

第十八讲

变分法初步(二)

北京大学 物理学院
数学物理方法课程组

2007年春



讲授要点

- ① 泛函的条件极值(续)
 - 举例
- ② 微分方程的变分形式
 - 微分方程定解问题
 - 微分方程本征值问题
- ③ Rayleigh-Ritz方法
 - 基本思路
 - 举例



讲授要点

- ① 泛函的条件极值(续)
 - 举例
- ② 微分方程的变分形式
 - 微分方程定解问题
 - 微分方程本征值问题
- ③ Rayleigh-Ritz方法
 - 基本思路
 - 举例



讲授要点

- ① 泛函的条件极值(续)
 - 举例
- ② 微分方程的变分形式
 - 微分方程定解问题
 - 微分方程本征值问题
- ③ Rayleigh-Ritz方法
 - 基本思路
 - 举例



References

 吴崇试, 《数学物理方法》, 第21章

 梁昆森, 《数学物理方法》, §15.1

 胡嗣柱、倪光炯, 《数学物理方法》, 第15章



References




 吴崇试, 《数学物理方法》, 第21章

 梁昆森, 《数学物理方法》, §15.1

 胡嗣柱、倪光炯, 《数学物理方法》, 第15章



References

-  吴崇试, 《数学物理方法》, 第21章
-  梁昆森, 《数学物理方法》, §15.1
-  胡嗣柱、倪光炯, 《数学物理方法》, 第15章



讲授要点

- ① 泛函的条件极值(续)
 - 举例
- ② 微分方程的变分形式
 - 微分方程定解问题
 - 微分方程本征值问题
- ③ Rayleigh-Ritz方法
 - 基本思路
 - 举例



例18.1 求泛函 $I[y] = \int_0^1 xy'^2 dx$ 在边界条件
 $y(0)$ 有界, $y(1) = 0$
 和约束条件 $\int_0^1 xy^2 dx = 1$ 下的极值曲线

【解】 采用上面描述的Lagrange乘子法, 可以得到必要条件

$$\left(\frac{\partial}{\partial y} - \frac{d}{dx} \frac{\partial}{\partial y'} \right) (xy'^2 - \lambda xy^2) = 0$$

即
$$\frac{d}{dx} \left(x \frac{dy}{dx} \right) + \lambda xy = 0$$



例18.1 求泛函 $I[y] = \int_0^1 xy'^2 dx$ 在边界条件
 $y(0)$ 有界, $y(1) = 0$
 和约束条件 $\int_0^1 xy^2 dx = 1$ 下的极值曲线

【解】 采用上面描述的Lagrange乘子法, 可以得到必要条件

$$\left(\frac{\partial}{\partial y} - \frac{d}{dx} \frac{\partial}{\partial y'} \right) (xy'^2 - \lambda xy^2) = 0$$

即
$$\frac{d}{dx} \left(x \frac{dy}{dx} \right) + \lambda xy = 0$$



微分方程
$$\frac{d}{dx} \left(x \frac{dy}{dx} \right) + \lambda xy = 0$$

边界条件 $y(0)$ 有界, $y(1) = 0$

构成本征值问题

- 本征值 $\lambda_i = \mu_i^2$, $i = 1, 2, 3, \dots$
(μ_i 是零阶贝塞耳函数 $J_0(x)$ 的第 i 个正零点)
正好就是 Lagrange 乘子
- 相应本征函数 $y_i(x) = C J_0(\mu_i x)$ 就是极值函数
- 常量 C 可以由约束条件 $\int xy^2 dx = 1$ 定出



微分方程
$$\frac{d}{dx} \left(x \frac{dy}{dx} \right) + \lambda xy = 0$$

边界条件 $y(0)$ 有界, $y(1) = 0$

构成本征值问题

- 本征值 $\lambda_i = \mu_i^2$, $i = 1, 2, 3, \dots$
(μ_i 是零阶贝塞耳函数 $J_0(x)$ 的第 i 个正零点)
正好就是 Lagrange 乘子
- 相应本征函数 $y_i(x) = C J_0(\mu_i x)$ 就是极值函数
- 常量 C 可以由约束条件 $\int_0^1 xy^2 dx = 1$ 定出



微分方程
$$\frac{d}{dx} \left(x \frac{dy}{dx} \right) + \lambda xy = 0$$

边界条件 $y(0)$ 有界, $y(1) = 0$

构成本征值问题

- 本征值 $\lambda_i = \mu_i^2$, $i = 1, 2, 3, \dots$
(μ_i 是零阶贝塞耳函数 $J_0(x)$ 的第 i 个正零点)
正好就是 Lagrange 乘子
- 相应本征函数 $y_i(x) = C J_0(\mu_i x)$ 就是极值函数
- 常量 C 可以由约束条件 $\int_0^1 xy^2 dx = 1$ 定出



微分方程
$$\frac{d}{dx} \left(x \frac{dy}{dx} \right) + \lambda xy = 0$$

边界条件 $y(0)$ 有界, $y(1) = 0$

构成本征值问题

- 本征值 $\lambda_i = \mu_i^2$, $i = 1, 2, 3, \dots$
(μ_i 是零阶贝塞耳函数 $J_0(x)$ 的第 i 个正零点)
正好就是 Lagrange 乘子
- 相应本征函数 $y_i(x) = C J_0(\mu_i x)$ 就是极值函数
- 常量 C 可以由约束条件 $\int_0^1 xy^2 dx = 1$ 定出



因为
$$C^2 \int_0^1 x J_0^2(\mu_i x) dx = \frac{C^2}{2} J_1^2(\mu_i) = 1$$

所以
$$C = \frac{\sqrt{2}}{J_1(\mu_i)}$$

这样，就求出了极值函数

$$y_i(x) = \frac{\sqrt{2}}{J_1(\mu_i)} J_0(\mu_i x)$$



因为
$$C^2 \int_0^1 x J_0^2(\mu_i x) dx = \frac{C^2}{2} J_1^2(\mu_i) = 1$$

所以
$$C = \frac{\sqrt{2}}{J_1(\mu_i)}$$

这样，就求出了极值函数

$$y_i(x) = \frac{\sqrt{2}}{J_1(\mu_i)} J_0(\mu_i x)$$



因为
$$C^2 \int_0^1 x J_0^2(\mu_i x) dx = \frac{C^2}{2} J_1^2(\mu_i) = 1$$

所以
$$C = \frac{\sqrt{2}}{J_1(\mu_i)}$$

这样，就求出了极值函数

$$y_i(x) = \frac{\sqrt{2}}{J_1(\mu_i)} J_0(\mu_i x)$$



小结

- 含有待定参量(Lagrange乘子)的 Euler-Lagrange方程, 和齐次边界条件组合在一起, 就构成本征值问题
- 而作为本征值问题, 它的解, 本征值和本征函数, 有无穷多个
- 有两个问题需要讨论



小结

- 含有待定参量(Lagrange乘子)的 Euler-Lagrange方程, 和齐次边界条件组合在一起, 就构成本征值问题
- 而作为本征值问题, 它的解, 本征值和本征函数, 有无穷多个
- 有两个问题需要讨论



小结

- 含有待定参量(Lagrange乘子)的 Euler-Lagrange方程, 和齐次边界条件组合在一起, 就构成本征值问题
- 而作为本征值问题, 它的解, 本征值和本征函数, 有无穷多个
- 有两个问题需要讨论



一、这无穷多个本征函数都是极值函数

【证】

$$\begin{aligned}\delta I[y] &= \int_0^1 [\delta y'^2] x dx \\ &= 2 \int_0^1 y' (\delta y)' x dx\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\text{二级变分 } \delta^2 I[y] &= 2 \int_0^1 \delta [y' \delta y'] x dx \\ &= 2 \int_0^1 (\delta y')^2 x dx > 0\end{aligned}$$

因为泛函 $I[y]$ 的二级变分恒取正值，所以这些极值函数均使泛函取极小



一、这无穷多个本征函数都是极值函数

$$\begin{aligned} \text{【证】} \quad \delta I[y] &= \int_0^1 [\delta y'^2] x dx \\ &= 2 \int_0^1 y' (\delta y)' x dx \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{二级变分 } \delta^2 I[y] &= 2 \int_0^1 \delta [y' \delta y'] x dx \\ &= 2 \int_0^1 (\delta y')^2 x dx > 0 \end{aligned}$$

因为泛函 $I[y]$ 的二级变分恒取正值, 所以这些极值函数均使泛函取极小



一、这无穷多个本征函数都是极值函数

$$\begin{aligned} \text{【证】} \quad \delta I[y] &= \int_0^1 [\delta y'^2] x dx \\ &= 2 \int_0^1 y' (\delta y)' x dx \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{二级变分 } \delta^2 I[y] &= 2 \int_0^1 \delta [y' \delta y'] x dx \\ &= 2 \int_0^1 (\delta y')^2 x dx > 0 \end{aligned}$$

因为泛函 $I[y]$ 的二级变分恒取正值, 所以这些极值函数均使泛函取极小



一、这无穷多个本征函数都是极值函数

$$\begin{aligned} \text{【证】} \quad \delta I[y] &= \int_0^1 [\delta y'^2] x dx \\ &= 2 \int_0^1 y' (\delta y)' x dx \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{二级变分 } \delta^2 I[y] &= 2 \int_0^1 \delta [y' \delta y'] x dx \\ &= 2 \int_0^1 (\delta y')^2 x dx > 0 \end{aligned}$$

因为泛函 $I[y]$ 的二级变分恒取正值，所以这些极值函数均使泛函取极小



一、这无穷多个本征函数都是极值函数

$$\begin{aligned} \text{【证】} \quad \delta I[y] &= \int_0^1 [\delta y'^2] x dx \\ &= 2 \int_0^1 y' (\delta y)' x dx \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{二级变分 } \delta^2 I[y] &= 2 \int_0^1 \delta [y' \delta y'] x dx \\ &= 2 \int_0^1 (\delta y')^2 x dx > 0 \end{aligned}$$

因为泛函 $I[y]$ 的二级变分恒取正值，所以这些极值函数均使泛函取极小



一、这无穷多个本征函数都是极值函数

$$\begin{aligned} \text{【证】} \quad \delta I[y] &= \int_0^1 [\delta y'^2] x dx \\ &= 2 \int_0^1 y' (\delta y)' x dx \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{二级变分 } \delta^2 I[y] &= 2 \int_0^1 \delta [y' \delta y'] x dx \\ &= 2 \int_0^1 (\delta y')^2 x dx > 0 \end{aligned}$$

因为泛函 $I[y]$ 的二级变分恒取正值，所以这些极值函数均使泛函取极小



一、这无穷多个本征函数都是极值函数

$$\begin{aligned} \text{【证】} \quad \delta I[y] &= \int_0^1 [\delta y'^2] x dx \\ &= 2 \int_0^1 y' (\delta y)' x dx \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{二级变分 } \delta^2 I[y] &= 2 \int_0^1 \delta [y' \delta y'] x dx \\ &= 2 \int_0^1 (\delta y')^2 x dx > 0 \end{aligned}$$

因为泛函 $I[y]$ 的二级变分恒取正值，所以这些极值函数均使泛函取极小



二、这无穷个本征值正好也就是泛函的极值

【证】 将方程 $(xy')' + \lambda xy = 0$ 乘以极值函数 $y(x)$, 积分

$$\begin{aligned}\lambda \int_0^1 y^2 x dx &= - \int_0^1 y (xy')' dx \\ &= -y \cdot xy' \Big|_0^1 + \int_0^1 y'^2 x dx = \int_0^1 y'^2 x dx\end{aligned}$$

根据约束条件 $\int_0^1 xy^2 dx = 1$, 就能得到

$$\lambda = \int_0^1 y'^2 x dx$$



二、这无穷个本征值正好也就是泛函的极值

【证】 将方程 $(xy')' + \lambda xy = 0$ 乘以极值函数 $y(x)$, 积分

$$\begin{aligned}\lambda \int_0^1 y^2 x dx &= - \int_0^1 y (xy')' dx \\ &= -y \cdot xy' \Big|_0^1 + \int_0^1 y'^2 x dx = \int_0^1 y'^2 x dx\end{aligned}$$

根据约束条件 $\int_0^1 xy^2 dx = 1$, 就能得到

$$\lambda = \int_0^1 y'^2 x dx$$



二、这无穷个本征值正好也就是泛函的极值

【证】 将方程 $(xy')' + \lambda xy = 0$ 乘以极值函数 $y(x)$, 积分

$$\begin{aligned}\lambda \int_0^1 y^2 x dx &= - \int_0^1 y (xy')' dx \\ &= -y \cdot xy' \Big|_0^1 + \int_0^1 y'^2 x dx = \int_0^1 y'^2 x dx\end{aligned}$$

根据约束条件 $\int_0^1 xy^2 dx = 1$, 就能得到

$$\lambda = \int_0^1 y'^2 x dx$$



二、这无穷个本征值正好也就是泛函的极值

【证】 将方程 $(xy')' + \lambda xy = 0$ 乘以极值函数 $y(x)$, 积分

$$\begin{aligned} \lambda \int_0^1 y^2 x dx &= - \int_0^1 y (xy')' dx \\ &= -y \cdot xy' \Big|_0^1 + \int_0^1 y'^2 x dx = \int_0^1 y'^2 x dx \end{aligned}$$

根据约束条件 $\int_0^1 xy^2 dx = 1$, 就能得到

$$\lambda = \int_0^1 y'^2 x dx$$



二、这无穷个本征值正好也就是泛函的极值

【证】 将方程 $(xy')' + \lambda xy = 0$ 乘以极值函数 $y(x)$, 积分

$$\begin{aligned}\lambda \int_0^1 y^2 x dx &= - \int_0^1 y (xy')' dx \\ &= -y \cdot xy' \Big|_0^1 + \int_0^1 y'^2 x dx = \int_0^1 y'^2 x dx\end{aligned}$$

根据约束条件 $\int_0^1 xy^2 dx = 1$, 就能得到

$$\lambda = \int_0^1 y'^2 x dx$$



二、这无穷个本征值正好也就是泛函的极值

【证】 将方程 $(xy')' + \lambda xy = 0$ 乘以极值函数 $y(x)$, 积分

$$\begin{aligned}\lambda \int_0^1 y^2 x dx &= - \int_0^1 y (xy')' dx \\ &= -y \cdot xy' \Big|_0^1 + \int_0^1 y'^2 x dx = \int_0^1 y'^2 x dx\end{aligned}$$

根据约束条件 $\int_0^1 xy^2 dx = 1$, 就能得到

$$\lambda = \int_0^1 y'^2 x dx$$



从另一个角度理解泛函条件极值问题

- 从第11讲的讨论知道，本征函数的全体构成完备函数组
- 因此，作为泛函中的可取函数 $y(x)$ ，一定可以按照任意一组(完备的)本征函数(必须满足相同的边界条件)展开
- 不妨就选择上面求得的本征函数

$$y_i(x) = \frac{\sqrt{2}}{J_1(\mu_i)} J_0(\mu_i x)$$

- 因而展开为 $y(x) = \sum_{i=1}^{\infty} c_i y_i(x)$
(不妨设展开系数 c_i 为实数)



从另一个角度理解泛函条件极值问题

- 从第11讲的讨论知道，本征函数的全体构成完备函数组
- 因此，作为泛函中的可取函数 $y(x)$ ，一定可以按照任意一组(完备的)本征函数(必须满足相同的边界条件)展开
- 不妨就选择上面求得的本征函数

$$y_i(x) = \frac{\sqrt{2}}{J_1(\mu_i)} J_0(\mu_i x)$$

- 因而展开为 $y(x) = \sum_{i=1}^{\infty} c_i y_i(x)$
(不妨设展开系数 c_i 为实数)



从另一个角度理解泛函条件极值问题

- 从第11讲的讨论知道，本征函数的全体构成完备函数组
- 因此，作为泛函中的可取函数 $y(x)$ ，一定可以按照任意一组(完备的)本征函数(必须满足相同的边界条件)展开
- 不妨就选择上面求得的本征函数

$$y_i(x) = \frac{\sqrt{2}}{J_1(\mu_i)} J_0(\mu_i x)$$

- 因而展开为 $y(x) = \sum_{i=1}^{\infty} c_i y_i(x)$
(不妨设展开系数 c_i 为实数)



从另一个角度理解泛函条件极值问题

- 从第11讲的讨论知道，本征函数的全体构成完备函数组
- 因此，作为泛函中的可取函数 $y(x)$ ，一定可以按照任意一组(完备的)本征函数(必须满足相同的边界条件)展开
- 不妨就选择上面求得的本征函数

$$y_i(x) = \frac{\sqrt{2}}{J_1(\mu_i)} J_0(\mu_i x)$$

- 因而展开为 $y(x) = \sum_{i=1}^{\infty} c_i y_i(x)$
(不妨设展开系数 c_i 为实数)



从另一个角度理解泛函条件极值问题

$$\begin{aligned}
 \int_0^1 xy'^2 dx &= xy'y \Big|_0^1 - \int_0^1 (xy')' y dx \\
 &= - \int_0^1 \sum_{i=1}^{\infty} c_i (xy'_i)' \sum_{j=1}^{\infty} c_j y_j dx \\
 &= \sum_{i,j} c_i c_j \lambda_i \int_0^1 y_i y_j x dx \\
 &= \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i c_i^2 \\
 \int_0^1 xy'^2 dx &= \sum_{i=1}^{\infty} c_i^2 = 1
 \end{aligned}$$

因此，例18.1中的泛函条件极值问题又完全等价于(无穷维)二次型在约束条件下的极值问题



从另一个角度理解泛函条件极值问题

$$\begin{aligned}
 \int_0^1 xy'^2 dx &= xy'y \Big|_0^1 - \int_0^1 (xy')' y dx \\
 &= - \int_0^1 \sum_{i=1}^{\infty} c_i (xy'_i)' \sum_{j=1}^{\infty} c_j y_j dx \\
 &= \sum_{i,j} c_i c_j \lambda_i \int_0^1 y_i y_j x dx \\
 &= \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i c_i^2 \\
 \int_0^1 xy^2 dx &= \sum_{i=1}^{\infty} c_i^2 = 1
 \end{aligned}$$

因此，例18.1中的泛函条件极值问题又完全等价于(无穷维)二次型在约束条件下的极值问题



从另一个角度理解泛函条件极值问题

$$\begin{aligned}
 \int_0^1 xy'^2 dx &= xy'y \Big|_0^1 - \int_0^1 (xy')' y dx \\
 &= - \int_0^1 \sum_{i=1}^{\infty} c_i (xy'_i)' \sum_{j=1}^{\infty} c_j y_j dx \\
 &= \sum_{i,j} c_i c_j \lambda_i \int_0^1 y_i y_j x dx \\
 &= \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i c_i^2 \\
 \int_0^1 xy^2 dx &= \sum_{i=1}^{\infty} c_i^2 = 1
 \end{aligned}$$

因此，例18.1中的泛函条件极值问题又完全等价于(无穷维)二次型在约束条件下的极值问题



从另一个角度理解泛函条件极值问题

$$\begin{aligned}
 \int_0^1 xy'^2 dx &= xy'y \Big|_0^1 - \int_0^1 (xy')' y dx \\
 &= - \int_0^1 \sum_{i=1}^{\infty} c_i (xy'_i)' \sum_{j=1}^{\infty} c_j y_j dx \\
 &= \sum_{i,j} c_i c_j \lambda_i \int_0^1 y_i y_j x dx \\
 &= \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i c_i^2 \\
 \int_0^1 xy^2 dx &= \sum_{i=1}^{\infty} c_i^2 = 1
 \end{aligned}$$

因此，例18.1中的泛函条件极值问题又完全等价于(无穷维)二次型在约束条件下的极值问题



从另一个角度理解泛函条件极值问题

$$\begin{aligned}
 \int_0^1 xy'^2 dx &= xy'y \Big|_0^1 - \int_0^1 (xy')' y dx \\
 &= - \int_0^1 \sum_{i=1}^{\infty} c_i (xy'_i)' \sum_{j=1}^{\infty} c_j y_j dx \\
 &= \sum_{i,j} c_i c_j \lambda_i \int_0^1 y_i y_j x dx \\
 &= \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i c_i^2 \\
 \int_0^1 xy^2 dx &= \sum_{i=1}^{\infty} c_i^2 = 1
 \end{aligned}$$

因此，例18.1中的泛函条件极值问题又完全等价于(无穷维)二次型在约束条件下的极值问题



从另一个角度理解泛函条件极值问题

$$\begin{aligned}
 \int_0^1 xy'^2 dx &= xy'y \Big|_0^1 - \int_0^1 (xy')' y dx \\
 &= - \int_0^1 \sum_{i=1}^{\infty} c_i (xy'_i)' \sum_{j=1}^{\infty} c_j y_j dx \\
 &= \sum_{i,j} c_i c_j \lambda_i \int_0^1 y_i y_j x dx \\
 &= \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i c_i^2 \\
 \int_0^1 xy^2 dx &= \sum_{i=1}^{\infty} c_i^2 = 1
 \end{aligned}$$

因此，例18.1中的泛函条件极值问题又完全等价于(无穷维)二次型在约束条件下的极值问题



从另一个角度理解泛函条件极值问题

【思考题】 是否可以将可取函数 $y(x)$ 按任意一组
(完备的)本征函数(当然要满足与
 $y(x)$ 同样的边界条件)展开?



评述

- 👉 这一类泛函的条件极值问题的原型，可以追溯到“闭合曲线周长一定而面积取极大”的原始几何问题
- 👉 因此，泛函的条件极值问题，常称为等周问题(Isoperimetric problem)



评述

- ☞ 这一类泛函的条件极值问题的原型，可以追溯到“闭合曲线周长一定而面积取极大”的原始几何问题
- ☞ 因此，泛函的条件极值问题，常称为等周问题(Isoperimetric problem)



微分方程定解问题 和本征值问题 的变分形式



- 👉 泛函取极值的必要条件的微分形式(Euler-Lagrange方程) 是常微分方程或偏微分方程, 它和变量函数的定解条件结合起来, 就构成常微分方程或偏微分方程的定解问题
- 👉 对于泛函的条件极值问题, 其必要条件中出现待定参量(Lagrange乘子), 它和齐次边界条件结合起来, 就构成微分方程本征值问题
- 👉 现在研究它的反问题: 如何将微分方程的定解问题或本征值问题转化为泛函的极值或条件极值问题, 或者说, 如何将微分方程的定解问题或本征值问题用变分语言表述



- 👉 泛函取极值的必要条件的微分形式(Euler-Lagrange方程) 是常微分方程或偏微分方程, 它和变量函数的定解条件结合起来, 就构成常微分方程或偏微分方程的定解问题
- 👉 对于泛函的条件极值问题, 其必要条件中出现待定参量(Lagrange乘子), 它和齐次边界条件结合起来, 就构成微分方程本征值问题
- 👉 现在研究它的反问题: 如何将微分方程的定解问题或本征值问题转化为泛函的极值或条件极值问题, 或者说, 如何将微分方程的定解问题或本征值问题用变分语言表述



- 👉 泛函取极值的必要条件的微分形式(Euler-Lagrange方程) 是常微分方程或偏微分方程, 它和变量函数的定解条件结合起来, 就构成常微分方程或偏微分方程的定解问题
- 👉 对于泛函的条件极值问题, 其必要条件中出现待定参量(Lagrange乘子), 它和齐次边界条件结合起来, 就构成微分方程本征值问题
- 👉 现在研究它的反问题: 如何将微分方程的定解问题或本征值问题转化为泛函的极值或条件极值问题, 或者说, 如何将微分方程的定解问题或本征值问题用变分语言表述



讲授要点

- ① 泛函的条件极值(续)
 - 举例
- ② 微分方程的变分形式
 - 微分方程定解问题
 - 微分方程本征值问题
- ③ Rayleigh-Ritz方法
 - 基本思路
 - 举例



例18.2 写出常微分方程边值问题

$$\frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{dy}{dx} \right] + q(x)y(x) = f(x) \quad x_0 < x < x_1 \quad (\#)$$

$$y(x_0) = y_0 \quad y(x_1) = y_1 \quad (\times)$$

的泛函形式, 即找出相应的泛函, 它在边界条件(\times)下取极值的必要条件即为($\#$)

【解】 方程($\#$)一定来自

$$\int_{x_0}^{x_1} \left\{ \frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{dy}{dx} \right] + q(x)y(x) - f(x) \right\} \delta y(x) dx = 0$$



例18.2 写出常微分方程边值问题

$$\frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{dy}{dx} \right] + q(x)y(x) = f(x) \quad x_0 < x < x_1 \quad (\#)$$

$$y(x_0) = y_0 \quad y(x_1) = y_1 \quad (\times)$$

的泛函形式, 即找出相应的泛函, 它在边界条件(\times)下取极值的必要 条件即为($\#$)

【解】 方程($\#$)一定来自

$$\int_{x_0}^{x_1} \left\{ \frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{dy}{dx} \right] + q(x)y(x) - f(x) \right\} \delta y(x) dx = 0$$



$$\int_{x_0}^{x_1} \left\{ \frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{dy}{dx} \right] + q(x)y(x) - f(x) \right\} \delta y(x) dx$$

$$= \delta \int_{x_0}^{x_1} F(x, y, y') dx?$$

因为已知函数 $q(x)$ 和 $f(x)$ 是与 $y(x)$ 变分无关，因此，在变分计算中，它们应当看成是“常量”

$$\int_{x_0}^{x_1} q(x)y(x)\delta y(x)dx = \frac{1}{2}\delta \int_{x_0}^{x_1} q(x)y^2(x)dx$$

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)\delta y(x)dx = \delta \int_{x_0}^{x_1} f(x)y(x)dx$$



$$\int_{x_0}^{x_1} \left\{ \frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{dy}{dx} \right] + q(x)y(x) - f(x) \right\} \delta y(x) dx$$

$$= \delta \int_{x_0}^{x_1} F(x, y, y') dx?$$

因为已知函数 $q(x)$ 和 $f(x)$ 是与 $y(x)$ 变分无关，因此，在变分计算中，它们应当看成是“常量”

$$\int_{x_0}^{x_1} q(x)y(x)\delta y(x)dx = \frac{1}{2}\delta \int_{x_0}^{x_1} q(x)y^2(x)dx$$

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)\delta y(x)dx = \delta \int_{x_0}^{x_1} f(x)y(x)dx$$



$$\int_{x_0}^{x_1} \left\{ \frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{dy}{dx} \right] + q(x)y(x) - f(x) \right\} \delta y(x) dx$$

$$= \delta \int_{x_0}^{x_1} F(x, y, y') dx?$$

因为已知函数 $q(x)$ 和 $f(x)$ 是与 $y(x)$ 变分无关，因此，在变分计算中，它们应当看成是“常量”

$$\int_{x_0}^{x_1} q(x)y(x)\delta y(x)dx = \frac{1}{2}\delta \int_{x_0}^{x_1} q(x)y^2(x)dx$$

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)\delta y(x)dx = \delta \int_{x_0}^{x_1} f(x)y(x)dx$$



$$\int_{x_0}^{x_1} \left\{ \frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{dy}{dx} \right] + q(x)y(x) - f(x) \right\} \delta y(x) dx$$

$$= \delta \int_{x_0}^{x_1} F(x, y, y') dx?$$

因为已知函数 $q(x)$ 和 $f(x)$ 是与 $y(x)$ 变分无关，因此，在变分计算中，它们应当看成是“常量”

$$\int_{x_0}^{x_1} q(x)y(x)\delta y(x)dx = \frac{1}{2}\delta \int_{x_0}^{x_1} q(x)y^2(x)dx$$

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)\delta y(x)dx = \delta \int_{x_0}^{x_1} f(x)y(x)dx$$



$$\int_{x_0}^{x_1} \left\{ \frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{dy}{dx} \right] + q(x)y(x) - f(x) \right\} \delta y(x) dx$$

$$= \delta \int_{x_0}^{x_1} F(x, y, y') dx?$$

$$\int_{x_0}^{x_1} \frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{dy}{dx} \right] \delta y(x) dx$$



$$\int_{x_0}^{x_1} \left\{ \frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{dy}{dx} \right] + q(x)y(x) - f(x) \right\} \delta y(x) dx$$

$$= \delta \int_{x_0}^{x_1} F(x, y, y') dx?$$

$$\int_{x_0}^{x_1} \frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{dy}{dx} \right] \delta y(x) dx$$

$$= p(x) \frac{dy}{dx} \delta y(x) \Big|_{x_0}^{x_1} - \int_{x_0}^{x_1} p(x) \frac{dy}{dx} \frac{d(\delta y)}{dx} dx$$



$$\int_{x_0}^{x_1} \left\{ \frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{dy}{dx} \right] + q(x)y(x) - f(x) \right\} \delta y(x) dx$$

$$= \delta \int_{x_0}^{x_1} F(x, y, y') dx?$$

$$\int_{x_0}^{x_1} \frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{dy}{dx} \right] \delta y(x) dx$$

$$= - \int_{x_0}^{x_1} p(x) \frac{dy}{dx} \frac{d(\delta y)}{dx} dx$$



$$\int_{x_0}^{x_1} \left\{ \frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{dy}{dx} \right] + q(x)y(x) - f(x) \right\} \delta y(x) dx$$

$$= \delta \int_{x_0}^{x_1} F(x, y, y') dx?$$

$$\int_{x_0}^{x_1} \frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{dy}{dx} \right] \delta y(x) dx$$

$$= - \int_{x_0}^{x_1} p(x) \frac{dy}{dx} \frac{d(\delta y)}{dx} dx$$

$$= -\frac{1}{2} \delta \int_{x_0}^{x_1} p(x) \left(\frac{dy}{dx} \right)^2 dx$$



解答

$$\int_{x_0}^{x_1} \left\{ \frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{dy}{dx} \right] + q(x)y(x) - f(x) \right\} \delta y(x) dx$$

$$= -\delta \int_{x_0}^{x_1} \left\{ \frac{1}{2} \left[p(x) \left(\frac{dy}{dx} \right)^2 - q(x)y^2(x) \right] + f(x)y(x) \right\} dx$$

所以方程(#)一定是泛函

$$J[y] = \int_{x_0}^{x_1} \left\{ \frac{1}{2} \left[p(x) \left(\frac{dy}{dx} \right)^2 - q(x)y^2(x) \right] + f(x)y(x) \right\} dx$$

取极值的必要条件

解答

$$\int_{x_0}^{x_1} \left\{ \frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{dy}{dx} \right] + q(x)y(x) - f(x) \right\} \delta y(x) dx$$

$$= -\delta \int_{x_0}^{x_1} \left\{ \frac{1}{2} \left[p(x) \left(\frac{dy}{dx} \right)^2 - q(x)y^2(x) \right] + f(x)y(x) \right\} dx$$

所以方程(#)一定是泛函

$$J[y] = \int_{x_0}^{x_1} \left\{ \frac{1}{2} \left[p(x) \left(\frac{dy}{dx} \right)^2 - q(x)y^2(x) \right] + f(x)y(x) \right\} dx$$

取极值的必要条件

例18.3 写出偏微分方程边值问题

$$\nabla^2 u(\mathbf{r}) + k^2 u(\mathbf{r}) = -\rho(\mathbf{r}) \quad \mathbf{r} \in V$$

$$u(\mathbf{r})|_{\Sigma} = f(\Sigma)$$

的泛函形式

【解】 仿照例18.2的做法，应当考虑积分

$$\iiint_V [\nabla^2 u + k^2 u + \rho(\mathbf{r})] \delta u d\mathbf{r}$$

$$\stackrel{?}{=} \delta \iiint_V F(\mathbf{r}, u, u_x, u_y, u_z) d\mathbf{r}$$



例18.3 写出偏微分方程边值问题

$$\nabla^2 u(\mathbf{r}) + k^2 u(\mathbf{r}) = -\rho(\mathbf{r}) \quad \mathbf{r} \in V$$

$$u(\mathbf{r})|_{\Sigma} = f(\Sigma)$$

的泛函形式

【解】 仿照例18.2的做法，应当考虑积分

$$\iiint_V [\nabla^2 u + k^2 u + \rho(\mathbf{r})] \delta u d\mathbf{r}$$

$$\stackrel{?}{=} \delta \iiint_V F(\mathbf{r}, u, u_x, u_y, u_z) d\mathbf{r}$$



例18.3 写出偏微分方程边值问题

$$\nabla^2 u(\mathbf{r}) + k^2 u(\mathbf{r}) = -\rho(\mathbf{r}) \quad \mathbf{r} \in V$$

$$u(\mathbf{r})|_{\Sigma} = f(\Sigma)$$

的泛函形式

【解】 仿照例18.2的做法，应当考虑积分

$$\iiint_V [\nabla^2 u + k^2 u + \rho(\mathbf{r})] \delta u d\mathbf{r}$$

$$\stackrel{?}{=} \delta \iiint_V F(\mathbf{r}, u, u_x, u_y, u_z) d\mathbf{r}$$



显然

$$\iiint_V k^2 u \delta u d\mathbf{r} = \frac{1}{2} \delta \iiint_V k^2 u^2 d\mathbf{r}$$



显然

$$\iiint_V k^2 u \delta u d\mathbf{r} = \frac{1}{2} \delta \iiint_V k^2 u^2 d\mathbf{r}$$

$$\iiint_V \rho(\mathbf{r}) \delta u d\mathbf{r} = \delta \iiint_V \rho(\mathbf{r}) u d\mathbf{r}$$



显然

$$\iiint_V k^2 u \delta u d\mathbf{r} = \frac{1}{2} \delta \iiint_V k^2 u^2 d\mathbf{r}$$

$$\iiint_V \rho(\mathbf{r}) \delta u d\mathbf{r} = \delta \iiint_V \rho(\mathbf{r}) u d\mathbf{r}$$

对于第一项，要用到Green第一公式及边界条件



显然

$$\iiint_V k^2 u \delta u d\mathbf{r} = \frac{1}{2} \delta \iiint_V k^2 u^2 d\mathbf{r}$$

$$\iiint_V \rho(\mathbf{r}) \delta u d\mathbf{r} = \delta \iiint_V \rho(\mathbf{r}) u d\mathbf{r}$$

$$\iiint_V \nabla^2 u \delta u d\mathbf{r}$$



显然
$$\iiint_V k^2 u \delta u d\mathbf{r} = \frac{1}{2} \delta \iiint_V k^2 u^2 d\mathbf{r}$$

$$\iiint_V \rho(\mathbf{r}) \delta u d\mathbf{r} = \delta \iiint_V \rho(\mathbf{r}) u d\mathbf{r}$$

$$\iiint_V \nabla^2 u \delta u d\mathbf{r} = \iint_{\Sigma} \delta u \nabla u \cdot d\Sigma - \iiint_V \nabla u \cdot \nabla(\delta u) d\mathbf{r}$$



显然
$$\iiint_V k^2 u \delta u d\mathbf{r} = \frac{1}{2} \delta \iiint_V k^2 u^2 d\mathbf{r}$$

$$\iiint_V \rho(\mathbf{r}) \delta u d\mathbf{r} = \delta \iiint_V \rho(\mathbf{r}) u d\mathbf{r}$$

$$\begin{aligned} \iiint_V \nabla^2 u \delta u d\mathbf{r} &= \iint_{\Sigma} \delta u \nabla u \cdot d\Sigma - \iiint_V \nabla u \cdot \nabla(\delta u) d\mathbf{r} \\ &= - \iiint_V \nabla u \cdot \delta(\nabla u) d\mathbf{r} \end{aligned}$$



$$\text{显然} \quad \iiint_V k^2 u \delta u d\mathbf{r} = \frac{1}{2} \delta \iiint_V k^2 u^2 d\mathbf{r}$$

$$\iiint_V \rho(\mathbf{r}) \delta u d\mathbf{r} = \delta \iiint_V \rho(\mathbf{r}) u d\mathbf{r}$$

$$\begin{aligned} \iiint_V \nabla^2 u \delta u d\mathbf{r} &= \iint_{\Sigma} \delta u \nabla u \cdot d\Sigma - \iiint_V \nabla u \cdot \nabla(\delta u) d\mathbf{r} \\ &= - \iiint_V \nabla u \cdot \delta(\nabla u) d\mathbf{r} \\ &= -\frac{1}{2} \delta \iiint_V (\nabla u)^2 d\mathbf{r} \end{aligned}$$



结论

$$\begin{aligned} & \iiint_V [\nabla^2 u + k^2 u + \rho(\mathbf{r})] \delta u d\mathbf{r} \\ &= -\delta \iiint_V \left\{ \frac{1}{2} [(\nabla u)^2 - k^2 u^2] - \rho u \right\} d\mathbf{r} \end{aligned}$$



结论

所以

偏微分方程边值问题

$$\nabla^2 u(\mathbf{r}) + k^2 u(\mathbf{r}) = -\rho(\mathbf{r}) \quad \mathbf{r} \in V$$

$$u(\mathbf{r})|_{\Sigma} = f(\Sigma)$$

等价于在上述边界条件下求泛函

$$\iiint_V \left\{ \frac{1}{2} [(\nabla u)^2 - k^2 u^2] - \rho u \right\} d\mathbf{r}$$

的极值问题



结论

所以

偏微分方程边值问题

$$\nabla^2 u(\mathbf{r}) + k^2 u(\mathbf{r}) = -\rho(\mathbf{r}) \quad \mathbf{r} \in V$$

$$u(\mathbf{r})|_{\Sigma} = f(\Sigma)$$

等价于在上述边界条件下求泛函

$$\iiint_V \left\{ \frac{1}{2} [(\nabla u)^2 - k^2 u^2] - \rho u \right\} d\mathbf{r}$$

的极值问题



讲授要点

- ① 泛函的条件极值(续)
 - 举例
- ② 微分方程的变分形式
 - 微分方程定解问题
 - 微分方程本征值问题
- ③ Rayleigh-Ritz方法
 - 基本思路
 - 举例



例18.4 写出偏微分方程本征值问题

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

$$u(\mathbf{r})|_{\Sigma} = 0$$

的泛函形式

【解】首先，由例18.3的结果可知，此问题等价于在上述边界条件下求泛函

$$\iiint_V \left\{ [\nabla u]^2 - \lambda u^2 \right\} d\mathbf{r}$$

的极值问题



例18.4 写出偏微分方程本征值问题

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

$$u(\mathbf{r})|_{\Sigma} = 0$$

的泛函形式

【解】 首先，由例18.3的结果可知，此问题等价于在上述边界条件下求泛函

$$\iiint_V \left\{ [\nabla u]^2 - \lambda u^2 \right\} d\mathbf{r}$$

的极值问题



再进一步将本征值 λ 看成是Lagrange乘子，则原问题又等价于泛函

$$J[u] = \iiint_V [\nabla u]^2 dr$$

在原齐次边界条件及约束条件(本征函数的归一化条件)

$$J_1[u] = \iiint_V u^2 dr$$

下的条件极值问题



再进一步将本征值 λ 看成是Lagrange乘子，则原问题又等价于泛函

$$J[u] = \iiint_V [\nabla u]^2 dr$$

在原齐次边界条件及约束条件(本征函数的归一化条件)

$$J_1[u] = \iiint_V u^2 dr$$

下的条件极值问题



- 不难理解，这些本征函数正好就是泛函的极值函数，而本征值正好是泛函的极值

- 由于泛函 $J[u]$ 的二级变分

$$\delta^2 J[u] = 2 \iiint_V [\nabla(\delta u(r))]^2 dr$$

恒为正，所以泛函的极值是极小值

- 这些极小值中的最小者，当然就是本征值问题的最小本征值



- 不难理解，这些本征函数正好就是泛函的极值函数，而本征值正好是泛函的极值
- 由于泛函 $J[u]$ 的二级变分

$$\delta^2 J[u] = 2 \iiint_V [\nabla(\delta u(\mathbf{r}))]^2 d\mathbf{r}$$

恒为正，所以泛函的极值是极小值

- 这些极小值中的最小者，当然就是本征值问题的最小本征值



- 不难理解，这些本征函数正好就是泛函的极值函数，而本征值正好是泛函的极值

- 由于泛函 $J[u]$ 的二级变分

$$\delta^2 J[u] = 2 \iiint_V [\nabla(\delta u(\mathbf{r}))]^2 d\mathbf{r}$$

恒为正，所以泛函的极值是极小值

- 这些极小值中的最小者，当然就是本征值问题的最小本征值



讲授要点

- ① 泛函的条件极值(续)
 - 举例
- ② 微分方程的变分形式
 - 微分方程定解问题
 - 微分方程本征值问题
- ③ **Rayleigh-Ritz方法**
 - **基本思路**
 - 举例



变分法在物理学中的应用，可归纳为两个主要方面

一、作为基本物理规律的表述语言

- 可以用Hamilton原理或其他类似的语言描述力学系统(质点、质点组……)的运动
- 可以用Fermat原理描述光线在介质中的传播，包括在界面上的反射和折射
- 也可以用变分的语言描述电磁场乃至微观粒子的运动
-



变分法在物理学中的应用，可归纳为两个主要方面

一、作为基本物理规律的表述语言

- 可以用Hamilton原理或其他类似的语言描述力学系统(质点、质点组 \cdots)的运动
- 可以用Fermat原理描述光线在介质中的传播，包括在界面上的反射和折射
- 也可以用变分的语言描述电磁场乃至微观粒子的运动



变分法在物理学中的应用，可归纳为两个主要方面

一、作为基本物理规律的表述语言

- 可以用Hamilton原理或其他类似的语言描述力学系统(质点、质点组……)的运动
- 可以用Fermat原理描述光线在介质中的传播，包括在界面上的反射和折射
- 也可以用变分的语言描述电磁场乃至微观粒子的运动

•



变分法在物理学中的应用，可归纳为两个主要方面

一、作为基本物理规律的表述语言

- 可以用Hamilton原理或其他类似的语言描述力学系统(质点、质点组……)的运动
- 可以用Fermat原理描述光线在介质中的传播，包括在界面上的反射和折射
- 也可以用变分的语言描述电磁场乃至微观粒子的运动

•



变分法在物理学中的应用，可归纳为两个主要方面

一、作为基本物理规律的表述语言

- 可以用Hamilton原理或其他类似的语言描述力学系统(质点、质点组……)的运动
- 可以用Fermat原理描述光线在介质中的传播，包括在界面上的反射和折射
- 也可以用变分的语言描述电磁场乃至微观粒子的运动

• • • • •



变分法在物理学中的应用，可归纳为两个主要方面

一、作为基本物理规律的表述语言

- 可以用Hamilton原理或其他类似的语言描述力学系统(质点、质点组……)的运动
- 可以用Fermat原理描述光线在介质中的传播，包括在界面上的反射和折射
- 也可以用变分的语言描述电磁场乃至微观粒子的运动
-



变分法在物理学中的应用，可归纳为两个主要方面

一、作为基本物理规律的表述语言

- ☞ 在物理学的这些分支中，支配物质运动的各种特定形式的基本规律，无一例外地都可以表述为各自的泛函极值问题
- ☞ 变分法的这种应用，具有重要的理论意义：它可以使我们更统一地了解物质世界的运动，可以使我们更方便地从已知的物理领域向新的领域扩展



变分法在物理学中的应用，可归纳为两个主要方面

一、作为基本物理规律的表述语言

- ☞ 在物理学的这些分支中，支配物质运动的各种特定形式的基本规律，无一例外地都可以表述为各自的泛函极值问题
- ☞ 变分法的这种应用，具有重要的理论意义：它可以使我们更统一地了解物质世界的运动，可以使我们更方便地从已知的物理领域向新的领域扩展



变分法在物理学中的应用，可归纳为两个主要方面

二、为求解具体的物理问题提供了一种新的灵活手段

- 尽管我们平时仍然是习惯于使用微分方程去描写各类物理问题，但毕竟只有少数的问题才能精确求解
- 在多数的实际问题中往往只能得到近似解
- 在变分法的基础上，建立了实用的近似解法



变分法在物理学中的应用，可归纳为两个主要方面

二、为求解具体的物理问题提供了一种新的灵活手段

- 尽管我们平时仍然是习惯于使用微分方程去描写各类物理问题，但毕竟只有少数的问题才能精确求解
- 在多数的实际问题中往往只能得到近似解
- 在变分法的基础上，建立了实用的近似解法



变分法在物理学中的应用，可归纳为两个主要方面

二、为求解具体的物理问题提供了一种新的灵活手段

- 👉 尽管我们平时仍然是习惯于使用微分方程去描写各类物理问题，但毕竟只有少数的问题才能精确求解
- 👉 在多数的实际问题中往往只能得到近似解
- 👉 在变分法的基础上，建立了实用的近似解法



变分法在物理学中的应用，可归纳为两个主要方面

二、为求解具体的物理问题提供了一种新的灵活手段

- 👉 尽管我们平时仍然是习惯于使用微分方程去描写各类物理问题，但毕竟只有少数的问题才能精确求解
- 👉 在多数的实际问题中往往只能得到近似解
- 👉 在变分法的基础上，建立了实用的近似解法



设想有一个一般的本征值问题

$$LX = \lambda \rho X$$

$$\alpha_1 X(a) + \beta_1 X'(a) = 0$$

$$\alpha_2 X(b) + \beta_2 X'(b) = 0$$

可能出现三种情形：

• 微分方程的解已知



设想有一个一般的本征值问题

$$LX = \lambda \rho X$$

$$\alpha_1 X(a) + \beta_1 X'(a) = 0$$

$$\alpha_2 X(b) + \beta_2 X'(b) = 0$$

可能出现三种情形：

- 微分方程的解已知
- 微分方程的解未知，但可用常微分方程级数解法求解
- 微分方程难以直接求解，可考虑按(已知的完备)本征函数组展开



设想有一个一般的本征值问题

$$LX = \lambda\rho X$$

$$\alpha_1 X(a) + \beta_1 X'(a) = 0$$

$$\alpha_2 X(b) + \beta_2 X'(b) = 0$$

可能出现三种情形：

- 微分方程的解已知
- 微分方程的解未知，但可用常微分方程级数解法求解
- 微分方程难以直接求解，可考虑按(已知的完备)本征函数组展开



设想有一个一般的本征值问题

$$LX = \lambda \rho X$$

$$\alpha_1 X(a) + \beta_1 X'(a) = 0$$

$$\alpha_2 X(b) + \beta_2 X'(b) = 0$$

可能出现三种情形：

- 微分方程的解已知
- 微分方程的解未知，但可用常微分方程级数解法求解
- 微分方程难以直接求解，可考虑按(已知的完备)本征函数组展开



设想有一个一般的本征值问题

$$LX = \lambda \rho X$$

$$\alpha_1 X(a) + \beta_1 X'(a) = 0$$

$$\alpha_2 X(b) + \beta_2 X'(b) = 0$$

可能出现三种情形：

- 微分方程的解已知
- 微分方程的解未知，但可用常微分方程级数解法求解
- 微分方程难以直接求解，可考虑按(已知的完备)本征函数组展开



Rayleigh-Ritz方法解本征值问题的基本思路

- 首先将微分方程的本征值问题转化为泛函的条件极值问题
- 然后在一定的函数空间中求解，因而把问题转化函数的条件极值问题
- 只要选择的函数空间(对于此本征值问题)是完备的，原则上总可以足够精确地逼近本征值的精确值



Rayleigh-Ritz方法解本征值问题的基本思路

- 首先将微分方程的本征值问题转化为泛函的条件极值问题
- 然后在一定的函数空间中求解，因而把问题转化函数的条件极值问题
- 只要选择的函数空间(对于此本征值问题)是完备的，原则上总可以足够精确地逼近本征值的精确值



Rayleigh-Ritz方法解本征值问题的基本思路

- 首先将微分方程的本征值问题转化为泛函的条件极值问题
- 然后在一定的函数空间中求解，因而把问题转化函数的条件极值问题
- 只要选择的函数空间(对于此本征值问题)是完备的，原则上总可以足够精确地逼近本征值的精确值



Rayleigh-Ritz方法解本征值问题的基本思路

- 从实用的角度看，就是要选择一个“好”的函数空间(实际上是一个函数序列)，一方面便于计算，一方面又能够足够快地、足够精确地求得本征值的近似值
- 这就要求函数序列具有本征函数所要求的主要基本特征，要求我们事先从物理上和数学上对于本征函数的性质作出准确的判断



Rayleigh-Ritz方法解本征值问题的基本思路

- 从实用的角度看，就是要选择一个“好”的函数空间(实际上是一个函数序列)，一方面便于计算，一方面又能够足够快地、足够精确地求得本征值的近似值
- 这就要求函数序列具有本征函数所要求的主要基本特征，要求我们事先从物理上和数学上对于本征函数的性质作出准确的判断



讲授要点

- ① 泛函的条件极值(续)
 - 举例
- ② 微分方程的变分形式
 - 微分方程定解问题
 - 微分方程本征值问题
- ③ **Rayleigh-Ritz方法**
 - 基本思路
 - 举例



例18.5 求本征值问题

$$\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \left(x \frac{dy}{dx} \right) + \lambda y(x) = 0 \quad (\#)$$

$y(0)$ 有界 $y(1) = 0$

的最小本征值

【解】 这个本征值问题在例18.1中已经讨论过

条件极值问题

泛函 $I[y] = \int_0^1 xy'^2 dx$

边界条件 $y(0)$ 有界 $y(1) = 0$

约束条件 $I_1[y] \equiv \int_0^1 xy^2 dx = 1$

Euler-Lagrange方
程就是(#)

例18.5 求本征值问题

$$\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \left(x \frac{dy}{dx} \right) + \lambda y(x) = 0 \quad (\#)$$

$y(0)$ 有界 $y(1) = 0$

的最小本征值

【解】 这个本征值问题在例18.1中已经讨论过

条件极值问题

泛函 $I[y] = \int_0^1 xy'^2 dx$
 边界条件 $y(0)$ 有界 $y(1) = 0$
 约束条件 $I_1[y] \equiv \int_0^1 xy^2 dx = 1$

Euler-Lagrange 方程就是(#)



例18.5 求本征值问题

$$\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \left(x \frac{dy}{dx} \right) + \lambda y(x) = 0 \quad (\#)$$

$y(0)$ 有界 $y(1) = 0$

的最小本征值

【解】 这个本征值问题在例18.1中已经讨论过

条件极值问题

泛函 $I[y] = \int_0^1 xy'^2 dx$

边界条件 $y(0)$ 有界 $y(1) = 0$

约束条件 $I_1[y] \equiv \int_0^1 xy^2 dx = 1$

Euler-Lagrange 方程就是(#)



在求最小本征值的近似值之前，其实我们已经知道精确解

- 本征值 $\lambda_i = \mu_i^2 \quad i = 1, 2, 3, \dots$
(μ_i 是零阶贝塞耳函数 $J_0(x)$ 的第 i 个正零点)
- 相应本征函数 $y_i(x) = \frac{\sqrt{2}}{J_1(\mu_i)} J_0(\mu_i x)$
- 最小本征值 $\lambda_1 = (2.4048 \dots)^2 = 5.7831 \dots$



在求最小本征值的近似值之前，其实我们已经知道精确解

- 本征值 $\lambda_i = \mu_i^2 \quad i = 1, 2, 3, \dots$
 (μ_i 是零阶贝塞耳函数 $J_0(x)$ 的第 i 个正零点)

- 相应本征函数 $y_i(x) = \frac{\sqrt{2}}{J_1(\mu_i)} J_0(\mu_i x)$

- 最小本征值 $\lambda_1 = (2.4048 \dots)^2 = 5.7831 \dots$



在求最小本征值的近似值之前，其实我们已经知道精确解

- 本征值 $\lambda_i = \mu_i^2 \quad i = 1, 2, 3, \dots$
 (μ_i 是零阶贝塞耳函数 $J_0(x)$ 的第 i 个正零点)

- 相应本征函数 $y_i(x) = \frac{\sqrt{2}}{J_1(\mu_i)} J_0(\mu_i x)$

- 最小本征值 $\lambda_1 = (2.4048 \dots)^2 = 5.7831 \dots$



在求最小本征值的近似值之前，其实我们已经知道精确解

- 本征值 $\lambda_i = \mu_i^2 \quad i = 1, 2, 3, \dots$
 (μ_i 是零阶贝塞耳函数 $J_0(x)$ 的第 i 个正零点)
- 相应本征函数 $y_i(x) = \frac{\sqrt{2}}{J_1(\mu_i)} J_0(\mu_i x)$
- 最小本征值 $\lambda_1 = (2.4048 \dots)^2 = 5.7831 \dots$



现在用Rayleigh-Ritz方法求最小本征值

我们对于本征函数的了解是，它除了必须满足边界条件之外，还应该具有奇偶性（为什么？）

下面用多项式序列

$$y_n(x) = \alpha_1(1-x^2) + \alpha_2(1-x^2)^2 + \alpha_3(1-x^2)^3 \\ + \cdots + \alpha_n(1-x^2)^n \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

去逼近本征函数



现在用Rayleigh-Ritz方法求最小本征值

我们对于本征函数的了解是，它除了必须满足边界条件之外，还应该具有奇偶性（为什么？）

下面用多项式序列

$$y_n(x) = \alpha_1(1-x^2) + \alpha_2(1-x^2)^2 + \alpha_3(1-x^2)^3 \\ + \cdots + \alpha_n(1-x^2)^n \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

去逼近本征函数



现在用Rayleigh-Ritz方法求最小本征值

我们对于本征函数的了解是，它除了必须满足边界条件之外，还应该具有奇偶性（为什么？）

下面用多项式序列

$$y_n(x) = \alpha_1(1-x^2) + \alpha_2(1-x^2)^2 + \alpha_3(1-x^2)^3 \\ + \cdots + \alpha_n(1-x^2)^n \quad n = 1, 2, 3, \cdots$$

去逼近本征函数



先取一项(“一级近似”)

本征函数

(一级近似)

$$\bar{y}_1(x) = \alpha_1(1 - x^2)$$

归一化条件

$$\int_0^1 \bar{y}_1^2(x) x dx = 1$$



$$\alpha_1 = \sqrt{6}$$

最小本征值
(一级近似)

$$\bar{\lambda}_1 = \int_0^1 (\bar{y}'_1)^2 x dx = 6$$



先取一项(“一级近似”)

本征函数

(一级近似)

$$\bar{y}_1(x) = \alpha_1(1 - x^2)$$

归一化条件

$$\int_0^1 \bar{y}_1^2(x) x dx = 1$$

\Rightarrow

$$\alpha_1 = \sqrt{6}$$

最小本征值
(一级近似)

$$\bar{\lambda}_1 = \int_0^1 (\bar{y}'_1)^2 x dx = 6$$



先取一项(“一级近似”)

本征函数

(一级近似)

$$\bar{y}_1(x) = \alpha_1(1 - x^2)$$

归一化条件

$$\int_0^1 \bar{y}_1^2(x) x dx = 1$$



$$\alpha_1 = \sqrt{6}$$

最小本征值
(一级近似)

$$\bar{\lambda}_1 = \int_0^1 (\bar{y}'_1)^2 x dx = 6$$



先取一项(“一级近似”)

本征函数

(一级近似)

$$\bar{y}_1(x) = \alpha_1(1 - x^2)$$

归一化条件

$$\int_0^1 \bar{y}_1^2(x) x dx = 1$$



$$\alpha_1 = \sqrt{6}$$

最小本征值
(一级近似)

$$\bar{\lambda}_1 = \int_0^1 (\bar{y}_1')^2 x dx = 6$$



再取两项(“二级近似”)

本征函数

(二级近似)

$$\bar{y}_2(x) = \alpha_1(1 - x^2) + \alpha_2(1 - x^2)^2$$

归一化条件

$$\int_0^1 \bar{y}_2^2(x) x dx = 1$$

$$\frac{1}{6}\alpha_1^2 + \frac{1}{4}\alpha_1\alpha_2 + \frac{1}{10}\alpha_2^2 = 1$$

泛函值
(二级近似)

$$\begin{aligned} & \int_0^1 (\bar{y}'_2)^2 x dx \\ &= \alpha_1^2 + \frac{4}{3}\alpha_1\alpha_2 + \frac{2}{3}\alpha_2^2 \end{aligned}$$



再取两项(“二级近似”)

本征函数

(二级近似)

$$\bar{y}_2(x) = \alpha_1(1 - x^2) + \alpha_2(1 - x^2)^2$$

归一化条件

$$\int_0^1 \bar{y}_2^2(x) x dx = 1$$

$$\frac{1}{6}\alpha_1^2 + \frac{1}{4}\alpha_1\alpha_2 + \frac{1}{10}\alpha_2^2 = 1$$

泛函值
(二级近似)

$$\begin{aligned} & \int_0^1 (\bar{y}_2')^2 x dx \\ &= \alpha_1^2 + \frac{4}{3}\alpha_1\alpha_2 + \frac{2}{3}\alpha_2^2 \end{aligned}$$



再取两项(“二级近似”)

本征函数

(二级近似)

$$\bar{y}_2(x) = \alpha_1(1 - x^2) + \alpha_2(1 - x^2)^2$$

归一化条件

$$\int_0^1 \bar{y}_2^2(x) x dx = 1$$

$$\frac{1}{6}\alpha_1^2 + \frac{1}{4}\alpha_1\alpha_2 + \frac{1}{10}\alpha_2^2 = 1$$

泛函值
(二级近似)

$$\begin{aligned} & \int_0^1 (\bar{y}'_2)^2 x dx \\ &= \alpha_1^2 + \frac{4}{3}\alpha_1\alpha_2 + \frac{2}{3}\alpha_2^2 \end{aligned}$$



再取两项(“二级近似”)

本征函数

(二级近似)

$$\bar{y}_2(x) = \alpha_1(1 - x^2) + \alpha_2(1 - x^2)^2$$

归一化条件

$$\int_0^1 \bar{y}_2^2(x) x dx = 1$$

$$\frac{1}{6}\alpha_1^2 + \frac{1}{4}\alpha_1\alpha_2 + \frac{1}{10}\alpha_2^2 = 1$$

泛函值
(二级近似)

$$\begin{aligned} \int_0^1 (\bar{y}_2')^2 x dx \\ = \alpha_1^2 + \frac{4}{3}\alpha_1\alpha_2 + \frac{2}{3}\alpha_2^2 \end{aligned}$$



- 如何使泛函值(本征值)取极值?
 应当选取适当的 α_1, α_2

- 这是关于 α_1, α_2 的二元函数条件极值问题

二元函数
$$I = \alpha_1^2 + \frac{4}{3}\alpha_1\alpha_2 + \frac{2}{3}\alpha_2^2$$

约束条件
$$I_1 = \frac{1}{6}\alpha_1^2 + \frac{1}{4}\alpha_1\alpha_2 + \frac{1}{10}\alpha_2^2 = 1$$

- 必要条件

$$\frac{\partial(I - \lambda I_1)}{\partial \alpha_1} = 2\alpha_1 + \frac{4}{3}\alpha_2 - \lambda \left(\frac{1}{3}\alpha_1 + \frac{1}{4}\alpha_2 \right) = 0$$

$$\frac{\partial(I - \lambda I_1)}{\partial \alpha_2} = \frac{4}{3}\alpha_2 + \frac{4}{3}\alpha_1 - \lambda \left(\frac{1}{5}\alpha_2 + \frac{1}{4}\alpha_1 \right) = 0$$



- 如何使泛函值(本征值)取极值?
 应当选取适当的 α_1, α_2

- 这是关于 α_1, α_2 的二元函数条件极值问题

二元函数
$$I = \alpha_1^2 + \frac{4}{3}\alpha_1\alpha_2 + \frac{2}{3}\alpha_2^2$$

约束条件
$$I_1 = \frac{1}{6}\alpha_1^2 + \frac{1}{4}\alpha_1\alpha_2 + \frac{1}{10}\alpha_2^2 = 1$$

- 必要条件是

$$\frac{\partial(I - \lambda I_1)}{\partial \alpha_1} = 2\alpha_1 + \frac{4}{3}\alpha_2 - \lambda \left(\frac{1}{3}\alpha_1 + \frac{1}{4}\alpha_2 \right) = 0$$

$$\frac{\partial(I - \lambda I_1)}{\partial \alpha_2} = \frac{4}{3}\alpha_2 + \frac{4}{3}\alpha_1 - \lambda \left(\frac{1}{5}\alpha_2 + \frac{1}{4}\alpha_1 \right) = 0$$



- 如何使泛函值(本征值)取极值?
 应当选取适当的 α_1, α_2

- 这是关于 α_1, α_2 的二元函数条件极值问题

二元函数
$$I = \alpha_1^2 + \frac{4}{3}\alpha_1\alpha_2 + \frac{2}{3}\alpha_2^2$$

约束条件
$$I_1 = \frac{1}{6}\alpha_1^2 + \frac{1}{4}\alpha_1\alpha_2 + \frac{1}{10}\alpha_2^2 = 1$$

- 必要条件是

$$\frac{\partial(I - \lambda I_1)}{\partial \alpha_1} = 2\alpha_1 + \frac{4}{3}\alpha_2 - \lambda \left(\frac{1}{3}\alpha_1 + \frac{1}{4}\alpha_2 \right) = 0$$

$$\frac{\partial(I - \lambda I_1)}{\partial \alpha_2} = \frac{4}{3}\alpha_2 + \frac{4}{3}\alpha_1 - \lambda \left(\frac{1}{5}\alpha_2 + \frac{1}{4}\alpha_1 \right) = 0$$



$$2\alpha_1 + \frac{4}{3}\alpha_2 - \lambda\left(\frac{1}{3}\alpha_1 + \frac{1}{4}\alpha_2\right) = 0$$

$$\frac{4}{3}\alpha_2 + \frac{4}{3}\alpha_1 - \lambda\left(\frac{1}{5}\alpha_2 + \frac{1}{4}\alpha_1\right) = 0$$

是关于 α_1, α_2 线性齐次代数方程组

有非零解的充分必要条件是系数行列式为0

$$\begin{vmatrix} 2 - \frac{\lambda}{3} & \frac{4}{3} - \frac{\lambda}{4} \\ \frac{4}{3} - \frac{\lambda}{4} & \frac{4}{3} - \frac{\lambda}{5} \end{vmatrix} = 0$$

即

$$3\lambda^2 - 128\lambda + 640 = 0$$



$$2\alpha_1 + \frac{4}{3}\alpha_2 - \lambda\left(\frac{1}{3}\alpha_1 + \frac{1}{4}\alpha_2\right) = 0$$

$$\frac{4}{3}\alpha_2 + \frac{4}{3}\alpha_1 - \lambda\left(\frac{1}{5}\alpha_2 + \frac{1}{4}\alpha_1\right) = 0$$

是关于 α_1, α_2 线性齐次代数方程组

有非零解的充分必要条件是系数行列式为0

$$\begin{vmatrix} 2 - \frac{\lambda}{3} & \frac{4}{3} - \frac{\lambda}{4} \\ \frac{4}{3} - \frac{\lambda}{4} & \frac{4}{3} - \frac{\lambda}{5} \end{vmatrix} = 0$$

即

$$3\lambda^2 - 128\lambda + 640 = 0$$



$$2\alpha_1 + \frac{4}{3}\alpha_2 - \lambda\left(\frac{1}{3}\alpha_1 + \frac{1}{4}\alpha_2\right) = 0$$

$$\frac{4}{3}\alpha_2 + \frac{4}{3}\alpha_1 - \lambda\left(\frac{1}{5}\alpha_2 + \frac{1}{4}\alpha_1\right) = 0$$

是关于 α_1, α_2 线性齐次代数方程组

有非零解的充分必要条件是系数行列式为0

$$\begin{vmatrix} 2 - \frac{\lambda}{3} & \frac{4}{3} - \frac{\lambda}{4} \\ \frac{4}{3} - \frac{\lambda}{4} & \frac{4}{3} - \frac{\lambda}{5} \end{vmatrix} = 0$$

即

$$3\lambda^2 - 128\lambda + 640 = 0$$



解之得
$$\lambda = \frac{64}{3} \pm \frac{8}{3}\sqrt{34}$$

给出了 λ (本征值, 亦即泛函值)的两个极小值

最小本征值是 $\bar{\lambda}_1 = 5.7841 \dots$

与精确值 $\lambda_1 = 5.7831 \dots$ 的相对误差 $< 2 \times 10^{-4}$



解之得
$$\lambda = \frac{64}{3} \pm \frac{8}{3}\sqrt{34}$$

给出了 λ (本征值, 亦即泛函值)的两个极小值

最小本征值是 $\bar{\lambda}_1 = 5.7841 \dots$

与精确值 $\lambda_1 = 5.7831 \dots$ 的相对误差 $< 2 \times 10^{-4}$



解之得
$$\lambda = \frac{64}{3} \pm \frac{8}{3}\sqrt{34}$$

给出了 λ (本征值, 亦即泛函值)的两个极小值

最小本征值是
$$\bar{\lambda}_1 = 5.7841 \dots$$

与精确值 $\lambda_1 = 5.7831 \dots$ 的相对误差 $< 2 \times 10^{-4}$



解之得
$$\lambda = \frac{64}{3} \pm \frac{8}{3}\sqrt{34}$$

给出了 λ (本征值, 亦即泛函值)的两个极小值

最小本征值是
$$\bar{\lambda}_1 = 5.7841 \dots$$

与精确值 $\lambda_1 = 5.7831 \dots$ 的相对误差 $< 2 \times 10^{-4}$



对应于最小本征值 $\bar{\lambda}_1$, 可求得

$$\alpha_1 = 2\sqrt{12 - 33\sqrt{2/17}} = 1.6505676 \dots$$

$$\alpha_2 = \sqrt{80 - 230\sqrt{2/17}} = 1.0538742 \dots$$

相应的本征函数近似解为

$$\bar{y}_2(x) = \alpha_1(1 - x^2) + \alpha_2(1 - x^2)^2$$



对应于最小本征值 $\bar{\lambda}_1$, 可求得

$$\alpha_1 = 2\sqrt{12 - 33\sqrt{2/17}} = 1.6505676 \dots$$

$$\alpha_2 = \sqrt{80 - 230\sqrt{2/17}} = 1.0538742 \dots$$

相应的本征函数近似解为

$$\bar{y}_2(x) = \alpha_1(1 - x^2) + \alpha_2(1 - x^2)^2$$



与精确解 $y(x) = \frac{\sqrt{2}}{J_1(\mu_1)} J_0(\mu_1 x)$ 的比较:

① 图形

▶ Figure

② 二者之差

▶ Figure

③ $\Delta = \int_0^1 [y(x) - \bar{y}_2(x)]^2 x dx = 1.66 \times 10^{-5}$

▶ Continue



与精确解 $y(x) = \frac{\sqrt{2}}{J_1(\mu_1)} J_0(\mu_1 x)$ 的比较:

① 图形

▶ Figure

② 二者之差

▶ Figure

③ $\Delta = \int_0^1 [y(x) - \bar{y}_2(x)]^2 x dx = 1.66 \times 10^{-5}$

▶ Continue



与精确解 $y(x) = \frac{\sqrt{2}}{J_1(\mu_1)} J_0(\mu_1 x)$ 的比较:

① 图形

▶ Figure

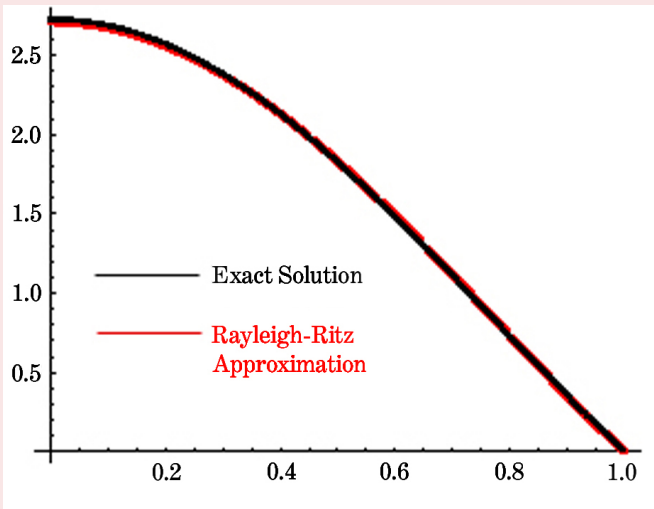
② 二者之差

▶ Figure

③
$$\Delta = \int_0^1 [y(x) - \bar{y}_2(x)]^2 x dx = 1.66 \times 10^{-5}$$

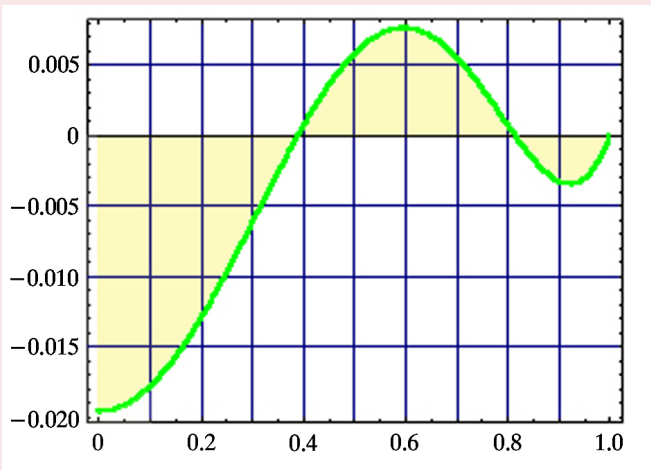
▶ Continue





Return





◀ Return



评述

- 二级近似计算出的本征值和本征函数就能达到这个精度，由此可以看出，Rayleigh-Ritz方法的确不失为一种好的近似方法
- 可以想像，如果更高级的近似(取的项数更多)，得到的精度会更高



评述

- 二级近似计算出的本征值和本征函数就能达到这个精度，由此可以看出，Rayleigh-Ritz方法的确不失为一种好的近似方法
- 可以想像，如果更高级的近似(取的项数更多)，得到的精度会更高



评述

- 在应用Rayleigh–Ritz方法时，只能求得最低的几个本征值的近似值，本征值的个数和使用的逼近函数中的参数数目相同
- 这是应用Rayleigh–Ritz方法求解本征值问题的一个特点。在实际应用中，并不会因为Rayleigh–Ritz方法只能求得有限个本征值而降低它的实用价值，因为有不少问题只需要求出最小的若干个本征值



评述

- 在应用Rayleigh–Ritz方法时，只能求得最低的几个本征值的近似值，本征值的个数和使用的逼近函数中的参数数目相同
- 这是应用Rayleigh–Ritz方法求解本征值问题的一个特点。在实际应用中，并不会因为Rayleigh–Ritz方法只能求得有限个本征值而降低它的实用价值，因为有不少问题只需要求出最小的若干个本征值



次小本征值?

$$\bar{\lambda}_2 = \frac{64}{3} + \frac{8}{3}\sqrt{34} = 36.883 \dots$$

与精确值 $30.471 \dots$ 之间的误差竟超过20%

如何能提高次小本征值的计算精度?



次小本征值?

$$\bar{\lambda}_2 = \frac{64}{3} + \frac{8}{3}\sqrt{34} = 36.883 \dots$$

与精确值 $30.471 \dots$ 之间的误差竟超过20%

如何能提高次小本征值的计算精度?



次小本征值?

$$\bar{\lambda}_2 = \frac{64}{3} + \frac{8}{3}\sqrt{34} = 36.883 \dots$$

与精确值 $30.471 \dots$ 之间的误差竟超过20%

如何能提高次小本征值的计算精度?



次小本征值?

$$\bar{\lambda}_2 = \frac{64}{3} + \frac{8}{3}\sqrt{34} = 36.883\dots$$

与精确值 $30.471\dots$ 之间的误差竟超过20%

如何能提高次小本征值的计算精度?

