1　傅里叶级数与傅里叶变换

泰勒级数将一个连续可导函数用无穷多项式来等同，从而在自变量很小时做近似，同时也可以用来计算一些级数的值。但是，随着时间的推移，当物理学与工程学的研究逐渐走上正轨后，人们越来越感觉，多项式函数并不是在任何时候都那么好用。于是，以工程师傅里叶（Fourier）为首的一群人开始思考，是否可以用其他形式的函数项级数来模拟一个普通的函数，从而在某些体系下可以更好地被应用？

1.1　周期函数的傅里叶级数展开

在当时的工程学中，有一类非常重要的问题，那就是周期性问题，例如电路中周期性的电压、电流、电磁波，以及弹性介质中的波动等。我们知道，理想情况下的波动是一个正弦函数（平面波），但是实际的信号不可能是完全理想的。那么，对于一个一般函数形式的信号，如何对其进行研究？傅里叶想到用三角函数展开一个普通的函数。也就是说，一般的信号虽然并不是某个单一的平面波，但是可以看成不同频率平面波的线性叠加。

定理　周期函数的傅里叶展开

若某函数 $f(x)$ 的周期为 <u>***2L***</u>，且除了一些离散的跳跃间断点之外处处连续，则可以将其展开为傅里叶级数：

$$\boxed{f(x)=\frac{a_0}{2}+\sum_{n=1}^{\infty}a_n\cos\frac{n\pi}{L}x+b_n\sin\frac{n\pi}{L}x}$$

其中系数

$$\boxed{\begin{aligned}a_n&=\frac{1}{L}\int_{-L}^{L}f(x)\cos\frac{n\pi}{L}x\mathrm{d}x\\ b_n&=\frac{1}{L}\int_{-L}^{L}f(x)\sin\frac{n\pi}{L}x\mathrm{d}x\end{aligned}}$$

傅里叶级数在 $f(x)$ 的连续点与 $f(x)$ 完全相等，在跳跃间断点等于 $f(x)$ 左右极限的平均值。

定理包含三条基本信息，对其解释如下：

（1）任何一个至多只有离散的跳跃间断点的函数，都可以被看成平面波的叠加。而且，平面波的频率不是随便取的，对于周期为 <u>***2L***</u> 的函数，它的傅里叶展开中只会包含频率为 $\dfrac{n\pi}{L}$ 的成分。这是周期性的要求，$2L$ 应当是函数最小正周期的整数倍，而能满足这种条件的正弦/余弦函数必然具有 $\dfrac{n\pi}{L}$ 的频率。从空间周期上看，波长 $\lambda=\dfrac{2\pi}{n\pi/L}=\dfrac{2L}{n}$，即 $2L=n\lambda$，也就是函数 $f(x)$ 的周期 $2L$ 中必须包含整数个半波长；不满足这个条件的频率必然会破坏 $f(x)$ 的周期性。

（2）对于确定的$f(x)$，其傅里叶展开必然是唯一的，所以系数可以通过某些方法求出来。在这里我们使用的是三角函数积分的性质：对于非负整数 m 与 n，有

$$\boxed{\begin{gathered}\int_{-L}^{L}\sin\frac{m\pi}{L}x\sin\frac{n\pi}{L}x\mathrm{d}x=\int_{-L}^{L}\cos\frac{m\pi}{L}x\cos\frac{n\pi}{L}x\mathrm{d}x=L\cdot\delta_{mn}\ (m,n\neq 0)\\ \int_{-L}^{L}\cos\frac{m\pi}{L}x\sin\frac{n\pi}{L}x\mathrm{d}x=0\end{gathered}}$$

其中$\delta_{mn}=\begin{cases}1,\ m=n\\ 0,\ m\neq n\end{cases}$为 Kronecker 符号。这些公式都可以用**积化和差**进行验证，我们把它们称为三角函数的**正交性**[1]。知道了这几个公式之后，我们可以这样做：已知

$$f(x)=\frac{a_0}{2}+\sum_{n=1}^{\infty}a_n\cos\frac{n\pi}{L}x+b_n\sin\frac{n\pi}{L}x$$

两边同乘以$\cos\frac{m\pi}{L}x$，并在$[-L,L]$上积分：

$$\int_{-L}^{L}f(x)\cos\frac{m\pi}{L}x\mathrm{d}x=\frac{a_0}{2}\int_{-L}^{L}\cos\frac{m\pi}{L}x\mathrm{d}x+\sum_{n=1}^{\infty}a_n\int_{-L}^{L}\cos\frac{m\pi}{L}x\cos\frac{n\pi}{L}x\mathrm{d}x+b_n\int_{-L}^{L}\cos\frac{m\pi}{L}x\sin\frac{n\pi}{L}x\mathrm{d}x$$

上述表达式中，最后一项$\int_{-L}^{L}\cos\frac{m\pi}{L}x\sin\frac{n\pi}{L}x\mathrm{d}x$必然为 0：

$$\int_{-L}^{L}f(x)\cos\frac{m\pi}{L}x\mathrm{d}x=\frac{a_0}{2}\int_{-L}^{L}\cos\frac{m\pi}{L}x\mathrm{d}x+\sum_{n=1}^{\infty}a_n\int_{-L}^{L}\cos\frac{m\pi}{L}x\cos\frac{n\pi}{L}x\mathrm{d}x$$

若 $m\neq 0$，则只有Σ符号里下标为 m 的项对等号右边有贡献：

$$\int_{-L}^{L}f(x)\cos\frac{m\pi}{L}x\mathrm{d}x=a_mL\Rightarrow a_m=\frac{1}{L}\int_{-L}^{L}f(x)\cos\frac{m\pi}{L}x\mathrm{d}x\ (m\neq 0)$$

若 $m=0$，则只有 a_0 项对等号右边有贡献：

$$\int_{-L}^{L}f(x)\mathrm{d}x=\frac{a_0}{2}\int_{-L}^{L}\cos\frac{0\pi}{L}x\mathrm{d}x=\frac{a_0}{2}\cdot 2L\Rightarrow a_0=\frac{1}{L}\int_{-L}^{L}f(x)\mathrm{d}x=\frac{1}{L}\int_{-L}^{L}f(x)\cos\frac{0\pi}{L}x\mathrm{d}x$$

从这里我们就知道为什么 a_0 项要单独拿出来除以 2，显然是为了让 a_0 的表达式和其他 a_m 都一致。

用类似的方法，可以证明$b_m=\frac{1}{L}\int_{-L}^{L}f(x)\sin\frac{m\pi}{L}x\mathrm{d}x\ (m\neq 0)$。注意级数展开式中没有 b_0（因为$\sin\frac{0\pi}{L}x=0$），不需要花时间求 b_0 的值。

（3）很多微积分教材会将傅里叶展开写成$f(x)\sim\frac{a_0}{2}+\sum_{n=1}^{\infty}a_n\cos\frac{n\pi}{L}x+b_n\sin\frac{n\pi}{L}x$而不会使用等号，这是因为函数在跳跃间断点的行为和傅里叶级数并不一样。无论函数在跳跃间断点处的定义是什么，傅里叶级数在该处的取值都是一定的，都等于该处左右极限的平均值，即

$$\frac{a_0}{2}+\sum_{n=1}^{\infty}a_n\cos\frac{n\pi}{L}x+b_n\sin\frac{n\pi}{L}x=\begin{cases}f(x),\ x\text{为连续点}\\ \frac{1}{2}[f(x^+)+f(x^-)],\ x\text{为跳跃间断点}\end{cases}$$

[1] “正交”（Orthogonal）和“垂直”是一个意思。至于为什么对函数可以说“垂直”，15.4 节将会讲到。

1.2 非周期函数的傅里叶变换

周期函数的傅里叶展开中只能包含某些特定的频率，但如果函数没有周期性，能否将结论进行推广呢？

傅里叶认为，非周期函数不是没有周期，而是“什么周期都有”。周期函数的傅里叶展开中，各个频率的步调是比较一致、和谐的；非周期函数最终总体上没有周期性，应当是由于很多不和谐的频率参与了其中，导致函数成为一个很混乱的无周期的变化。

我们现在尝试将傅里叶级数改写到非周期函数的形式。傅里叶将非周期函数看成一个周期为无穷大的函数，因为它在有限大的区间内永远不会重复。

（1）第一步：我们知道在波动问题中可以使用复数法，这里为了方便在复数法中的应用，将傅里叶展开写成复数形式。

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos\frac{n\pi}{L}x + b_n \sin\frac{n\pi}{L}x \\ &= \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cdot \frac{1}{2}\left(e^{\mathrm{i}\frac{n\pi}{L}x} + e^{-\mathrm{i}\frac{n\pi}{L}x}\right) + b_n \cdot \frac{1}{2\mathrm{i}}\left(e^{\mathrm{i}\frac{n\pi}{L}x} - e^{-\mathrm{i}\frac{n\pi}{L}x}\right) \\ &= \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{a_n - \mathrm{i}b_n}{2} e^{\mathrm{i}\frac{n\pi}{L}x} + \frac{a_n + \mathrm{i}b_n}{2} e^{-\mathrm{i}\frac{n\pi}{L}x} \end{aligned}$$

定义新的系数

$$c_0 = \frac{a_0}{2}；\ c_n = \frac{a_n - \mathrm{i}b_n}{2}，\ c_{-n} = \frac{a_n + \mathrm{i}b_n}{2}（n\text{为正整数}）$$

可以写成 $c_n = \frac{1}{2L}\int_{-L}^{L} f(x) e^{-\mathrm{i}\frac{n\pi}{L}x}\mathrm{d}x$（$n$ 为 0、正整数或负整数）。从而

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{\mathrm{i}\frac{n\pi}{L}x} = \frac{1}{2L}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\left(\int_{-L}^{L} f(x) e^{-\mathrm{i}\frac{n\pi}{L}x}\mathrm{d}x\right) e^{\mathrm{i}\frac{n\pi}{L}x}$$

（2）第二步：令 $L\to+\infty$。此时，各个频率都趋于 0，似乎不是很好考量。我们这样处理：

$$f(x) = \frac{1}{2\pi}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\left(\int_{-L}^{L} f(x) e^{-\mathrm{i}\frac{n\pi}{L}x}\mathrm{d}x\right) e^{\mathrm{i}\frac{n\pi}{L}x} \cdot \frac{\pi}{L}$$

这个求和可以看成——我们把频率（记为 k，也就是波矢）的取值分为若干小区间，每个区间的长度为 $\frac{\pi}{L}$；现在要做的就是让所有区间的长度趋于 0。我们发现，这种做法其实就是定积分中先分割后取极限的过程。也就是说，此时的求和变成了一个积分：

$$f(x) = \lim_{L\to+\infty}\frac{1}{2\pi}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\left(\int_{-L}^{L} f(x) e^{-\mathrm{i}k_n x}\mathrm{d}x\right) e^{\mathrm{i}k_n x}\cdot\Delta k_n = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-\mathrm{i}kx}\mathrm{d}x\right) e^{\mathrm{i}kx}\mathrm{d}k$$

其中，定义 $\widetilde{f}(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-\mathrm{i}kx}\mathrm{d}x$，称为函数 $f(x)$ 在波矢 k 上的的傅里叶分量（Fourier Component）。二者之间可以互相做变换：

$$\boxed{\widetilde{f}(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-\mathrm{i}kx}\mathrm{d}x,\ f(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\widetilde{f}(k) e^{\mathrm{i}kx}\mathrm{d}k}$$

前者称为傅里叶变换，后者称为反傅里叶变换。这种对应关系记为

$$f(x) \leftrightarrow \widetilde{f}(k)$$

大部分初学者可以理解傅里叶级数，但是无法理解傅里叶变换，因为不知道积分代表什么。事实上，从傅里叶级数到傅里叶变换，体现的正是频率从离散取值到连续取值的一种过渡。

如果没有学过概率论，可能对“分布函数”的概念还不熟悉，从而增加了理解的困难。我们在中学时学过的概率分布都是“离散变量”的概率，即一个量可以取某些分立的值，比如双色球的抽奖中，抽奖结果都是整数编号，从而结果是可以“数的清”的，我们可以计算出每一个事件的概率，这些概率可以排成一个数列；但是，有些时候一个量的取值是连续的，比如我们在区间[0,1]中任取一个实数，这种情况下我们数不清到底有多少个事件。数学家对后面这种情况的解决方法，就是把离散的几个概率值推广为概率密度函数——把变量取在 x 到 $x+\mathrm{d}x$ 这个小区间内的概率记为 $\varphi(x)\mathrm{d}x$，而 $\varphi(x)$ 就是在 x 附近单位长度区间内所包含的概率，也就是概率分布的一种“密度”，它是 x 的函数。

对于傅里叶变换而言，我们得到了一个关于波矢 k 的函数 $\widetilde{f}(k)$，其实它就是不同波矢成分的分布函数。因为 $f(x)=\dfrac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\widetilde{f}(k)e^{ikx}\mathrm{d}k$，我们看到这个式子中复数 e^{ikx} 实际上就代表波矢为 k 的平面波，而 $\widetilde{f}(k)$ 恰好处在振幅的位置上，所以它代表的就是——波矢在 k 到 $k+\mathrm{d}k$ 的平面波具有 $\widetilde{f}(k)$ 的幅度，所有的平面波以 $\widetilde{f}(k)$ 这个函数为权重进行叠加。而 $\widetilde{f}(k)$ 本身又需要通过 $f(x)$ 来计算得到，表达式为 $\widetilde{f}(k)=\int_{-\infty}^{+\infty}f(x)e^{-ikx}\mathrm{d}x$，可以将它看成函数 $f(x)$ 在平面波 e^{ikx} 上的投影[2]。知道了 $\widetilde{f}(k)$，我们就可以直观地知道一个普通的函数中包含哪些平面波的成分，不同成分的贡献又是多少；对于周期函数的傅里叶展开，系数 a_n 与 b_n 的作用也是一样的。

另外，值得注意的是，$\widetilde{f}(k)=\int_{-\infty}^{+\infty}f(x)e^{-ikx}\mathrm{d}x$，$f(x)=\dfrac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\widetilde{f}(k)e^{ikx}\mathrm{d}k$ 这个表达式只是数学家最原始的定义。由于傅里叶变换在其他学科中的应用非常广泛，有些时候物理学家或工程师会适当改变定义，以方便应用。例如：

（1）物理学：$\widetilde{f}(k)=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}f(x)e^{-ikx}\mathrm{d}x$，$f(x)=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\widetilde{f}(k)e^{ikx}\mathrm{d}k$。将两个积分都添加系数 $\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}$，这是因为物理学家喜欢对称的公式。

（2）电气与电子工程：$\widetilde{f}(k)=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}f(x)e^{ikx}\mathrm{d}x$，$f(x)=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\widetilde{f}(k)e^{-ikx}\mathrm{d}k$。一方面，工程师喜欢对称，所以把物理学家定义的 $\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}$ 沿用了下来；与此同时，电气、电子学科中更关注时间相位而不是空间相位，所以这些学科中波动的相位都是 $\omega t-kx$ 而不是物理学家喜欢的 $kx-\omega t$，从而指数上差了一个符号。

[2] 前面有“正交”，这里有“投影”，函数的行为越来越像矢量了。到了 15.4 节，我们会发现函数其实就是一种特殊的矢量。

根据不同的定义，一个函数的傅里叶变换在不同学科中可能有不同的形式，但是它们的思路都是一样的，都是希望通过一个函数 $\tilde{f}(k)$ 来定量表示不同成分的比例。本课程对傅里叶级数、傅里叶变换的要求并不高，而且普通物理中基本不会涉及定量计算的傅里叶变换，但是有些内容会使用到傅里叶变换的思想，所以学习本节重在理解。也正是因此，本节不提供任何例题，但本章最后有习题可以进行练习。

2　二阶齐次线性常微分方程的级数解

下面我们探讨级数的实用价值。对目前的我们而言，级数的一个非常重要的应用就是求解一些很难通过常规方法求解的微分方程。

高等数学中已经介绍了几种最简单的常微分方程及其解法。可惜的是，微分方程本身是一个非常复杂的问题，很多微分方程并不好求解，因为它们的结果可能就不是一个初等函数，无法被写成简单的表达式。因此，我们尝试解出它们的幂级数形式；之所以选用幂级数，也是因为它可以逐项求导，比较方便。

2.1　级数解的具体形式

在物理中，遇到的常微分方程一般至多为二阶，或者可以转化为二阶，而且线性方程偏多。我们考虑二阶齐次线性微分方程：

$$y'' + P(x)y' + Q(x)y = 0$$

这种方程在物理中出现得非常多，也是级数解的主要讨论对象；偶尔会出现一些非齐次的方程，但由于是线性方程，我们只需使用解的叠加原理即可，没有增添很大的难度。

级数解的基本思想，就是在参考点 x_0 附近用幂级数写出解的形式：

$$y = \sum_{n=0}^{\infty} a_n (x - x_0)^n$$

然后将这个形式代入原方程，利用逐项求导把 y' 和 y'' 也表示出来，最终得到各项系数 a_n 的表达式，这就是在 x_0 附近对解的幂级数展开。

那么，在什么样的点可以这样做？我们知道幂级数作为多项式肯定是连续可导的，而对方程起支配作用的就是函数 $P(x)$ 和 $Q(x)$。我们根据它们的性质对展开点进行分类：

（1）若 $P(x)$ 和 $Q(x)$ 在 x_0 处都连续可导，则称 x_0 是这个微分方程的<u>常点</u>；

（2）若 $P(x)$ 和 $Q(x)$ 在 x_0 处不可导，但 $(x-x_0)P(x)$ 和 $(x-x_0)^2Q(x)$ 在 x_0 处都可导，则称 x_0 是这个微分方程的<u>正则奇点</u>；

（3）若上面两种情况均不满足，则称 x_0 是这个微分方程的<u>非正则奇点</u>。

非正则奇点的讨论是极其复杂的，而且物理上基本不会遇到，所以一般不讨论，或者在选取展开点 x_0 时会避开非正则奇点，在其他点处展开。对于常点和正则奇点处的级数解的形式，数学家给出了结论。

定理 Frobenius and Fuchs 定理

对于二阶线性齐次常微分方程 $y''+P(x)y'+Q(x)y=0$ 在点 x_0 处的级数解：

（1）若 x_0 为方程的常点，则在其邻域中必然存在两个线性无关的解，它们都具有如下形式：

$$y=\sum_{n=0}^{\infty}a_n(x-x_0)^n$$

其中必有一解满足常数项 $a_0\neq 0$。

（2）若 x_0 为方程的正则奇点，则在其邻域中至少存在一个这样的解：

$$y=\sum_{n=0}^{\infty}a_n(x-x_0)^{n+\rho}$$

并且该解满足 $a_0\neq 0$。其中ρ称为<u>指标</u>，是一个固定的实数，其取值由 $P(x)$和 $Q(x)$决定。

也就是说，真正可以直接套用幂级数解的必须是常点，而正则奇点处 $P(x)$和 $Q(x)$有奇性，所以不是很好的幂级数，但 Frobenius and Fuchs 定理告诉我们，只要在幂级数中各项同时加一个指标ρ即可。

定理 正则奇点的指标方程

（1）二阶线性齐次微分方程在正则奇点 x_0 处必然可以写成如下的形式：

$$x^2y''+xg(x)y'+h(x)y=0$$

其中 $g(x)$与 $h(x)$在 x_0 处连续可导。

（2）原方程正则奇点 x_0 处级数解的指标ρ满足如下的指标方程：

$$\boxed{\rho(\rho-1)+g_0\rho+h_0=0}$$

其中 $g_0=g(x_0)=\lim\limits_{x\to x_0}(x-x_0)P(x)$， $h_0=h(x_0)=\lim\limits_{x\to x_0}(x-x_0)^2Q(x)$ 。

指标方程的解 ρ_1,ρ_2 与微分方程的解有如下的对应关系：

（1）若 $\rho_1\neq\rho_2$ 且 $\rho_1-\rho_2$ 不是整数，则微分方程的两个线性无关解为

$$y_1=\sum_{n=0}^{\infty}a_n(x-x_0)^{n+\rho_1}，\ y_2=\sum_{n=0}^{\infty}b_n(x-x_0)^{n+\rho_2}$$

并且至少有一个解的常数项不为 0。

（2）若 $\rho_1=\rho_2$，则微分方程的两个线性无关解为

$$y_1=\sum_{n=0}^{\infty}a_n(x-x_0)^{n+\rho_1}，\ y_2=y_1\cdot\ln x+\sum_{n=0}^{\infty}b_n(x-x_0)^{n+\rho_1}=\sum_{n=0}^{\infty}(a_n\ln x+b_n)(x-x_0)^{n+\rho_1}$$

（3）若 $\rho_1\neq\rho_2$ 且 $\rho_1-\rho_2$ 是整数，则微分方程至少有一个解为

$$y_1=\sum_{n=0}^{\infty}a_n(x-x_0)^{n+\rho_1}$$

另一个线性无关解可通过常数变易法、Wronsky 行列式等方法求出。

微分方程级数解的数学结构实在太复杂，这里所给出的已经是最简单的一部分结论，但具体处理时的工作量还是很大。尽管很多工作其实就只是化简，但物理学家向来对这种没有物理内涵的繁琐的数学计算是极其厌恶的，可有些时候为了得出结果不得不做计算。因此，他们一般将这种工作交给计算机，或者直接使用数学家的成果。

2.2 一些典型微分方程的级数解

在介绍了一般理论之后，我们对一些典型的微分方程进行求解。不过，由于每个方程的计算量都特别大，而且物理课程中一般也不会要求做这些计算，我们只详细求解一个方程，其他的方程只是给出结果并尽量做一些形象的理解，并且大致介绍各个解在物理中的应用。

例 以 0 为展开点求解勒让德（Legendre）方程：

$$(1-x^2)y''-2xy'+l(l+1)y=0$$

其中 l 为已知常数。

【解】该微分方程的标准形式为 $y''-\dfrac{2x}{1-x^2}y'+\dfrac{l(l+1)}{1-x^2}y=0$，容易验证 0 是它的常点。因此，在 0 附近有两个线性无关的幂级数解：

$$y_1=\sum_{n=0}^{\infty}a_nx^n,\ y_2=\sum_{n=0}^{\infty}b_nx^n$$

两者的形式是一样的，我们可以直接将 $y=\sum_{n=0}^{\infty}a_nx^n$ 代入原方程：

$$y=\sum_{n=0}^{\infty}a_nx^n \Rightarrow y'=\sum_{n=1}^{\infty}na_nx^{n-1} \Rightarrow y''=\sum_{n=2}^{\infty}n(n-1)a_nx^{n-2}$$

即

$$(1-x^2)\sum_{n=2}^{\infty}n(n-1)a_nx^{n-2}-2x\sum_{n=1}^{\infty}na_nx^{n-1}+l(l+1)\sum_{n=0}^{\infty}a_nx^n=0$$

三项的求和指标不太一致，先稍作化简：

$$(1-x^2)\sum_{n=2}^{\infty}n(n-1)a_nx^{n-2}=\sum_{n=2}^{\infty}n(n-1)a_nx^{n-2}-\sum_{n=2}^{\infty}n(n-1)a_nx^n$$

$$=\sum_{n=0}^{\infty}(n+2)(n+1)a_{n+2}x^n-\sum_{n=0}^{\infty}n(n-1)a_nx^n$$

这一步中，对第一个求和，我们将求和指标整体往左平移了 2 个单位，也就是用 n 替换 $n-2$；对第二个求和，我们敏锐地发现 $n=0$ 和 $n=1$ 的项正好都是 0，从而直接将求和改成从 0 开始，也不会影响求和结果。

同理：$-2x\sum_{n=1}^{\infty}na_nx^{n-1}=\sum_{n=1}^{\infty}-2na_nx^n=\sum_{n=0}^{\infty}-2na_nx^n$ 。综上，原方程可以化为：

$$\sum_{n=0}^{\infty}[(n+2)(n+1)a_{n+2}-n(n+1)a_n+l(l+1)a_n]x^n=0$$

这个式子在 0 的邻域内恒成立，所以多项式的每项系数都是 0：

$$(n+2)(n+1)a_{n+2}-n(n+1)a_n+l(l+1)a_n=0$$

这样我们就得到了系数之间的递推关系，这也是级数解法的常见套路：

$$a_{n+2}=\frac{n(n+1)-l(l+1)}{(n+2)(n+1)}a_n=\frac{(n-l)(n+l+1)}{(n+2)(n+1)}a_n$$

这个递推式中的两个系数不是相邻的，而是同奇偶项的系数，因此对它们的通项公式自然需要分奇数项和偶数项来讨论：

（1）n 为奇数，即 $n=2k+1$，则

$$a_{n+2}=\frac{(n-l)(n+l+1)}{(n+2)(n+1)}a_n=\frac{(n-l)(n-l-2)(n+l+1)(n+l-1)}{(n+2)(n+1)n(n-1)}a_{n-2}=\ldots$$

$$=\frac{(n-l)(n-l-2)\ldots(1-l)\cdot(n+l+1)(n+l-1)\ldots(l+2)}{(n+2)(n+1)n(n-1)\ldots\cdot 3\cdot 2}a_1$$

$$=\frac{(2k+3-l)(2k-l-1)\ldots(1-l)\cdot(l+2k+4)(l+2k+2)\ldots(l+2)}{(2k+3)(2k+2)(2k+1)\cdot 2k\cdot\ldots\cdot 3\cdot 2}a_1$$

$$=\frac{2^{2k+2}\left(-\frac{l-1}{2}+k+1\right)\left(-\frac{l-1}{2}+k\right)\ldots\left(-\frac{l-1}{2}\right)\cdot\left(\frac{l}{2}+1+k+1\right)\left(\frac{l}{2}+1+k-1\right)\ldots\left(\frac{l}{2}+1\right)}{(2k+3)!}a_1$$

$$=\frac{2^{2k+2}}{(2k+3)!}\left(-\frac{l-1}{2}\right)_{k+1}\left(\frac{l}{2}+1\right)_{k+1}a_1$$

其中，Pochhammer 符号的定义为 $(a)_k=a(a+1)\ldots(a+k)$。也即

$$a_{2k+3}=\frac{2^{2k+2}}{(2k+3)!}\left(-\frac{l-1}{2}\right)_{k+1}\left(\frac{l}{2}+1\right)_{k+1}a_1\Rightarrow a_{2k+1}=\frac{2^{2k}}{(2k+1)!}\left(-\frac{l-1}{2}\right)_{k}\left(\frac{l}{2}+1\right)_{k}a_1.$$

（2）n 为偶数，用相似的方法可以得到通项：

$$a_{2k}=\frac{2^{2k}}{(2k)!}\left(-\frac{l}{2}\right)_k\left(\frac{l+1}{2}\right)_k a_0.$$

由此可见，只要 a_1 为 0，所有奇数项就都为 0；只要 a_0 为 0，所有偶数项就都为 0。因此，我们可以构造两个解，一个只有奇数项，一个只有偶数项：

$$\boxed{\begin{aligned}y_1&=a_1\sum_{k=0}^{\infty}\frac{2^{2k}}{(2k+1)!}\left(-\frac{l-1}{2}\right)_k\left(\frac{l}{2}+1\right)_k x^{2k+1}\\ y_2&=a_0\sum_{k=0}^{\infty}\frac{2^{2k}}{(2k)!}\left(-\frac{l}{2}\right)_k\left(\frac{l+1}{2}\right)_k x^{2k}\end{aligned}}$$

这两个函数一个是奇函数、一个是偶函数；原方程的通解就是这两者的线性叠加。可以看到这两个函数的级数形式非常复杂，而它们已经不能被写成初等函数了，级数本身就是它们的解析式。

直到这里，解的形式对任意的 l 都成立。但是，不是所有的 l 在物理中都有研究意义。利用比值法可以发现，Legendre 方程的两个解的收敛半径都是 1；在物理上，有些地方会用到这两个解，并且希望它们在 $x=\pm1$ 时也是收敛的。

不难发现，如果 l 不是整数，那么这两个级数一定有无穷多项，而且系数在 k 无穷大时不会趋于 0，这就意味着代入 $x=1$ 会使它们发散。但是，如果 l 是整数，我们会发现**这两个无穷级数中与 l 奇偶性相同的那一个变成了 l 次多项式**（可以代入递推式，验证高于 l 次的系数都为 0），自然是收敛的；另外一个解在 $x=\pm1$ 时还是发散的。我们把每一个整数 l 对应的收敛解叫做第一类 Legendre 函数，也叫 l 阶 Legendre 多项式，记为 $P_l(x)$；另一个发散解则叫做第二类 Legendre 函数，记为 $Q_l(x)$。与此同时，物理上还对前面的自由常数提出要求：

$$l=2m+1\Rightarrow 取 a_1=(-1)^m\frac{(2m+1)!}{2^{2m}(m!)^2}$$

$$l=2m\Rightarrow 取 a_0=(-1)^m\frac{(2m)!}{2^{2m}(m!)^2}$$

即

$$\boxed{\begin{aligned}P_{2m+1}(x)&=(-1)^m\sum_{k=0}^{m}2^{2(k-m)}\frac{(2m+1)!}{(2k+1)!}(-m)_k\left(m+\frac{3}{2}\right)_k x^{2k+1}\\P_{2m}(x)&=(-1)^m\sum_{k=0}^{m}2^{2(k-m)}\frac{(2m)!}{(2k)!}(-m)_k\left(m+\frac{1}{2}\right)_k x^{2k}\end{aligned}}$$

这就是最终修饰好的 Legendre 多项式，最后设定系数的目的是让 $P(1)=1$，满足这一点将会在物理中应用得更方便。

物理当中用得较多的是正整数阶的 Legendre 多项式，在量子力学和电动力学中都会出现。第二类 Legendre 函数由于在 $x=\pm1$ 处发散，在物理上往往不允许，因此很少讨论；负整数阶的 Legendre 多项式与正整数阶的 Legendre 多项式是线性相关的，$P_l(x)=P_{-l-1}(x)$，因此讨论负整数 l 的情形没有必要；非整数阶的两类 Legendre 函数在 $x=\pm1$ 处都发散，不是物理上允许的解，因此一般也不讨论。

【思考】为什么说 $P_l(x)=P_{-l-1}(x)$？（答案：在 Legendre 方程中把 l 换成 $-l-1$，方程根本没有变，因此解不可能会有不同。）

下面我们给出其他一些不太复杂的二阶线性齐次常微分方程以及它们的解。

1、贝塞尔（Bessel）方程：$x^2y''+xy'+(x^2-\nu^2)y=0$，其中 ν 为常数。

首先，$x=0$ 是这个方程的正则奇点，所以在 0 附近的级数解是有指标的。其次，根据 ν 是否为整数，有如下的两种情况：

（1）若 ν 不是整数，有这样两个线性无关解：

$$\boxed{y_1=J_\nu(x)=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k}{k!\Gamma(k+\nu+1)}\left(\frac{x}{2}\right)^{2k+\nu},\quad y_2=J_{-\nu}(x)=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k}{k!\Gamma(k-\nu+1)}\left(\frac{x}{2}\right)^{2k-\nu}}$$

其中 $\Gamma(s)=\int_1^{+\infty}x^{s-1}e^{-x}\mathrm{d}x+\sum_{j=0}^{\infty}\frac{(-1)^j}{j!}\frac{1}{j+s}$ 为 Gamma 函数。上述的两个线性无关解被称为 ν 阶和 $-\nu$ 阶 Bessel 函数。

（2）若 ν 是整数，可以验证上述两个解是线性相关的，它们被合并为一个解，即 $J_\nu(x)$。另外一个解这样得到：

$$\boxed{N_\nu(x)=\frac{\cos\nu\pi\cdot J_\nu(x)-J_{-\nu}(x)}{\sin\nu\pi}}$$

当 ν 是整数时，这个函数在 0 处是发散的，但它确实是与 Bessel 函数线性无关的解，被称为 ν 阶 Neumann（纽曼）函数或者第二类 Bessel 函数。

在第 3 节中我们将看到，Bessel 函数与 Neumann 函数主要应用于柱对称体系中；如果我们要求函数在原点处不能发散，那么 Neumann 函数就不是合理的解，最终的物理解将只有 Bessel 函数；此外，我们如果将这两个函数线性组合：

$$\boxed{\begin{cases}H_\nu^{(1)}(x)=J_\nu(x)+\mathrm{i}N_\nu(x)\\H_\nu^{(2)}(x)=J_\nu(x)-\mathrm{i}N_\nu(x)\end{cases}}$$

得到的函数叫做第一类和第二类 Hankel（汉克尔）函数，它们互为复共轭。这两个解在物理上分别描述向外和向内传播的柱面波。

2、厄米（Hermite）方程：$y''-2xy'+2\lambda y=0$，其中λ为常数。

对于这个方程，0 是常点，有两个线性无关的幂级数解：

$$y_1=x+\sum_{k=1}^{\infty}\frac{2^{2k}}{(2k+1)!}\left(\frac{1-\lambda}{2}\right)_{k-1}x^{2k+1},\ \ y_2=1+\sum_{k=1}^{\infty}\frac{2^{2k}}{(2k)!}\left(-\frac{\lambda}{2}\right)_{k-1}x^{2k}$$

当λ不是自然数时，它们都是无穷级数；当λ是自然数时，二者中与λ奇偶性相同的那一个退化为λ次多项式，可以收敛。选取适当的系数，这个多项式成为

$$H_\lambda(x)=(2x)^\lambda-\frac{\lambda(\lambda-1)}{1!}(2x)^{\lambda-2}+\frac{\lambda(\lambda-1)(\lambda-2)(\lambda-3)}{2!}(2x)^{\lambda-4}-\ldots$$

这个多项式被称为λ阶厄米多项式。在数学上可以证明一个这样的恒等式：

$$\boxed{H_n(x)=(-1)^n e^{x^2}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}e^{-x^2}}$$

写得更形象一些，就是$\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}e^{-x^2}=(-1)^n H_n(x)e^{-x^2}$。也就是说，对函数$e^{-x^2}$求导若干次，旁边逐渐出来的多项式就是厄米多项式。

在量子力学中，可能会用厄米多项式进行一些计算。

3、球 Bessel 方程：$x^2y''+2xy'+[k^2x^2-l(l+1)]y=0$。

这个方程通过变量代换可以变成 Bessel 方程。令$z=kx$，$u=\sqrt{\frac{\pi}{2z}}y$，有

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}z^2}+z\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}z}+\left[z^2-\left(l+\frac{1}{2}\right)^2\right]u=0$$

即 z 和 u 之间满足$l+\frac{1}{2}$阶 Bessel 方程。因此，原先的球 Bessel 方程的解为

$$\boxed{j_l(kx)=\sqrt{\frac{\pi}{kx}}J_{l+1/2}(kx),\ \ n_l(kx)=\sqrt{\frac{\pi}{kx}}N_{l+1/2}(kx)}$$

它们被称为球 Bessel 函数和球 Neumann 函数。同样，还可以构造球 Hankel 函数：

$$\boxed{\begin{cases}h_l^{(1)}(x)=j_l(x)+\mathrm{i}n_l(x)\\h_l^{(2)}(x)=j_l(x)-\mathrm{i}n_l(x)\end{cases}}$$

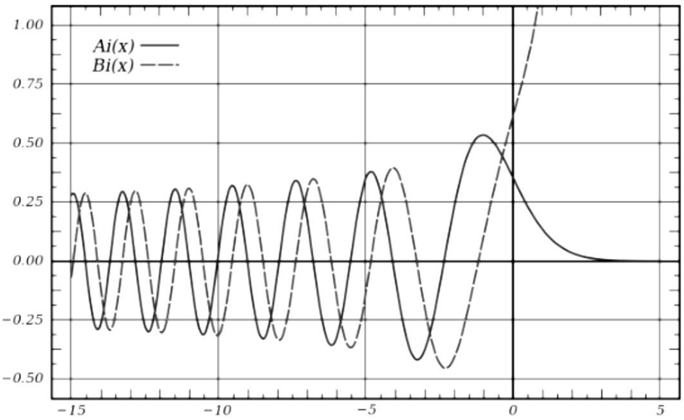
球 Bessel/Neumann/Hankel 函数在球对称体系中会出现。其中，第一类、第二类球 Hankel 函数在物理中分别对应于向外和向内传播的球面波，在量子力学的散射问题中经常用到；这两种球面波的实部和虚部分别对应$j_l(x)$与$n_l(x)$。

4、艾里（Airy）方程：$y''-xy=0$。

这个微分方程看起来特别简单，甚至像是曾经学过的方程。但是，由于第二项中 x 的存在，它的解不是初等函数。我们可以用级数法对这个方程进行求解，但结果会比前几个方程还要麻烦。我们在这里用另一种形式来写：

$$\mathrm{Ai}(x)=\frac{1}{\pi}\int_0^{+\infty}\cos\left(\frac{t^3}{3}+xt\right)\mathrm{d}t,\ \ \mathrm{Bi}(x)=\frac{1}{\pi}\int_0^{+\infty}\left[e^{-\frac{t^3}{3}+xt}+\sin\left(\frac{t^3}{3}+xt\right)\right]\mathrm{d}t$$

这两个函数就是 Airy 方程的解，被称为第一类、第二类 Airy 函数。这两个函数的独特之处在于它们的图像：



它们在 $x<0$ 时的行为类似于三角函数（振荡），而在 $x>0$ 时，Ai 函数类似于指数衰减，Bi 函数类似于指数发散。这一点其实从微分方程本身就可以看出来：在 $x<0$ 时，$y''=xy\sim -y$，其解类似于三角函数；在 $x>0$ 时，$y''=xy\sim +y$，所以解又类似于指数函数。

在量子力学中，求解出的波可能在一个区间内是正弦形式的传播波，而在另一个区间内是指数形式的衰减波。如果我们想用一个连续并且具有无穷阶导数的函数把三角函数和指数函数光滑地连接在一起，那么 Airy 函数就是一个再合适不过的工具，利用它可以近似地求解这个过渡区中的一些性质。

5、关联 Legendre 方程：$(1-x^2)y''-2xy'+\left[l(l+1)-\dfrac{m^2}{1-x^2}\right]y=0$。

这个方程与 Legendre 方程有一定的关系：令 $y=(1-x^2)^{m/2}u(x)$，则

$$(1-x^2)u''-2(m+1)xu'+[l(l+1)-m(m+1)]u=0$$

可以说明，如果要求存在 $x=\pm1$ 处收敛的解，同样需要 l 为整数。物理上一般讨论 m 也为整数时的解，此时在 $x=\pm1$ 时收敛的结果为：

$$m>0\Rightarrow y=P_l^m(x)=(1-x^2)^{m/2}\frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m}P_l(x)$$

$$m<0\Rightarrow y=P_l^m(x)=(-1)^m\frac{(l-m)!}{(l+m)!}P_l^{-m}(x)$$

这个函数叫做关联（连带/缔结）Legendre 函数；由于 $P_l(x)$ 是 l 次多项式，所以要求 $|m|\le l$，才能给出非 0 结果。这个函数同样在量子力学和电动力学中出现，一般用来描述球坐标中一个函数的角向分布。

2.3　特殊函数的研究要点

在 2.2 节中，我们已经介绍了一些典型的特殊函数，它们不能被写成初等函数，形式也多种多样。那么，对于一个特殊函数，我们究竟需要把握它的哪些性质？对于这个问题，可以查找一些专门讨论特殊函数的书籍。总而言之，可以归纳为以下几点。

1、如何表示一个特殊函数。我们在 2.2 节中已经有所涉及，这里大致总结一下，数学家尝试过多少不同方法来表示同一个特殊函数。

（1）直接写出函数的级数表达，这是微分方程中求解的最常见的结果，例如上一节中的 Legendre 函数、Bessel 函数。

（2）将特殊函数写成某个函数的导数，例如厄米多项式与 e^{-x^2} 的导数有关；其他的特殊函数也可以这样做，例如 Legendre 多项式可以写为

$$P_l(x)=\frac{1}{2^l l!}\frac{\mathrm{d}^l}{\mathrm{d}x^l}(x^2-1)^l$$

所以连带 Legendre 函数可以写为

$$P_l^m(x)=(1-x^2)^{m/2}\frac{1}{2^l l!}\frac{\mathrm{d}^{l+m}}{\mathrm{d}x^{l+m}}(x^2-1)^l$$

这个表达式对于 $m=-l,-l+1,...,+l$ 都是统一的。

数学上，把特殊函数的导数表达式叫做罗德里格斯（Rodrigues）公式。这种公式的好处在于可以用来分部积分，从而推导出特殊函数的递推公式。

（3）将特殊函数写成积分形式，例如 Airy 函数和 Gamma 函数。当然，这里的“积分”不仅可以是实数范围内的定积分，也可以是复数范围内的积分。

（4）用已知的特殊函数表示未知的特殊函数，例如用 Bessel 函数得到球 Bessel 函数，用 Legendre 函数得到连带 Legendre 函数。

（5）寻找特殊函数的“生成函数”。这一点对于特殊多项式有很重要的意义。例如，Legendre 多项式可以通过如下的级数生成：

$$\frac{1}{\sqrt{1+t^2-2tx}}=\sum_{n=0}^{\infty}P_n(x)t^n$$

在球坐标中，公式里的 x 一般是 $\cos\theta$，t 一般与 r 有关；公式左边的 $\sqrt{1+t^2-2tx}$ 往往是余弦定理，而右边的级数则将其展开成了不同的角向分布 $P_n(\cos\theta)$ 以及随距离的不同阶数 t^n。在求解电磁场、引力场分布时可能会用到这样的公式，随距离的不同阶数对应于不同的角向对称性。

2、单个特殊函数的性质。由于是特殊函数，其求导和积分都不甚方便，所以特殊函数的变化规律（单调性、凹凸性等）主要是通过直接作图得到的。与此同时，对于物理学家而言，一般更关心这些抽象的函数是否可以近似成一些熟悉的、简单的函数，从而更好地把握它们的变化趋势。这样的性质叫做特殊函数的**渐近行为**。例如 Airy 函数在远处的行为可以定量地近似：

$$x>>0:\begin{cases}\mathrm{Ai}(x)\approx\dfrac{1}{2\sqrt{\pi}x^{1/4}}e^{-\frac{2}{3}x^{3/2}}\\ \mathrm{Bi}(x)\approx\dfrac{1}{\sqrt{\pi}x^{1/4}}e^{\frac{2}{3}x^{3/2}}\end{cases}\qquad x<<0:\begin{cases}\mathrm{Ai}(x)\approx\dfrac{1}{\sqrt{\pi}x^{1/4}}\sin\left(\dfrac{2}{3}x^{3/2}+\dfrac{\pi}{4}\right)\\ \mathrm{Bi}(x)\approx\dfrac{1}{\sqrt{\pi}x^{1/4}}\cos\left(\dfrac{2}{3}x^{3/2}+\dfrac{\pi}{4}\right)\end{cases}$$

这就定量地体现出 Airy 函数是如何连接三角函数与指数函数的。

3、同类特殊函数之间的关系。

（1）递推公式。特殊函数的递推公式可以是函数值之间的关系，也可以是导数之间的关系，亦或是函数值与导数的关系。例如，Hermite 多项式存在如下的两个递推关系：$H_{n+1}(x)=2xH_n(x)-2nH_{n-1}(x)$，$H_n'(x)=2nH_{n-1}(x)$。

（2）各个特殊函数积分之间的关系。在 15.2 节，我们通过三角函数积分的性质

求出了傅里叶级数中各个系数的表达式；同理，如果我们用一类特殊函数对一个函数进行展开，那么也可以利用类似的性质求解前面的系数。例如，Legendre 多项式满足这样的积分性质：

$$\int_{-1}^{1} P_m(x)P_n(x)\mathrm{d}x = \frac{2}{2n+1}\delta_{mn}$$

如果一个定义域为$[-1,1]$的函数用 Legendre 多项式进行了展开：

$$f(x)=\sum_{n=0}^{\infty} a_n P_n(x)$$

那么可以两边同乘以$P_m(x)$，然后在$[-1,1]$上积分，求出系数：

$$a_m = \frac{2m+1}{2}\int_{-1}^{1} f(x)P_m(x)\mathrm{d}x$$

在下一节中我们将揭示这种做法的本质。

（3）这一类特殊函数满足怎样的常微分方程。有些时候我们是从微分方程解出特殊函数，但也有些时候我们通过其他的方式先得到了特殊函数，然后再考虑它满足怎样的微分方程。

以上这些就是研究特殊函数时的一些关键点；对于目前市面上流行的特殊函数书籍，如果翻看目录，可以看到同一本书对不同特殊函数的研究思路基本都是一样的，并且都覆盖上述的这些要点。在学习四大力学以及更高的学科时可以准备这样一本书，不过要注意这样的书不适合专门阅读，因为书中基本只是一些数学计算结果的罗列，建议只在需要时作为工具书进行查阅。

★推荐参考书：王竹溪、郭敦仁《特殊函数概论》，北京大学出版社

注意，不要纠结数学细节，当成工具书用即可。

3　正交函数与本征函数系

通过第 2 节，我们引入了一些常见的特殊函数。它们的数学形式复杂而繁琐，很难记忆，也不必记忆，在需要使用时能够查找到即可；真正需要我们理解并记住的，是它们在求解微分方程中所体现出的绝佳性质。

3.1　正交函数理论：函数也是矢量？

如果对第十一章的内容还有些印象，就会记得我们曾经讨论过线性齐次微分方程的解，它与矢量空间很相似：

n阶线性齐次微分方程 $\Leftrightarrow$ n维空间

n个线性无关的特解 $\Leftrightarrow$ n个不共线的基底矢量

n个线性无关特解叠加成通解 $\Leftrightarrow$ n个基底矢量叠加成空间内任意矢量

所以，我们完全可以用矢量空间的一些思想和方法来研究函数；上面这几句话只是从概念上比较了它们，而这一节我们将从定量上进行讨论。

初等数学对矢量进行了如下的研究：

（1）矢量的定义与表示方法；

（2）矢量的加法法则、数乘法则；

（3）矢量的点乘与叉乘，以及三重标积、三重矢积；
（4）n 维矢量空间必然存在 n 个彼此不共线的矢量 $\vec{e}_1,...,\vec{e}_n$，以它们为基底做线性叠加可以得到空间内所有矢量；如果这些矢量正交归一（即两两垂直且长度全为 1，数学上写为 $\vec{e}_m\cdot\vec{e}_n=\delta_{mn}$），则第 i 个基底 $\vec{e}_i$ 前的组合系数可以直接通过点乘得到：

$$\vec{a}=\sum_{j=1}^{n}c_j\vec{e}_j\Rightarrow c_i=\vec{a}\cdot\vec{e}_i$$

最后这条性质其实就是在 $\vec{a}=\sum_{j=1}^{n}c_j\vec{e}_j$ 两边同时点乘 $\vec{e}_i$，然后根据 $\vec{e}_m\cdot\vec{e}_n=\delta_{mn}$，最终只有第 i 项留下来了。

对于函数而言，其概念早就被定义出来，其加法和数乘就是普通标量的加法与乘法，不需要再多做讨论；而矢量中引入的点乘运算则还没有推广到函数中，这是一件值得做的事情。

我们知道，最好的坐标系就是正交归一的基矢，因为它们满足 $\vec{e}_m\cdot\vec{e}_n=\delta_{mn}$，彼此的分量不会受影响，可以通过点乘直接分出每一个方向上的分量（投影）。在这一章，我们其实已经遇到过两次 δ_{mn} 了：

$$\int_{-L}^{L}\sin\frac{m\pi}{L}x\sin\frac{n\pi}{L}x\mathrm{d}x=\int_{-L}^{L}\cos\frac{m\pi}{L}x\cos\frac{n\pi}{L}x\mathrm{d}x=L\cdot\delta_{mn}\text{（}m,n\neq 0\text{）}$$

$$\int_{-1}^{1}P_m(x)P_n(x)\mathrm{d}x=\frac{2}{2n+1}\delta_{mn}$$

可以看到，它们好像也是两个量乘在一起，这两个量也是一个有 m 一个有 n，最终结果即使不是 δ_{mn}，也和 δ_{mn} 成正比。因此，这些积分对于函数而言就好像是做了一次“点乘”，结果为 0 时，两个函数好像是“垂直”的一样。

在线性代数中，已经把“内积”这个概念拓宽到了函数空间——如果函数 $f(x)$ 与 $g(x)$ 都是实数，并且在区间[a,b]上连续，则可以定义它们的内积为：

$$\langle f|g\rangle=\int_a^b f(x)g(x)\mathrm{d}x$$

如果 $f(x)$ 与 $g(x)$ 是复数，可以将内积定义为

$$\langle f|g\rangle=\int_a^b f^*(x)g(x)\mathrm{d}x$$

这个定义看起来好像和矢量的内积一点也不像，但其实二者是非常相似的。我们知道，在直角坐标系下，两个矢量的内积可以写为

$$\vec{a}\cdot\vec{b}=\sum_i a_ib_i$$

之所以会这样，是因为矢量空间的基底是分立的，所以投影也是一个个出现的，我们只需要将这些离散的分量进行求和就可以了；至于连续函数，数学家和物理学家倾向于把它们看成“无穷维空间”中的矢量。普通的矢量空间，用整数 $1,2,...,n$ 就可以标注所有的基底矢量；而函数所处的空间则有无数多个基底矢量，它们需要用每一个实数 x 来标注。也就是说，连续区间[a,b]内的每一个实数就代表一个基底，而函数 $f(x)$可以看成某个抽象的矢量 $|f\rangle$ 在 x 这个基底上的投影、

分量[3]。我们将两个函数在各个 x 上的分量相乘，就是 $f(x)g(x)$，然后再对所有 x 上的分量进行求和，就变成了 $f(x)g(x)$的定积分。

因此，数学家将内积为 0 的函数称为“正交”，将一个函数与自己的内积（也就是 $\langle f|f\rangle=\int_a^b|f(x)|^2\,\mathrm{d}x$）称为函数的“模”（类似于矢量的长度），而模为 1 的函数则被称为“归一化”函数。若一群函数 $f_1,\dots,f_n$ 满足 $\langle f_i|f_j\rangle=\delta_{ij}$，则称这些函数是“正交归一”的。

不过，对于上述内积的表达式，还需要注意两点：

（1）定义内积时只要求两个函数在区间$[a,b]$上连续，但要想让内积呈现出正交归一，一般必须是在某些特定的区间。例如三角函数一般要在公共的周期中做内积，Legendre 多项式要在区间$[-1,1]$中做内积。

（2）有时候被积函数未必就是 $f(x)g(x)$，有时可能需要加上一些其他的东西，需要具体问题具体分析。

下面给出一些典型函数的正交性。

（1）三角函数：$\int_{-L}^{L}\sin\frac{m\pi}{L}x\sin\frac{n\pi}{L}x\,\mathrm{d}x=\int_{-L}^{L}\cos\frac{m\pi}{L}x\cos\frac{n\pi}{L}x\,\mathrm{d}x=L\cdot\delta_{mn}$（$m,n\neq 0$）

（2）Legendre 多项式：$\int_{-1}^{1}P_m(x)P_n(x)\,\mathrm{d}x=\frac{2}{2n+1}\delta_{mn}$。

（3）连带 Legendre 函数：$\int_{-1}^{1}P_l^m(x)P_{l'}^m(x)\,\mathrm{d}x=\frac{2}{2n+1}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}\delta_{ll'}$。

（4）Hermite 多项式：$\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-x^2}H_m(x)H_n(x)\,\mathrm{d}x=2^n n!\sqrt{\pi}\delta_{mn}$。

这里的内积就需要添加一个 e^{-x^2}，可以理解为不同的 x 对内积有不同的权重。

（5）整数阶 Bessel 函数：记 $x_i^{(m)}$ 为 $J_m(x)$ 在正数范围内的第 i 个零点[4]，$a>0$ 为常数，$k_{mi}=\frac{x_i^{(m)}}{a}$，则 $\int_0^a J_m(k_{mi}r)J_m(k_{mj}r)r\,\mathrm{d}r=\frac{a^2}{2}[J_{m+1}(k_{mi}a)]^2\delta_{ij}$。

正如前面所说，正交性在数学上最大的用处就是计算展开系数的值。例如：

（1）$x\in[-1,1]$，$f(x)=\sum_{n=0}^{\infty}a_nP_n(x)\Rightarrow a_n=\frac{2n+1}{2}\int_{-1}^{1}f(x)P_n(x)\,\mathrm{d}x$

（2）$x\in\boldsymbol{R}$，$f(x)=\sum_{n=0}^{\infty}a_nH_n(x)\Rightarrow a_n=\frac{1}{2^n n!\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}f(x)e^{-x^2}H_n(x)\,\mathrm{d}x$

（3）$f(x)\text{周期为}2L\Rightarrow f(x)=\frac{a_0}{2}+\sum_{n=1}^{\infty}a_n\cos\frac{n\pi}{L}x+b_n\sin\frac{n\pi}{L}x\Rightarrow\begin{cases}a_n=\frac{1}{L}\int_{-L}^{+L}f(x)\cos\frac{n\pi}{L}x\,\mathrm{d}x,\\ b_n=\frac{1}{L}\int_{-L}^{+L}f(x)\sin\frac{n\pi}{L}x\,\mathrm{d}x\end{cases}$

最后一个其实就是傅里叶级数，由此可见，这个级数展开在数学上并不特殊，只是正交函数展开的一个平凡例子而已。不过傅里叶的创新功不可没，否则人们或许还会在幂级数中沉浸很多年。与此同时，我们看到这些系数都是通过 $f(x)$

[3] 符号<$f|g$>、$|f$>是狄拉克（Dirac）在研究量子力学时引入的，被称为 Dirac 符号。在量子力学中，函数一般都用 Dirac 符号表示，它们已经完完全全被当成矢量看待了。

[4] 可以证明，每个 Bessel 函数都有无数多个零点，而且 $J_m(x)$与 $J_{m+1}(x)$的零点互相不重合。这保证积分式的右边不为 0。

与相应的“基底”相乘再做积分得到，所以本质上这就是一种“内积”，一种投影，它代表了第 n 个基底对 $f(x)$的贡献有多少。

3.2 偏微分方程的本征函数解法

前面讲到的具有正交关系的函数，如 Legendre 多项式、Bessel 函数、Hermite 多项式等，都是从常微分方程来的，而数学家在解偏微分方程时，会尝试将其化为常微分方程，从而将未知化为已知。

1、偏微分方程的概念

偏微分方程与常微分方程相对立，指的是多元函数及其偏导数满足的等式。从常微分方程变到偏微分方程，看上去只是自变量多了，其实为函数本身添加了很多的不确定性。例如，已知一个二元函数 $f(x,y)$，它满足偏微分方程 $\frac{\partial f}{\partial y}=0$，那么任何一个不含 y 只含 x 的函数都满足这个偏微分方程，不管它关于 x 是什么解析式。维度增加一个，解并不是只增加一个；常微分方程的解一般函数形式都是定的，只是系数可以变动，但是偏微分方程的解往往连函数形式都确定不了。因此，为了将偏微分方程的解确定下来，我们需要比常微分方程更多的附加条件。例如，常微分方程只要给出端点所满足的条件，而偏微分方程往往需要给出函数在高维区域的整个边界上所满足的关系（边界条件）。例如，对二元函数 $f(x,y)$，我们可以给出整个边界线上 f 的具体形式，只有这样才有可能把解确定下来。

例 已知二元函数 $f(x,y)$ 满足偏微分方程 $\frac{\partial f}{\partial x}=x$ 。

（1）求 $f(x,y)$ 的通解；（2）如果添加一个偏微分方程 $\frac{\partial f}{\partial y}=y$，求通解。

【解】（1）由于对 x 求导是 x，所以 $\frac{\partial f}{\partial x}=x$ 可以直接对 x 积分回来：

$$f=\frac{x^2}{2}+\psi(y)$$

其中 $\psi(y)$ 是任意一个关于 y 的一元函数。注意，在偏微分方程中对变量 x 积分，后面并不是加一个常数这么简单，而是要加上一个函数，这个函数里面不含 x。所以，如果只有 $\frac{\partial f}{\partial x}=x$ 这样一个方程，根本无法确定 $f(x,y)$ 的形式。

（2）在第一问的基础上，添加 $\frac{\partial f}{\partial y}=y$ 。我们可以直接对 $f=\frac{x^2}{2}+\psi(y)$ 求偏导：

$$\frac{\partial f}{\partial y}=\psi'(y)=y$$

注意方程 $\psi'(y)=y$ 已经是常微分方程了，所以此时对 y 积分后面所加的是积分常数，而不需要加一个关于 x 的函数。

$$\psi'(y)=y\Rightarrow\psi(y)=\frac{y^2}{2}+C$$

代回第一问的结果，得到 $f(x,y)=\frac{x^2+y^2}{2}+C$ 。这样的 $f(x,y)$ 算是确定了函数形式，可以看到至少要两个方程才能做到这一点。

2、分离变量法的思想

前面的例子算是一个比较简单的偏微分方程，它是一阶的，所以直接积分是可行的；但是物理中大多数偏微分方程是二阶线性齐次偏微分方程，很难通过这样简单的方法求解。因此，数学家尝试将偏微分方程转化成常微分方程。

我们知道，作为多个自变量的方程，偏微分方程要想化为常微分方程，那么至少应该要能够把各个自变量分开来。在数学上，一个多元函数可以分离变量的形式一般如下：

$$f(x_1,\ldots,x_n)=g_1(x_1)\ldots g_n(x_n)$$

即各个函数互相不会交叉，而是各自的部分相乘。对于这种函数，我们往往可以分别求解 $g_1(x_1)$关于x_1、$g_2(x_2)$关于x_2、…、$g_n(x_n)$关于x_n 的常微分方程，然后再把 $g_1(x_1),g_2(x_2),\ldots,g_n(x_n)$ 的各种组合线性叠加（因为是线性方程），得到的就是总的函数 f 的通解。这种做法就叫做偏微分方程的分离变量解法，它的适用范围很广，求解复杂度适中，而且物理内涵也很丰富，所以是物理学科中使用较多的一种求解方法。

3、分离变量解 Laplace 方程

在电动力学、热力学中经常会在三维空间中遇到这样一个偏微分方程：

$$\nabla^2 f=0$$

其中 ∇^2 就是第十四章讲到的 Laplace 算符，在直角坐标系下有

$$\nabla^2 f=\nabla\cdot(\nabla f)=\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 f}{\partial z^2}$$

这个方程就叫 Laplace 方程。物理中，在没有电荷的地方，电势满足这个方程；在没有热源的地方，温度的分布满足这个方程。它看起来很简单，但由于是偏微分方程，它的解其实很不确定，而且形式往往很复杂，具体的解需要根据体系的对称性来决定。下面我们将展示，在不同对称性的体系中，如何通过分离变量求解 Laplace 方程。

（1）直角坐标系

如果研究的区域具有类似于矩形、长方体的形状，则可以使用直角坐标系。例如，我们让函数 f 具有这样的边界条件：

$$\begin{cases} f(0,y,z)=f(a,y,z)=0 \\ f(x,0,z)=f(x,b,z)=0 \\ f(x,y,0)=f(x,y,c)=0 \end{cases}$$

这个方程组可以理解为，函数 f 被限制在长 a 宽 b 高 c 的长方体区域内，并且长方体的边界上要求 $f=0$。例如，我们在这个长方体的边界上放置接地的导体

板，那么这个长方体空腔内的电势就满足 Laplace 方程和上述的边界条件。此时，我们就直接在直角坐标系中解决。假设 f 具有分离变量的形式：

$$f(x,y,z)=X(x)Y(y)Z(z)$$

代入 Laplace 方程，可以得到

$$X''YZ+XY''Z+XYZ''=0\Rightarrow\frac{X''}{X}+\frac{Y''}{Y}+\frac{Z''}{Z}=0$$

接下来的一步是分离变量法的关键，如果不承认这件事，将不能进行分离。数学家的思路是这样的：把最后的这个方程进行移项，有

$$\frac{X''}{X}=-\frac{Y''}{Y}-\frac{Z''}{Z}$$

这个方程有什么特点呢？可以看到，它的左边只和 x 有关，右边只和 y、z 有关。数学家发现，在 x,y,z 相互独立的情况下，等号的左右两边必须都是常数才可以。原因如下：

（1）因为等式右边与 x 无关，所以左边也和 x 无关；

（2）因为等式左边与 y、z 无关，所以右边也和 y、z 无关。

这样一来，等式两边和 x,y,z 都没关系，从而它们只能等于一个共同的常数函数。我们将这个常数设为 $-\lambda$：

$$\frac{X''}{X}=-\frac{Y''}{Y}-\frac{Z''}{Z}=-\lambda$$

于是，我们得到 $\begin{cases}\dfrac{X''}{X}=-\lambda\\ \dfrac{Y''}{Y}+\dfrac{Z''}{Z}=-\lambda\end{cases}$。第二个方程可以进一步分离 y 和 z：

$$\frac{Y''}{Y}+\frac{Z''}{Z}=-\lambda\Rightarrow\frac{Y''}{Y}=-\lambda-\frac{Z''}{Z}=-\mu$$

到这里为止，我们得到了 X、Y、Z 三者各自满足的常微分方程：

$$\begin{cases}X''+\lambda X=0\\ Y''+\mu Y=0\\ Z''+(\lambda-\mu)Z=0\end{cases}$$

这样就完成了分离变量，其中 λ 和 μ 是分离变量所引入的常数，叫做分离变量常数。这两个数的取值也是未知的，需要通过附加条件确定。下面我们进行具体求解：

（1）$X''+\lambda X=0$。由于 λ 的正负未知，X 可能是指数函数或者三角函数。至于具体是哪个，我们需要考虑第一个边界条件：

$$f(0,y,z)=f(a,y,z)=0\Rightarrow X(0)Y(y)Z(z)=X(a)Y(y)Z(z)=0$$

这个式子对任意 y 和 z 都成立，因此要求 $X(0)=X(a)=0$。显然，如果 X 是指数函数，它不可能满足这种条件，所以 X 一定是三角函数，也就暗示 λ 为正。因此，可以设 $\lambda=k^2$，就有 $X(x)=A_1\sin kx+B_1\cos kx$，其中 k、A、B 是未知的。为了进一步求解是否有可以确定的参数，我们代入边界条件：

$$\begin{cases}X(0)=0\Rightarrow B_1=0\\ X(a)=0\Rightarrow A_1\sin ka+B_1\cos ka=A_1\sin ka=0\end{cases}$$

现在已经有 $B_1=0$，如果 A_1 也是 0，那么 X 恒等于 0，这意味着 f 在区域内恒等于 0。但是我们并不想找这种没有物理意义的解（它代表什么场都没有），

还是希望 X 和 f 非零，因此 $A_1 \neq 0$。但是 $A_1 \sin ka = 0$，所以

$$\sin ka = 0 \Rightarrow ka = m\pi \text{（} m = 1,2,3,... \text{）}$$

因此所有可能的解都可以被写成 $X(x) = A_1 \sin \frac{m\pi}{a} x$ 的形式。这里我们只需要 m 为正整数，因为负整数的解和正整数的解线性相关，不必单独列出。而且，我们顺便将一个分离变量常数求了出来：

$$k = \frac{m\pi}{a}, \quad \lambda = \left(\frac{m\pi}{a}\right)^2$$

同理，我们可以知道 $Y(y) = A_2 \sin \frac{n\pi}{b} y$，$Z(z) = A_3 \sin \frac{p\pi}{c} z$，其中 n 和 p 也都是正整数。这样一来，记 $A_1A_2A_3 = A$，就有

$$f(x,y,z) = X(x)Y(y)Z(z) = A \sin \frac{m\pi}{a} x \sin \frac{n\pi}{b} y \sin \frac{p\pi}{c} z$$

这种形式的函数就是方程 $\nabla^2 f = 0$ 在边界条件 $\begin{cases} f(0,y,z) = f(a,y,z) = 0 \\ f(x,0,z) = f(x,b,z) = 0 \\ f(x,y,0) = f(x,y,c) = 0 \end{cases}$ 下的分离变量解[5]，我们把它称为偏微分方程的本征函数（Eigen Function），所有本征函数构成的集合称为本征函数系。最终的一般解则是本征函数的线性叠加[6]：

$$\boxed{f(x,y,z) = \sum_{m,n,p} A_{mnp} \sin \frac{m\pi}{a} x \sin \frac{n\pi}{b} y \sin \frac{p\pi}{c} z}$$

目前所能做到的就是这些，而结果中的系数 A_{mnp} 还是不确定的（其他参数都已经确定）。如果问题还有其他的条件，那么可以通过三角函数的正交性把所有 A_{mnp} 也都定下来，从而最终的解就完全确定了。目前我们遇到的物理问题，其解一般都是可以完全确定的，我们要尽可能地寻找问题中的条件，使方程的解不断被完善。

（2）三维球坐标系

如果问题所给的边界条件是球对称的（例如在 $r = R$ 时 $f = 0$），那么一般要选择球坐标才能最好地利用这样的条件。

首先要解决的一件事情是：Laplace 算符 ∇^2 在球坐标下是怎样写的？这件事通过链式法则可以做到：

$$\nabla^2 f = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial f}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 \sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\sin\theta \frac{\partial f}{\partial \theta}\right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta}\frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2}$$

Laplace 方程就是上面的这个式子为 0。我们同样尝试分离变量：

$$f(r,\theta,\varphi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi) \Rightarrow \frac{\partial}{\partial r}(r^2 R')\Theta\Phi + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\,\Theta')R\Phi + \frac{1}{\sin^2\theta}\Phi'' R\Theta = 0$$

$$\Rightarrow \frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}(r^2 R') + \frac{1}{\Theta}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\,\Theta') + \frac{1}{\Phi}\frac{1}{\sin^2\theta}\Phi'' = 0$$

$$\Rightarrow -\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}(r^2 R') = \frac{1}{\Theta}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\,\Theta') + \frac{1}{\Phi}\frac{1}{\sin^2\theta}\Phi'' \equiv -l(l+1)$$

[5] 注意偏微分方程的解一定要说是在什么边界条件下的解。在不同的边界条件下，函数的最终形式一般不一样；这些结果几乎全是依靠边界条件得到的，Laplace 方程本身其实没有多少信息。

[6] 数学家曾经质疑：分离变量解的线性叠加，一定就是偏微分方程的全部解吗，会漏掉一些解吗？这种问题被称为解的完备性（Completeness）问题，是非常有意义的。后来，数学家自己消化了这个问题——Sturm 和 Liouville 证明，对于二阶齐次线性微分方程，分离变量解的线性叠加确实是全部解。

$$\Rightarrow\begin{cases}\dfrac{\partial}{\partial r}(r^2R')-l(l+1)R=r^2R''+2rR'-l(l+1)R=0\\ \dfrac{1}{\Theta}\dfrac{1}{\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\,\Theta')+\dfrac{1}{\Phi}\dfrac{1}{\sin^2\theta}\Phi''=-l(l+1)\end{cases}$$

这里先把 r 分离了出来，其中分离变量常数记为 $-l(l+1)$，这是为了后续计算方便。下面把θ和φ也分离：

$$\frac{1}{\Theta}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\,\Theta')+\frac{1}{\Phi}\frac{1}{\sin^2\theta}\Phi''+l(l+1)=0$$

$$\Rightarrow\frac{1}{\Theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\,\Theta')+l(l+1)\sin^2\theta=-\frac{1}{\Phi}\Phi''\equiv\gamma$$

$$\Rightarrow\begin{cases}\sin\theta\dfrac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\,\Theta')+l(l+1)\Theta\sin^2\theta=\gamma\Theta\\ \Phi''+\gamma\Phi=0\end{cases}$$

最终得到三个常微分方程：

$$\begin{cases}r^2R''+2rR'-l(l+1)R=0\\ \dfrac{1}{\sin\theta}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}(\sin\theta\,\Theta')+\left[l(l+1)-\dfrac{\gamma}{\sin^2\theta}\right]\Theta=0\\ \Phi''+\gamma\Phi=0\end{cases}$$

三者可以分别求解。

①关于 R 的方程：这是一个我们在第十一章就可以解的方程，它的解不是特殊函数。如果直觉足够好，可以看到r^2R''、rR'、R 具有相同的量纲，因此可以猜测 R 应该大致是一个幂函数 r^α；将这个形式代入原方程，有 $\alpha=l$或$-l-1$，即

$$\boxed{R(r)=A_lr^l+B_lr^{-l-1}}$$

由于已经猜出了两个线性无关的解，所以不会漏掉其他任何解了。

②关于Θ的方程：如果令 $\cos\theta=x$，则方程可以化为

$$(1-x^2)\frac{\mathrm{d}^2\Theta}{\mathrm{d}x^2}-2x\frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}x}+\left[l(l+1)-\frac{\gamma}{1-x^2}\right]\Theta=0$$

这个方程有点像关联 Legendre 方程。但是由于 l 和γ的值还没确定（不知道它们是不是整数），这个方程暂时不能解，需要等到Φ的部分讨论完之后才能解。

③关于Φ的方程：$\Phi''+\gamma\Phi=0$，它的解可能是指数函数或三角函数。此时不得不考虑一下物理的边界条件：φ是空间中的转角，它转动 2π之后空间点回到原始位置，那么函数Φ一定要回到原始值。也就是说，**<u>Φ应该具有 2π的周期</u>**，被称为“周期性边界条件”。这就使得Φ是三角函数而不是指数函数，故γ为正。设$\gamma=k^2$，则 $\Phi(\varphi)=C_1\cos k\varphi+C_2\sin k\varphi$。由于 2π是Φ的周期，故

$$2\pi=mT=m\frac{2\pi}{k}\Rightarrow k=m\text{（}m=0,1,2,\ldots\text{）}$$

即$\boxed{\Phi(\varphi)=C_m\cos m\varphi+D_m\sin m\varphi}$。这里 m 不需要取负整数，因为负整数与正整数的解是线性相关的。

得到Φ之后，把$\gamma=m^2$ 代入Θ的方程，有

$$(1-x^2)\frac{\mathrm{d}^2\Theta}{\mathrm{d}x^2}-2x\frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}x}+\left[l(l+1)-\frac{m^2}{1-x^2}\right]\Theta=0$$

这是个非常标准的关联 Legendre 方程。最终得到的是以 $\cos\theta$为自变量的关联 Legendre 函数，而θ的范围是$[0,\pi]$，所以 $\cos\theta$的范围是$[-1,1]$；物理上，一个场在

满足 Laplace 方程的区域内一般是没有源头的，因此场不可能发散，从而我们需要寻找合适的 l、m，使得方程至少有一个在 $\cos\theta\in[-1,1]$ 时不发散而且不恒为 0 的解。通过 15.3 节的介绍，我们已经知道，当 l 为正整数，且 $m=-l,-l+1,\ldots,+l$ 时，方程的解满足上述条件，也就是关联 Legendre 函数 $P_l^m(x)=P_l^m(\cos\theta)$。所以，我们在第 2 节努力寻找 $x\in[-1,1]$ 时收敛的解，其实就是为了用在这里；物理上，把上述的这种性质称为"自然"条件，它要求：**若一个场的源都在有限远处，那么在满足 Laplace 方程的区域内，场一定不发散，在无穷远处则一定要趋于 0。**

自然条件其实对 R 也有限制。根据刚才的分析，分离变量解中 l 必然为正整数，因此 r^l 会在无穷远处发散，r^{-l-1} 会在原点处发散。因此，如果这个场的分布区域包含原点，则解中不能有 r^{-l-1} 项；若场一直分布到无穷远，则解中不能有 r^l 项；如果原点和无穷远处都不在讨论范围内，那么可以允许二者都存在。

综上所述，Laplace 的分离变量解如下：

（1）如果求解区域不包括原点和无穷远，则

$$f(r,\theta,\varphi)=\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{l}(A_{lm}r^l+B_{lm}r^{-l-1})P_l^m(\cos\theta)(C_{lm}\cos m\varphi+D_{lm}\sin m\varphi)$$

这里对系数 A、B、C、D 又多加了一个下标，因为同一 l、不同的 m 可能对应于不同的系数 A 和 B，同一 m、不同的 l 可能对应于不同的系数 C 和 D。

（2）如果求解区域不包括原点但包括无穷远，则

$$f(r,\theta,\varphi)=\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{l}r^{-l-1}P_l^m(\cos\theta)(C_{lm}\cos m\varphi+D_{lm}\sin m\varphi)$$

（3）如果求解区域不包括无穷远但包括原点，则

$$f(r,\theta,\varphi)=\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{l}r^lP_l^m(\cos\theta)(C_{lm}\cos m\varphi+D_{lm}\sin m\varphi)$$

一般而言，求解区域不会同时包括原点和无穷远，否则那将是一个在全空间无源的场；整个空间里什么也没有，那么场的分布自然只能恒为 0。一般来说，具体的物理问题中总是在空间某些位置有源，这些源把三维空间分成若干个区域。例如，一个球壳上有电荷，那么这些电荷就把球内和球外分成两个区域，前者包括原点，后者包括无穷远；两个区域中的电势都满足 Laplace 方程，前者的解只包含 r^l 项，后者的解只包含 r^{-l-1} 项。

此外，在物理上还有两种处理：

（1）如果在一开始可以判断出这个体系是旋转对称的（即函数和φ无关），那么 m 不为 0 的项可以直接舍去，因为这些项与φ有关。这样得到的解为

$$f(r,\theta)=\sum_{l=0}^{\infty}(A_lr^l+B_lr^{-l-1})P_l(\cos\theta)$$

这里考虑到 $P_l^0(x)=P_l(x)$，即旋转对称体系中θ部分的函数是一个关于 $\cos\theta$ 的多项式（Legendre 多项式）。

（2）如果求解的函数是复数，那么可以把Φ写成复数形式：

$$f(r,\theta,\varphi)=\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}(A_{lm}r^l+B_{lm}r^{-l-1})P_l^m(\cos\theta)e^{\mathrm{i}m\varphi}$$

在量子力学中，函数 R 的形式可能并不是幂函数，但是θ和φ的部分往往还是关联 Legendre 函数与三角函数，而 $e^{\mathrm{i}m\varphi}$在量子力学中会比实的三角函数更方便。

注意，因为 $e^{\mathrm{i}m\varphi}$ 与 $e^{-\mathrm{i}m\varphi}$ 并非线性相关，所以此时 m 正整数和负整数不能合并，求和要从 $m=-l$ 开始。

有些时候，我们甚至会把θ和φ的部分合写成一个函数：

$$\boxed{Y_l^m(\theta,\varphi)=(-1)^m\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}P_l^m(\cos\theta)e^{\mathrm{i}m\varphi}}$$

前面复杂的系数是为了正交归一：

$$\int_0^{2\pi}\left(\int_0^{\pi}Y_{l'}^{m'*}(\theta,\varphi)Y_l^m(\theta,\varphi)\sin\theta\mathrm{d}\theta\right)\mathrm{d}\varphi=\delta_{ll'}\delta_{mm'}$$

其中*表示复共轭。这种函数叫做<u>球谐函数</u>（Spherical Harmonic Function），对于描述微观粒子的“轨道”很有意义，原子核外电子分布的对称性就和它密切相关。如果有兴趣，可以上网查找“电子云”的概念，再查找一下氢原子若干种电子云在空间中的分布，它们就代表量子力学下电子在质子周围可取的状态。

（3）三维柱坐标系

在柱坐标系下，Laplace 方程变为：

$$\nabla^2 f=\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial f}{\partial\rho}\right)+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2 f}{\partial\varphi^2}+\frac{\partial^2 f}{\partial z^2}=0$$

分离变量：

$$f(\rho,\varphi,z)=R(\rho)\Phi(\varphi)Z(z)\Rightarrow\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}(\rho R')\Phi Z+\frac{1}{\rho^2}\Phi''RZ+Z''R\Phi=0$$

$$\Rightarrow\frac{1}{R}\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}(\rho R')+\frac{1}{\Phi}\frac{1}{\rho^2}\Phi''+\frac{Z''}{Z}=0$$

$$\Rightarrow\frac{1}{R}\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}(\rho R')+\frac{1}{\Phi}\frac{1}{\rho^2}\Phi''=-\frac{Z''}{Z}\equiv\mu\Rightarrow\begin{cases}Z''+\mu Z=0\\ \dfrac{1}{R}\dfrac{1}{\rho}\dfrac{\partial}{\partial\rho}(\rho R')+\dfrac{1}{\Phi}\dfrac{1}{\rho^2}\Phi''=\mu\end{cases}$$

将ρ和φ进一步分离：

$$\frac{1}{R}\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}(\rho R')+\frac{1}{\Phi}\frac{1}{\rho^2}\Phi''=\mu\Rightarrow=-\frac{1}{\Phi}\Phi''=\gamma$$

$$\Rightarrow\begin{cases}\rho\dfrac{\partial}{\partial\rho}(\rho R')-(\mu\rho^2+\gamma)R=0\Rightarrow\rho^2R''+\rho R'-(\mu\rho^2+\gamma)R=0\\ \Phi''+\gamma\Phi=0\end{cases}$$

一共有三个常微分方程：

$$\begin{cases}\rho^2R''+\rho R'-(\mu\rho^2+\gamma)R=0\\ \Phi''+\gamma\Phi=0\\ Z''+\mu Z=0\end{cases}$$

①Φ是角度φ方向的变化规律，它还是要满足周期性边界条件。因此，与球坐标中类似，有 $\gamma=n^2$（$n=0,1,2,\ldots$），$\Phi(\varphi)=C\cos n\varphi+D\sin n\varphi$。

②Z 和 R 的具体形式，与分离变量常数μ的取值有关。

(i)若可以判断函数与 z 无关，则必然有 $Z''=0$，从而 $\mu=0$。此时第一个方程变为

$$\rho^2R''+\rho R'-n^2R=0$$

当 $n\neq 0$ 时，这个方程的解是幂函数：$R(\rho)=A_n\rho^n+B_n\rho^{-n}$；

当 $n=0$ 时，这个方程的解有所不同：$R(\rho)=A_0+B_0\ln\rho$。

从而整个函数的形式为

$$f(\rho,\varphi)=A_0+B_0\ln\rho+\sum_{n=1}^{\infty}(A_n\rho^n+B_n\rho^{-n})(C_n\cos n\varphi+D_n\sin n\varphi)$$

其中，为了满足自然条件，在无穷远处不可以有 ρ^n 项，在 z 轴上（$\rho=0$）不可以有 ρ^{-n} 项；至于 $\ln\rho$，对数函数在$\rho=0$ 和$\rho=\infty$处都发散，但是物理学家允许解中存在这一项，原因在于：能够在 z 方向平移不变的体系，一般在 z 方向都是无限长的，例如无限长直导线周围的电势和 z 无关，但是有限长直导线的电势就会和 z 有关。也就是说，当函数与 z 无关时，这个体系的源本身可能就会在 z 方向延伸到无穷远处，因此我们允许函数本身有微弱的对数发散，但更严重的幂函数发散还是不允许的。也就是说，和 z 无关函数本身就是一个理想模型，它的解必然会稍稍打破自然条件；如果体系在两个维度上都是无限大，例如无限大的平板，其电势就可以在无穷远处以距离的一次方发散，自然条件完全被打破。

以上是$\mu=0$ 的情形；如果源都分布在有限远处，一般可以确定$\mu\neq0$，此时 Z 究竟是指数函数还是三角函数，需要根据边界条件来判断。

(ii) Z 是指数函数，$\mu<0$。设 $\mu=-\kappa^2$，则 $Z(z)=E_\kappa e^{\kappa z}+F_\kappa e^{-\kappa z}$。此时，$R$ 满足的方程为

$$\rho^2R''+\rho R'+(\kappa^2\rho^2-n^2)R=0$$

令 $\kappa\rho=x$，则 $x^2\dfrac{\mathrm{d}^2R}{\mathrm{d}x^2}+x\dfrac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}x}+(x^2-n^2)R=0$，正好是 Bessel 方程。因此，$R$ 的解为

$$R(\rho)=A_nJ_n(\kappa\rho)+B_nN_n(\kappa\rho)$$

Bessel 函数和 Neumann 函数在无穷远处都趋于 0，自动满足自然条件；但是在$\rho=0$ 处 Neumann 函数将以 ρ^{-1} 的速度发散，如果求解范围包括$\rho=0$，则不能出现 Neumann 函数（即 $B_n=0$）。最终，Laplace 方程的一般解为

$$f(\rho,\varphi,z)=\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{\kappa}[A_{n\kappa}J_n(\kappa\rho)+B_{n\kappa}N_n(\kappa\rho)](C_n\cos n\varphi+D_n\sin n\varphi)(E_\kappa e^{\kappa z}+F_\kappa e^{-\kappa z})$$

特别地，如果这个体系与φ无关，则 n 必须取 0，有

$$f(\rho,z)=\sum_{\kappa}[A_\kappa J_0(\kappa\rho)+B_\kappa N_0(\kappa\rho)](E_\kappa e^{\kappa z}+F_\kappa e^{-\kappa z})$$

κ可能的取值需要通过其他条件来确定。还有一点要注意：如果求解区域包含了 z 轴的$+\infty$处，那么 $e^{\kappa z}$ 不能出现，因为它严重发散；同理，如果求解区域包含了 z 轴的$-\infty$处，那么 $e^{-\kappa z}$ 不能出现。这就是 z 方向的自然条件。

(iii) Z 是三角函数，$\mu>0$。设 $\mu=k^2$，则 $Z(z)=E_k\cos kz+F_k\sin kz$。此时，$R$ 满足的方程为

$$\rho^2R''+\rho R'-(k^2\rho^2+n^2)R=0$$

令 $k\rho=x$，则 $x^2\dfrac{\mathrm{d}^2R}{\mathrm{d}x^2}+x\dfrac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}x}-(x^2+n^2)R=0$。这个方程好像和 Bessel 方程差一个符号，但是如果允许复数的存在，我们可以这样看这个方程：

$$x^2\frac{\mathrm{d}^2R}{\mathrm{d}x^2}+x\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}x}+[(\mathrm{i}x)^2-n^2]R=0$$

令 $\mathrm{i}x=y$，则

$$y^2\frac{\mathrm{d}^2R}{\mathrm{d}y^2}+y\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}y}+(y^2-n^2)R=0\Rightarrow R=A_nJ_n(y)+B_nN_n(y)=A_nJ_n(\mathrm{i}k\rho)+B_nN_n(\mathrm{i}k\rho)$$

此时，Bessel 函数和 Neumann 函数的值为复数，这样的结果不太方便。我们定义这样两个函数：

$$\boxed{I_n(x)=e^{-\mathrm{i}n\pi/2}J_n(\mathrm{i}x),\ K_n(x)=e^{-\mathrm{i}n\pi/2}N_n(\mathrm{i}x)}$$

在数学上可以证明，乘上了 $e^{-\mathrm{i}n\pi/2}$ 之后的 $I_n(x)$与$K_n(x)$ 就是实数了。我们把它们叫做第一类、第二类虚宗量 Bessel 函数。也就是说，R 的实数解为

$$R(\rho)=A_nI_n(k\rho)+B_nK_n(k\rho)$$

从而 Laplace 的一般解为

$$f(\rho,\varphi,z)=\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{k}[A_nI_n(k\rho)+B_nK_n(k\rho)](C_n\cos n\varphi+D_n\sin n\varphi)(E_k\cos kz+F_k\sin kz)$$

特别地，如果这个体系与φ无关，则 n 必须取 0，有

$$f(\rho,z)=\sum_{k}[A_kI_0(k\rho)+B_kK_0(k\rho)](E_k\cos kz+F_k\sin kz)$$

k 可能的取值需要通过其他条件来确定。

本节看似没有什么例题，其实求解 Laplace 方程的过程就是个很大的例题。可以看到，仅仅是一个$\nabla^2 f=0$，在不同的边界条件下，最终的解可能会出现指数函数、三角函数、对数函数、幂函数、Bessel 函数、虚宗量 Bessel 函数、Legendre 函数、关联 Legendre 函数等各种各样的形式。仅仅一个偏微分方程能对体系产生的限制实在是太少，求解过程中最精彩也最重要的应当是对边界条件的发掘和使用。实际的物理问题中，边界条件往往需要由我们自己来翻译成数学语言，还有一些边界条件是物理中即使不说也默认成立的隐含条件，如周期性条件、自然条件等。所以，物理中偏微分方程的求解看似全是繁琐的数学，其实包含了很多物理的思考；从列出方程、列出边界条件，到写解、舍解，再到最后确定级数中所有未知的系数、参数，每一步都是对数学与物理综合能力的考察。随着学习的不断深入，数学的复杂度和物理的深刻度会同步提升，计算更多（当然不是过分的多），物理图像其实也更丰富和清晰。在学习数理方程的内容时，建议不要只看数学书，也不要只看物理书，而应该二者相结合，从而在计算的细节和物理的解释上都可以得到很好的消化。