Очерк
замены переменных в дифференциальных соотношениях

Новосадов Б. К.
ГЕОХИ РАН, г. Москва

Обстоятельно развитая с начала XIX в. теория преобразований к криволинейным координатам имеет большое практическое значение в математическом анализе и теории дифференциальных уравнений до настоящего времени. В справочных руководствах по математическому анализу и математической физике приведены весьма изящные аналитические формулы. Однако и в этой классической задаче остаются незамеченными полезные соотношения, которые мы хотели бы здесь впервые отметить, обсудить и применить.

Имеем два случая обращения к новым криволинейным координатам: при контравариантном переходе в линейном элементе и ковариантном переходе в дифференциальных операторах. Первый подход актуален в классической механике, а второй является рабочим инструментом в электродинамике, теории сплошной среды и в квантовой физике.

Линейный элемент определяется соотношением дифференциалов в декартовых координатах

$$ds^2 = \sum_{i=1}^{n} dx_i^2 \,. \tag{1}$$

Введем криволинейные координаты соотношениями

$$x_i = x_i\left(q_1, q_2, \ldots, q_n\right). \tag{2}$$

Для дифференциалов получаем линейные уравнения

$$dx_i = \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial x_i}{\partial q_k} dq_k \,. \tag{3}$$

Частные производные дают компоненты направляющих векторов вдоль координатных линий, составляющие матрицу преобразования в каждой точке нового пространства

$$A = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial x_1}{\partial q_1} & \cdots & \dfrac{\partial x_1}{\partial q_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \dfrac{\partial x_n}{\partial q_1} & \cdots & \dfrac{\partial x_n}{\partial q_n} \end{pmatrix}. \tag{4}$$

В матричной записи соотношения (3) имеют вид столбца дифференциалов переменных

$$\|dx\| = A\|dq\| \,. \tag{5}$$

Подставим уравнения (3) в линейный элемент, получим

$$ds^2 = \{dq\}\, A'A \|dq\| = \sum_{i=1}^{n} \left(\sum_{k=1}^{n} \frac{\partial x_i}{\partial q_k} dq_k \right)^2 = \sum_{i=1}^{n} \sum_{k=1}^{n} \sum_{k'=1}^{n} \frac{\partial x_i}{\partial q_k} \frac{\partial x_i}{\partial q_{k'}} dq_k dq_{k'} \,. \tag{6}$$

Сумма по i дает скалярное произведение направляющих векторов криволинейных координат. Тогда линейный элемент можно записать в геометрическом виде

$$ds^2 = \sum_{k=1}^{n} \sum_{k'=1}^{n} \left(\sum_{i=1}^{n} \frac{\partial x_i}{\partial q_k} \frac{\partial x_i}{\partial q_{k'}} \right) dq_k dq_{k'} \,. \tag{7}$$

Сумма в круглых скобках в правой части равенства есть элемент метрического тензора, $g_{kk'}$, представляющий не что иное, как скалярное произведение направляющих векторов новой системы координат, заданных столбцами матрицы A, поэтому линейный элемент получает геометрическое представление

$$ds^2 = \sum_{k=1}^{n} \sum_{k'=1}^{n} h_k h_{k'} \cos \omega_{kk'} \; dq_k dq_{k'} \,, \tag{8}$$

где параметры h_k определяют длины направляющих векторов (их называют в математическом анализе параметрами Ламэ)

$$h_k^2 = \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial x_i}{\partial q_k} \right)^2 , \tag{9}$$

здесь $\omega_{kk'}$ – угол между направляющими векторами. Если углы между направляющими векторами прямые, то данная криволинейная система координат является ортогональной.

Полученное выражение, наводит на мысль, что в случае ортогональной системы криволинейных координат матрица преобразования A может быть представлена в виде произведения диагональной матрицы параметров Ламэ и ортогональной матрицы. В самом деле, в этом случае столбцы матрицы (4) ортогональны и предполагаемая факторизация осуществляется следующим образом

$$A = \begin{pmatrix} b_{11} & \cdots & b_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{n1} & \cdots & b_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & h_n \end{pmatrix} = BD \,, \tag{10}$$

где $b_{ik} = \dfrac{1}{h_k} \dfrac{\partial x_i}{\partial q_k}$. Тогда линейный элемент представляется суммой квадратов дифференциалов с параметрами Ламэ в качестве множителей

$$ds^2 = \{dq\}\, DB'BD \|dq\| = \sum_{k=1}^{n} h_k^2 dq_k^2 \,, \tag{11}$$

поскольку $B'B = I$.

Теперь обратимся к ковариантным преобразованиям производных, которые потребуются при выражении лапласианов и других векторных дифференциальных операциях математической физики. Имеем для некоторой функции f соотношение производных

$$\frac{\partial f}{\partial q_k} = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial x_i}{\partial q_k}. \qquad (12)$$

В матричной записи это соотношение имеет вид

$$\left\| \frac{\partial f}{\partial q} \right\| = A' \left\| \frac{\partial f}{\partial x} \right\|. \qquad (13)$$

Мы видим, что для получения выражений производных по криволинейным координатам нужно обратить матрицу A. Имеем

$$\left\| \frac{\partial f}{\partial x} \right\| = A'^{-1} \left\| \frac{\partial f}{\partial q} \right\|. \qquad (14)$$

Представление (10) позволяет получить весьма простой алгебраический результат при переходе к ортогональным криволинейным координатам в виде перемножения транспонированной ортогональной матрицы на обратную диагональную матрицу параметров Ламэ

$$A'^{-1} = B'^{-1} D'^{-1} = AD^{-2}. \qquad (15)$$

Применим эту формулу к преобразованию уравнения Гамильтона – Якоби для системы материальных точек

$$\sum_{i=1}^{n} \frac{1}{2m_i} \left(\frac{\partial S}{\partial \mathbf{r}_i} \right)^2 + V(\mathbf{r}) = E. \qquad (16)$$

Вводя масс-взвешенные координаты $\mathbf{r}_i' = \sqrt{m_i}\mathbf{r}_i$, получим сумму квадратов частных производных функции действия по этим координатам, замена которых новыми координатами приводит к матричному преобразованию

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial S}{\partial \mathbf{r}_i'} \right)^2 = \frac{1}{2} \left\{ \frac{\partial S}{\partial q} \right\} A^{-1} A'^{-1} \left\| \frac{\partial S}{\partial q} \right\|. \qquad (17)$$

Согласно (15) мы приходим к разделению переменных в дифференциальной части уравнения (16)

$$\frac{1}{2} \left\{ \frac{\partial S}{\partial q} \right\} D^{-2} \left\| \frac{\partial S}{\partial q} \right\| + V(q) = E. \qquad (18)$$

При соответствующей аналитической структуре потенциала достигается также полное разделение переменных в уравнении Гамильтона – Якоби в криволинейных ортогональных координатах. Ряд вычислительных примеров дан в [1].

Представляет также интерес преобразование данных уравнений к неортогональным координатам, например, к естественным координатам в теории малых колебаний молекул. В этом случае обратную матрицу (10) следует записать в виде

$$A^{-1} = D^{-1}B^{-1}. \tag{19}$$

Выражение (17) преобразуется к более сложной матричной форме

$$\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial S}{\partial \mathbf{r}_i'}\right)^2 = \frac{1}{2}\left\{\frac{\partial S}{\partial q}\right\} D^{-1}\left(B'B\right)^{-1} D^{-1}\left\|\frac{\partial S}{\partial q}\right\|. \tag{20}$$

Учтем, что матрица B состоит из компонент единичных векторов, тогда на диагонали произведения матриц B стоят единицы, а недиагональные элементы равны косинусам углов между направляющими векторами. Имеем симметричную матрицу

$$B'B = \begin{pmatrix} 1 & \cos\omega_{12} & \cdots & \cos\omega_{1n} \\ \cos\omega_{21} & 1 & \cdots & \cos\omega_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \cos\omega_{n1} & \cos\omega_{n2} & \cdots & 1 \end{pmatrix}. \tag{21}$$

При ортогональных направляющих все косинусы обращаются в нуль, и мы получаем единичную матрицу. Если неортогональность слабая (объем параллелепипеда, построенного на единичных направляющих векторах, близок к 1), то косинусы являются малыми величинами, и мы можем разложить рассматриваемую матрицу в сходящийся ряд матриц. В самом деле, для косоугольной криволинейной системы координат получаем

$$B'B = I + W\ , \tag{22}$$

где I – единичная матрица, а W – матрица косинусов с нулевой диагональю. Обратная матрица к данной вычисляется в виде разложения в ряд геометрической прогрессии матриц

$$\left(B'B\right)^{-1} = \left(I + W\right)^{-1} = I - W + W^2 - W^3 + \ldots. \tag{23}$$

Таким образом, матрица между операторами дифференцирования по криволинейным координатам представляется рядом

$$D^{-1}\left(B'B\right)^{-1} D^{-1} = D^{-2} - D^{-1}WD^{-1} + D^{-1}W^2D^{-1} - \ldots\ . \tag{24}$$

В силу абсолютной сходимости ряда геометрической прогрессии данный ряд матриц также сходится абсолютно. Этот ряд может быть использован в теории колебаний атомов молекул при расчете колебаний большой амплитуды. Первый член в правой части равенства (24) дает возможность разделить переменные задачи, а последующие матричные выражения дают поправки на неортогональность (недекартовость) выбранной криволинейной системы координат. Здесь важно почувствовать физику движений вдоль выбранных координатных кривых, а уточнение расчета, связанное с учетом неортогональности системы координат, дает представление о взаимном влиянии движений вдоль криволинейных координат.

Другой метод вычисления обратной матрицы состоит в применении схемы ортогонализации системы векторов по Граму – Шмидту. Однако эту технику мы здесь разбирать не станем ввиду того, что вычисление коэффициентов в этом методе потребует последовательного обращения матриц; как раз этой алгебраической процедуры удается избежать в предложенном выше методе.

Оператор Лапласа преобразуется к новым координатам по более сложным формулам, что связано с двойным дифференцированием функции

$$\sum_{i=1}^{n} \frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2} = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right). \tag{25}$$

В матричной записи данное выражение имеет вид

$$\sum_{i=1}^{n} \frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2} = \left\{\frac{\partial}{\partial x}\right\}\left\|\frac{\partial f}{\partial x}\right\|. \tag{26}$$

Для оператора-строки формула (11) должна быть представлена в виде

$$\left\{\frac{\partial}{\partial x}\right\} = \left\{\frac{\partial}{\partial q}\right\}\underline{A}^{-1}, \tag{27}$$

где подчеркивание матрицы означает, что при матричном умножении на неё не действует дифференциальный оператор, расположенный слева. Для производных (26) получаем выражение в криволинейных координатах

$$\sum_{i=1}^{n} \frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2} = \left\{\frac{\partial}{\partial q}\right\}\underline{A}^{-1} A'^{-1}\left\|\frac{\partial f}{\partial q}\right\|. \tag{28}$$

Как известно, в случае ортогональной системы криволинейных координат лапласиан весьма просто записывается через параметры Ламэ [2]

$$\Delta = \frac{1}{h}\sum_{i=1}^{n} \frac{\partial}{\partial q_i}\frac{h}{h_i^2}\frac{\partial}{\partial q_i}, \tag{29}$$

где

$$h = \prod_{i=1}^{n} h_i . \tag{30}$$

Общий случай перехода от декартовых к неортогональным координатам следует рассмотреть особо. Из общих соображений новую систему следует выбирать так, чтобы исключить вырождение координатных линий, иначе объем многомерного параллелепипеда станет весьма малой величиной и обращение матриц преобразований будет численно неустойчивой процедурой. В практических расчетах можно допустить слабую неортогональность новых координат. В таком случае произведение обратных матриц в (28) можно аппроксимировать подходящим разложением по исходным матрицам. Имеем

$$\underline{A}^{-1}A'^{-1}=\underline{D}^{-1}\left(B'\underline{B}\right)^{-1}D^{-1}. \tag{31}$$

В операторе Лапласа можно выделить в явном виде сумму вторых производных и сумму первых производных по криволинейным координатам, а именно,

$$\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}=\left\{\frac{\partial}{\partial q}\right\}\underline{A}^{-1}A'^{-1}\left\|\frac{\partial}{\partial q}\right\|=\left\{\frac{\partial}{\partial q}\right\}\underline{A}^{-1}\underline{A}'^{-1}\left\|\frac{\partial}{\partial q}\right\|+\left(\left\{\frac{\partial}{\partial q}\right\}\underline{A}^{-1}A'^{-1}\right)\left\|\frac{\partial}{\partial q}\right\|, \tag{32}$$

где дифференциальный оператор-строка в круглых скобках действует на вторую справа матрицу. По аналогии с соотношениями (22)-(24) представим матрицу (31) в виде ряда

$$\begin{aligned}&\underline{A}^{-1}A'^{-1}=\underline{D}^{-1}\left(B'\underline{B}\right)^{-1}D^{-1}=\underline{D}^{-1}\left(I+B'\underline{B}-I\right)^{-1}D^{-1}=\\&=\underline{D}^{-1}\left(2I-B'\underline{B}+\left(B'\underline{B}-I\right)^{2}-\ldots\right)D^{-1}\approx 2\underline{D}^{-1}D^{-1}-\underline{D}^{-1}B'\underline{B}D^{-1}.\end{aligned} \tag{33}$$

Учитывая, что дифференцирование единичных направляющих векторов криволинейной системы координат дает векторы, перпендикулярные исходным, то можно пренебречь слагаемыми с этими производными и оставить наиболее важные диагональные матрицы D, содержащие параметры Ламэ, которые являются функциями вдоль координатных направлений. Тогда оператор Лапласа приближенно можно заменить ортогонализованным представлением, оставив в виде возмущения прочие матрицы, учитывающие неортогональность координатных направлений. При слабой неортогональности координат этот прием позволит упростить теорию решения многомерного волнового уравнения, особенно в применении к теории малых колебаний молекул.

Найти обратную матрицу неортогональных единичных направляющих векторов новой системы координат позволяет также следующее наблюдение. При ортогональных ортах обратная матрица преобразования равна транспонированной к исходной. Можно представить обратную матрицу неортогональной системы векторов как произведение транспонированной матрицы на некоторую неизвестную матрицу, которую требуется найти. Имеем

$$B^{-1}=EB', \tag{34}$$

Умножая это равенство справа на матрицу B, получим для матрицы E представление

$$E=\left(B'B\right)^{-1}, \tag{35}$$

совпадающее с обратной симметричной матрицей (21). Эта матрица становится единичной в случае ортогональных направляющих векторов. Приближенно обратную матрицу единичных неортогональных векторов при слабой неортогональности можно представить формулой

$$B^{-1}\simeq 2B'-B'BB'. \tag{36}$$

Далее приведем для справок выражения параметров Ламэ и факторизованных матриц преобразования для ряда криволинейных систем координат.

1. Сферические координаты

$x = r\sin\theta\cos\varphi,\ y = r\sin\theta\sin\varphi,\ z = r\cos\theta$.

Матрица производных по сферическим координатам факторизуется следующим образом:

$$A = \begin{pmatrix} \sin\theta\cos\varphi & \cos\theta\cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\theta\sin\varphi & \cos\theta\sin\varphi & \cos\varphi \\ \cos\theta & -\sin\theta & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & & 0 \\ & r & \\ 0 & & r\sin\theta \end{pmatrix} = BD.$$

2. Цилиндрические координаты

$x = r\cos\varphi,\ y = r\sin\varphi,\ z = z$.

$$A = \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & & 0 \\ & r & \\ 0 & & 1 \end{pmatrix}.$$

3. Координаты вытянутого эллипсоида вращения

$x = a\,\mathrm{sh}\,u\sin v\cos\varphi,\ y = a\,\mathrm{sh}\,u\sin v\sin\varphi,\ z = a\,\mathrm{ch}\,u\cos v$,

$2a$ – расстояние между фокусами эллипсоида.

$$A = a\begin{pmatrix} h_{11}^{-1}\,\mathrm{ch}\,u\sin v\cos\varphi & h_{22}^{-1}\,\mathrm{sh}\,u\cos v\cos\varphi & -h_{33}^{-1}\,\mathrm{sh}\,u\sin v\sin\varphi \\ h_{11}^{-1}\,\mathrm{ch}\,u\sin v\sin\varphi & h_{22}^{-1}\,\mathrm{sh}\,u\cos v\sin\varphi & h_{33}^{-1}\,\mathrm{sh}\,u\sin v\cos\varphi \\ h_{11}^{-1}\,\mathrm{sh}\,u\cos v & -h_{22}^{-1}\,\mathrm{ch}\,u\sin v & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h_{11} & & 0 \\ & h_{22} & \\ 0 & & h_{33} \end{pmatrix},$$

где $h_{11} = h_{22} = \sqrt{\mathrm{sh}^2 u + \sin^2 v},\ h_{33} = \mathrm{sh}\,u\sin v$. В теории катиона молекулярного водорода в качестве координат используют расстояния от протонов до электрона, которые через введенные функции получают следующие выражения: $r_1 = a(\mathrm{ch}\,u - \cos v)$, $r_2 = a(\mathrm{ch}\,u + \cos v)$.

4. Координаты сплюснутого эллипсоида вращения

$x = a\,\mathrm{ch}\,u\sin v\cos\varphi,\ y = a\,\mathrm{ch}\,u\sin v\sin\varphi,\ z = a\,\mathrm{sh}\,u\cos v$,

$2a$ – расстояние между фокусами эллипсоида.

$$A = a\begin{pmatrix} h_{11}^{-1}\,\mathrm{sh}\,u\sin v\cos\varphi & h_{22}^{-1}\,\mathrm{ch}\,u\cos v\cos\varphi & -h_{33}^{-1}\,\mathrm{ch}\,u\sin v\sin\varphi \\ h_{11}^{-1}\,\mathrm{sh}\,u\sin v\sin\varphi & h_{22}^{-1}\,\mathrm{ch}\,u\cos v\sin\varphi & h_{33}^{-1}\,\mathrm{ch}\,u\sin v\cos\varphi \\ h_{11}^{-1}\,\mathrm{ch}\,u\cos v & -h_{22}^{-1}\,\mathrm{sh}\,u\sin v & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h_{11} & & 0 \\ & h_{22} & \\ 0 & & h_{33} \end{pmatrix},$$

где $h_{11} = h_{22} = \sqrt{\mathrm{sh}^2 u + \cos^2 v},\ h_{33} = \mathrm{ch}\,u\sin v$.

5. Параболические координаты

$x = \sigma\tau\cos\varphi,\ y = \sigma\tau\sin\varphi,\ z = \dfrac{1}{2}\left(\tau^2 - \sigma^2\right)$.

$$A=\begin{pmatrix} h_{11}^{-1}\tau\cos\varphi & h_{22}^{-1}\sigma\cos\varphi & -h_{33}^{-1}\sigma\tau\sin\varphi \\ h_{11}^{-1}\tau\sin\varphi & h_{22}^{-1}\sigma\sin\varphi & h_{33}^{-1}\sigma\tau\cos\varphi \\ -h_{11}^{-1}\sigma & h_{22}^{-1}\tau & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} h_{11} & & 0 \\ & h_{22} & \\ 0 & & h_{33} \end{pmatrix},$$

где $h_{11}=h_{22}=\sqrt{\sigma^2+\tau^2}$, $h_{33}=\sigma\tau$.

6. Полисферические координаты

Полисферические координаты могут быть введены с помощью дерева, определяющего следование и подчинение угловых координат [3]. Мы рассмотрим, к примеру, следующую систему сферических координат в 5-мерном декартовом пространстве.

$$\left.\begin{aligned} x_1 &= r\sin\theta_4\sin\theta_3\sin\theta_2\sin\theta_1, \\ x_2 &= r\sin\theta_4\sin\theta_3\sin\theta_2\cos\theta_1, \\ x_3 &= r\sin\theta_4\sin\theta_3\cos\theta_2 \\ x_4 &= r\sin\theta_4\cos\theta_3, \\ x_5 &= r\cos\theta_4. \end{aligned}\right\}$$

При этом числа $r,\theta_1,\ldots,\theta_4$ меняются в следующих пределах:

$$\left.\begin{aligned} &0\le r<\infty, \\ &0\le\theta_1<2\pi, \\ &0\le\theta_k<\pi,\ k\ne 1. \end{aligned}\right\}$$

Введем обозначения: $s_k=\sin\theta_k$, $c_k=\cos\theta_k$. Матрица A представляется в виде

$$A=\begin{pmatrix} s_4s_3s_2s_1 & c_4s_3s_2s_1 & c_3s_2s_1 & c_2s_1 & c_1 \\ s_4s_3s_2c_1 & c_4s_3s_2c_1 & c_3s_2c_1 & c_2c_1 & -s_1 \\ s_4s_3c_2 & c_4s_3c_2 & c_3c_2 & -s_2 & 0 \\ s_4c_3 & c_4c_3 & -s_3 & 0 & 0 \\ c_4 & -s_4 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & r & & 0 & \\ & & rs_4 & & \\ & 0 & & rs_4s_3 & \\ & & & & rs_4s_3s_2 \end{pmatrix}.$$

Нетрудно записать алгоритм составления матрицы для пространства произвольной размерности. Примеры более сложных прямых произведений пространств в задачах многих частиц приведены в [4].

Литература

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Курс теоретической физики. Т. 1. Механика. М.: Наука, 1988.

2. Смирнов В.И. Курс высшей математики. Т. 2. М.: Наука, 1974.

3. Виленкин Н.Я. Специальные функции и теория представлений групп. М.: Наука, 1991.

4. Новосадов Б.К. Аналитическая механика атома. М.: Нобель Пресс, 2014.