Лекция 7

Разделение переменных

7.1 Полное разделение переменных

Рассмотрим снова общее дифференциальное уравнение в частных производных (1.1). Будем искать его решение в виде произведения функции только одной переменной и функции всех остальных переменных

$$u(x_1, x_2 \dots, x_n) = \phi_1(x_1)\phi(x_2, \dots, x_n).$$

Определение 7.1. Если уравнение можно переписать в виде

$$\mathcal{F}_1\left(x_1, \phi_1, \frac{d\phi_1}{dx_1}, \frac{d^2\phi_1}{dx_1^2}, \dots\right) = \mathcal{F}_2\left(x_2, \dots, x_n; \frac{\partial\phi}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial\phi}{\partial x_n}; \frac{\partial^2\phi}{\partial x_2^2} \dots\right),$$

где в левой части содержится переменная x_1 и функции только от нее, то говорят, что произошло *разделение переменных*.

В этом случае обе части можно приравнять постоянной C (*константе разделения*), потому что они зависят от разных переменных, и получится обыкновенное дифференциальное уравнение $\mathcal{F}_1 = C$. Иногда удается, записав решение в виде произведения функции только от x_2 и функции переменных $x_3, \dots, x_n$, снова отделить переменную x_2. Далее, так же отделяя x_3 и т.д., можно дойти до переменной x_{n-1}. Тогда говорят, что произошло полное разделение переменных. В зависимости от симметрии исходного уравнения и граничных условий уравнение может допускать разделение переменных в той или иной системе координат.

В качестве примера рассмотрим атом водорода в постоянном электрическом поле $\mathcal{E}$, который описывается оператором Гамильтона

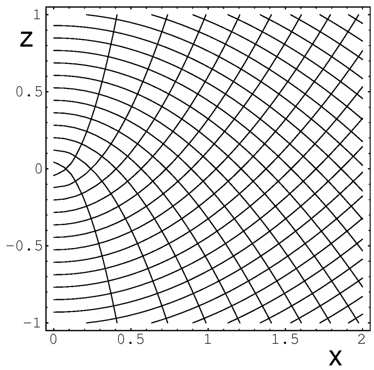
$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} + e\mathcal{E}\mathbf{r}.$$

Здесь m, e — масса электрона и абсолютная величина его заряда. Мы будем пользоваться атомной системой единиц, в которой они равны единице $e = m = \hbar = 1$.

Будем интересоваться связанными состояниями, поэтому стационарное уравнение Шредингера **1.10** следует решать при $E < 0$. Перейдем к новым переменным

$$x = \sqrt{\xi\eta}\cos\varphi, \quad y = \sqrt{\xi\eta}\sin\varphi, \quad z = \frac{\xi - \eta}{2}, \tag{7.1}$$

где $0 \leqslant \xi, \eta < \infty, 0 \leqslant \varphi < 2\pi$ — параболические координаты.



В плоскости (x, z), т.е. при $\varphi = 0$, координатные линии представляют собой два семейства парабол $\xi = \mathrm{const}$ и $\eta = \mathrm{const}$, повернутых вершинами вверх и вниз. Если вращать рисунок вокруг оси z, параболы перейдут в параболоиды вращения — координатные поверхности $\xi = \mathrm{const}$ и $\eta = \mathrm{const}$. Третье семейство поверхностей $\varphi = \mathrm{const}$ — это полуплоскости, проходящие через ось z. Параболические координаты точки указывают, на пересечении каких трех поверхностей находится точка.

Чтобы перейти от декартовой к новой ортогональной системе координат $q_i = q_i(x, y, z)$, надо вычислить коэффициенты Ламе

$$h_i = \sqrt{\left(\frac{\partial x}{\partial q_i}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial q_i}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial q_i}\right)^2}.$$

Как известно, оператор Лапласа в ортогональной системе записывается как

$$\triangle = \frac{1}{h}\sum_{i=1}^{3}\frac{\partial}{\partial q_i}\left(\frac{h}{h_i^2}\frac{\partial}{\partial q_i}\right),$$

где коэффициент преобразования объема обозначен $h = h_1 h_2 h_3$. В нашем случае коэффициенты Ламе

$$h_\xi = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\xi+\eta}{\xi}}, \quad h_\eta = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\xi+\eta}{\eta}}, \quad h_\varphi = \sqrt{\xi\eta}, \quad h = \frac{1}{4}(\xi+\eta),$$

отсюда

$$\triangle = \frac{4}{\xi+\eta}\left(\frac{\partial}{\partial\xi}\xi\frac{\partial}{\partial\xi} + \frac{\partial}{\partial\eta}\eta\frac{\partial}{\partial\eta}\right) + \frac{1}{\xi\eta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}.$$

Уравнение Шредингера запишется как

$$\left(\triangle + \frac{2}{r} - 2\mathcal{E}z\right)\psi = \varkappa^2\psi, \quad \varkappa^2 = -2E.$$

Если искать решение в виде $\psi(\xi, \eta, \varphi) = X(\xi)Y(\eta)\Phi(\varphi)$, переменная φ сразу отделяется. Получается уравнение

$$\Phi'' + m^2\Phi = 0 \Rightarrow \Phi(\varphi) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \tag{7.2}$$

Таблица 7.1: Системы координат, в которых разделяются переменные в двумерном уравнении Гельмгольца.

№	Координаты	Преобразование
1	Декартовы	x, y
2	Полярные	$x = r\cos\varphi,\, y = r\sin\varphi$
3	Параболические	$x = \frac{1}{2}(\xi^2 - \eta^2),\, y = \xi\eta$
4	Эллиптические	$x = d\,\mathrm{ch}\,\alpha\cos\beta,\, y = d\,\mathrm{sh}\,\alpha\sin\beta$

где константа разделения m (магнитное квантовое число) принимает только целые значения, чтобы решение было 2π-периодической функцией угла φ.

Если каждую декартову координату из (7.1) возвести в квадрат и все сложить, найдем $r = (\xi + \eta)/2$. Тогда переменные в оставшемся уравнении снова разделяются и получается два однотипных уравнения

$$\frac{(\xi X')'}{X} - \frac{m^2}{4\xi} - \frac{\mathcal{E}\xi^2}{4} - \frac{\varkappa^2\xi}{4} + C_1 = 0, \quad \frac{(\eta Y')'}{Y} - \frac{m^2}{4\eta} + \frac{\mathcal{E}\eta^2}{4} - \frac{\varkappa^2\eta}{4} + C_2 = 0, \tag{7.3}$$

где $C_1 + C_2 = 1$. Решение этих уравнений при $\mathcal{E} = 0$ выражается через вырожденную гипергеометрическую функцию, которую мы изучим в лекции **11**. Здесь же нам достаточно было показать, что происходит полное разделение переменных и задача сводится к решению обыкновенных дифференциальных уравнений.

Как видно из примера, переменные удается разделить только в специальных симметричных случаях. В особенно симметричных системах переменные разделяются в нескольких системах координат. Так, в уравнении Шредингера для невозмущенного атома водорода $\hat{H} = \hat{p}^2/2 - 1/r$ можно разделить переменные в сферических или параболических координатах, а в задаче о пространственном осцилляторе $\hat{H} = \hat{p}^2/2 + r^2/2$ переменные разделяются в декартовых или сферических координатах [4].

Уравнение Гельмгольца

$$\triangle u + k^2 u = 0 \tag{7.4}$$

при постоянном k еще более симметрично, поэтому допускает полное разделение переменных более чем в двух координатных системах. Приведем только таблицы таких систем, отсылая читателя за доказательством к монографии Миллера [34]. Таблицы на стр. 44 и 45 содержат списки четырех координатных систем для двумерного и одиннадцати координатных систем для трехмерного пространства, соответственно. Первые четыре координатные системы в трехмерном пространстве получаются из двумерных добавлением оси z.

7.2 Метод Фурье

Разделение переменных в линейных уравнениях позволяет продвинуться намного дальше, чем в общем случае, а часто и решить задачу до конца. Для этого

Таблица 7.2: То же, что и в табл. 7.1, но для трехмерной геометрии.

№	Координаты	Преобразование
1	Декартовы	$x \quad y \quad z$
2	Цилиндрические	$x = r\cos\varphi \quad y = r\sin\varphi \quad z = z$
3	Параболического цилиндра	$x = \frac{1}{2}(\xi^2 - \eta^2)$ $y = \xi\eta$ $z = z$
4	Эллиптического цилиндра	$x = d\,\mathrm{ch}\,\alpha\cos\beta$ $y = d\,\mathrm{sh}\,\alpha\sin\beta$ $z = z$
5	Сферические	$x = r\sin\theta\cos\varphi$ $y = r\sin\theta\sin\varphi$ $z = r\cos\theta$
6	Вытянутого сфероида	$x = a\,\mathrm{sh}\,\eta\sin\alpha\cos\varphi$ $y = a\,\mathrm{sh}\,\eta\sin\alpha\sin\varphi$ $z = a\,\mathrm{ch}\,\eta\cos\alpha$
7	Сплюснутого сфероида	$x = a\,\mathrm{ch}\,\eta\sin\alpha\cos\varphi$ $y = a\,\mathrm{ch}\,\eta\sin\alpha\sin\varphi$ $z = a\,\mathrm{sh}\,\eta\cos\alpha$
8	Параболические	$x = \xi\eta\,\cos\varphi$ $y = \xi\eta\,\sin\varphi$ $z = (\xi^2 - \eta^2)/2$
9	Параболоидальные	$x = 2c\,\mathrm{ch}\,\alpha\cos\beta\mathrm{sh}\,\gamma$ $y = 2c\,\mathrm{sh}\,\alpha\sin\beta\mathrm{ch}\,\gamma$ $z = \frac{c}{2}(\mathrm{ch}\,2\alpha + \cos 2\beta - \mathrm{ch}\,2\gamma)$
10	Эллипсоидальные	$x = \sqrt{\frac{(\mu-a)(\nu-a)(\rho-a)}{a(a-1)}}$ $y = \sqrt{\frac{(\mu-1)(\nu-1)(\rho-1)}{1-a}}$ $z = \sqrt{\frac{\mu\nu\rho}{a}}$
11	Конические	$x = r\sqrt{\frac{(b\mu-1)(b\nu-1)}{1-b}}$ $y = r\sqrt{\frac{b(\mu-1)(\nu-1)}{b-1}}$ $z = r\sqrt{b\mu\nu}$

надо уметь решать спектральную задачу для эллиптического оператора

$$\hat{L} = a_{ij}\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} + b_k \frac{\partial}{\partial x_k} + c,$$

где a_{ij}, b_k, c — функции $x = (x_1, \dots, x_n)$, квадратичная форма $Q = a_{ij}p_i p_j$ положительно определена. Требуется знать собственные функции $\psi_n(x)$ и собственные значения λ_n задачи в области $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^n$

$$\hat{L}\psi_n = \lambda_n \psi_n \tag{7.5}$$

с условиями на границе области $\mathcal{S} = \partial\mathcal{D}$

$$\left[\alpha\, u + \beta\, \frac{\partial u}{\partial n}\right]_{x \in \mathcal{S}} = f, \tag{7.6}$$

где $\partial/\partial n$ означает производную вдоль внутренней нормали к поверхности $\mathcal{S}$, а функция $f(x)$ определена на поверхности $\mathcal{S}$. Обычно эти задачи называются

$\alpha = 1, \beta = 0$ I краевая задача (или *задача Дирихле*)
$\alpha = 0, \beta = 1$ II краевая задача (или *задача Неймана*)
$\alpha\beta \neq 0$ III краевая задача.

Если краевая задача (7.6) содержит нуль в правой части $f = 0$, то она называется *однородной*. Рассматриваются также краевые задачи, в которых граничная поверхность делится на части $\mathcal{S} = \mathcal{S}_1 \cup \dots \cup \mathcal{S}_m$ и на каждой части ставится своя задача $\alpha = \alpha_k, \beta = \beta_k, f = f_k; k = 1, \dots, m$. Такую постановку называют *смешанной* краевой задачей.

Пусть спектр отрицательный, т.е. все $\lambda_n < 0$, а система собственных функций полна.[1] В этом случае можно найти решение линейного гиперболического уравнения с начальными условиями

$$u_{tt} = \hat{L}u, \quad u(x,0) = \phi_0(x),\ u_t(x,0) = \phi_1(x) \tag{7.7}$$

и с теми же граничными условиями (7.6). Продемонстрируем, как строится решение.

Ищем решение в виде $u(x,t) = T(t)\psi(x)$, тогда переменная t отделяется

$$\frac{\ddot{T}}{T} = \frac{\hat{L}\psi}{\psi} = -\omega^2,$$

а константа разделения получается отрицательной в силу отрицательности собственных чисел оператора $\hat{L}$. Решение обыкновенного уравнения дается формулой $T(t) = A\cos\omega t + B\sin\omega t$. Зная полную систему собственных функций, мы

[1] Для полноты системы собственных функций дифференциального оператора в бесконечномерном гильбертовом пространстве самосопряженности недостаточно. Необходимо еще, чтобы собственные значения были ограничены сверху и $\lambda_n \to -\infty, n \to \infty$. Подробное изложение теории, не предполагающей ограниченности операторов, имеется в учебнике Михлина [19].

можем искать решение в виде разложения с коэффициентами, зависящими от t, и получить обыкновенные уравнения на коэффициенты, приравнивая выражения при одинаковых собственных функциях:

$$u(x,t) = \sum_n c_n(t)\psi_n(x) \Rightarrow \ddot{c_n} = \lambda_n c_n. \tag{7.8}$$

Обозначим $\lambda_n = -\omega_n^2$, тогда $c_n(t) = A_n \cos\omega_n t + B_n \sin\omega_n t$. Теперь при $t = 0$ получается разложения в обобщенный ряд Фурье заданных начальных условий

$$\phi_0(x) = \sum_n A_n\psi_n(x), \quad \phi_1(x) = \sum_n \omega_n B_n \psi_n(x).$$

Теперь, пользуясь ортогональностью системы функций, мы можем найти все коэффициенты A_n, B_n и построить решение задачи Коши (7.7).

Замечание 7.1. Если надо решить не гиперболическое уравнение, а параболическое с одним начальным условием

$$u_t = \hat{L}u, \quad u(x,0) = \phi(x), \tag{7.9}$$

то разлагая, как и в гиперболическом уравнении, по собственным функциям, получим обыкновенные уравнения на этот раз первого порядка

$$\dot{c_n} = \lambda_n c_n \Rightarrow c_n = A_n \mathrm{e}^{-|\lambda_n|t}.$$

Тогда все коэффициенты A_n найдутся с помощью разложения начального условия

$$\phi(x) = \sum_n A_n\psi_n(x).$$

Замечание 7.2. Все формулы метода Фурье можно вывести также с помощью преобразования Лапласа по t. В частности, для параболического уравнения (7.9) проводя преобразование Лапласа

$$u_p(x) = \int_0^\infty u(x,t)\mathrm{e}^{-pt}\,dt,$$

получим уравнение $pu_p = \hat{L}u_p + \phi(x)$. Подставляя разложение образа решения $u_p = \sum c_n\psi_n$ и начального условия $\phi = \sum a_n\psi_n$, найдем коэффициенты $c_n = a_n/(p-\lambda_n)$, откуда

$$u_p = \sum \frac{a_n}{p-\lambda_n}\psi_n \Rightarrow u(x,t) = \sum_n a_n\psi_n \oint_\gamma \frac{dp}{2\pi \mathrm{i}} \frac{\mathrm{e}^{pt}}{p-\lambda_n},$$

где контур γ для каждого конечного отрезка ряда замыкается полуокружностью большого радиуса R и охватывает полюсы подынтегрального выражения, которые лежат на левой действительной полуоси, рис. 7.1a. Вычисляя интеграл как предел суммы вычетов при $R \to \infty$, получим то же самое разложение решения параболического уравнения. Для гиперболического уравнения полюсы $p = \pm \mathrm{i}\omega_i = \pm\mathrm{i}\sqrt{-\lambda_i}$ лежат на мнимой оси, как показано на рис. 7.1b.

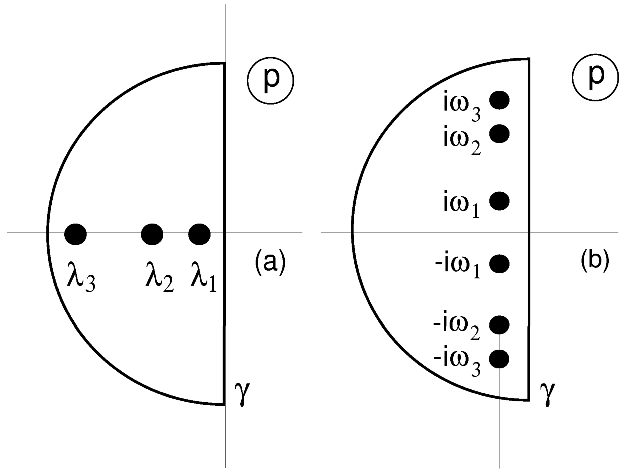


Рис. 7.1: Контур γ в p-плоскости: (a) — для параболического уравнения, (b) — для гиперболического.

Замечание 7.3. Если уравнение неоднородное, его можно решить, разлагая правую часть по системе функций ψ_n.

Упражнение 7.1. Методом преобразования Лапласа получите решение задачи Коши для неоднородных уравнений $u_{tt} = \hat{L}u + f$ и $u_t = \hat{L}u + f$.