第 4 章　变分问题

4.1 变分和变分方程

简单泛函是简单函数 $U(x)$ 的函数形式之函数, 是函数空间到数值空间的映射.

$$J\{U(x)\} = \int_{x_1}^{x_2} F[x, U(x)]\,\mathrm{d}x \tag{4.1}$$

其定义域是在 $[x_1, x_2]$ 上有定义的可取函数集 (可测函数集) M, 泛函式中 $F[x, U(x)]$ 是以 x 为积分变量的被积函数, 是同时取决于自变量 x 与可取函数 U 的双变量函数.

函数的变分: $\delta U = \varepsilon\eta(x)$, $\varepsilon \ll 1$ 是任意给定的常数, $\eta \in M$ 是可取函数. δU 引起的泛函式 (4.1) 值的微小变化

$$\begin{aligned}
J\{U+\delta U\} - J\{U\} &= \int_{x_1}^{x_2} F[x, U+\delta U]\,\mathrm{d}x - \int_{x_1}^{x_2} F[x, u]\,\mathrm{d}x \\
&= \int_{x_1}^{x_2} \big\{F[x, U+\delta U] - F[x, U]\big\}\,\mathrm{d}x \\
&= \int_{x_1}^{x_2} \left(\frac{\partial F}{\partial U}\delta U\right)\mathrm{d}x + \frac{1}{2!}\int_{x_1}^{x_2} \left(\frac{\partial^2 F}{\partial U^2}\delta U^2\right)\mathrm{d}x + \cdots \\
&= \delta J\{U(x)\} + \frac{1}{2!}\delta^2 J\{U(x)\} + \cdots
\end{aligned} \tag{4.2}$$

从而可定义泛函的一阶变分

$$\delta J\{U(x)\} = \int_{x_1}^{x_2} \left(\frac{\partial F}{\partial U}\delta U\right)\mathrm{d}x \tag{4.3}$$

和泛函的 n 阶变分

$$\delta^n J\{U(x)\} = \int_{x_1}^{x_2} \left(\frac{\partial^n F}{\partial U^n}\delta U^n\right)\mathrm{d}x \tag{4.4}$$

泛函取极值的条件是一阶变分为 0, 即变分方程

由于函数变分 δU=$\varepsilon\eta(x)$ 的任意性, 可知上述变分方程等价为 Euler (微分) 方程:

$$\frac{\partial F}{\partial U} = 0, \qquad x \in [x_1, x_2] \tag{4.5}$$

变分与微分概念完全不同,但运算规则上有许多相似之处,如

$$\delta(xU) = x\delta U \tag{4.6a}$$

$$\delta(UV) = U\delta V + V\delta U \tag{4.6b}$$

$$\delta(U') = (\delta U)' \tag{4.6c}$$

$$\delta U^{(n)} = nU^{n-1}\delta U \tag{4.6d}$$

$$\delta \int F \,\mathrm{d}x = \int \delta F \,\mathrm{d}x \tag{4.6e}$$

4.2 变分问题及 Euler 边值问题

微分方程 + 边界条件: 边值问题

变分方程 + 边界条件: 变分问题

变分方程的求解和某种具有 Euler 方程形式的微分方程的求解可以互相转换, 但变分方程与所附边界条件构成的变分问题和对应的 Euler 边值问题未必完全等价.

泛函取极值又称**泛函驻定**.

4.2.1 简单泛函

即 (4.1) 式. 对应 Euler 方程 (4.5) 式. 其边界条件

$$U(x_1) = a, U(x_2) = b$$

在变分问题中, 该端点条件表示 $U(x)$ 曲线族汇交于端点 (x_1, a) 和 (x_2, b), 称作固定端点的变分问题.

4.2.2 含一阶导函数的泛函

设泛函

$$J\{U(x)\} = \int_{x_1}^{x_2} F[x, U, U'] \,\mathrm{d}x \tag{4.7}$$

其函数变分为 $\delta U = \varepsilon\eta(x)$, 其导数的变分为 $\delta U' = \varepsilon\eta'(x)$, 则被积函数的变化

$$\begin{aligned}
\delta F =& F[x, U + \delta U, U' + \delta U'] - F[x, U, U'] \\
=& \left[\frac{\partial F}{\partial U}\delta U + \frac{\partial F}{\partial U'}\delta U'\right] + \frac{\partial^2 F}{\partial U \partial U'}\delta U \delta U' + \frac{1}{2!}\left[\frac{\partial^2 F}{\partial U^2}\delta U^2 + \frac{\partial^2 F}{\partial U'^2}\delta U'^2\right] + \cdots \\
=& \varepsilon\left[\frac{\partial F}{\partial U}\eta + \frac{\partial F}{\partial U'}\eta'\right] + \frac{\varepsilon^2}{2}[\cdots
\end{aligned} \tag{4.8}$$

而泛函的一阶变分

$$\begin{aligned}
\delta J\{U(x)\} =& \int_{x_1}^{x_2} \varepsilon\left[\frac{\partial F}{\partial U}\eta + \frac{\partial F}{\partial U'}\eta'\right] \mathrm{d}x \\
\text{分部积分} =& \varepsilon\left\{\int_{x_1}^{x_2} \eta\left[\frac{\partial F}{\partial U} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\frac{\partial F}{\partial U'}\right] \mathrm{d}x + \left[\eta\frac{\partial F}{\partial U'}\right]_{x=x_1}^{x=x_2}\right\}
\end{aligned} \tag{4.9}$$

由于 ε 是常数, $\eta(x)$ 的选择具有随意性,变分方程 $\delta J\{U(x)\}=0$ 等价于

$$\begin{cases} \dfrac{\partial F[x,U,U']}{\partial U}=\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\dfrac{\partial F[x,U,U']}{\partial U'} & \text{Euler 方程} \\ \eta(x)\dfrac{\partial F[x,U,U']}{\partial U'}\Bigg|_{x=x_2}=0,\eta(x)\dfrac{\partial F[x,U,U']}{\partial U'}\Bigg|_{x=x_2}=0 & \text{附加条件} \end{cases} \tag{4.10}$$

若 $\eta(x_1)=\eta(x_2)=0$, 即 $U(x_1)=a$ 和 $U(x_2)=b$ 是定值, 属第一类边界条件, 则固定端点的变分问题

$$\begin{cases} \delta J\{U(x)\}=\delta\displaystyle\int_{x_1}^{x_2}F[x,U,U']\,\mathrm{d}x=0 \\ U(x_1)=a,U(x_2)=b \end{cases} \tag{4.11a}$$

等价于第一类 Euler 边值问题

$$\begin{cases} \dfrac{\partial F[x,U,U']}{\partial U}=\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\dfrac{\partial F[x,U,U']}{\partial U'}\right) \\ U(x_1)=a,U(x_2)=b \end{cases} \tag{4.11b}$$

若 $\eta(x_1)\neq 0,\eta(x_2)\neq 0$, 即 $U(x_1)$ 和 $U(x_2)$ 不是定值, 属第二类或第三类边界条件, 则自由端点的变分问题

$$\delta J\{U(x)\}=\delta\int_{x_1}^{x_2}F[x,U,U']\,\mathrm{d}x=0 \tag{4.12a}$$

等价于 Euler 边值问题

$$\begin{cases} \dfrac{\partial F[x,U,U']}{\partial U}=\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\dfrac{\partial F[x,U,U']}{\partial U'}\right) \\ \dfrac{\partial F}{\partial U'}\bigg|_{x=x_1}=0,\dfrac{\partial F}{\partial U'}\bigg|_{x=x_2}=0 \end{cases} \tag{4.12b}$$

其中对应于第二类和第三类边界条件的定解条件在对应的变分问题中并无要求, 仿佛自然满足, 故称为**自然边界条件**.

4.2.3 含一阶偏导数的泛函

设多变量函数 $U(\boldsymbol{r})=U(x,y,z)$, 定义泛函

$$J\{U(\boldsymbol{r})\}=\iiint_V F[\boldsymbol{r},U,U'_x,U'_y,U'_z]\,\mathrm{d}v \tag{4.13}$$

记函数的变分 $\delta U=\varepsilon\eta(\boldsymbol{r})$, 则该泛函的一阶变分

$$
\begin{aligned}
\delta J\{U(\boldsymbol{r})\} &= \iiint_V \left[\frac{\partial F}{\partial U}\varepsilon\eta + \frac{\partial F}{\partial U'_x}\varepsilon\eta'_x + \frac{\partial F}{\partial U'_y}\varepsilon\eta'_y + \frac{\partial F}{\partial U'_z}\varepsilon\eta'_z\right]\mathrm{d}v \\
&= \varepsilon\iiint_V \left[\frac{\partial F}{\partial U}\eta + \left(\hat{\boldsymbol{x}}\frac{\partial F}{\partial U'_x} + \hat{\boldsymbol{y}}\frac{\partial F}{\partial U'_y} + \hat{\boldsymbol{z}}\frac{\partial F}{\partial U'_z}\right)\cdot\nabla\eta\right]\mathrm{d}v
\end{aligned}
\tag{4.14}
$$

利用 $\boldsymbol{A}\cdot\nabla\Phi=\nabla(\Phi\boldsymbol{A})-\Phi\nabla\boldsymbol{A}$ 及 Gauss 散度定理, 可得

$$
\begin{aligned}
\delta J\{U(\boldsymbol{r})\} = \varepsilon\iiint_V \eta\left[\frac{\partial F}{\partial U} - \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial F}{\partial U'_x}\right) - \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial F}{\partial U'_y}\right) - \frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\partial F}{\partial U'_z}\right)\right]\mathrm{d}v \\
+ \varepsilon \oiint_{S[V]} \eta\left[\frac{\partial F}{\partial U'_x}(\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\hat{\boldsymbol{x}}) + \frac{\partial F}{\partial U'_y}(\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\hat{\boldsymbol{y}}) + \frac{\partial F}{\partial U'_z}(\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\hat{\boldsymbol{z}})\right]\mathrm{d}s
\end{aligned}
\tag{4.15}
$$

由 $\eta(\boldsymbol{r})$ 的随意性,变分方程 $\delta J\{U(\boldsymbol{r})\}=0$ 等价于定解问题

$$
\begin{cases}
\dfrac{\partial F}{\partial U} = \dfrac{\partial}{\partial x}\left(\dfrac{\partial F}{\partial U'_x}\right) + \dfrac{\partial}{\partial y}\left(\dfrac{\partial F}{\partial U'_y}\right) + \dfrac{\partial}{\partial z}\left(\dfrac{\partial F}{\partial U'_z}\right) & \text{Euler 方程} \\
\left\{\eta\left[\dfrac{\partial F}{\partial U'_x}(\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\hat{\boldsymbol{x}}) + \dfrac{\partial F}{\partial U'_y}(\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\hat{\boldsymbol{y}}) + \dfrac{\partial F}{\partial U'_z}(\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\hat{\boldsymbol{z}})\right]\right\}_{\boldsymbol{r}\in S[V]} = 0 & \text{附加条件}
\end{cases}
\tag{4.16}
$$

类似上节的分析, 固定边界值的变分问题

$$
\begin{cases}
\delta J\{U(\boldsymbol{r})\} = \delta\iiint_V F\left[\boldsymbol{r}, U, U'_x, U'_y, U'_z\right]\mathrm{d}v = 0 \\
U|_{\boldsymbol{r}\in S[V]} = \text{const}, \text{即 } \delta U|_{\boldsymbol{r}\in S[V]} = 0, \text{即 } \eta|_{\boldsymbol{r}\in S[V]} = 0
\end{cases}
\tag{4.17a}
$$

等价于第一类 Euler 边值问题

$$
\begin{cases}
\dfrac{\partial F}{\partial U} = \dfrac{\partial}{\partial x}\left(\dfrac{\partial F}{\partial U'_x}\right) + \dfrac{\partial}{\partial y}\left(\dfrac{\partial F}{\partial U'_y}\right) + \dfrac{\partial}{\partial z}\left(\dfrac{\partial F}{\partial U'_z}\right) = 0 \\
U|_{\boldsymbol{r}\in S[V]} = \text{const}
\end{cases}
\tag{4.17b}
$$

而自由边界值的变分问题

$$
\delta J\{U(\boldsymbol{r})\} = \delta\iiint_V F[\boldsymbol{r}, U, U'_x, U'_y, U'_z]\mathrm{d}v = 0 \qquad (\text{无边界条件})
\tag{4.18a}
$$

等价于自然条件的边值问题

$$\begin{cases} \dfrac{\partial F}{\partial U} = \dfrac{\partial}{\partial x}\left(\dfrac{\partial F}{\partial U_x'}\right) + \dfrac{\partial}{\partial y}\left(\dfrac{\partial F}{\partial U_y'}\right) + \dfrac{\partial}{\partial z}\left(\dfrac{\partial F}{\partial U_z'}\right) \\ \left[\dfrac{\partial F}{\partial U_x'}(\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\hat{\boldsymbol{x}}) + \dfrac{\partial F}{\partial U_y'}(\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\hat{\boldsymbol{y}}) + \dfrac{\partial F}{\partial U_z'}(\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\hat{\boldsymbol{z}})\right]_{\boldsymbol{r}\in S[V]} = 0 \end{cases} \tag{4.18b}$$

4.2.4 含二阶偏导数 (不含一阶偏导) 的泛函

设多变量函数 $U(\boldsymbol{r})$ 的泛函

$$J\{U(\boldsymbol{r})\} = \iiint_V F[\boldsymbol{r}, U, U_{xx}'', U_{yy}'', U_{zz}'']dv \tag{4.19}$$

其变分方程 $\delta J\{U(\boldsymbol{r})\} = 0$ 等价于 Euler 定解问题

$$\begin{cases} \dfrac{\partial F}{\partial U} + \dfrac{\partial^2}{\partial x^2}\left(\dfrac{\partial F}{\partial U_{xx}''}\right) + \dfrac{\partial^2}{\partial y^2}\left(\dfrac{\partial F}{\partial U_{yy}''}\right) + \dfrac{\partial^2}{\partial z^2}\left(\dfrac{\partial F}{\partial U_{zz}''}\right) = 0 \\ \hat{\boldsymbol{n}}\cdot\left\{\hat{\boldsymbol{x}}\left[\eta_x'\dfrac{\partial F}{\partial U_{xx}''} - \eta\dfrac{\partial}{\partial x}\left(\dfrac{\partial F}{\partial U_{xx}''}\right)\right]\right. \\ \quad \left. +\hat{\boldsymbol{y}}\left[\eta_y'\dfrac{\partial F}{\partial U_{yy}''} - \eta\dfrac{\partial}{\partial y}\left(\dfrac{\partial F}{\partial U_{yy}''}\right)\right] + \hat{\boldsymbol{z}}\left[\eta_x'\dfrac{\partial F}{\partial U_{zz}''} - \eta\dfrac{\partial}{\partial z}\left(\dfrac{\partial F}{\partial U_{zz}''}\right)\right]\right\}_{\boldsymbol{r}\in S[v]} = 0 \end{cases} \tag{4.20}$$

例 设已知含二阶偏导数的泛函

$$J\{U(\boldsymbol{r})\} = \langle -\nabla\nabla U, U\rangle - 2\langle U, f\rangle \tag{4.21}$$

其中 $U(\boldsymbol{r})$ 为未知实函数, $f(\boldsymbol{r})$ 为已知实函数.

按内积定义, 将该泛函展开成

$$J\{U(\boldsymbol{r})\} = \iiint_V -U(\nabla\nabla U + 2f)\,\mathrm{d}v \tag{4.22}$$

其被积函数为

$$F[\boldsymbol{r}, U, U_{xx}'', U_{yy}'', U_{zz}''] = -U(U_{xx}'' + U_{yy}'' + U_{zz}'' + 2f)$$

所以

$$\frac{\partial F}{\partial U} = -(\nabla\nabla U + 2f), \quad \frac{\partial F}{\partial U_{xx}''} = \frac{\partial F}{\partial U_{yy}''} = \frac{\partial F}{\partial U_{zz}''} = -U$$

代入式 (4.20) 得

$$\begin{cases} -(\nabla\nabla U + 2f) - \nabla\nabla U = 0 \rightarrow \nabla\nabla U = -f \\ \left[\eta\dfrac{\partial U}{\partial n} - U\dfrac{\partial \eta}{\partial n}\right]_{\boldsymbol{r}\in S[V]} = 0 \end{cases}$$

4.2.5 约束条件下的变分问题

从可取函数集中符合某些约束条件的子集内寻求使泛函驻定的极值函数, 称为约束条件下的变分问题, 也叫**泛函条件极值问题**, 类似于多元函数的条件极值问题, 可用 Lagrange 乘子法求解. 以含一阶导函数泛函为例.

4.2.6 微分方程形式的约束条件

变分问题

$$\begin{cases} \delta J\{U(x)\} = \delta\displaystyle\int_{x_1}^{x_2} F[x, U, U']dx = 0 \\ \text{第一类或无边界条件} \end{cases} \tag{4.23}$$

附有微分方程形式的约束条件组:

$$\begin{cases} \Phi_i[x, U, U'] = 0 \\ i = 1, 2, \ldots, m \end{cases} \tag{4.24}$$

设新泛函

$$\widetilde{J}\{U(x)\} = \int_{x_1}^{x_2} \widetilde{F}[x, U, U']\,\mathrm{d}x$$

其中新的被积函数为

$$\widetilde{F}[x, U, U'] = F[x, U, U'] + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i(x)\Phi_i[x, U, U']$$

式中 $\lambda_i(x)$ 为待求的 Lagrange 乘子. 于是原变分问题转化为新变分问题:

$$\begin{cases} \delta\widetilde{J}\{U(x)\} = \delta\displaystyle\int_{x_1}^{x_2} \widetilde{F}[x, U, U']\,\mathrm{d}x = 0 \\ \text{第一类或无边界条件} \end{cases} \tag{4.25}$$

对应的 Euler 方程可类似地写出为

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \widetilde{F}}{\partial U} - \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(\dfrac{\partial \widetilde{F}}{\partial U'}) = 0 \\ \text{1st, 2nd or 3rd B.C} \end{cases} \tag{4.26}$$

将 $\widetilde{F}$ 代入上式, 得 $m+1$ 个方程, 从而解出 $\lambda_i(x)$ 及条件极值函数 $U(x)$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial F}{\partial U} - \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(\dfrac{\partial F}{\partial U'}) + \displaystyle\sum_{i=1}^{m} \left\{ \lambda_i \left[\dfrac{\partial \Phi_i}{\partial U} - \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \left(\dfrac{\partial \Phi_i}{\partial U'} \right) \right] - \lambda_i' \dfrac{\partial \Phi_i}{\partial U'} \right\} = 0 \\ \Phi_i[x, U, U'] = 0, i = 1, 2, \ldots, m \end{cases} \tag{4.27}$$

4.2.7 泛函方程形式的约束条件

设

$$\delta J\{U(x)\} = \delta \int_{x_1}^{x_2} F[x, U, U']\,\mathrm{d}x = 0$$

附有泛函方程形式的约束条件组

$$\begin{cases} \displaystyle\int_{x_1}^{x_2} \Phi_i[x, U, U']\,\mathrm{d}x = C_i \quad (\text{常数}) \\ i = 1, 2, \ldots, m \end{cases} \tag{4.28}$$

构作新泛函

$$\begin{aligned} \widetilde{J}\{U(x)\} &= \int_{x_1}^{x_2} \widetilde{F}[x, U, U']\,\mathrm{d}x \\ &= \int_{x_1}^{x_2} \left\{ F[x, U, U'] + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \Phi_i[x, U, U'] \right\} \mathrm{d}x - \sum_{i=1}^{m} \lambda_i c_i \end{aligned} \tag{4.29}$$

对于满足约束条件组的 $U(x)$, $\widetilde{J}\{U(x)\} = J\{U(x)\}$, 两者驻定条件也相同. 从新泛函的 Euler 边值问题可写出联立方程组

$$\begin{cases} \dfrac{\partial F}{\partial U} - \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \left(\dfrac{\partial F}{\partial U'} \right) + \displaystyle\sum_{i=1}^{m} \lambda_i \left[\dfrac{\partial \Phi_i}{\partial U} - \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \dfrac{\partial \Phi_i}{\partial U'} \right] = 0 \\ \displaystyle\int_{x_1}^{x_2} \Phi_i[x, U, U']\,\mathrm{d}x = c_i, \quad i = 1, 2, \ldots, m \end{cases} \tag{4.30}$$

解出 λ_i 和约束条件下的解 $U(x)$. 其中积分常数由 $U(x)$ 的边界条件确定.

4.3 线性算子方程化为变分方程

如前所述, 变分方程导出等价 Euler 微分方程及附加的定解条件. 反之, 从微分方程也应导出其等价的变分方程. 更进一步, 从已知线性算子方程也可能导出等价的变分方程, 从而可以利用变分方程的直接解法求得算子方程的近似解.

4.3.1 正算子的确定性方程

定理 设正算子 $\mathbf{A}$ (当然也是自伴算子) 的定义域、值域分别为 D_A 和 D'_A, D_b 是符合所给边界条件的函数集. 则由已知函数 $f \in D'_A \subset H$ 和未知函数 $U \in (D_A \cap D_b) \subset H$ 构成的确定性算子方程

$$\mathbf{A}U = f \tag{4.31a}$$

等价于下列泛函为极小值的变分方程

$$J\{U\} = \langle \mathbf{A}U, U\rangle - \langle U, f\rangle - \langle f, U\rangle = \min \tag{4.31b}$$

即它们的解完全一样.

证明 取任意已知函数 $\eta \in (D_A \cap D_b) \subset H$.

首先证明凡式 (4.31a) 的解都满足式 (4.31b). 根据算子 $\mathbf{A}$ 和内积的线性性质展开

$$\begin{aligned} J\{U+\eta\} =& \langle \mathbf{A}(U+\eta), U+\eta\rangle - \langle U+\eta, f\rangle - \langle f, U+\eta\rangle \\ =& \big\{\langle \mathbf{A}U, U\rangle - \langle U, f\rangle - \langle f, U\rangle\big\} + \langle \mathbf{A}\eta, \eta\rangle \\ &+ \big\{\langle \mathbf{A}U, \eta\rangle - \langle f, \eta\rangle\big\} + \big\{\langle \mathbf{A}\eta, U\rangle - \langle \eta, f\rangle\big\} \end{aligned}$$

$$\therefore J\{U+\eta\} - J\{U\} = \langle \eta, \eta\rangle + \langle U - f, \eta\rangle + \big\{\langle \eta, U\rangle - \langle \eta, f\rangle\big\}.$$

由于 $\mathbf{A}$ 是正算子, 从而也是对称算子, 故 $\langle \mathbf{A}\eta, \eta\rangle > 0, \langle \mathbf{A}\eta, U\rangle = \langle \eta, \mathbf{A}U\rangle$, 所以

$$J\{U+\eta\} - J\{U\} = \langle \mathbf{A}\eta, \eta\rangle + \langle \mathbf{A}U - f, \eta\rangle + \langle \eta, \mathbf{A}U - f\rangle$$

显然, 若 $\mathbf{A}U = f$, 则 $J\{U+\eta\} - J\{U\} > 0$. 根据 η 的任意性, 可知 $J\{U\}$ 最小, 式 (4.31b) 成立.

证明的第二步是证明凡式 (4.31b) 的解必满足式 (4.31a).

作 $V = U + \alpha\eta$, (α 是复数, $\eta \in (D_A \cap D_b)$, 为任意已知函数) 的泛函, 则

$$\begin{cases} I = J\{V\} - J\{U\} = \langle \mathbf{A}\alpha\eta, \alpha\eta\rangle + \langle \mathbf{A}U - f, \alpha\eta\rangle + \langle \alpha\eta, \mathbf{A}U - f\rangle \geqslant 0 \\ \lim\limits_{\alpha\to 0} I = \min. \end{cases}$$

若 $\alpha = b$ 为实数, 则根据内积性质, $\langle bf, g\rangle = b\langle f, g\rangle$, 有

$$\begin{aligned} I =& b^2\langle \mathbf{A}\eta, \eta\rangle + b\langle \mathbf{A}U - f, \eta\rangle + b\langle \eta, \mathbf{A}U - f\rangle \\ =& b^2\langle \mathbf{A}\eta, \eta\rangle + 2b\Re\langle \mathbf{A}U - f, \eta\rangle \end{aligned}$$

若 $\alpha = \mathrm{j}b$ 为虚数, 则

$$\begin{aligned} I =& b^2\langle \eta, \eta\rangle - \mathrm{j}b\langle \mathbf{A}U - f, \eta\rangle + \mathrm{j}b\langle \eta, \mathbf{A}U - f\rangle \\ =& b^2\langle \mathbf{A}\eta, \eta\rangle + 2b\Im\langle \mathbf{A}U - f, \eta\rangle \end{aligned}$$

由 $\lim\limits_{b\to 0} I = \min$, 即 $\lim\limits_{b\to 0} \dfrac{\partial I}{\partial b} = 0$, 只要 $\mathbf{A}$ 是下有界算子, 就有

$$\begin{cases} \Re\langle \mathbf{A}U - f, \eta\rangle = 0 \\ \Im\langle \mathbf{A}U - f, \eta\rangle = 0 \end{cases} \longrightarrow \langle \mathbf{A}U - f, \eta\rangle = 0 \longrightarrow \mathbf{A}U = f$$

且此时 $I = b^2\langle \mathbf{A}\eta, \eta\rangle \geqslant 0$ 故 $\mathbf{A}$ 必须是正算子. ■

4.3.2 下有界算子的本征值方程

设本征值方程

$$\mathbf{A}U = \lambda U \tag{4.32a}$$

其中 $\mathbf{A}$ 为下有界算子, $U \in (D_A \cap D_b) \subset H$, 且值域 $D'_A = D_A$. 该方程取本征值 $\lambda_k (k = 1, 2, \ldots)$ 时才有对应的本征函数解

$$\mathbf{A}U_k = \lambda_k U_k \tag{4.32b}$$

定理一 下有界算子本征值方程的所有本征值都是实数; 且任何两个不同本征值所对应的本征函数之内积为 0, 即互相正交. 特别地, 对于本征值重根的情况, 对应的本征函数未必正交, 但按照后序本征值定理的正交化步骤构成的不同本征函数仍相互正交.

证明 (1) $\mathbf{A}$ 也是对称算子, 故

$$\langle \mathbf{A}U_k, U_k\rangle = \langle U_k, \mathbf{A}U_k\rangle = \langle U_k, U_k\rangle^*$$

(2) 将 $\mathbf{A}U_k = \lambda_k U_k$ 代入, 注意到 $\langle f, f\rangle \geqslant 0$, 得

$$\lambda_k\langle U_k, U_k\rangle = \lambda_k^*\langle U_k, U_k\rangle (k = 1, 2, \ldots)$$

故对于非零本征函数 $U_k, \langle U_k, U_k\rangle = \|U_k\| \neq 0$, 有

$$\lambda_k = \lambda_k^* = \text{实数}, k = 1, 2, \ldots \tag{4.33}$$

又有 $\langle \mathbf{A}U_i, U_j\rangle = \langle U_i, \mathbf{A}U_j\rangle, (i, j = 1, 2, \ldots)$, 将式 (4.32b) 代入, 且知 λ_k 是实数, 故

$$\lambda_i\langle U_i, U_j\rangle = \lambda_j\langle U_i, U_j\rangle$$

所以, 若 $\lambda_i \neq \lambda_j$, 必有 $\langle U_i, U_j\rangle = 0$. 或

$$\langle U_i, U_j\rangle = \delta_{ij}\|U_i\|^2 (i, j = 1, 2, \ldots) \quad \blacksquare \tag{4.34}$$

定理二 (最小本征值定理) 设 $\mathbf{A}U = \lambda U$ 的最小本征值为 λ_1, 对应的本征函数为 U_1, 满足算子方程

$$\begin{cases} \mathbf{A}U_1 = \lambda_1 U_1 \\ \lambda_1 = \min\{\lambda_k | k = 1, 2, \ldots\} \end{cases} \tag{4.35}$$

则 λ_1 等于算子 $\mathbf{A}$ 的下界值 (注意下界算子的定义), 即下列泛函 (Rayleigh 商) 的极小值:

$$J\{U\} = \frac{\langle \mathbf{A}U, U\rangle}{\langle U, U\rangle} \tag{4.36}$$

而 U_1 是变分方程 $\delta J\{U\} = 0$, 且 $\delta^2 J\{U\} > 0$ 的解, 满足

$$\begin{cases} J\{U_1\} = \dfrac{\langle \mathbf{A}U_1, U_1\rangle}{\langle U_1, U_1\rangle} = \lambda_1 \\ \lambda_1 = \min[J\{U\}] = \min\left[\dfrac{\langle \mathbf{A}U, U\rangle}{\langle U, U\rangle}\right] \end{cases} \tag{4.37}$$

推论 正算子的本征值 $\{\lambda_k\}$ 都是正值. 因为最小的 $\lambda_1 > 0$.

定理三 (后序本征值定理) 设 $\mathbf{A}U = \lambda U$ 的本征值序列 $\lambda_1 \leqslant \lambda_2 \leqslant \cdots \leqslant \lambda_n \leqslant \lambda_{n+1} \leqslant \cdots$, 若前 n 个本征值对应的 n 个彼此正交的本征函数为 $\{U_1, U_2, \ldots, U_n | \langle U_i, U_j\rangle = \delta_{ij}\|U_i\|^2\}$, 则后序本征值 λ_{n+1} 是泛函式 (4.37) 在约束条件 $\{\langle U, U_k\rangle = 0 | k = 1, 2, \ldots, n\}$ 下的极小值, 其对应的本征函数是变分方程 $\delta J\{U\} = 0$ 且 $\delta^2 J\{U\} > 0$ 的条件解, 满足:

$$\begin{cases} J\{U_{n+1}\} = \dfrac{\langle \mathbf{A}U_{n+1}, U_{n+1}\rangle}{\langle U_{n+1}, U_{n+1}\rangle} = \lambda_{n+1} \\ \langle U_{n+1}, U_k\rangle = 0, \quad k = 1, 2, \ldots, n \end{cases} \tag{4.38}$$

4.3.3 正定算子的广义本征值方程

线性下有界算子 **A**、线性正定算子 **B** (当然也是自伴算子) 构成广义本征值方程

$$\mathbf{A}U = \lambda \mathbf{B}U \tag{4.39a}$$

仅当待定常数 λ 取广义本征值 $\{\lambda_k | k = 1, 2, \ldots\}$ 时才有特定解 $\{U_k | k = 1, 2, \ldots\}$, 称为**广义本征函数解**:

$$\mathbf{A}U_k = \lambda_k \mathbf{B}U_k, \quad k = 1, 2, \ldots \tag{4.39b}$$

在电磁场的 Helmholtz 或 Fredholm (广义) 本征值问题中, 有无穷多本征值, 最大本征值无确定意义. 故最小 (广义) 本征值定理和后序 (广义) 本征值定理提供了逐个求解 (广义) 本征值和 (广义) 本征函数的唯一途径.

最大广义本征值定理将最小 (广义) 本征值定理的 “下界” 改为 “上界” , “min” 改为 “max”, “小” 改为 “大”, $\delta^2 J > 0$ 改为 $\delta^2 J < 0$.

4.3.4 非自伴算子的确定性方程

电磁场边值问题一般属于自伴边值问题, 其算子是正 (定) 算子, 故可以转化为等价的变分方程. 但在特殊场合 (如有耗媒质中时谐场问题, 即 Helmholtz 方程中的 k^2 为复数, 算子 $\nabla\nabla + k^2$ 不再自伴) , 算子是非自伴的, 但非自伴算子方程也可能转化成变分方程.

定理　设未知场函数 U, 已知源函数 f 和非自伴线性算子 **A** 构成非自伴线性算子方程

$$\mathbf{A}U = f \tag{4.40a}$$

又由独立于 U 的未知伴随场函数 W, 任意指定辅助源函数 g, 构成辅助的伴随算子方程

$$\mathbf{A}^\dagger W = g \tag{4.40b}$$

则算子方程组 (4.40a)、(4.40b) 式等价为泛函

$$J\{U, W\} = \langle \mathbf{A}U, W\rangle - \langle U, g\rangle - \langle f, W\rangle \tag{4.41a}$$

的驻定公式, 即变分方程

$$\delta J\{U, W\} = 0 \tag{4.41b}$$

证明 作变分

$$\begin{aligned}\delta J\{U,W\} =&\langle \mathbf{A}\delta U, W\rangle + \langle \mathbf{A}U, \delta W\rangle - \langle \delta U, g\rangle - \langle f, \delta W\rangle \\ =&[\langle \delta U, \mathbf{A}^{\dagger}W\rangle - \langle \delta U, g\rangle] + [\langle \mathbf{A}U, \delta W\rangle - \langle f, \delta W\rangle] \\ =&\langle \delta U, \mathbf{A}^{\dagger}W - g\rangle + \langle \mathbf{A}U - f, \delta W\rangle\end{aligned}$$

于是, 若 U, W 使式 (4.40a)、(4.40b) 成立, 则式 (4.40b) 成立; 反之若 (4.41b) 成立, 由于 $\delta U, \delta W$ 的随意性, 式 (4.40a)、(4.40b) 必须成立.

另一方面

$$\begin{aligned}I =&J\{U + \alpha\eta, W + \beta\xi\} - J\{U, W\} \\ =&\alpha\beta^{*}\langle \mathbf{A}\eta, \xi\rangle + \alpha\langle \eta, \mathbf{A}^{\dagger}W - g\rangle + \beta^{*}\langle \mathbf{A}U - f, \xi\rangle\end{aligned}$$

α、β 为常数, η、ξ 为可取函数, 即使式 (4.40a)、(4.40b) 成立, $I = \alpha\beta^{*}\langle \mathbf{A}\eta, \xi\rangle$, 仍不能判断 I 为正、为零或为负, 即只能证明泛函驻定 ($\delta J = 0$), 不能判断是极小、极大值或拐点. 对于边值问题, 设边界条件算子方程 $\mathbf{b}U = 0$, 辅助方程为 $\mathbf{b}^{\dagger}W = 0$, 则等价变分问题也应附有上列边界值的约束条件 (自然条件除外).

综上, 求解非自伴算子的确定性边值问题, 必须同时求解其伴随边值问题.