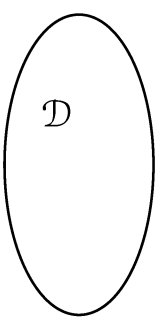
Лекция 10

Функция Грина

10.1 Полуоднородная задача



$\mathcal{S} = \partial\mathcal{D}$

Рассмотрим компактную область $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^n$ евклидова пространства и два линейных оператора, один из которых $\hat{L}$ — дифференциальный оператор порядка N — определен в области $\mathcal{D}$, а другой $\hat{B}$ — порядка $(N-1)$ — действует на ее границе $\mathcal{S} = \partial\mathcal{D}$. В математической физике наиболее распространен случай $N = 2$. Общая постановка *неоднородной задачи* для дифференциального оператора записывается в виде уравнения в частных производных и граничных условий. Неоднородную задачу можно разбить на две, которые называются *полуоднородными*:

$$\hat{L}u\Big|_{x\in\mathcal{D}} = f, \quad \hat{B}u\Big|_{x\in\mathcal{S}} = g, \tag{10.0}$$

$$\hat{L}u\Big|_{x\in\mathcal{D}} = f, \quad \hat{B}u\Big|_{x\in\mathcal{S}} = 0, \tag{10.1}$$

$$\hat{L}u\Big|_{x\in\mathcal{D}} = 0, \quad \hat{B}u\Big|_{x\in\mathcal{S}} = g. \tag{10.2}$$

В силу линейности если $u_1(x)$ — решение задачи **(10.1)**, а $u_2(x)$ — решение задачи **(10.2)**, то их сумма $u(x) = u_1(x) + u_2(x)$ будет решением неоднородной задачи **(10.0)**. Сначала мы будем исследовать полуоднородную задачу **(10.1)**, а в лекции 12 вернемся к решению второй полуоднородной задачи **(10.2)**.

Функции, удовлетворяющие однородному граничному условию, образуют линейное пространство, потому что если две функции удовлетворяют однородному условию, то и их линейная комбинация удовлетворяет тому же условию. Пространство превращается в гильбертово, если ограничиться разумными функциями и задать скалярное произведение. Напомним, что *гильбертово пространство* — это полное счетномерное нормированное линейное пространство, где норма вектора определяется *скалярным произведением*. Элементы (векторы) такого пространства — функции, удовлетворяющие однородному граничному усло-

вию. Скалярное произведение двух функций $v(x), u(x)$ определим как интеграл по области $\mathcal{D}$:

$$(v, u) = \int_{\mathcal{D}} v^*(x)u(x)\,dx \equiv \langle v|u\rangle.$$

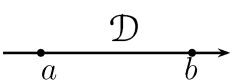
Несложно проверить, что скалярное произведение удовлетворяет трем необходимым свойствам:

1. $(v, \lambda u_1 + u_2) = \lambda(v, u_1) + (v, u_2)$ линейность;
2. $(u, v) = (v, u)^*$ эрмитовость;
3. $(u, u) \geqslant 0$, причем $(u, u) = \|u\|^2 = 0 \Rightarrow u \equiv 0$ неотрицательность нормы.

Скалярное произведение мы будем обозначать круглыми скобками, как принято в функциональном анализе, либо треугольными скобками, как принято в квантовой механике (обозначения Дирака). Через скалярное произведение можно определить и *сопряженный оператор*

$$(v, \hat{L}u) = (\hat{L}^\dagger v, u), \tag{10.3}$$

т.е. оператор переходит в сопряженный при перебрасывании на другую обкладку скалярного произведения.



Для иллюстрации общих определений будем использовать оператор *Штурма — Лиувилля*

$$\hat{L} = p(x)\frac{d^2}{dx^2} + q(x)\frac{d}{dx} + r(x), \tag{10.4}$$

который определим на функциях $u(x)$, равных нулю на концах отрезка $a \leqslant x \leqslant b$: $u(a) = u(b) = 0$. Значит для такого оператора $n = 1, N = 2$, область $\mathcal{D}$ — отрезок $[a, b]$, а граница $\mathcal{S}$ состоит из двух точек. Функции $p(x), q(x), r(x)$ считаем действительными.

Пример 10.1. Для примера найдем сопряженный оператор $\hat{L}^\dagger$ для оператора Штурма — Лиувилля. По определению сопряженного оператора (10.3), выпишем интеграл для скалярного произведения и проинтегрируем по частям

$$(v, \hat{L}u) = \int\limits_a^b v^*(x)\hat{L}u(x)\,dx = \left[v^*(x)p(x)u'(x) - (v^*(x)p(x))'\,u(x) + q(x)v^*(x)u(x)\right]_a^b +$$

$$+ \int\limits_a^b u(x)\left(\frac{d^2}{dx^2}\left(p(x)v^*(x)\right) - \frac{d}{dx}\left(q(x)v^*(x)\right) + r(x)v^*(x)\right)dx. \tag{10.5}$$

В силу нулевых граничных условий для функций $u(x), v(x)$ внеинтегральный член (10.5) исчезает, получается

$$\hat{L}^\dagger = p(x)\frac{d^2}{dx^2} + \left(2p'(x) - q(x)\right)\frac{d}{dx} + r(x) - q'(x) + p''(x).$$

Здесь функции $p(x), q(x)$ предполагаются гладкими.

10.2 Разложение оператора по проекторам

Самосопряженным будем называть оператор, совпадающий с сопряженным $\hat{L} = \hat{L}^\dagger$, если у них одинаковые области определения. Запишем спектральную задачу для самосопряженного оператора $\hat{L}$

$$\hat{L}u_m(x) = \lambda_m u_m(x), \tag{10.6}$$

где u_m — собственные функции, а λ_m — собственные значения. Скалярно умножим **(10.6)** на u_m, получится

$$\left(u_m, \hat{L}u_m\right) = \lambda_m \left(u_m, u_m\right).$$

В обеих частях стоят действительные матричные элементы:

$$(u_m, u_m) = \|u\|^2 \geqslant 0, \quad \left(u_m, \hat{L}u_m\right) = \left(\hat{L}u_m, u_m\right) = \left(u_m, \hat{L}u_m\right)^*,$$

значит собственные значения тоже действительны. Теперь скалярно умножим уравнение **(10.6)** на $u_l(x)$, затем поменяем местами индексы $l \leftrightarrow m$, выполним комплексное сопряжение, а затем вычтем друг из друга:

$$\left(u_l, \hat{L}u_m\right) - \left(u_m, \hat{L}u_l\right)^* = (u_l, \lambda_m u_m) - (u_m, \lambda_l u_l)^* = (\lambda_m - \lambda_l)\,(u_l, u_m)$$

В левой части получится нуль, откуда

$$(\lambda_m - \lambda_l)(u_l, u_m) = 0.$$

Отсюда следует, что либо собственные значения совпадают, либо собственные функции ортогональны друг другу. Собственные функции, принадлежащие одному собственному значению, тоже можно выбрать ортогональными.

Если собственные функции выбрать еще и нормированными, то соотношение ортогональности запишется особенно просто

$$(u_m, u_l) = \delta_{ml}.$$

Соотношение полноты базиса будет иметь вид

$$\sum_m u_m(x)u_m^*(x') = \delta(x - x').$$

Естественно, не у всякого оператора имеется полная система функций. Даже в конечномерном пространстве удается диагонализовать не всякую матрицу. Чтобы диагонализация удалась, достаточно симметричности для действительной матрицы или эрмитовости для комплексной матрицы. Аналогичные теоремы

имеются и для операторов в гильбертовом пространстве. В частности, для самосопряженного оператора Штурма — Лиувилля достаточно положительной определенности оператора и неограниченного возрастания собственных чисел с номером $\lambda_m \to \infty, m \to \infty$.

Перейдем к бра- и кет- обозначениям [28], считая, что $u_m(x) = \langle x|m\rangle$, тогда задача на собственные значения запишется в инвариантном виде

$$\hat{L}|m\rangle = \lambda_m|m\rangle,$$

а ее запись (10.6) в координатном представлении получится умножением слева на базисный вектор $\langle x|$. Соотношения ортогональности и полноты выглядят как

$$\langle m|l\rangle = \delta_{ml}, \quad \sum_m |m\rangle\langle m| = |.$$

Соотношение полноты записано как разложение единичного оператора $|$. Отдельные слагаемые — это проекторы $\hat{P}_m = |m\rangle\langle m|$ на одномерные подпространства, отвечающие заданному базисному вектору с номером m.

Аналогично можно записать разложения по проекторам прямого и обратного оператора

$$\hat{L} = \sum_m \lambda_m|m\rangle\langle m|, \quad \hat{L}^{-1} = \sum_m \frac{1}{\lambda_m}|m\rangle\langle m|, \ \lambda_m \neq 0. \tag{10.7}$$

Согласно теореме Рисса действие операторов на функции $u(x), v(x)$ в гильбертовом пространстве можно записать в виде интегралов

$$(\hat{L}u)(x) = \int_{\mathcal{D}} K(x,x')u(x')\,dx', \quad (\hat{L}^{-1}v)(x) = \int_{\mathcal{D}} G(x,x')v(x')\,dx',$$

где $x = (x_1,\ldots,x_m), x' = (x'_1,\ldots,x'_m) \in \mathcal{D}$, $K(x,x') = \langle x|\hat{L}|x'\rangle$, $G(x,x') = \langle x|\hat{L}^{-1}|x'\rangle$ — интегральные ядра прямого и обратного операторов, соответственно. Интегральное ядро обратного оператора $G(x,x')$ задачи (10.1) называется *функцией Грина первого рода*.

Перечислим простейшие свойства функции Грина.

1. Решение полуоднородной задачи (10.1) выражается *интегралом Дюамеля*

$$u(x) = \int_{\mathcal{D}} G(x,x')f(x')\,dx'. \tag{10.8}$$

   Это свойство прямо следует из определения интегрального ядра обратного оператора.

2. Если $\hat{L}$ — самосопряженный оператор, то функция Грина удовлетворяет *принципу взаимности*:

$$G(x,x') = G^*(x',x).$$

   Принцип взаимности следует из разложения (10.7) обратного оператора по проекторам, если учесть, что все собственные значения самосопряженного оператора — действительные.

3. Функция Грина удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$\hat{L}G(x,x') = \delta(x-x'). \tag{10.9}$$

с граничным условием $\hat{B}G(x,x')|_{x\in S} = 0$. Уравнение получается, если подействовать прямым оператором $\hat{L}$ на разложение обратного **(10.7)** и умножить полученное равенство слева на $\langle x|$, а справа на $|x'\rangle$, учитывая соотношение ортогональности $\langle x|x'\rangle = \delta(x-x')$. Дифференциальные уравнения обычно решать проще, чем суммировать бесконечные ряды, поэтому на практике это свойство и используется для нахождения функции Грина.

Назовем *фундаментальным решением* функцию $G(x,x')$, которая удовлетворяет уравнению **(10.9)**, но не обязана удовлетворять граничным условиям.

Замечание 10.1. Мы предположили, что у оператора нет собственных функций, отвечающих нулевому собственному значению. Такие функции будем называть *нулевыми модами*. Как известно, для операторов имеется альтернатива Фредгольма. Если нет нулевых мод, то неоднородное уравнение разрешимо при любой правой части и имеет единственное решение. Второй случай альтернативы Фредгольма — это когда имеются нулевые моды, но выполнено некоторое условие разрешимости. Во втором случае имеется бесконечное множество решений. Мы рассмотрим его на следующей лекции.

10.3 Оператор Штурма — Лиувилля

Рассмотрим однородную задачу **(10.1)** для оператора Штурма — Лиувилля **(10.4)** на отрезке $a \leqslant x \leqslant b$. Пусть $u(a) = u(b) = 0$. Прежде, чем решать уравнение для функции Грина

$$\hat{L}G = \left[p(x)\frac{d^2}{dx^2} + q(x)\frac{d}{dx} + r(x)\right] G(x,x') = \delta(x-x'),$$

локально проинтегрируем его, т.е. найдем интеграл по x от $x'-\epsilon$ до $x'+\epsilon$, а затем устремим $\epsilon \to 0$. В правой части получится единица, а в левой последнее слагаемое в пределе обратится в нуль. Предпоследнее слагаемое даст скачок функции Грина $q(x')\,[G(x,x')]_{x'-0}^{x'+0}$ и тоже обратится в нуль, если функция Грина непрерывна. Останется первое слагаемое

$$p(x')\left[\frac{dG(x,x')}{dx}\right]_{x'-0}^{x'+0} = 1.$$

Отсюда получается, что функция Грина терпит скачок производной, равный $1/p(x')$.

Вместо функции Грина ищем сначала *фундаментальное решение* $g(x,x')$, от которого потребуем такого же скачка, но не будем требовать выполнения граничного условия. Пусть $u_1(x), u_2(x)$ — два линейно - независимых решения однородного уравнения $\hat{L}u = 0$, тогда фундаментальное решение можно искать в

виде

$$g(x,x') = \begin{cases} C_1 u_1(x), & x < x'; \\ C_2 u_2 + -(x), & x > x'. \end{cases}$$

Коэффициенты C_1, C_2 найдем из непрерывности функции и скачка производной в точке $x = x'$. Получится система двух линейных уравнений

$$\begin{cases} C_1 u_1(x') - C_2 u_2(x') = 0, \\ -C_1 u_1'(x') + C_2 u_2'(x') = \frac{1}{p(x')}. \end{cases}$$

Ее определитель

$$\Delta = \begin{vmatrix} u_1(x') & -u_2(x') \\ -u_1'(x') & u_2'(x') \end{vmatrix} = W(x')$$

совпадает с определителем Вронского в точке $x = x'$, который отличен от нуля, если выбраны линейно - независимые решения. Тогда из системы можно найти неизвестные коэффициенты

$$C_1 = \frac{1}{\Delta} \begin{vmatrix} 0 & -u_2(x') \\ \frac{1}{p(x')} & u_2'(x') \end{vmatrix} = \frac{u_2(x')}{p(x')W(x')},$$
$$C_2 = \frac{1}{\Delta} \begin{vmatrix} u_1(x') & 0 \\ -u_1'(x') & \frac{1}{p(x')} \end{vmatrix} = \frac{u_1(x')}{p(x')W(x')}.$$

Фундаментальное решение найдено:

$$g(x,x') = \begin{cases} \dfrac{u_1(x)u_2(x')}{p(x')W(x')}, & x < x', \\ \dfrac{u_1(x')u_2(x)}{p(x')W(x')}, & x > x'. \end{cases} \tag{10.10}$$

Решение можно записать в одну строчку, если вести новые обозначения $x_< = \min(x,x'), x_> = \max(x,x')$:

$$g(x,x') = \frac{u_1(x_<)u_2(x_>)}{p(x')W(x')}.$$

Если $q = 0$, то вронскиан не зависит от координаты. Если к тому же $p = 1$, формула еще немного упрощается. Фундаментальное решение становится зависящим только от переменных $x_>, x_<$, а значит симметричным по перестановке координат $x \leftrightarrow x'$. Так и должно быть, потому что в этом случае оператор — самосопряженный. Формула выводится аналогично и в случае обыкновенного дифференциального уравнения более высокого порядка n. В этом случае локальное интегрирование позволяет найти скачок $(n-1)$-й производной, а производные более низкого порядка непрерывны в точке $x = x'$. Фундаментальное решение неоднозначно, потому что пару независимых решений можно выбирать по разному.

Вернемся к функции Грина. Чтобы ее найти из фундаментального решения, надо добавить линейную комбинацию независимых решений, а два коэффициента этой комбинации найти из граничных условий. Функция Грина находится единственным образом, когда $\lambda_m \neq 0$. Если с самого начала выбрать $u_1(x)$, удовлетворяющее граничному условию при $x = a$ ($u_1(a) = 0$), а $u_2(x)$, которое удовлетворяет второму условию при $x = b$ ($u_2(b) = 0$), то формула **(10.10)** сразу даст функцию Грина

$$G(x, x') = g(x, x'), \quad G(a, x') = G(b, x') = 0, \quad a < x' < b.$$

Замечание 10.2. Бывает так, что однородные граничные условия $\hat{B}_{1,2}u|_{x=a,b} = 0$ не удается разделить на левое и правое. Тогда вместо формулы **(10.10)** надо использовать более общую:

$$G(x, x') = \frac{Z(x, x')}{\Delta}, \quad \Delta = \begin{vmatrix} \hat{B}_1 u_1 & \hat{B}_1 u_2 \\ \hat{B}_2 u_1 & \hat{B}_2 u_2 \end{vmatrix} \neq 0,$$

$$Z(x, x') = \begin{vmatrix} g(x, x') & u_1(x) & u_2(x) \\ \hat{B}_1 g(x, x') & \hat{B}_1 u_1(x) & \hat{B}_1 u_2(x) \\ \hat{B}_2 g(x, x') & \hat{B}_2 u_1(x) & \hat{B}_2 u_2(x) \end{vmatrix}. \tag{10.11}$$

Если разложить определитель Z по первой строке, мы увидим, что он равен линейной комбинации фундаментального решения g и двух линейно-независимых решений однородного уравнения u_1, u_2. Причем минор при g равен Δ, поэтому при фундаментальном решении стоит единичный коэффициент. Чтобы показать, что получилась функция Грина, осталось проверить выполнение граничных условий. Подействуем на определитель Z операторами $\hat{B}_{1,2}$. В первом случае у получившегося определителя совпадут первая и вторая строки, а во втором — первая и третья. Значит функция G удовлетворяет и граничным условиям.

Пример 10.2.

$$\frac{d^2}{dx^2}G(x, x') = \delta(x - x'), \quad G|_{x=0} + G|_{x=1} - \left.\frac{dG}{dx}\right|_{x=1} = 0, \quad \left.\frac{dG}{dx}\right|_{x=0} + \left.\frac{dG}{dx}\right|_{x=1} = 0.$$

Два решения однородного уравнения — константа и линейная функция $u_1(x) = 1, u_2(x) = x$. Вронскиан $W = 1$, фундаментальное решение дается формулой **(10.10)**

$$g(x, x') = \begin{cases} x', & x < x', \\ x, & x > x'. \end{cases}$$

Оператор $\hat{B}_1$ здесь сумма значений функции минус производная в единице, а $\hat{B}_2$ — сумма значений производных в граничных точках $x = 0, 1$. Осталось выполнить граничные условия. Найдем определители **(10.11)**:

$$Z = \begin{vmatrix} x_> & 1 & x \\ x' & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 2 \end{vmatrix} = 4x_> - 2(x + x'), \quad \Delta = \begin{vmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{vmatrix} = 4.$$

Отсюда получится функция Грина

$$G(x, x') = \frac{|x - x'|}{2}. \tag{10.12}$$

Действительно, эта функция непрерывна, имеет, где надо, единичный скачок производной и удовлетворяет граничным условиям.

10.4 Дополнительная литература

Последовательное изложение теорем функционального анализа можно найти в учебниках [29–31]. Теория функций Грина изложена в книгах [7, 32, 33], в учебнике [34] рассмотрен также случай несамосопряженных операторов. Теоремы единственности многих краевых задач можно найти в [35]. Функция Грина конкретных уравнений Шредингера приведены в книгах по физике, см., например, [5, 36, 37]. Лекция 15 — дополнительная, в программу не входит и посвящена так называемой суперсимметричной квантовой механике — операторному методу нахождения собственных значений одномерного уравнения Шредингера.