1 Метод функции Грина

1.1 Обращение операторов

В пространстве функций удобно ввести скалярное произведение

$$\langle \psi | \varphi \rangle = \int \langle \psi | x \rangle \langle x | \varphi \rangle \, dx = \int \psi^*(x) \varphi(x) dx$$

а действие операторов $\hat{L} : \psi \mapsto \varphi$ представлять с помощью интегрального ядра

$$\langle y | \hat{L} | \psi \rangle = \int \langle y | \hat{L} | x \rangle \langle x | \psi \rangle \, dx = \int L(y,x) \psi(x) dx = \varphi(y) = \langle y | \varphi \rangle .$$

При этом область интегрирования определяется классом функции, на котором задан оператор. Важно отметить, что область определения оператора является частью его определения, так например, оператор импульса $\hat{p} = -id/dx$ в классе аналитичных функций на оси $C^\infty(\mathbb{R})$ является самосопряжённым, имеет полный в данном классе набор собственных функций $\psi_k(x) = e^{ikx}$, $k \in \mathbb{R}$. Того же нельзя сказать про оператор производной, действующий в пространстве бесконечно дифференцируемых функций на отрезке $C^\infty[0,1]$ с нулевыми граничными условиями.

На практике чаще всего имеют дело с самосопряжёнными операторами, которые могут быть диагонализованы, т.е. представлены в виде

$$\hat{L} = \sum_k |k\rangle \lambda_k \langle k| , \qquad L(x,y) = \langle x | \hat{L} | y \rangle = \sum_k \lambda_k \psi_k(x) \psi_k^*(y).$$

В данных терминах, решение дифференциального уравнения

$$\hat{L}\psi = f \tag{1.1}$$

эквивалентно нахождению обратного оператора $\hat{L}^{-1} = \hat{G}$ — оператора Грина.

$$\hat{L}\hat{G} = \mathbb{1}, \quad \hat{L}G(x,y) = \delta(x-y) \qquad \Rightarrow \qquad \psi(x) = \int G(x,y) f(y) dy. \tag{1.2}$$

Ядро гриновского оператора — функцию Грина — легко представить в виде разложения по собственным функциям оператора $\hat{L}$.

$$G(x,y) = \sum_k \frac{\psi_k(x)\psi_k^*(y)}{\lambda_k}. \tag{1.3}$$

Нулевые моды

Из разложения (1.3) видно, что функция Грина не определена при наличии у оператора $\hat{L}$ нулевых мод — собственных функций с нулевыми собственными значениями $\lambda_n = 0$. В таком случае имеет смысл сузить исходную область определения оператора, исключив из рассмотрения нулевые моды.

$$\left(\begin{array}{ccc|c} \lambda_1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & \lambda_k & \\ \hline & & & 0 \end{array}\right)^{-1}_{\text{right}} \simeq \left(\begin{array}{ccc|c} \lambda_1^{-1} & & & \\ & \ddots & & \\ & & \lambda_k^{-1} & \\ \hline * & \cdots & * & * \end{array}\right)$$

Полученный оператор Грина будет решать дифференциальное уравнение (1.1) в случае, когда правая часть не содержит в своём разложении соответствующих собственных функций.

$$f(y) = \sum_{\mu \neq 0} f_\mu \psi_\mu(y), \quad \psi(x) = \int \sum_{\lambda \neq 0} \frac{\psi_\lambda(x)}{\lambda} \psi_\lambda^*(y) f(y) dy = \sum_{\lambda \neq 0} \frac{f_\lambda}{\lambda} \psi_\lambda(x).$$

Следует уточнить, что для решения (1.1), нужен именно правый обратный оператор $\hat{L}^{-1}_{\text{right}}$. При наличии нулевых мод эта особенность приводит к неоднозначности оператора Грина, поскольку добавление функции вида $\psi_{\lambda_0}(x)\varphi(y)$ не изменяет функции Грина, когда $\hat{L}\psi_{\lambda_0} = 0$. Другими словами, частное решение уравнения (1.2) определено с точностью добавления произвольной линейной комбинации решений однородного уравнения.

Трансляционно–инвариантный оператор

Простым и практически важным примером является трансляционной инвариантный оператор, т. е. такой оператор, который коммутирует с оператором сдвига координаты $\hat{T}_a\psi(x) = \psi(x+a)$. В этом случае оператор диагонализуется в базисе плоских волн и, следовательно, является функцией только разности координат.

Пусть, например, $\hat{L}$ — некоторый дифференциальный полином $P\left(\frac{d}{dx}\right)$, определённый на отрезке $[-l/2, l/2]$ с периодическими граничными условиями. Нормированные собственные функции и собственные значения суть

$$\psi_k(x) = \frac{e^{ikx}}{\sqrt{L}}, \quad \lambda_k = P(ik), \qquad k = 0, \pm\frac{2\pi}{l}, \pm\frac{4\pi}{l}, \dots.$$

Тождественный оператор в таком базисе имеет вид

$$\delta(x-y) = \sum_k \psi_k(x)\psi_k^*(y) = \sum_k \frac{e^{ik(x-y)}}{l}, \quad -l/2 < x < l/2. \tag{1.4}$$

Тогда оператор Грина дифференциального полинома $P\left(\frac{d}{dx}\right)$, заданного на периодических на отрезке функциях представляется рядом

$$G(x,y) = \frac{1}{l}\sum_k \frac{e^{ik(x-y)}}{P(ik)}, \quad -l/2 < x < l/2.$$

Замечание. Чтобы продолжить равенство (1.4) на всю ось, следует периодически продолжить δ–функцию, что приводит к известному тождеству Пуассона.

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - nl) = \frac{1}{l}\sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp\left(2\pi n i \frac{x}{l}\right), \quad x \in \mathbb{R}.$$

Здесь же полезно продемонстрировать как происходит переход к пределу $l \to \infty$. Шаг изменения импульса $\delta k = 2\pi/l \to 0$, что позволяет заменить сумму на интеграл.

$$\delta(x) = \frac{1}{l}\sum_k e^{ikx} = \frac{1}{l}\sum_k \frac{l\delta k}{2\pi} e^{ikx} \to \int e^{ikx}\frac{dk}{2\pi}.$$

Функция Грина в пределе $l \to +\infty$ переходит в знакомое Фурье–представление

$$G(x,y) = \int \frac{e^{ik(x-y)}}{P(ik)}\frac{dk}{2\pi}.$$

Упражнение 1.1. Найти собственные вектора и значения матрицы смежности графа–цикла C_n.

$$A_n = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 \end{pmatrix}_{n\times n}$$

1.3 Граничные задачи

Разберу теперь метод функции Грина применительно к задачам с граничными условиями.

Периодические граничные условия

В качестве простого примера, рассмотрю оператор Гельмгольца на кольце (отрезке $[-\pi, \pi]$ с периодическими граничными условиями).

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + \kappa^2\right]\psi(x) = 0, \quad \psi(-\pi) = \psi(\pi), \;\; \psi'(-\pi) = \psi'(\pi).$$

Собственными функциями рассматриваемого оператора являются плоские волны с дискретными значениями волнового вектора. Следовательно функция Грина является функцией только разности координат.

$$G(x, y) = \frac{1}{2\pi}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\frac{e^{inx}e^{-iny}}{\kappa^2 - n^2} = \frac{1}{2\pi\kappa^2} + \frac{1}{\pi}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\cos n(x-y)}{\kappa^2 - n^2} \equiv G(x-y). \tag{1.10}$$

Если $\kappa \in \mathbb{Z}$ меня будет интересовать сужение оператора Грина на класс функций, не содержащих κ фурье–гармонику. В этом случае из суммы (1.10) следует убрать член с $n = \kappa$.

Представления функции Грина в виде ряда содержательны сами по себе, однако, на практике бывает удобно представить функции Грина в замкнутой форме. Сначала буду полагать, что $\kappa \notin \mathbb{Z}$.

Нецелые $\kappa \notin \mathbb{Z}$ Функцию $G(x)$ можно вычислить в замкнутой форме как решение задачи

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + \kappa^2\right]G(x) = \delta(x), \quad G(-\pi) = G(\pi), \;\; G'(-\pi) = G'(\pi).$$

Граничные условия легко установить из представления в виде ряда. Несложно увидеть частное решение $\frac{1}{2\kappa}\sin\kappa|x|$, значит функция Грина имеет вид

$$G(x) = \frac{1}{2\kappa}\operatorname{sgn} x \sin\kappa x + A\cos\kappa x + B\sin\kappa x, \qquad -\pi < x < \pi.$$

Из граничных условий нахожу $G(-\pi) = G(\pi) \Rightarrow B = 0$, $G'(-\pi) = G'(\pi) \Rightarrow A = \frac{1}{2\kappa}\operatorname{ctg}\kappa\pi$. В итоге,

$$G_\kappa(x) = \frac{1}{2\kappa}\left(\sin\kappa|x| + \operatorname{ctg}\kappa\pi\cos\kappa x\right) = \frac{\cos\kappa(|x| - \pi)}{2\kappa\sin\pi\kappa}, \qquad \kappa \notin \mathbb{Z}. \tag{1.11}$$

Упражнение 1.5. Используя полученнок выражение (1.11) найти значение суммы ряда

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty}\frac{1}{\kappa^2 - (\pi n)^2}, \qquad \kappa \notin \mathbb{Z}.$$

Случай $\kappa \in \mathbb{Z}$ легко решить, совершив предельный переход в полученном ответе, предварительно вычтя иррегулярный член.

Упражнение 1.6. Исходя из выражения (1.11) вычислить функции Грина в предельных случаях

$$G_{\kappa\in\mathbb{N}}(x) = \lim_{\kappa\to n}\left[G_\kappa(x) - \frac{\cos nx}{\pi(\kappa^2 - n^2)}\right], \qquad G_{\kappa=0}(x) = \lim_{\kappa\to 0}\left[G_\kappa(x) - \frac{1}{2\pi\kappa^2}\right].$$

Также полезно показать, как обработать нулевые моды исходя из других соображений.

Целые $\kappa \in \mathbb{Z}$ Редуцированная сумма, не содержащая κ–гармонику удовлетворяет

$$\left[\frac{d^2}{dx^2}+\kappa^2\right]G(x)=\delta(x)-\frac{1}{\pi}\cos\kappa x.$$

Неоднородная добавка учитывается при помощи $-\frac{x}{2\pi\kappa}\sin\kappa x$, так что общее решение суть

$$G(x)=\frac{1}{2\kappa}\sin\kappa|x|-\frac{x}{2\pi\kappa}\sin\kappa x+A\cos\kappa x+B\sin\kappa x, \qquad -\pi<x<\pi.$$

Условия $G(-\pi)=G(\pi)$, $G'(-\pi)=G'(\pi)$ при целом κ выполняются при произвольных A, B. Таким образом, вне зависимости от значений коэффициентов A, B указанная функция является функцией Грина оператора Гельмгольца в классе периодических функций, не содержащих κ–гармоники. Действительно, свёртка $\cos\kappa x$, $\sin\kappa x$ с любой такой функцией обращается в ноль.

Коэффициенты A, B можно зафиксировать условием отсутствия гармоник с $n=\kappa$, тогда функция Грина будет в точности совпадать со своим представлением в виде ряда.

$$\int_{-\pi}^{\pi}G(x)\cos\kappa x\,dx=\int_{-\pi}^{\pi}G(x)\sin\kappa x\,dx=0,$$

Откуда следует $A=-\frac{1}{4\pi\kappa^2}$, $B=0$. Окончательно,

$$G_{\kappa\in\mathbb{N}}(x)=\frac{1}{2\pi\kappa^2}+\frac{1}{\pi}\sum_{n\geqslant 1}^{n\neq\kappa}\frac{\cos nx}{\kappa^2-n^2}=\frac{1}{2\kappa}\left(\sin\kappa|x|+\frac{x}{\pi}\sin\kappa x-\frac{\cos\kappa x}{2\pi\kappa}\right), \quad \kappa\in\mathbb{Z}\backslash\{0\}$$

Случай $\kappa=0$ Также может быть рассмотрен случай $\kappa=0$, когда оператор Гельмгольца вырождается в оператор второй производной (лапласиан). Уравнение на функцию Грина выглядит следующим образом.

$$G(x)=\frac{-1}{\pi}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\cos nx}{n^2}, \qquad \frac{d^2}{dx^2}G(x)=\delta(x)-\frac{1}{2\pi}.$$

Общее решение имеет вид

$$G(x)=\frac{1}{2}|x|-\frac{x^2}{4\pi}+A+Bx,$$

причём из условий периодичности следует, что $B=0$, а вот константа A может быть выбрана произвольной, покуда оператор Грина действует только на пространстве функций без нулевой гармоники. Чтобы получить сумму ряда, нужно зафиксировать константу условием

$$\int_{-\pi}^{\pi}G(x)\,dx=0 \qquad \Rightarrow \qquad G_{\kappa=0}(x)=\frac{1}{2}|x|-\frac{x^2}{4\pi}-\frac{\pi}{6}.$$

Замечание. Обобщение полученных выражений для оператора, действующего на кольце $[-L/2,L/2]$ произвольной длины L легко получить из соображений размерности.

$$\begin{aligned}
G_{\kappa L\notin 2\pi\mathbb{N}}(x)&=\frac{1}{2\kappa}\left(\sin\kappa|x|+\operatorname{ctg}\frac{\kappa L}{2}\cos\kappa x\right),\\
G_{\kappa L\in 2\pi\mathbb{N}}(x)&=\frac{1}{2\kappa}\left(\sin\kappa|x|+\frac{2x}{L}\sin\kappa x-\frac{\cos\kappa x}{\kappa L}\right),\\
G_{\kappa=0}(x)&=\frac{1}{2}|x|-\frac{x^2}{2L}-\frac{L}{12}.
\end{aligned}$$

Замечу, что лишь одно из указанных выражений имеет определённый предел при $L\to\infty$, когда два других страдают от фиктивного присутствия нулевых мод, которые в пределе $L\to\infty$ существуют при любом κ.

Нулевые граничные условия

Теперь рассмотрю оператор Гельмгольца на отрезке $[0,\pi]$ с нулевыми граничными условиями.

$$\left[\frac{d^2}{dx^2}+\kappa^2\right]\psi(x)=0,\quad \psi(0)=\psi(\pi)=0.$$

Согласно общему подходу, функция Грина может быть представлена в виде ряда

$$G(x,y)=\frac{2}{\pi}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\sin nx\sin ny}{\kappa^2-n^2}.$$

Откуда немедленно следует выражение через найденный ранее ряд (1.11).

$$G(x,y)=\frac{1}{\pi}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\cos n(x-y)}{\kappa^2-n^2}-\frac{1}{\pi}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\cos n(x+y)}{\kappa^2-n^2}=G_\kappa(x-y)-G_\kappa(x+y).$$

Таким образом, замкнутое выражение для функции Грина суть

$$G(x,y)=\frac{\cos\kappa\left(|x-y|-\pi\right)-\cos\kappa\left(x+y-\pi\right)}{2\kappa\sin\pi\kappa},\quad 0<x,y<\pi. \tag{1.12}$$

Упражнение 1.7. Показать, что функция Грина на отрезке $[-L/2,L/2]$ с нулевыми граничными условиями, также как и с периодическими граничными условиями, в пределе $L\to\infty$ переходит в

$$G(x,y)=\frac{\sin\kappa|x-y|}{2\kappa},$$

если выбросить из области её определения κ–гармонику.

Правое и левое решения Более общий способ нахождения функции Грина оператора Штурма–Лиувилля

$$\hat{L}=\frac{d^2}{dx^2}+Q(x)\frac{d}{dx}+U(x)$$

вида заключается в формуле

$$G(x,y)=\frac{1}{W(y)}\begin{cases}\psi_<(x)\psi_>(y), & x<y,\\ \psi_<(y)\psi_>(x), & x>y,\end{cases}\qquad W(y)=\psi_<(y)\psi_>'(y)-\psi_<'(y)\psi_>(y).$$

где $\psi_<(x)$ — решение, удовлетворяющее левому граничному условию, $\psi_>(x)$ — правому. Так, например, для оператора Гельмгольца на отрезке $[0,\pi]$ с нулевыми граничными условиями

$$\begin{aligned}\psi_<(x)&=\sin\kappa x,\\ \psi_>(x)&=\sin\kappa(x-\pi),\end{aligned}\qquad G(x,y)=\frac{1}{\kappa\sin\kappa\pi}\begin{cases}\sin\kappa x\sin\kappa(y-\pi), & x<y,\\ \sin\kappa y\sin\kappa(x-\pi), & x>y,\end{cases}$$

что эквивалентно выражению (1.12).