

1

古典变分原理

Contents

1.1	变分学中的基本概念.....	2
1.2	泛函导数.....	5
1.3	硬边界的泛函极值的必要条件 ...	12
1.4	带约束的泛函极值的必要条件 ...	19
1.5	端点值可变的泛函极值问题.....	25
1.6	变分逆问题.....	32
1.6.1	本征值问题.....	32
1.6.2	定解问题.....	35
1.6.3	Rayleigh–Ritz 方法.....	36

变分法,总的来说不是那么地「分析」,但其在数学应用方面却十分重要,譬如说物理理论,很多情形下都归结于求解泛函极值问题;又比如在经济学,化学或工业工程领域,凡涉及到「在函数空间内求取极值」的问题,均绕不开变分学的介入.

关于参考书,我本人没有系统学习过变分学原理,基本上都是在本科课堂上零散地摄入,如经典力学,数理方法都有涉及¹,但只是刚好够用,不成体系,所以没有特别推荐的参考书.据我所知,系统讨论变分法的教材也不见远近闻名者.本笔记多参考本人课上所学,并参阅老大中的《变分法基础》[老大中 15],此书为少有的系统讨论变分法的中文教材,推荐拜读原著.本章参考第二章至第六章,力求概括变分问题之概要.另,本章以及下章涉及诸多例题,诸引用于胡英和刘洪来的《密度泛函理论》[胡刘 16, Chapter 1].变分法应用的一大领域就是密度泛函理论,该理论是现代计算化学和凝聚态物理的基石.

¹这些课程均为复旦大学物理学系林志方老师所讲授,该师平易近人,炉火纯青于 Mathematica 编程技术,频此著有诸多课件;该师平易近人,为人幽默,笔者在学课程是年师正修订胡嗣柱和倪光炯的《数学物理方法》[胡倪 02],于同年出版《数学物理方法》[胡倪 25],这是本优秀的教材.

Chapter 1. 古典变分原理

1.1 变分学中的基本概念

Definition 1.1 [函数类 (function class)]. 函数类是满足某一类性质的函数全体构成的集合.

Example. 例如, 符号 $C^n(\mathbb{R})$ 表示在实数轴上存在 n 阶连续的导数的函数全体.

Definition 1.2 [函数空间 (function space)]. 函数空间是赋予了代数或拓扑结构的函数类, 在变分问题中一般要求陪域是数域.

Example. 例如, 平方可积函数空间 $L^2(\Omega)$, 其上装备了内积 $\langle f, g \rangle = \int_{\Omega} f(x) g(x) dx$.

Definition 1.3 [泛函 (functional)]. 泛函是定义域为函数空间的函数, 陪域一般是数.

Example. 例如, 作用量 $S[\phi] = \int \mathcal{L}(\phi, \partial\phi) dx$, 称作用量 S 为场 ϕ 的泛函.

顺带一提, 物理上常称泛函的自变量为**宗量 (functional)**². 为了研究泛函的极值, 我们需要引入函数空间中距离和领域的概念.

Definition 1.4 [多重指标]. 多重指标 $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_m)$, 其中 $m \in \mathbb{N}, \alpha_i \in \mathbb{N}, i = 1, \dots, m$,

$$D^{\alpha} := \frac{\partial^{|\alpha|}}{\partial x_1^{\alpha_1} \dots \partial x_m^{\alpha_m}},$$

其中 $|\alpha| = \sum_{i=1}^m \alpha_i$.

Definition 1.5 [n 级距离]. 设 $\phi, \psi : \Omega \subseteq \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^k$ 是定义在区域 Ω 上的多元向量值函数,

²「宗量」一词常用于中文物理语境, 且没有数学上严格明确的定义, 也常代指物理量之间的依赖关系. 例如物理学习惯上常用诸如 $x = x(t)$ 的符号, 意思是「 x 这个物理量依赖于 t 」, 而不是像数学上的 $y = f(t)$, 意思是「 y 这个因变量通过映射 f 依赖于自变量 t 」, 我们说「 t 是 x 的宗量」, 在这种语境下, $x(t)$ 与 $x(t^2)$ 等有时意思是相同的. 类似的还有 Maxwell 速率分布 $f(v)$, 很多时候 $f(v), f(\mathbf{v}), f(v^2)$ 等都混着使用, 仅依靠上下文区分细微差别.

1.1. 变分学中的基本概念

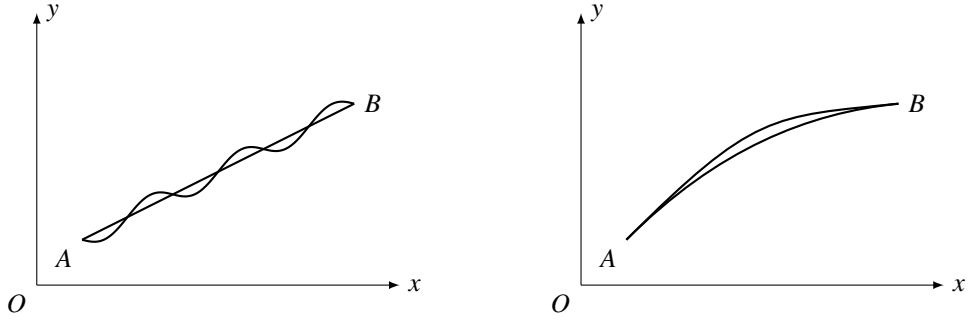


Figure 1.1: 左图两个函数只有 n 阶接近, 右图两个函数有 1 阶接近

定义两者之间的 n 级距离为

$$d_n(\phi, \psi) := \max_{|\alpha| \leq n} \sup_{x \in \Omega} \|D^\alpha \phi(x) - D^\alpha \psi(x)\|.$$

Remark. 有时也定义 $d_n(\phi, \psi) = \sum_{|\alpha| \leq n} \sup_{x \in \Omega} \|D^\alpha \phi(x) - D^\alpha \psi(x)\|$, 可以证明两个定义给出的拓扑是等价的.

Definition 1.6 [n 阶 δ 邻域]. 定义在 $\Omega \subseteq \mathbb{R}^m$ 上的 $\mathbb{R}^k$ 函数 ϕ 的 n 阶 δ 邻域为

$$U_\delta^{(n)}(\phi) := \left\{ \psi \in C^n(\Omega, \mathbb{R}^k) : d_n(\phi, \psi) < \delta \right\}.$$

如果函数 ψ 处在函数 ϕ 的 n 阶 δ 邻域内, 我们还说两个函数有 n 阶 δ 接近度. 根据定义显然有, 若 ϕ 和 ψ 具有 n 阶 δ 接近度, 则两者具有任意比 n 阶低的 δ 的接近度. 领域概念已出, 泛函极值可见文生意, 意同微积分中极值的概念, 所谓泛函极值, 就是在作为定义域的函数空间中, 某个邻域内取得极值的点.

为了求取泛函极值, 我们仿照微积分中求取极值的操作, 在自变量/宗量中加入扰动, 当位于极值点时, 这个扰动造成的一阶效应是 0, 这样我们就得到了极值的必要条件, 为此引入函数变分的概念, 其用来描述如何微动函数空间.

Chapter 1. 古典变分原理

Definition 1.7 [函数变分]. 设 $\phi : \Omega \subseteq \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^k$, 任取一个同类型的函数 η , 称为**变分函数**, 定义**扰动族** $\phi_\varepsilon(r) = \phi(r) + \varepsilon\eta(r)$, 其中 ε 为充分小纯数, 是变量. 对函数 $\phi(r)$ 的**变分** 定义为

$$\delta\phi(r) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{d}{d\varepsilon} \phi_\varepsilon(r),$$

其中 $\phi_\varepsilon(r)$ 是 $\phi(r)$ 的 0 阶 δ 领域内的函数. 右式也被称为 **Gateaux 导数 (Gateaux derivative)**.

依定义, 立刻有 $\delta\phi(r) = \eta(r)$, 而 $\eta(r)$ 则是任意取定的, ε 是一个充分小的纯数. 在微积分中, dx 表示一阶无穷小量, 但是在这里, $\delta\phi$ 不是无穷小的, 而是类似 Δx 的「在函数空间中的一段有限位移」.

Proposition 1.1. 如果 $\phi(r)$ 可微性足够, 则 $D^\alpha \delta\phi(r) = \delta D^\alpha \phi(r)$.

Proof. 我们直接计算:

$$D^\alpha \delta\phi = D^\alpha \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{d}{d\varepsilon} \phi_\varepsilon = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{d}{d\varepsilon} D^\alpha \phi_\varepsilon = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{d}{d\varepsilon} (D^\alpha \phi)_\varepsilon = \delta D^\alpha \phi.$$

得证. □

注意符号 ϕ_ε 的意义, 应当理解为「在 ϕ 的函数空间内的邻域内游走」, 也就是变动 η 从而遍历 ϕ_ε .

Proposition 1.2. 函数变分的导数性:

- 线性: $\delta(a\phi + b\psi) = a\delta\phi + b\delta\psi$.
- Leibniz 法则: $\delta(fg) = (\delta f)g + f(\delta g)$;

Proof. 我们有

$$\begin{aligned} \delta(a\phi + b\psi) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{d}{d\varepsilon} (a\phi + b\psi)_\varepsilon = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{d}{d\varepsilon} (a\phi_\varepsilon + b\psi_\varepsilon) \\ &= a \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{d}{d\varepsilon} \phi_\varepsilon + b \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{d}{d\varepsilon} \psi_\varepsilon = a\delta\phi + b\delta\psi, \end{aligned}$$

1.2. 泛函导数

线性得证.

$$\begin{aligned}\delta(fg) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{d}{d\varepsilon} (fg)_\varepsilon = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{d}{d\varepsilon} (f_\varepsilon g_\varepsilon) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\frac{d}{d\varepsilon} f_\varepsilon \right) g_\varepsilon + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} f_\varepsilon \left(\frac{d}{d\varepsilon} g_\varepsilon \right) \\ &= (\delta f)g + f(\delta g),\end{aligned}$$

Leibnitz 法则得证. □

1.2 泛函导数

Convention 1.1. 约定从此刻起, 除非特殊说明, 否则讨论的对象均具有足够的可微性.

设泛函的一般形式, 即依赖函数任意阶可能的导数, 写作

$$S[\phi] = \int_{\Omega} L\left(\mathbf{r}, D^a \phi, D^b \phi, \dots\right) d\mathbf{r}, \quad (1.1)$$

其中 $\mathbf{r}$ 由 n 个独立分量, ϕ 是 m 分量矢量, 诸 $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \dots$ 均是多重指标.

现在考虑自变量 $\phi \rightarrow \phi + \varepsilon \delta \phi$, 试问 S 如何变化. 我们希望变分符号作用在泛函上有类似微积分中对普通函数的 Taylor 展开的效果³,

$$S[\phi + \varepsilon \delta \phi] = S[\phi] + \varepsilon \delta S[\phi] + \frac{\varepsilon^2}{2} \delta^2 S[\phi] + \frac{\varepsilon^3}{3!} \delta^3 S[\phi] + \dots, \quad (1.2)$$

而 $S[\phi + \varepsilon \delta \phi]$ 确实可以作为关于 ε 的一元函数, 寻此途径 Taylor 展开得到,

$$S[\phi + \varepsilon \delta \phi] = S[\phi] + \varepsilon \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\frac{d}{d\varepsilon} S[\phi + \varepsilon \delta \phi] \right) + \frac{\varepsilon^2}{2} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\frac{d^2}{d\varepsilon^2} S[\phi + \varepsilon \delta \phi] \right) + \dots, \quad (1.3)$$

对比第一阶系数, 从而得到:

³若感到不太熟悉, 参考

$$f(x + \varepsilon dx) = f(x) + \varepsilon df(x) + \dots,$$

这里的 $\phi + \varepsilon \delta \phi$ 就相当于 $x + \varepsilon dx$, 回忆 Def. 1.7 的讨论, 我们说「 $\delta \phi$ 像是 Δx 」, 而当 ε 足够小 $\varepsilon \delta \phi$ 就像是 εdx .

Chapter 1. 古典变分原理

Definition 1.8 [泛函变分]. 泛函 $S[\phi]$ 的变分被定义为

$$\delta S[\phi] = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{d}{d\varepsilon} S[\phi + \varepsilon \delta\phi].$$

右式也被称为 **Gateaux 导数** (Gateaux derivative).

泛函变分可以推出 **Def. 1.7**, 只要取函数是自己的恒等泛函即可.

Definition 1.9 [泛函导数]. 若存在一组函数 $\left(\frac{\delta S}{\delta \phi^i}\right)(\mathbf{r})$ 使得

$$\delta S[\phi] = \sum_{i=1}^m \int_{\Omega} \left(\frac{\delta S}{\delta \phi^i}\right)(\mathbf{r}) \eta^i(\mathbf{r}) d\mathbf{r},$$

则称这组函数构成的矢量为 $S[\phi]$ 的**泛函导数**.

从定义上看可知, 泛函导数不是唯一的. 注意这里 η 是任意的函数. 由 **Def. 1.7** 我们立刻得到

$$\delta S[\phi] = \sum_{i=1}^m \int_{\Omega} \left(\frac{\delta S}{\delta \phi^i}\right)(\mathbf{r}) \delta \phi^i(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (1.4)$$

以及

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\frac{d}{d\varepsilon} S[\phi + \varepsilon \delta\phi] \right) = \sum_{i=1}^m \int_{\Omega} \left(\frac{\delta S}{\delta \phi^i}\right)(\mathbf{r}) \eta^i(\mathbf{r}) d\mathbf{r},$$

这不过是两个定义指代同一个对象.

Proposition 1.3.

$$S[\phi + \delta\phi] - S[\phi] = \delta S[\phi] + \mathcal{O}(\delta^2 S[\phi]).$$

Proof. 在 (1.2) 中取 $\varepsilon = 1$ 即可. □

这个命题的重要意义是告诉我们, 泛函变分具有和微积分中函数的小量展开一样的性质, 并且是有高阶项的.

1.2. 泛函导数

Example 1 [Coulomb 势]. 某位置 $\mathbf{r}$ 处的电势 $V(\mathbf{r})$ 是电荷密度分布 $\rho(\mathbf{r}')$ 的函数, 事实上前者是后者的泛函, 记作 $V[\rho(\mathbf{r}'), \mathbf{r}]$, 根据电磁学有

$$V[\rho(\mathbf{r}'), \mathbf{r}] = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}'.$$

我们尝试计算泛函导数, 也就是「电荷密度分布略微变动对电势分布的影响」.

Solution. 我们根据 [Def. 1.8](#) 计算变分,

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{d}{d\varepsilon} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\mathbf{r}') + \varepsilon\eta(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\eta(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}',$$

然后根据 [Def. 1.9](#) 对照看泛函导数, 即

$$\frac{\delta V[\mathbf{r}, \rho(\mathbf{r}')]}{\delta \rho(\mathbf{r}')} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}.$$

这个结果有明确的物理意义, 也就是距离 $\mathbf{r}$ 点越远的地方, 电荷密度分布的概念对 $\mathbf{r}$ 处影响越小, 以 $\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$ 的规律衰减, 恰好是电磁学中电势的距离衰减规律. 我们也体会到 [Def. 1.9](#) 第一眼看上去很不自然, 但实则这个定义非常恰当. $\square$

Example 2. 运用 (1.4) 重新计算 [Ex. 1](#).

Solution. 我们有

$$\begin{aligned} V[\mathbf{r}, \rho(\mathbf{r}') + \delta\rho(\mathbf{r}')] &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\mathbf{r}') + \delta\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' \\ &= V[\mathbf{r}, \rho(\mathbf{r}')] + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\delta\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}', \end{aligned}$$

所以 $V[\mathbf{r}, \rho(\mathbf{r}') + \delta\rho(\mathbf{r}')] - V[\mathbf{r}, \rho(\mathbf{r}')] = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\delta\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}'$, 对比 [Def. 1.9](#) 即可. $\square$

Example 3 [Coulomb 相互作用能]. *L. H. Thomas* 和 *E. Fermi* 提出用以下 *Coulomb* 势能泛

Chapter 1. 古典变分原理

函数表示电荷体系的相互作用能,

$$J[\rho] = \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}'.$$

我们希望计算泛函导数, 也就是「电荷密度分布略微改变时, 体系的相互作用能变化多少」.

Solution.

$$\begin{aligned} J[\rho + \delta\rho] &= \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}') + \rho(\mathbf{r}) \delta\rho(\mathbf{r}') + \delta\rho(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}') + \delta\rho(\mathbf{r}) \delta\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \\ &= J[\rho] + \iint \frac{\rho(\mathbf{r}) \delta\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' + \mathcal{O}(\delta\rho^2), \end{aligned}$$

根据 [Prop. 1.3](#), 我们知道第二项就是 $\delta J[\rho]$, 再根据 [Def. 1.9](#) 就得到

$$\frac{\delta J}{\delta\rho}(\mathbf{r}') = \int \frac{\rho(\mathbf{r})}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}.$$

□

在 [Def. 1.9](#) 中, 我们要求的是泛函导数对任意的 η 均能满足等式, 所以我们可以取一些特别的「函数」将积分算出来, 我们取 Dirac δ -函数 $\eta^i(\mathbf{r}) = \delta_{ij} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, 得到

$$\delta S[\phi] = \sum_{i=1}^m \int_{\Omega} \left(\frac{\delta S}{\delta \phi^i} \right)(\mathbf{r}) \delta \phi^i(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \sum_{i=1}^m \int_{\Omega} \left(\frac{\delta S}{\delta \phi^i} \right)(\mathbf{r}) \delta_{ij} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r} = \left(\frac{\delta S}{\delta \phi^j} \right)(\mathbf{r}'),$$

再看 [Def. 1.9](#), 我们得到:

Proposition 1.4.

$$\left(\frac{\delta S}{\delta \phi^j} \right)(\mathbf{r}') = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{d}{d\varepsilon} S[\phi(\mathbf{r}) + \varepsilon \delta_j(\mathbf{r} - \mathbf{r}')],$$

其中 $\delta_j(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') (\delta_{ij})_{i=1}^m$.

当然我们这里使用的 Dirac δ -函数, 在分析学中是众所周知的不严谨, 但是上面的结果依旧是正确的. 关于严谨性不是本部分的讨论范畴.

1.2. 泛函导数

Example 4. 运用 *Prop. 1.4* 再次计算 *Ex. 1*.

Solution.

$$\begin{aligned} \left(\frac{\delta V}{\delta \rho} \right) (\mathbf{r}'') &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{d}{d\varepsilon} V [\rho(\mathbf{r}') + \varepsilon \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'')] \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{d}{d\varepsilon} \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \int \frac{\rho(\mathbf{r}') + \varepsilon \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \int \frac{\delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' \\ &= \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}''|}. \end{aligned}$$

□

Example 5. 1935 年, Weizsäcker 对 Thomas 和 Fermi 提出的泛函 *Ex. 3* 提出了动能修正项:

$$T_W[\rho(\mathbf{r})] = \int \frac{\nabla \rho(\mathbf{r}) \cdot \nabla \rho(\mathbf{r})}{\rho(\mathbf{r})} d\mathbf{r},$$

计算因为电荷密度分布发生微变引发的泛函导数.

Solution.

$$\begin{aligned} \frac{\delta T_W}{\delta \rho}(\mathbf{r}') &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{d}{d\varepsilon} T_W[\rho(\mathbf{r}) + \varepsilon \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')] \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{d}{d\varepsilon} \int \frac{\nabla \rho(\mathbf{r}) \cdot \nabla \rho(\mathbf{r}) + 2\varepsilon \nabla \rho(\mathbf{r}) \cdot \nabla \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \varepsilon^2 \nabla \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \cdot \nabla \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\rho(\mathbf{r}) + \varepsilon \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')} d\mathbf{r} \\ &= \int \frac{2\nabla \rho(\mathbf{r}) \cdot \nabla \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\rho(\mathbf{r})} d\mathbf{r} = -2\nabla \cdot \frac{\nabla \rho(\mathbf{r}')}{\rho(\mathbf{r}')} = -2 \frac{\nabla^2 \rho(\mathbf{r}')}{\rho(\mathbf{r}')} + \frac{\nabla \rho(\mathbf{r}') \cdot \nabla \rho(\mathbf{r}')}{\rho^2(\mathbf{r}')}, \end{aligned}$$

我们这里避免讨论一些分析学上的严谨性问题, 按照物理上认可的作法, 上述过程没有问题. □

Proposition 1.5.

$$\frac{\delta \phi(\mathbf{r})}{\delta \phi(\mathbf{r}')} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \mathbf{I},$$

其中 $\mathbf{I}$ 是 $m \times m$ 的单位矩阵.

Proof. 代入 *Prop. 1.4* 立刻得到. □

Chapter 1. 古典变分原理

Example 6. 考虑非齐次微分方程 $\hat{L}\phi(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r})$, 利用泛函导数和 *Green* 函数的积分核定义 $\phi(\mathbf{r}) = \int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') f(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'$ 导出其冲击响应定义 $\hat{L}G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$.

Solution. 我们可以把解 ϕ 视作源 f 的泛函 $\phi[f](\mathbf{r}) = \hat{L}^{-1}f(\mathbf{r})$, 这里的 $\hat{L}^{-1}$ 就是原方程的解算子. 于是根据 *Green* 函数的积分核定义, 有

$$\frac{\delta\phi[f](\mathbf{r})}{\delta f(\mathbf{r}')} = G(\mathbf{r}, \mathbf{r}').$$

又根据 *Prop. 1.5*, 有

$$\frac{\delta\phi[f](\mathbf{r})}{\delta f(\mathbf{r}')} = \frac{\delta\hat{L}^{-1}f(\mathbf{r})}{\delta f(\mathbf{r}')} = \hat{L}^{-1} \frac{\delta f(\mathbf{r})}{\delta f(\mathbf{r}')} = \hat{L}^{-1}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'),$$

整理得到 $\hat{L}^{-1}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. □

Theorem 1.1. 如果在积分边界上, $\delta\phi$ 的任意导数均为 0, 则

$$\frac{\delta S[\phi]}{\delta\phi^i} = \sum_{|\alpha|=0}^{\infty} (-1)^{|\alpha|} D^\alpha \left(\frac{\partial L}{\partial (D^\alpha \phi^i)} \right).$$

这就是泛函导数最一般的形式, 在证明其之前, 我们先说明其可以退化为我们熟知的低维度形式. 在经典场论中, 常见到 $L = L(\mathbf{r}, \phi(\mathbf{r}), \partial_\mu \phi(\mathbf{r}))$, 此时根据定理有

$$\frac{\delta S[\phi]}{\delta\phi} = (-1)^0 \frac{\partial L}{\partial\phi} + (-1)^1 \partial_\mu \frac{\partial L}{\partial(\partial_\mu \phi)},$$

注意这里使用了 Einstein 求和约定对 μ 求和, 即 $|\alpha| = 1$ 其实有四项, 分别对应 $\partial/\partial x^\mu$, $\mu = 0, 1, 2, 3$. 我们熟知经典解 ϕ 处有一阶变分为 0, 所以上式两侧都是 0, 从而上式右侧就是熟知的 Euler-Lagrange 方程.

Proof. 我们有

$$\begin{aligned} \int \frac{\delta S[\phi]}{\delta\phi}(\mathbf{r}) \cdot \eta(\mathbf{r}) d\mathbf{r} &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{d}{d\varepsilon} \int L(\mathbf{r}, D^a\phi + \varepsilon D^a\delta\phi, \dots) d\mathbf{r} \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int \frac{\partial}{\partial\varepsilon} L(\mathbf{r}, D^a\phi + \varepsilon D^a\delta\phi, \dots) d\mathbf{r} = \int \sum_{|\alpha|=0}^{\infty} \left(\frac{\partial L}{\partial (D^\alpha \phi)} \right) D^\alpha \delta\phi d\mathbf{r} \end{aligned}$$

1.2. 泛函导数

$$= \int \left\{ \sum_{|\alpha|=0}^{\infty} (-1)^{|\alpha|} D^{\alpha} \left(\frac{\partial L}{\partial (D^{\alpha} \phi)} \right) \right\} \delta \phi \, dr,$$

其中最后一个等号是反复进行分布积分并扔掉边界项得到. 因为 $\delta \phi = \eta$ 是任意函数, 对照等式两侧即得. $\square$

Theorem 1.2 [链式法则]. 设 $S[\phi] = \int_{\Omega} L(r, D^a \phi, D^b \phi, \dots) \, dr$, ψ 是另一个函数, 则

$$\frac{\delta S[\phi]}{\delta \psi} = \int \frac{\delta S}{\delta \phi} \cdot \frac{\delta \phi}{\delta \psi} \, dr.$$

Remark. 符号 $\frac{\delta \phi}{\delta \psi} = \left(\frac{\delta \phi^i}{\delta \psi} \right)_{i=1}^m$.

Proof. 根据 *Def. 1.9*,

$$\delta S = \int \frac{\delta S}{\delta \phi} \cdot \delta \phi \, dr,$$

同时有

$$\delta \phi = \int \frac{\delta \phi}{\delta \psi} \cdot \delta \psi \, dr,$$

注意点乘是按照 $\frac{\delta(\cdot)}{\delta \psi} \cdot \delta \psi$ 作用的, 代回得到

$$\delta S = \iint \frac{\delta S}{\delta \phi} \cdot \frac{\delta \phi}{\delta \psi} \cdot \delta \psi \, dr \, dr',$$

按照 *Def. 1.9* 得到

$$\frac{\delta S}{\delta \psi} = \int \frac{\delta S}{\delta \phi} \cdot \frac{\delta \phi}{\delta \psi} \, dr,$$

内积是按照 $\frac{\delta S}{\delta \phi} \cdot \frac{\delta \phi}{\delta(\cdot)}$ 作用的. $\square$

Corollary 1.1.

$$I \delta(r - r') = \int \frac{\delta \phi(r)}{\delta \psi(r'')} \cdot \frac{\delta \psi(r'')}{\delta \phi(r')} \, dr'',$$

其中 I 是 $m \times m$ 的单位矩阵.

Chapter 1. 古典变分原理

Remark. 这个推论的重要意义在于, 说明 $\frac{\delta\phi(r)}{\delta\psi(r'')}$ 和 $\frac{\delta\psi(r'')}{\delta\phi(r')}$ 构成泛函导数意义的倒反关系.

Proof. 根据 *Prop. 1.5*

$$\frac{\delta\phi(r)}{\delta\phi(r')} = \int \frac{\delta\phi(r)}{\delta\psi(r'')} \cdot \frac{\delta\psi(r'')}{\delta\phi(r')} dr'' = I\delta(r-r'),$$

得证. □

Theorem 1.3 [泛函的 Taylor 公式].

$$S[\phi + \delta\phi] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int \cdots \int \frac{\delta^n S}{\delta\phi(r_1) \cdots \delta\phi(r_n)} \cdot \delta\phi(r_1) \cdots \delta\phi(r_n) dr_1 \cdots dr_n.$$

Remark. 这里的内积是 n 重内积.

Proof. 在 (1.2) 中取 $\varepsilon = 1$, 然后对每一阶变分, 使用 (1.4). □

1.3 硬边界的泛函极值的必要条件

我们尝试求取 (1.1) 的极值, 使用 *Thm. 1.1*, 我们知道, 当 $S[\phi]$ 取极值的时候, 其变分应该是 0, 于是有:

Theorem 1.4. 如果在积分边界上, $\delta\phi$ 的任意导数均为 0, 则 $S[\phi]$ 取极值的必要条件为

$$\sum_{|\alpha|=0}^{\infty} (-1)^{|\alpha|} D^{\alpha} \left(\frac{\partial L}{\partial (D^{\alpha} \phi^i)} \right) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, m.$$

Corollary 1.2 [**Euler-Lagrange 方程 (Euler-Lagrange equation)**]. 考虑泛函 $S[y] = \int L(x, y, y') dx$, 其导出的泛函极值必要条件为

$$\frac{\partial L}{\partial y} - \frac{d}{dx} \frac{\partial L}{\partial y'} = 0,$$

这就是著名的 *Euler-Lagrange 方程*. 在场论中, 则常把 *Lagrange* 量写作时空密度的形式

1.3. 硬边界的泛函极值的必要条件

且考虑多个场 $S[\phi_a(x^\mu)] = \int \mathcal{L}(x^\mu, \phi_a(x^\mu), \partial_\nu \phi_a(x^\mu)) d^4x$, 于是相应的 *Euler-Lagrange* 方程则为

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi_a} - \partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi_a)} = 0.$$

以上均要求边界处的各阶变分导数为 0.

Example 7 [Klein-Gordon 方程 (Klein-Gordon equation)]. 考虑弯曲时空中任意坐标系下的一个实标量场的 *Lagrange* 量密度

$$\mathcal{L} = -\frac{\hbar}{2} g^{\mu\nu} (\nabla_\mu \phi) (\nabla_\nu \phi) - \frac{1}{2} \frac{m^2 c^2}{\hbar} \phi^2 + \xi R \phi^2,$$

据此推导出 *Klein-Gordon* 方程

$$\left(\nabla_\mu \nabla^\mu - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} + \frac{2\xi R}{\hbar} \right) \phi = 0.$$

Solution. 当存在度规的时候, 4-散度公式为

$$\nabla_\mu V^\mu = \frac{1}{\sqrt{-g}} \partial_\mu (\sqrt{-g} V^\mu). \quad (1.5)$$

因此, 相应的 *Euler-Lagrange* 方程应该使用度规修正:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} - \frac{1}{\sqrt{-g}} \partial_\mu \sqrt{-g} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi)} = 0. \quad (1.6)$$

这个公式有点类似于 $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} - \nabla_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla_\mu \phi)} = 0$, 即便这个形式实际存在歧义 (这个形式正确的理解是, 把 $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi)} \equiv \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla_\mu \phi)}$ 理解为逆变矢量, 所以前面的 ∂_μ 应该替换为协变导数 ∇_μ). 下面我们正式开始计算, 因为 ϕ 是标量, 所以 $\nabla_\mu \phi = \partial_\mu \phi$, 所以 (1.6) 给出

$$-\frac{m^2 c^2}{\hbar} \phi + 2\xi R \phi + \frac{1}{\sqrt{-g}} \partial_\mu (\sqrt{-g} \hbar g^{\mu\nu} (\partial_\nu \phi)) = 0.$$

注意, 第三项括号内部是逆变矢量, 利用 (1.5), 得到

$$-\frac{m^2 c^2}{\hbar} \phi + 2\xi R \phi + \nabla_\mu (\hbar \nabla^\mu \phi) = 0,$$

Chapter 1. 古典变分原理

整理后得到的就是 *Klein-Gordon* 方程. □

Example 8 [最速降线 (brachistochrone)]. 在一铅直平面上, 求过两定点的光滑曲线段, 使质点由静止开始在重力作用下从较高点沿着该曲线滑落到较低点所用的时间最短.

Solution. 以起点为原点, 如图取平面为坐标系. 设此线段的曲线方程为 $y = y(x)$, 用 s 表示从原点算起的曲线长度, 则下落的时间为

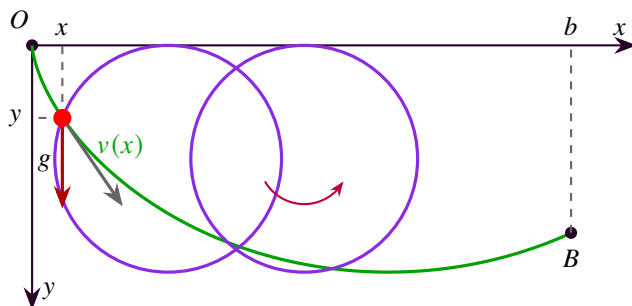


Figure 1.2: cycloid

$$I[y] = \int_0^{s(x)} \frac{ds}{v(x)},$$

其中 $s(x)$ 表示从原点算起, 横坐标为 x 时的曲线长度, $v(x)$ 表示这里的线速度, 根据能量守恒有 $v(x) = \sqrt{2gy}$, g 为重力加速度. 由于 $ds = \sqrt{1+y'^2}dx$, 从而

$$I[y] = \frac{1}{\sqrt{2g}} \int_0^{s(x)} \left(\frac{1+y'^2}{y} \right)^{\frac{1}{2}} dx. \quad (1.7)$$

注意到被积函数 $F := \left(\frac{1+y'^2}{y} \right)^{\frac{1}{2}}$ 不显含 x , 所以其 *Legendre* 变换

$$H = y' \frac{\partial F}{\partial y'} - F = \frac{1}{\sqrt{y(1+y'^2)}} \quad (1.8)$$

1.3. 硬边界的泛函极值的必要条件

是一个守恒量. 如上是一个 y, y' 构成的一阶常微分方程, 解得

$$\begin{cases} x = \frac{C}{2} (t - \sin t), \\ y = \frac{C}{2} (1 - \cos t). \end{cases}$$

这是摆线 (cycloid) 方程, 常数 C 根据终点位置决定. □

Example 9 [中心力场的 Noether 定理]. 证明中心力场下角动量守恒.

Solution. 中心力场下的作用量为

$$S = \int \left[\frac{1}{2} m (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2) - V(r) \right] dt.$$

注意到对称性 $\theta \mapsto \theta + \varepsilon \alpha$ 使得 S 不变, 这里的 α 是个常量. 从而, 若 r 与 θ 满足运动方程, 则 $\frac{\delta S}{\delta \theta} = 0$, 计算左侧式子

$$\begin{aligned} \left(\frac{\delta S}{\delta \theta} \right) (t) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{d}{d\varepsilon} S [\theta(t' + \varepsilon \delta(t - t'))] \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{d}{d\varepsilon} \int \left[\frac{1}{2} m (\dot{r}^2 + r^2 (\dot{\theta} + \varepsilon \delta(t - t'))^2) - V(r) \right] dt' \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int \frac{1}{2} m r^2 2 (\dot{\theta} + \varepsilon \delta(t - t')) \delta(t - t') dt' \\ &= \int m r^2 \dot{\theta} \delta(t - t') dt' = \left(\frac{d}{dt'} m r^2 \dot{\theta} \right)_{t'=t} = \frac{d}{dt} m r^2 \dot{\theta} = 0, \end{aligned}$$

这就是角动量守恒. 以上使用了 *Prop. 1.4*. □

Theorem 1.5. 考虑泛函 $S = \int L(t, q_a, \dot{q}_a) dt$, 定义 $p_a := \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_a}$, $H := \sum_a p_a \dot{q}_a - L$, 如果 $\frac{\partial L}{\partial t} = 0$, 则 $\frac{dH}{dt} = 0$.

Proof. 计算 H 的时间导数:

$$\frac{dH}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\sum_a p_a \dot{q}_a - L \right) = \sum_a (\dot{p}_a \dot{q}_a + p_a \ddot{q}_a) - \frac{dL}{dt}.$$

Chapter 1. 古典变分原理

由链式法则

$$\frac{dL}{dt} = \sum_a \left(\frac{\partial L}{\partial q_a} \dot{q}_a + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_a} \ddot{q}_a \right) + \frac{\partial L}{\partial t}.$$

利用 $p_a = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_a}$, 得到

$$\frac{dL}{dt} = \sum_a \left(\frac{\partial L}{\partial q_a} \dot{q}_a + p_a \ddot{q}_a \right) + \frac{\partial L}{\partial t}.$$

代回 $\frac{dH}{dt}$ 得

$$\frac{dH}{dt} = \sum_a (\dot{p}_a - \frac{\partial L}{\partial q_a}) \dot{q}_a - \frac{\partial L}{\partial t}.$$

由 Euler-Lagrange 方程 $\dot{p}_a = \frac{\partial L}{\partial q_a}$, 于是 $\frac{dH}{dt} = -\frac{\partial L}{\partial t}$. 若 $\frac{\partial L}{\partial t} = 0$, 则 $\frac{dH}{dt} = 0$. □

我们现在来讨论在场论中的对称性对应什么数学对象. 考虑

$$S[\phi_a(x^\mu)] = \int \mathcal{L}(x^\mu, \phi_a(x^\mu), \partial_\nu \phi_a(x^\mu)) d^4x,$$

所谓对称性, 指的是在无穷小变化下

$$\phi_a(x) \mapsto \phi'_a(x) = \phi_a(x) + \alpha \delta \phi_a(x)$$

下, Lagrange 量的变化为

$$\mathcal{L}(x) \mapsto \mathcal{L}'(x) = \mathcal{L}(x) + \alpha \partial_\mu \mathcal{J}^\mu(x),$$

其中 $\delta \phi_a(x)$ 是满足某种对称性的场的一阶变分, Lagrange 量在允许相差一个四散度的条件下是不变的, 四散度对应边界项, 不影响导出 **Cor. 1.2**. 精度只计一阶, 我们有

$$\begin{aligned} \alpha \delta \mathcal{L} &= \sum_a \left\{ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi_a} \alpha \delta \phi_a + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi_a)} \partial_\mu (\alpha \delta \phi_a) \right\} \\ &= \sum_a \left\{ \alpha \partial_\mu \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi_a)} \delta \phi_a \right) + \alpha \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi_a} - \partial_\mu \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi_a)} \right) \right] \delta \phi_a \right\}, \end{aligned}$$

第二项被 Euler-Lagrange 方程消除, 令剩下的项为 $\alpha \partial_\mu \mathcal{J}^\mu$, 于是:

Theorem 1.6 [Noether 定理 (Noether's theorem)]. 每个作用量的连续对称性对应一个守

1.3. 硬边界的泛函极值的必要条件

恒律,

$$\partial_\mu j^\mu(x) = 0, \quad j^\mu(x) := \sum_a \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi_a)} \delta \phi_a - \mathcal{J}^\mu,$$

这里 $\delta \phi_a$ 就是场的满足对称性的微变.

Noether 定理可用于时空变换, 考虑无限小变换 $x^\mu \mapsto x^\mu - a^\mu$, 场的变换为

$$\phi_a(x) \mapsto \phi_a(x + a) = \phi_a(x) + a^\mu \partial_\mu \phi_a(x),$$

这里我们均默认略去二阶小量. Lagrange 量也是给定度规后的标量, 其必然按照相同的方式变换,

$$\mathcal{L} \mapsto \mathcal{L} + a^\mu \partial_\mu \mathcal{L} = \mathcal{L} + a^\nu \partial_\mu (\delta^\mu_\nu \mathcal{L}).$$

运用 Noether 定理, 我们有守恒流为

$$j^\mu(x) = \sum_a \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi_a)} a^\nu \partial_\nu \phi_a - a^\nu \delta^\mu_\nu \mathcal{L},$$

去掉 a^ν , 我们得到了:

Definition 1.10 [能动张量 (energy-momentum tensor)]. 能动张量被定义为

$$T^\mu_\nu = \sum_a \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi_a)} \partial_\nu \phi_a - \delta^\mu_\nu \mathcal{L}.$$

Remark. Noether 定理导出的能动张量一般不是对称的, 但是在保持原 Noether 定理涉及的方程形式不变的情况下, 可以通过添加散度项使其对称化.

并且我们发现

$$\mathcal{H} = T^{00} = \sum_a \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}_a} \dot{\phi}_a - \mathcal{L},$$

Hamilton 量正是能动张量的一个分量.

Theorem 1.7 [局域守恒律]. 如果作用量不显含 x^ρ , 则该方向有动量守恒 $\partial_\mu T^\mu_\rho = 0$.

Remark. 不显含 x^ρ 的意思是不含那一个方向, 其余方向可以显含.

Chapter 1. 古典变分原理

Proof. 固定某个 ρ , 并考虑沿 x^ρ 方向的无穷小平移

$$x^\mu \mapsto x^\mu - a^\mu, \quad a^\mu = \varepsilon \delta^\mu_\rho,$$

其中 ε 为常数, ρ 固定不求和. 此时场的变分为

$$\delta\phi_a = a^\nu \partial_\nu \phi_a = \varepsilon \partial_\rho \phi_a.$$

同时 *Lagrange* 量作为标量满足

$$\delta\mathcal{L} = a^\nu \partial_\nu \mathcal{L} = \varepsilon \partial_\rho \mathcal{L} = \varepsilon \partial_\mu (\delta^\mu_\rho \mathcal{L}).$$

因而这是一个 *Noether* 对称性, 其中 $\mathcal{J}^\mu = \delta^\mu_\rho \mathcal{L}$. 代入前述 *Noether* 定理

$$j^\mu = \sum_a \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi_a)} \delta\phi_a - \mathcal{J}^\mu,$$

得

$$j^\mu = \varepsilon \left(\sum_a \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi_a)} \partial_\rho \phi_a - \delta^\mu_\rho \mathcal{L} \right) = \varepsilon T^\mu_\rho.$$

由 *Noether* 定理的守恒律 $\partial_\mu j^\mu = 0$, 立刻得到 $\varepsilon \partial_\mu T^\mu_\rho = 0$. 由于 ε 任意, 故 $\partial_\mu T^\mu_\rho = 0$. $\square$

Example 10. 考虑密度为 ρ 的一维弦振动, 张力为 T , 导出 *Lagrange* 量, 运动方程, 能动张量和指出守恒量.

Solution. 系统的 *Lagrange* 量以线密度计 $\mathcal{L} = \frac{1}{2}\rho\dot{y}^2 - \frac{1}{2}Ty'^2$, 代入 *Thm. 1.1* 得到波动方程

$$Ty'' = \rho\ddot{y}.$$

根据 *Def. 1.10*, 我们分别计算能动张量的四个分量,

$$T^0_0 = \frac{1}{2}\rho\dot{y}^2 + \frac{1}{2}Ty'^2, \quad T^0_1 = \rho\dot{y}y', \quad T^1_0 = -Ty'y', \quad T^1_1 = -\frac{1}{2}\rho\dot{y}^2 - \frac{1}{2}Ty'^2,$$

以 T^0_1 为例, 计算过程为

$$T^0_1 = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y'} \dot{y} - \delta^0_1.$$

1.4. 带约束的泛函极值的必要条件

按照能动张量的物理含义, 上述四式分别为 *Hamilton* 量密度, 能流, 正则动量密度, 动量流. 根据 *Thm. 1.7*, 此处 *Lagrange* 量不显含 t 与 x , 我们可以导出

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}T^0_0 + \frac{\partial}{\partial x}T^1_0 &= \rho\dot{y}\ddot{y} + Ty'\dot{y}' - Ty'' - Ty'\dot{y}' = \rho\dot{y}\ddot{y} - Ty''\dot{y} = 0, \\ \frac{\partial}{\partial t}T^0_1 + \frac{\partial}{\partial x}T^1_1 &= \rho\ddot{y}y' + \rho\dot{y}\dot{y}' - Ty'y'' - \rho\dot{y}\dot{y}' = \rho\ddot{y}y' - Ty'y'' = 0,\end{aligned}$$

以上两个式子均化简为波动方程. □

1.4 带约束的泛函极值的必要条件

等周问题 考虑如下两个泛函

$$\begin{cases} I[\phi_a] = \int F[x, \phi_a, \partial_\mu \phi_a] dx, \\ J[\phi_a] = \int G[x, \phi_a, \partial_\mu \phi_a] dx, \end{cases}$$

我们给定约束 $J[\phi_a] = C$, 其中 C 是一个常数, 并希望在此约束下求取 $I[\phi_a]$ 的极值.

考虑微小变分

$$\phi_a \mapsto \phi_a + \varepsilon_1 \eta_{1a} + \varepsilon_2 \eta_{2a},$$

于是我们有

$$\begin{cases} I[\phi_a + \varepsilon_1 \eta_{1a} + \varepsilon_2 \eta_{2a}] := f(\varepsilon_1, \varepsilon_2), \\ J[\phi_a + \varepsilon_1 \eta_{1a} + \varepsilon_2 \eta_{2a}] := g(\varepsilon_1, \varepsilon_2) = C, \end{cases}$$

于是问题转换为了在 $g(\varepsilon_1, \varepsilon_2) = C$ 的条件下求取 $f(\varepsilon_1, \varepsilon_2)$ 的极值, 所以可以使用 *Lagrange* 乘数法. 定义新的泛函

$$E[\phi_a] := I[\phi_a] + \lambda J[\phi_a] = \int (F + \lambda G) dx,$$

这里的 λ 待定. 我们要求在 $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$ 时, f 取得极值, 于是

$$\left(\frac{\partial E}{\partial \varepsilon_1} \right)_{\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0} = 0, \quad \left(\frac{\partial E}{\partial \varepsilon_2} \right)_{\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0} = 0,$$

也就是

$$\begin{cases} \int \sum_a \left\{ \frac{\partial (F + \lambda G)}{\partial \phi_a} - \partial_\mu \frac{\partial (F + \lambda G)}{\partial (\partial_\mu \phi_a)} \right\} \eta_{1a} dx = 0, \\ \int \sum_a \left\{ \frac{\partial (F + \lambda G)}{\partial \phi_a} - \partial_\mu \frac{\partial (F + \lambda G)}{\partial (\partial_\mu \phi_a)} \right\} \eta_{2a} dx = 0. \end{cases} \quad (1.9)$$

Chapter 1. 古典变分原理

注意使得 I 取得极值的 ϕ_a 不是方程

$$\sum_a \left\{ \frac{\partial G}{\partial \phi_a} - \partial_\mu \frac{\partial G}{\partial (\partial_\mu \phi_a)} \right\} = 0$$

的解, 这样就可以选取一个 η_{2a} 使得

$$\sum_a \left\{ \frac{\partial G}{\partial \phi_a} - \partial_\mu \frac{\partial G}{\partial (\partial_\mu \phi_a)} \right\} \neq 0.$$

代入 (1.9) 的第二式, 解得

$$\lambda = \frac{\int \sum_a \left\{ \frac{\partial F}{\partial \phi_a} - \partial_\mu \frac{\partial F}{\partial (\partial_\mu \phi_a)} \right\} \eta_{2a} dx}{\int \sum_a \left\{ \frac{\partial G}{\partial \phi_a} - \partial_\mu \frac{\partial G}{\partial (\partial_\mu \phi_a)} \right\} \eta_{2a} dx}. \quad (1.10)$$

而 η_{1a} 还是可以自由变动的, 于是

$$\sum_a \left\{ \frac{\partial (F + \lambda G)}{\partial \phi_a} - \partial_\mu \frac{\partial (F + \lambda G)}{\partial (\partial_\mu \phi_a)} \right\} = 0.$$

如果原问题取极值的解 ϕ_a 存在, 则上面的方程的有解, 其解含 λ 和两个积分常数, 把 (1.10) 带回解可以消除 λ , 再利用边界处 ϕ_a 的取值就可以确定积分常数.

Example 11 [等周问题 (isoperimetric problem)]. 平面上给定长度的封闭曲线, 计算其所围面积的最大值.

Solution. 设封闭曲线的参数方程为 $\mathbf{r} = (x(t), y(t))$, 于是面积微元为

$$dS = \frac{1}{2} |\mathbf{r} \times d\mathbf{r}| = \frac{1}{2} (x\dot{y} - y\dot{x}) dt,$$

此处我们选取合适的运动方向使得符号为正从而去掉绝对值. 于是我们要处理的问题就是

$$\begin{cases} S[x, y] = \frac{1}{2} \oint (x\dot{y} - y\dot{x}) dt \\ C[x, y] = \oint \sqrt{\dot{x}^2 + \dot{y}^2} dt = C \end{cases}$$

1.4. 带约束的泛函极值的必要条件

此处第二式为约束条件. 令 $H[x, y] = S[x, y] + \lambda C[x, y]$, 于是 *Euler-Lagrange* 方程给出

$$\begin{cases} \frac{\partial H}{\partial x} - \frac{d}{dt} \frac{\partial H}{\partial \dot{x}} = 0 \\ \frac{\partial H}{\partial y} - \frac{d}{dt} \frac{\partial H}{\partial \dot{y}} = 0 \end{cases} \implies \begin{cases} \dot{y} - \frac{d}{dt} \left(-y + \frac{\lambda \dot{x}}{\sqrt{\dot{x}^2 + \dot{y}^2}} \right) = 0 \\ \dot{x} + \frac{d}{dt} \left(x + \frac{\lambda \dot{y}}{\sqrt{\dot{x}^2 + \dot{y}^2}} \right) = 0 \end{cases}$$

并注意到可以对右侧两式积分得到

$$\begin{cases} 2y - \frac{\lambda \dot{x}}{\sqrt{\dot{x}^2 + \dot{y}^2}} = C_2 \\ 2x + \frac{\lambda \dot{y}}{\sqrt{\dot{x}^2 + \dot{y}^2}} = C_1 \end{cases}$$

且两式再可推出

$$\left(x - \frac{C_1}{2} \right)^2 + \left(y - \frac{C_2}{2} \right)^2 = \left(\frac{\lambda}{2} \right)^2,$$

可见所求解形状为圆. □

测地线问题 考虑在给定曲面 $G(x, y, z) = 0$ 上连接两点 (x_0, y_0, z_0) 和 (x_1, y_1, z_1) , 我们希望找到连接曲线 $\begin{cases} y = y(x), \\ z = z(x), \end{cases}$ 使得使得以下泛函取得极值:

$$I[y, z] = \int_{x_0}^{x_1} F[x, y(x), z(x), y'(x), z'(x)] dx.$$

最典型的的就是测地线问题, 该问题要求曲线的弧长在所有连接曲线中最短.

根据隐函数定理, 约束方程 $G(x, y, z)$ 可以局域地确定 $z = z(x, y)$, 于是

$$J[y] = \int_{x_0}^{x_1} F[x, y(x), z(x, y(x)), y', z' + z_y y'] dx = I[y, z],$$

问题就变为了我是熟悉的一元无约束情形. 记

$$\bar{F}(x, y, y') = F|_{z=z(x, y)} = F(x, y, z(x, y), y', z_x(x, y) + z_y(x, y)y')$$

Chapter 1. 古典变分原理

以区分不同的函数依赖关系, $J[y] = \int_{x_0}^{x_1} \bar{F} dx$, 随后 Euler-Lagrange 方程给出

$$\frac{\partial \bar{F}}{\partial y} - \frac{d}{dx} \frac{\partial \bar{F}}{\partial y'} = 0,$$

解得的 $y(x)$ 使得 $J[y]$ 取得极值, 从而 $I[y, z]$ 取得极值. 将 $\bar{F} = F|_{z=z(x,y)}$ 代入上述方程, 通过链式法则

$$\frac{\partial \bar{F}}{\partial y} = \frac{\partial F}{\partial y} + \frac{\partial F}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial y} + \frac{\partial F}{\partial z'} (z_{xy} + z_{yy} y'), \quad \frac{\partial \bar{F}}{\partial y'} = \frac{\partial F}{\partial y'} + \frac{\partial F}{\partial z'} z_y,$$

我们有

$$\frac{\partial F}{\partial y} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial y'} \right) + z_y \left(\frac{\partial F}{\partial z} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial z'} \right) \right) = 0. \quad (1.11)$$

接着我们需要求出 z_y , 考虑方程 $G(x, y, z(x, y)) = 0$ 链式法则给出

$$\frac{\partial G}{\partial y} + \frac{\partial G}{\partial z} z_y = 0 \quad \implies \quad z_y = - \frac{\partial G}{\partial y} \bigg/ \frac{\partial G}{\partial z},$$

代回 (1.11) 得到

$$\frac{\partial F}{\partial y} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial y'} \right) - \left(\frac{\partial G}{\partial y} \bigg/ \frac{\partial G}{\partial z} \right) \left(\frac{\partial F}{\partial z} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial z'} \right) \right) = 0,$$

整理上式有

$$\left(\frac{\partial G}{\partial y} \right)^{-1} \left(\frac{\partial F}{\partial y} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial y'} \right) \right) = \left(\frac{\partial G}{\partial z} \right)^{-1} \left(\frac{\partial F}{\partial z} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial z'} \right) \right) = 0. \quad (1.12)$$

根据上面的式子, 我们知道了等式左右两侧都仅仅与 x 有关系, 所以设

$$= \left(\frac{\partial G}{\partial z} \right)^{-1} \left(\frac{\partial F}{\partial z} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial z'} \right) \right) = 0 = \lambda(x),$$

于是

$$\begin{cases} \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial y'} \right) - \left[\frac{\partial F}{\partial y} + \lambda(x) \frac{\partial G}{\partial y} \right] = 0 \\ \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial z'} \right) - \left[\frac{\partial F}{\partial z} + \lambda(x) \frac{\partial G}{\partial z} \right] = 0 \end{cases} \xRightarrow{H := F + \lambda G} \begin{cases} \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial H}{\partial y'} \right) - \frac{\partial H}{\partial y} = 0 \\ \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial H}{\partial z'} \right) - \frac{\partial H}{\partial z} = 0 \end{cases} \quad (1.13)$$

就是原问题满足的微分方程.

1.4. 带约束的泛函极值的必要条件

Example 12 [测地线 (geodesic line)]. 求曲面 $G(x, y, z) = 0$ 上过两个定点的短程线.

Solution. 泛函极值问题

$$I[y, z] = \int_A^B ds = \int_A^B \sqrt{(dx)^2 + (dy)^2 + (dz)^2} = \int_A^B \sqrt{1 + (y')^2 + (z')^2} dx,$$

这里 $F = \sqrt{1 + (y')^2 + (z')^2}$ 约束 $G(x, y, z) = 0$, Euler-Lagrange 方程组

$$\begin{cases} \lambda \frac{\partial G}{\partial y} = \frac{d}{dx} \left(\frac{y'}{\sqrt{1 + (y')^2 + (z')^2}} \right), \\ \lambda \frac{\partial G}{\partial z} = \frac{d}{dx} \left(\frac{z'}{\sqrt{1 + (y')^2 + (z')^2}} \right). \end{cases} \quad (1.14)$$

将约束条件 $G(x, y, z) = 0$ 对 x 求导得:

$$\frac{\partial G}{\partial x} + \frac{\partial G}{\partial y} y' + \frac{\partial G}{\partial z} z' = 0,$$

两边同乘以 λ 并利用 (1.14) 式,

$$\lambda \frac{\partial G}{\partial x} + y' \frac{d}{dx} \left(\frac{y'}{\sqrt{1 + (y')^2 + (z')^2}} \right) + z' \frac{d}{dx} \left(\frac{z'}{\sqrt{1 + (y')^2 + (z')^2}} \right) = 0.$$

化简:

$$\lambda \frac{\partial G}{\partial x} = \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{\sqrt{1 + (y')^2 + (z')^2}} \right). \quad (1.15)$$

测地线由 $\begin{cases} y = y(x), \\ z = z(x) \end{cases}$ 描述, 故 (1.14) 和 (1.15) 式中的圆括号部分是所求测地线上各点切向的方向

余弦. 故 (1.14) 和 (1.15) 可写成:

$$\frac{d \cos \alpha}{dx} = \lambda \frac{\partial G}{\partial x}, \quad \frac{d \cos \beta}{dx} = \lambda \frac{\partial G}{\partial y}, \quad \frac{d \cos \gamma}{dx} = \lambda \frac{\partial G}{\partial z}. \quad (1.16)$$

其中 $\cos \alpha, \cos \beta, \cos \gamma$ 为测地线上各点切向的方向余弦. 以测地线的弧长 s 作为变量代替 x , 则 $\frac{dx}{ds} = \cos \alpha$, 从而 (1.16) 式变为

$$\frac{d \cos \alpha}{ds} = \mu \frac{\partial G}{\partial x}, \quad \frac{d \cos \beta}{ds} = \mu \frac{\partial G}{\partial y}, \quad \frac{d \cos \gamma}{ds} = \mu \frac{\partial G}{\partial z}, \quad (1.17)$$

Chapter 1. 古典变分原理

其中 $\mu = \lambda \cos \alpha$. 从 (1.17) 中消去 μ , 可得到由两个一阶微分方程构成的方程组. 解此方程组可得到所求测地线的表示式, 其中两个积分常数由测地线所通过的两定点的坐标确定. 为了进一步

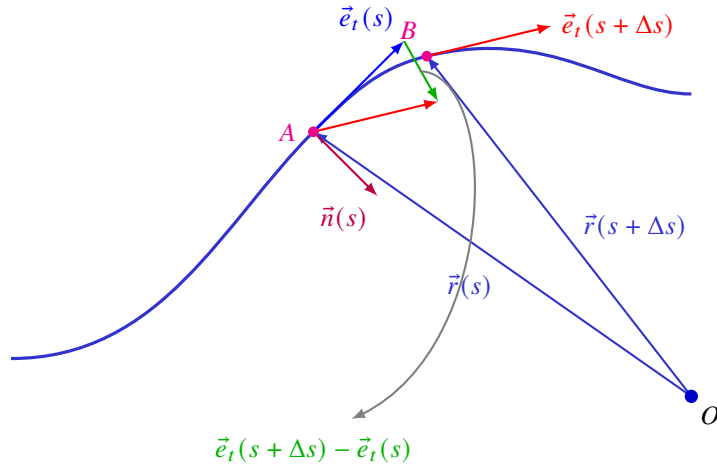


Figure 1.3: 曲线示意图

说明测地线的意义, 引进空间曲线上任一点的主法线的概念. 以曲线的弧长 s 为变量, 曲线上任一点 A 的切线方向的单位矢量:

$$\vec{e}_t(s) = \frac{d\vec{r}}{ds}, \quad |\vec{e}_t| = \left| \frac{d\vec{r}}{ds} \right| = 1.$$

其中 $\vec{r}(s)$ 是 A 的位置矢量. 定义主法线矢量为

$$\vec{n}(s) = \lim_{\Delta s \rightarrow 0} \frac{\vec{e}_t(s + \Delta s) - \vec{e}_t(s)}{\Delta s} = \frac{d\vec{e}_t(s)}{ds}.$$

由

$$|\vec{e}_t| = 1 \Rightarrow \vec{e}_t \cdot \vec{e}_t = 1 \Rightarrow \frac{d\vec{e}_t}{ds} \cdot \vec{e}_t = 0 \Rightarrow \vec{n} \cdot \vec{e}_t = 0,$$

即 $\vec{n}$ 与 $\vec{e}_t$ 正交, 并且由图可知 $\vec{n}(s)$ 总是指向曲线的凹侧. 由定义可知, 主法线矢量表征曲线的弯曲程度和转向. 称主法线矢量的模的倒数 $\rho(s) = \frac{1}{|\vec{n}(s)|}$ 为曲线的曲率半径.

返回例题. 记测地线切向的方向余弦为 $(\cos \alpha, \cos \beta, \cos \gamma)$, 切向对弧长 s 的导数 $\frac{d\vec{e}_t}{ds}$ 的三直角坐标分量 $\frac{d \cos \alpha}{ds}$, $\frac{d \cos \beta}{ds}$, $\frac{d \cos \gamma}{ds}$ 分别等于 $\mu \frac{\partial G}{\partial x}$, $\mu \frac{\partial G}{\partial y}$, $\mu \frac{\partial G}{\partial z}$, 就是说, 测地线的主法线方向恰好

1.5. 端点值可变的泛函极值问题

沿函数 $G(x, y, z)$ 的梯度方向 $\left(\frac{\partial G}{\partial x}, \frac{\partial G}{\partial y}, \frac{\partial G}{\partial z}\right)$, 也就是沿曲面 $G(x, y, z) = 0$ 的法向. 所以, 测地线上各点的主法线方向正是该点处的曲面 $G(x, y, z) = 0$ 的法向.

基于这个普遍特性, 可知, 如果 $G(x, y, z) = 0$ 退化为球面, 则连接球面上任意两点的测地线短程线必落在这两点与球心构成的平面与球面的交线 Γ . 这是因为该交线上各点的主法向都指向球心, 从而各点的主法向也正是球面在这些点的 (内) 法向. 物理学 (如广义相对论) 中常常涉及测地线的问题. $\square$

Example 13. 设 Γ 表示 n 个粒子的 *Hamilton* 力学系统的相空间, $d\Gamma = d^{3n}p d^{3n}q$ 为相空间体元的 *Liouville* 测度, $\rho(p, q)$ 为概率密度, $\rho(p, q) d\Gamma$ 表示体系处于相空间体元 $d\Gamma$ 内的概率. 假设熵是概率分布的泛函 $S[\rho] = -\int_{\Gamma} \rho \ln \rho d\Gamma$, 在给定能量 $\langle E \rangle = \int_{\Gamma} \rho H d\Gamma$ 的约束下求概率分布 ρ 使得熵 $S[\rho]$ 最大.

Solution. 考虑泛函

$$S[\rho] = -\int_{\Gamma} \rho \ln \rho d\Gamma,$$

约束条件为

$$\int_{\Gamma} \rho H d\Gamma = \langle E \rangle, \quad \int_{\Gamma} \rho d\Gamma = 1.$$

引入拉格朗日乘子 α, β , 构造泛函

$$F[\rho] = \int_{\Gamma} [-\rho \ln \rho + (\alpha + 1)\rho - \beta \rho H] d\Gamma,$$

求其驻值. 在引入拉格朗日乘子后, ρ 可自由变化. 取变分得

$$\delta F[\rho] = \int_{\Gamma} (-\ln \rho + \alpha - \beta H) \delta \rho d\Gamma.$$

由 $\delta F[\rho] = 0$, 且 $\delta \rho$ 任意, 得

$$-\ln \rho + \alpha - \beta H = 0.$$

因此 $\rho(p, q) = e^{\alpha - \beta H(p, q)}$. 这正是正则分布, 其中 $\beta = \frac{1}{k_B T}$. $\square$

1.5 端点值可变的泛函极值问题

最简情形 考虑泛函 $I[y] = \int_a^b F[x, y(x), y'(x)] dx$, 考虑如下条件的变分问题, $y(a) = y_1, y(b)$ 可变. 事实上, 如果曲线 $y(x)$ 是 $y(b)$ 可变时取得极值的解, 则对固定 $y(b)$, 也取得极值, 所以依旧满足 Euler-Lagrange 方程.

Chapter 1. 古典变分原理

由 $\delta I[y] = 0$, 我们有

$$\int_a^b \left[\frac{\partial F}{\partial y} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial y'} \right) \right] \eta(x) dx + \left. \frac{\partial F}{\partial y'} \eta \right|_a^b = 0,$$

此时第二项不是零, 由于 η 是任意的, 所以 $\frac{\partial F}{\partial y'}(b) = 0$, 这称为**自然边界条件**.

高阶情形 当涉及到高阶导数时

$$I[y] = \int_a^b F(x, y, y', y'', \dots, y^{(n)}) dx,$$

这里设 $y(a) = y_1, y'(a) = y_2$, 而 $y(b)$ 和 $y'(b)$ 是可变的, 那么反复分部积分给出的边界项就是所需的自然边界条件,

$$\sum_{k=l}^n (-1)^{k-l} \left(\frac{d}{dx} \right)^{k-l} \frac{\partial F}{\partial y^{(k)}} \bigg|_{x=b} = 0 \quad l = 1, 2, \dots, n.$$

二元情形 和

$$I[v] = \iint_D F[x, y, u(x, y), u_x(x, y), u_y(x, y)] dx dy$$

D 是一平面区域以区域, D 的境界线 l 从其上某点算起的弧长 s 为变量, 可以类似地导出 l 上的自然边界条件

$$\left[\frac{\partial F}{\partial u_x} \frac{dy}{ds} - \frac{\partial F}{\partial u_y} \frac{dx}{ds} \right] \bigg|_l = 0.$$

多元多场情形 设有若干场, 以 a 为指标, 泛函

$$S[\phi_a] = \int_{\Omega} L(x, \phi_a, \partial_i \phi_a) d^m x,$$

其中 $\Omega \subset \mathbb{R}^m$, $\partial\Omega$ 的外单位法向量记为 $\hat{n} = (n_i)$. 若边界上各场分量 $\phi_a|_{\partial\Omega}$ 自由, 则自然边界条件为

$$\left[\hat{n} \cdot \frac{\partial L}{\partial (\nabla \phi_a)} \right]_{\partial\Omega} = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad \left[n_i \frac{\partial L}{\partial (\partial_i \phi_a)} \right]_{\partial\Omega} = 0.$$

1.5. 端点值可变的泛函极值问题

Proof. 取变分 $\phi_a \mapsto \phi_a + \varepsilon \eta_a$, 则第一次变分为

$$\delta S = \int_{\Omega} \left(\frac{\partial L}{\partial \phi_a} \eta_a + \frac{\partial L}{\partial (\partial_i \phi_a)} \partial_i \eta_a \right) d^m x.$$

对第二项分部积分, 得

$$\delta S = \int_{\Omega} \left[\frac{\partial L}{\partial \phi_a} - \partial_i \left(\frac{\partial L}{\partial (\partial_i \phi_a)} \right) \right] \eta_a d^m x + \int_{\partial \Omega} n_i \frac{\partial L}{\partial (\partial_i \phi_a)} \eta_a dS.$$

由于内部的 η_a 任意, 体项给出 *Euler-Lagrange* 方程

$$\frac{\partial L}{\partial \phi_a} - \partial_i \left(\frac{\partial L}{\partial (\partial_i \phi_a)} \right) = 0.$$

若边界上 ϕ_a 自由, 则 $\eta_a|_{\partial \Omega}$ 亦任意, 因此边界项必须为零, 得到自然边界条件 $n_i \frac{\partial L}{\partial (\partial_i \phi_a)} = 0$, 亦即 $\hat{n} \cdot \frac{\partial L}{\partial (\nabla \phi_a)} = 0$. □

自带边界项情形 考虑泛函

$$S[\phi] = \iint_D L(x, y, u(x, y), u_x(x, y), u_y(x, y)) dx dy + \int_{l=\partial D} \Phi(s, u, u_s) ds,$$

其中 D 是一块平面区域, l 是 D 的边界, s 是自 l 上某点算起的弧长, Φ 是已知的函数, $u_s = \frac{\partial u}{\partial s}$. 我们根据公式

$$\iint_D \mathbf{A} \cdot \nabla \eta dx dy = \oint_l \eta \mathbf{A} \cdot \hat{n} dl - \iint_D (\nabla \cdot \mathbf{A}) \eta dx dy,$$

可以导出自然边界条件

$$\left[\frac{\partial F}{\partial u_x} \frac{dy}{ds} - \frac{\partial F}{\partial u_y} \frac{dx}{ds} + \frac{\partial \Phi}{\partial u} - \frac{d}{ds} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial u_s} \right) \right]_l = 0. \quad (1.18)$$

下面证明之. 考虑变分 $u \mapsto u + \varepsilon \eta$, 其中 η 在边界上不必为零. 则一阶变分为

$$\delta S = \iint_D \left(\frac{\partial L}{\partial u} \eta + \frac{\partial L}{\partial u_x} \eta_x + \frac{\partial L}{\partial u_y} \eta_y \right) dx dy + \oint_l \left(\frac{\partial \Phi}{\partial u} \eta + \frac{\partial \Phi}{\partial u_s} \eta_s \right) ds.$$

令 $\mathbf{A} = \left(\frac{\partial L}{\partial u_x}, \frac{\partial L}{\partial u_y} \right)$, 利用二维分部积分公式

$$\iint_D \mathbf{A} \cdot \nabla \eta dx dy = \oint_l \eta \mathbf{A} \cdot \hat{n} dl - \iint_D (\nabla \cdot \mathbf{A}) \eta dx dy,$$

Chapter 1. 古典变分原理

得到

$$\delta S = \iint_D \left[\frac{\partial L}{\partial u} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial L}{\partial u_x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial L}{\partial u_y} \right) \right] \eta dx dy + \oint_l \left[\mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{n}} \eta + \frac{\partial \Phi}{\partial u} \eta + \frac{\partial \Phi}{\partial u_s} \eta_s \right] ds.$$

再对边界上的最后一项作一维分部积分:

$$\oint_l \frac{\partial \Phi}{\partial u_s} \eta_s ds = \oint_l \frac{\partial \Phi}{\partial u_s} \frac{d\eta}{ds} ds = - \oint_l \frac{d}{ds} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial u_s} \right) \eta ds,$$

其中边界 l 为闭曲线, 因此端点项为零. 于是

$$\delta S = \iint_D \left[\frac{\partial L}{\partial u} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial L}{\partial u_x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial L}{\partial u_y} \right) \right] \eta dx dy + \oint_l \left[\mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{n}} + \frac{\partial \Phi}{\partial u} - \frac{d}{ds} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial u_s} \right) \right] \eta ds.$$

由于 η 在区域内部及边界上均可任意选取, 令 $\delta S = 0$, 分别得到:

- Euler-Lagrange 方程

$$\frac{\partial L}{\partial u} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial L}{\partial u_x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial L}{\partial u_y} \right) = 0.$$

- 自然边界条件

$$\mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{n}} + \frac{\partial \Phi}{\partial u} - \frac{d}{ds} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial u_s} \right) = 0.$$

最后将法向量写成边界参数形式. 若 $\mathbf{t} = \left(\frac{dx}{ds}, \frac{dy}{ds} \right)$ 为单位切向量, 则外法向量可取 $\hat{\mathbf{n}} = \left(\frac{dy}{ds}, -\frac{dx}{ds} \right)$. 因此

$$\mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{n}} = \frac{\partial L}{\partial u_x} \frac{dy}{ds} - \frac{\partial L}{\partial u_y} \frac{dx}{ds}.$$

故自然边界条件写为

$$\left[\frac{\partial L}{\partial u_x} \frac{dy}{ds} - \frac{\partial L}{\partial u_y} \frac{dx}{ds} + \frac{\partial \Phi}{\partial u} - \frac{d}{ds} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial u_s} \right) \right]_{\partial D} = 0.$$

特别的, 如果

$$I[u] = \iint_D |\nabla u(x, y)|^2 dx dy + \int_l \sigma u^2(x, y) ds,$$

则 (1.18) 给出的方程为

$$\left[\frac{\partial u}{\partial n} + \sigma u \right]_l = 0,$$

正是 Robin 齐次边界条件. 基于物理规律导出的定解问题, 可以视为某个量取极值的结果.

1.5. 端点值可变的泛函极值问题

Example 14. 一质量为 m 的小球套在光滑 y 轴并被绑在 x 平面上的弦的 $x = 0$ 一端, 弦的另一端固定在 $x = L$ 处. 利用拉格朗日量的泛函变分, 写出弦做小幅振动的定解问题.

Proof. 体系的 Lagrange 量 $\frac{1}{2}m\dot{y}^2(0, t) + \int_0^L \left(\frac{1}{2}\rho\dot{y}^2 - \frac{1}{2}Ty'^2 \right) dx$, 作用量

$$S = \int_{t_1}^{t_2} \frac{1}{2}m\dot{y}^2(0, t)dt + \int_{t_1}^{t_2} \int_0^L \left(\frac{1}{2}\rho\dot{y}^2 - \frac{1}{2}Ty'^2 \right) dxdt,$$

变分展开

$$\begin{aligned} \delta S &= \int_{t_1}^{t_2} [m\dot{y}\delta\dot{y}]_{x=0} dt + \int_{t_1}^{t_2} \int_0^L \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{y}} \delta\dot{y} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y'} \delta y' \right) dxdt \\ &= m \underbrace{\int_{t_1}^{t_2} [\partial_t(y\delta y) - \ddot{y}\delta y]_{x=0} dt}_{I_0} + \underbrace{\int_{t_1}^{t_2} \int_0^L \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\delta y \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y'} \right) + \frac{\partial}{\partial t} \left(\delta y \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{y}} \right) \right] dxdt}_{I_1} \\ &\quad - \underbrace{\int_{t_1}^{t_2} \int_0^L \delta y \left(\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{y}} + \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y'} \right) dxdt}_{I_2}. \end{aligned}$$

下面分别处理三项: $I_0 = (\dot{y}\delta y)_{x=0}|_{t_1}^{t_2} - \int_{t_1}^{t_2} \ddot{y}(0, t)\delta y(0, t)dt$. 因初值条件固定, 所以 $\delta y(0, t_1) = \delta y(0, t_2) = 0$, 第一项为 0, 故 $I_0 = - \int_{t_1}^{t_2} \ddot{y}(0, t)\delta y(0, t)dt$.

$$I_1 = - \int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y'} \right]_{x=0} \delta y(0, t)dt = \int_{t_1}^{t_2} [Ty']_{x=0} \delta y(0, t)dt,$$

对 I_1 的计算使用了二维的 Gauss 散度定理, 实际计算时要特别小心边界项的符号.

$$I_2 = \int_{t_1}^{t_2} \int_0^L \delta y(x, t) [\rho\ddot{y} - Ty''] dxdt,$$

代回去得到

$$\delta S = mI_0 + I_1 - I_2 = \int_{t_1}^{t_2} [Ty' - m\ddot{y}]_{x=0} \delta y(0, t)dt + \int_{t_1}^{t_2} \int_0^L \delta y(x, t) [Ty'' - \rho\ddot{y}] dxdt.$$

Chapter 1. 古典变分原理

由于 $\delta y(x, t)$, $\delta y(0, t)$ 都是任意的, δS 意味着

$$\begin{cases} \rho \ddot{y}(x, t) - T y''(x, t) = 0, & 0 < x < L, \\ m \ddot{y}(0, t) - T y'(0, t) = 0, & x = 0, \\ y(L, t) = 0. \end{cases}$$

第二式就是小珠的 *Newton* 第二定律. □

Example 15. 重力场中水表面波的作用量为

$$S[\phi, h] = \int dt \int dx \int_0^{h(x, t)} \rho_0 \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{1}{2} (\nabla \phi)^2 + gy \right] dy,$$

这里 ϕ 为流体速度势 $\mathbf{v} = \nabla \phi$, ρ_0 是水密度, 水当成不可压缩流体. 试通过对作用量 $S[\phi, h]$ 分别关于速度势 ϕ 和自由表面高度 h 进行变分, 推导水表面波的运动方程和边界条件.

Solution.

$$S[\phi, h] = \int_{t_1}^{t_2} dt \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_0^{h(x, t)} dy \rho_0 \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{1}{2} (\nabla \phi)^2 + gy \right],$$

其中 ϕ 为流体速度势, ρ_0 为密度, 水为不可压缩流体, 区域为

$$\Omega = \{(x, y) \mid 0 \leq y \leq h(x, t)\}.$$

对 ϕ 与 h 分别作变分.

对速度势 ϕ 的变分

$$\delta_\phi S = \int_{t_1}^{t_2} dt \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_0^{h(x, t)} dy \rho_0 \left[\frac{\partial(\delta \phi)}{\partial t} + (\nabla \phi) \cdot (\nabla \delta \phi) \right].$$

第一项:

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_{t_1}^{t_2} dt \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_0^h dy \frac{\partial(\delta \phi)}{\partial t} = \int_{t_1}^{t_2} dt \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\partial}{\partial t} \int_0^h \delta \phi dy - \int_{t_1}^{t_2} dt \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta \phi \Big|_{y=h} \frac{\partial h}{\partial t} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\int_0^h \delta \phi dy \right) \Big|_{t_1}^{t_2} - \int_{t_1}^{t_2} dt \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta \phi \Big|_{y=h} \frac{\partial h}{\partial t} = - \int_{t_1}^{t_2} dt \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\frac{\partial h}{\partial t} \right) \delta \phi \Big|_{y=h}. \end{aligned}$$

1.5. 端点值可变的泛函极值问题

注意这里 $\frac{\partial}{\partial t} \int_0^{h(x,t)} f(x, y, t) dy = f(x, h(x, t), t) \frac{\partial h(x, t)}{\partial t} + \int_0^{h(x,t)} \frac{\partial f(x, y, t)}{\partial t} dy$. 第二项:

$$\begin{aligned} I_2 &= \int_{t_1}^{t_2} dt \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_0^h dy (\nabla \phi) \cdot \nabla (\delta \phi) \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt \left[\oint_{\partial D(t)} \delta \phi (\nabla \phi) \cdot \mathbf{n} dl - \int_{D(t)} \delta \phi \nabla^2 \phi dx dy \right] \\ &= \underbrace{\int_{t_1}^{t_2} dt \oint_{\partial D(t)} \delta \phi (\nabla \phi) \cdot \mathbf{n} dl}_{I_{2a} + I_{2b}} - \underbrace{\int_{t_1}^{t_2} dt \int_{D(t)} \delta \phi \nabla^2 \phi dx dy}_{I_{2c}}. \end{aligned}$$

其中 $I_{2a} = - \int_{t_1}^{t_2} dt \int_{-\infty}^{\infty} \delta \phi \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_{y=0} dx$, $I_{2b} = \int_{t_1}^{t_2} dt \int_{-\infty}^{\infty} \delta \phi \left(-h_x \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \Big|_{y=h} |dx|$.

$$\begin{aligned} \delta \phi S &= \rho_0 (I_1 + I_2) = \rho_0 (I_1 + I_{2a} + I_{2b} + I_{2c}) \\ &= \rho_0 \left\{ \int_{t_1}^{t_2} dt \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\left(\frac{\partial h}{\partial t} \right) \frac{\partial \phi}{\partial y} + h_x \frac{\partial \phi}{\partial x} \right] \delta \phi \Big|_{y=h} \right. \\ &\quad \left. - \int_{t_1}^{t_2} dt \int_{-\infty}^{\infty} \delta \phi \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_{y=0} dx - \int_{t_1}^{t_2} dt \int_{D(t)} \delta \phi \nabla^2 \phi dx dy \right\}. \end{aligned}$$

上式三项积分因子 $\delta \phi|_{y=h}$, $\delta \phi|_{y=0}$ 和 $\delta \phi|_{D(t)}$ 均为任意函数, 因此得到三个方程:

- $\nabla^2 \phi = 0$, 在流体内部;
- $\frac{\partial \phi}{\partial y} = 0$, 在底部 $y = 0$;
- $\frac{\partial h}{\partial t} - \frac{\partial \phi}{\partial y} + h_x \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0$, 在自由表面 $y = h$;

关于自由表面 h 的变分

$$\delta_h S = \int_{t_1}^{t_2} dt \int_{-\infty}^{\infty} dx \rho_0 \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{1}{2} (\nabla \phi)^2 + gy \right]_{y=h(x,t)} \delta h(x, t).$$

据此导出方程

$$\left[\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{1}{2} (\nabla \phi)^2 + gy \right]_{y=h(x,t)} = 0.$$

动力学边界条件, 自由表面 *Bernoulli* 方程. □

Chapter 1. 古典变分原理

1.6 变分逆问题

1.6.1 本征值问题

考虑区域 V (边界为 S) 上的本征值问题

$$\nabla^2 u(\mathbf{r}) + \lambda u(\mathbf{r}) = 0, \quad (\mathbf{r} \in V),$$

配以边界条件 $u|_S = 0$, 或 $\left. \frac{\partial u}{\partial n} \right|_S = 0$. 定义泛函

$$I_1[u] = \int_V u(\mathbf{r}) [\nabla^2 u(\mathbf{r}) + \lambda u(\mathbf{r})] d^3r.$$

利用 Green 第一恒等式

$$\oint_S v \nabla u \cdot \mathbf{n} dS = \int_V \nabla v \cdot \nabla u d^3r + \int_V v \nabla^2 u d^3r,$$

取 $v = u$ 且边界条件使左边为 0, 得

$$I_1[u] = \int_V [\lambda u^2 - (\nabla u)^2] d^3r.$$

其 Euler-Lagrange 方程即为 $\nabla^2 u + \lambda u = 0$.

下面寻找等价的约束变分问题. 定义

$$I[u] = \int_V (\nabla u)^2 d^3r, \quad J[u] = \int_V u^2 d^3r = 1.$$

等价地, 可写为 Rayleigh 商

$$K[u] = \frac{\int_V (\nabla u)^2 d^3r}{\int_V u^2 d^3r}.$$

此处证明使得 $I[u]$ 的最小值 λ_0 就是原本征值问题的最小本征值, 且使得 $I[u]$ 在约束 $J[u] = 1$ 取得极值的解 u_0 就是原本征值问题的解. 若函数 u_0 是变分问题的解, 则必满足该变分问题的 Euler-Lagrange 方程, 即满足 $\nabla^2 u_0 + \lambda u_0 = 0$, 并且

$$\lambda_0 = I[u_0] = \int_V (\nabla u_0)^2 d^3r.$$

1.6. 变分逆问题

利用 $v = u$ 时的积分公式

$$\oint_S (v \nabla u) \cdot \mathbf{n} dS = \int_V (\nabla v) \cdot (\nabla u) d^3r + \int_V v \nabla^2 u d^3r,$$

可得

$$\lambda_0 = - \int_V u_0 \nabla^2 u_0 d^3r - \int_V u_0 (-\lambda_0 u_0) d^3r = \lambda_0 \int_V u_0^2 d^3r = \lambda_0,$$

其中最后一步利用了归一化条件. 将 $\lambda = \lambda_0$ 代入方程, 得 $\nabla^2 u_0 + \lambda_0 u_0 = 0$, 即 λ_0 为本征值. 下面证明 λ_0 为最小本征值. 假设存在更小的本征值 $\lambda_1 < \lambda_0$, 对应本征函数 u_1 , 满足 $\nabla^2 u_1 + \lambda_1 u_1 = 0$. 同样利用 Green 公式, 得

$$I[u_1] = \int_V (\nabla u_1)^2 d^3r = \lambda_1 < \lambda_0 = I[u_0].$$

这与 u_0 使泛函 $I[u]$ 取得最小值相矛盾. 因此, 小于 λ_0 的本征值不存在, 即 λ_0 是最小本征值.

第三类边界条件. 考虑

$$\nabla^2 u + \lambda u = 0, \quad \left(\frac{\partial u}{\partial n} + hu \right) \Big|_S = 0.$$

对应泛函为

$$I[u] = \int_V (\nabla u)^2 d^3r + \int_S hu^2 dS,$$

并满足约束 $\int_V u^2 d^3r = 1$. Rayleigh 商形式为

$$K[u] = \frac{\int_V (\nabla u)^2 d^3r + \int_S hu^2 dS}{\int_V u^2 d^3r}.$$

下面考虑 Sturm-Liouville 型问题. 考虑

$$\frac{d}{dx} (k(x)y'(x)) - q(x)y(x) + \lambda \rho(x)y(x) = 0, \quad a \leq x \leq b.$$

边界条件 $y(a) = y(b) = 0$, 或 $y'(a) = y'(b) = 0$. 对应变分问题

$$I[y] = \int_a^b (ky'^2 + qy^2) dx, \quad J[y] = \int_a^b \rho y^2 dx = 1.$$

Chapter 1. 古典变分原理

Rayleigh 商

$$K[y] = \frac{\int_a^b (ky'^2 + qy^2) dx}{\int_a^b \rho y^2 dx}. \quad (1.19)$$

Example 16. 估计半径为 a 的圆膜 (其边缘固定) 本征振动的最低圆频率 ω_0 .

Proof. 以圆膜的圆心为原点取极坐标, 定解问题为

$$u_{tt} = c^2 \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial u}{\partial \rho} \right), \quad (\rho \leq a),$$

$u|_{\rho=a} = 0$, 其中 $c = \sqrt{\frac{F_T}{\rho_m}}$, ρ_m 和 F_T 分别为膜的密度和张力. 设 $u = R(\rho)e^{i\omega t}$, 代入微分方程, 并令 $\lambda = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2$, 得到本征值问题

$$\frac{d}{d\rho} \left(\rho \frac{dR}{d\rho} \right) + \lambda \rho R = 0, \quad (\rho \leq a),$$

$R(a) = 0$. 于是, 所求问题可归结为在边界条件 $R(a) = 0$ 和归一化条件 $\int_0^a \rho R^2 d\rho = 1$, 下估计泛函 $I[R] = \int_0^a \rho (R')^2 d\rho$ 的最小值 λ_0 , 即 $\lambda_0 \equiv \left(\frac{\omega_0}{c}\right)^2$.

为此, 取满足边界条件 $R(a) = 0$ 的尝试函数 $\tilde{R}(\rho) = c_0 \left(1 - \frac{\rho}{a}\right)$, 其归一化常数为 $c_0 = \frac{2\sqrt{3}}{a}$. 于是

$$\lambda_0 \leq I[\tilde{R}] = \int_0^a \rho (\tilde{R}')^2 d\rho = \frac{c_0^2}{a^2} \int_0^a \rho d\rho = \frac{6}{a^2}.$$

从而 $\omega_0 \leq \sqrt{6} \frac{c}{a} \approx 2.4495 \frac{c}{a}$. 实际上, 本征值问题的本征值和本征函数分别为 $\lambda_n = \left(\frac{x_n}{a}\right)^2$, $R_n(\rho) = J_0\left(\frac{x_n}{a}\rho\right)$, 其中 x_n 为零阶贝塞尔函数 $J_0(x)$ 的第 n 个正根. 因此最小本征值为 $\lambda_0 = \left(\frac{2.4048}{a}\right)^2 = \frac{5.7831}{a^2}$, 即 $\omega_0 = \frac{2.4048}{a}c$, 对应的本征函数为 $R_0(\rho) = J_0\left(\frac{2.4048}{a}\rho\right)$. 基于变分法利用尝试函数估算的最小本征值总比准确值偏大, 这是变分原理的一般结论. $\square$

1.6. 变分逆问题

1.6.2 定解问题

这里仅以如下 Helmholtz 方程和 Robin 边界条件来说明定解问题与变分问题的联系:

$$\begin{cases} (\nabla^2 + k^2)u(\mathbf{r}) = -f(\mathbf{r}), \\ \left(\frac{\partial u}{\partial n} + hu \right) \Big|_S = g(\mathbf{r}), \end{cases} \quad (1.20)$$

其中 k^2 为常数, $f(\mathbf{r})$ 和 $g(\mathbf{r})$ 分别定义在区域 V 及其边界 S 上. 利用第一格林公式

$$\oint_S (v \nabla u) \cdot \mathbf{n} dS = \int_V (\nabla v) \cdot (\nabla u) d^3r + \int_V v \nabla^2 u d^3r,$$

定义泛函

$$I_1[u] = \int_V u [(\nabla^2 + k^2)u + 2f] d^3r.$$

其中

$$\int_V u \nabla^2 u d^3r = \oint_S u \frac{\partial u}{\partial n} dS - \int_V (\nabla u)^2 d^3r.$$

于是

$$I_1[u] = \oint_S u \frac{\partial u}{\partial n} dS - \int_V (\nabla u)^2 d^3r + \int_V k^2 u^2 d^3r + \int_V 2f u d^3r.$$

再利用边界条件 $\frac{\partial u}{\partial n} = g - hu$, 得到

$$I_1[u] = \oint_S g u dS - \oint_S h u^2 dS - \int_V (\nabla u)^2 d^3r + \int_V k^2 u^2 d^3r + \int_V 2f u d^3r.$$

对 $I_1[u]$ 作变分:

$$\delta I_1[u] = \oint_S g \delta u dS - 2 \oint_S h u \delta u dS + 2 \int_V k^2 u \delta u d^3r + 2 \int_V f \delta u d^3r - 2 \int_V \nabla u \cdot \nabla(\delta u) d^3r.$$

对最后一项再次使用 Green 公式:

$$\int_V \nabla u \cdot \nabla(\delta u) d^3r = \oint_S \delta u \frac{\partial u}{\partial n} dS - \int_V \delta u \nabla^2 u d^3r.$$

Chapter 1. 古典变分原理

整理得

$$\delta I_1[u] = 2 \int_V [(\nabla^2 + k^2)u + f] \delta u d^3r - 2 \oint_S \frac{\partial u}{\partial n} \delta u dS - 2 \oint_S hu \delta u dS + \oint_S g \delta u dS.$$

利用边界条件可化为

$$\delta I_1[u] = 2 \int_V [(\nabla^2 + k^2)u + f] \delta u d^3r - \oint_S g \delta u dS.$$

由于 δu 任意, 为得到原定解问题, 需定义新的泛函 $I[u] = I_1[u] + \oint_S g u dS$, 即

$$I[u] = \int_V u [(\nabla^2 + k^2)u + 2f] d^3r + \oint_S g u dS.$$

从而原定解问题可归结为该泛函的变分问题.

1.6.3 Rayleigh–Ritz 方法

Rayleigh–Ritz 方法是求解变分问题近似解的方法, 基本思想是用一个有限维函数空间去近似原来的无限维函数空间, 然后把变分问题转化为有限维参数优化问题.

Consider a variational problem

$$I[u] = \int_{\Omega} F(x, u, \nabla u) dx$$

whose extremum is determined by

$$\delta I[u] = 0$$

under certain boundary conditions.

In general, the true solution $u(x)$ belongs to an infinite-dimensional function space, which makes the problem difficult to solve directly. The idea of the Rayleigh–Ritz method is to approximate the unknown function by a finite linear combination of prescribed basis functions

$$u_N(x) = \sum_{k=1}^N c_k \phi_k(x),$$

where $\phi_k(x)$ are chosen **trial functions** satisfying the boundary conditions and c_k are unknown coefficients.

Substituting this approximation into the functional $I[u_N]$, the variational problem is reduced to a finite-dimensional optimization problem with respect to the parameters $c_1, \dots, c_N$. Thus the infinite-dimensional extremum problem becomes a finite-dimensional algebraic problem.

The Rayleigh–Ritz procedure can be summarized as follows.

1.6. 变分逆问题

1. **Choose trial functions.** Select a family of functions satisfying the boundary conditions

$$u_N(x) = \sum_{k=1}^N c_k \phi_k(x).$$

2. **Substitute into the functional.** Compute the functional value

$$I(c_1, \dots, c_N) = I[u_N].$$

3. **Find the stationary point.** Determine the extremum with respect to the parameters

$$\frac{\partial I}{\partial c_i} = 0, \quad i = 1, \dots, N.$$

4. **Solve the algebraic system.** Solve the resulting system of equations for

$$c_1, \dots, c_N.$$

5. **Obtain the approximate solution.** The approximate solution of the variational problem is

$$u_N(x) = \sum_{k=1}^N c_k \phi_k(x).$$

The trial functions should be chosen by taking into account physical insights such as symmetry, so as to obtain an approximation closer to the exact solution.

Example 17. 求如下二维谐振子问题的薛定谔方程的基态能量 E_0 和基态近似波函数,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) \Psi(x) = E \Psi(x), \quad (-\infty \leq x \leq \infty).$$

Solution. 引入无量纲变量 $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$, $\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$, 并记 $\Psi(x) = \psi(\xi)$, 则方程化为

$$H\psi(\xi) \equiv \left(-\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2 \right) \psi(\xi) = \lambda \psi(\xi), \quad (-\infty \leq \xi \leq \infty).$$

为求最小本征值 λ_0 的近似值, 先取尝试波函数

$$\tilde{\psi}(\xi) = (1 + \alpha \xi^2) e^{-\xi^2},$$

Chapter 1. 古典变分原理

其中 α 为待定参数. 根据变分原理,

$$\lambda_0 \leq \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \left[\left(\frac{d\tilde{\psi}}{d\xi} \right)^2 + \xi^2 \tilde{\psi}^2 \right] d\xi}{\int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}^2 d\xi} = I(\alpha).$$

计算得

$$I(\alpha) = \frac{5/4 - \alpha/8 + \frac{43}{64}\alpha^2}{1 + \alpha/2 + \frac{3}{16}\alpha^2} = \frac{80 - 8\alpha + 43\alpha^2}{64 + 32\alpha + 12\alpha^2}.$$

令 $\frac{dI}{d\alpha} = 0$, 得 $23\alpha^2 + 56\alpha - 48 = 0$, 解得 $\alpha = 0.6718$ 或 -3.1066 . 舍去负根, 得 $\alpha = 0.6718$. 代回得到 $\lambda_0 \leq 1.034$, 对应尝试波函数

$$\tilde{\psi}(\xi) = \tilde{c}(1 + 0.6718\xi^2)e^{-\xi^2},$$

其中归一化常数 $\tilde{c} = 0.7495$. 已知精确结果为

$$\lambda = 1, \quad \psi_0(\xi) = \pi^{-1/4}e^{-\xi^2/2}.$$

再取另一尝试波函数

$$\tilde{\psi}(\xi) = \tilde{c}e^{-\alpha\xi^2} = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/4}e^{-\alpha\xi^2}.$$

则

$$\begin{aligned} \lambda_0 &\leq \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(\xi) \left(-\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2 \right) \tilde{\psi}(\xi) d\xi \\ &= \alpha + \frac{1}{4\alpha} = I(\alpha). \end{aligned}$$

令 $\frac{dI}{d\alpha} = 0$, 得 $\alpha = \frac{1}{2}$. 于是

$$\tilde{\psi}(\xi) = \pi^{-1/4}e^{-\xi^2/2},$$

且 $I\left(\frac{1}{2}\right) = 1$, $\lambda_0 \leq 1$. 这表明该尝试波函数即为精确基态波函数. 可见, 变分法的精度强烈依赖于尝试波函数的选取. 并且, 精确能量本征值总是不超过变分法得到的极小值. $\square$