и } x = \infty,$$

а для β взято частное значение. Выбрав в качестве исходной пробной функции $u_0 = e^{-x}$, получить u_1 и u_2 по методу минимизированных итераций, рассматривая параметр λ как собственное значение. Найти λ из получающейся непрерывной дроби. Сравнить ответ с точным значением, данным в § 12.3.

9.3. Однородное электрическое поле E, направленное вдоль оси z, действует на электрический диполь с моментом p, который может только свободно вращаться. Записать уравнение Шредингера в сферических координатах (r, ϑ, φ), где ϑ — угол между осью диполя и осью z. Показать, что если движение не зависит от φ, то уравнение принимает вид

$$\frac{d}{d\mu}\left[(1-\mu^2)\frac{d\psi}{d\mu}\right] + \frac{2I}{\hbar^2}(W + Ep\mu)\psi = 0,$$

где $\mu = \cos\vartheta$, а I — момент инерции. Найти решение уравнения для состояния с минимальной энергией, используя (a) итерационно-пертурбацион-