勒让德多项式　球函数

路毅　　曲阜师范大学

2020 年 6 月 17 日

勒让德多项式　球函数

- 第一节：斯图姆-刘维尔理论
- 第二节：勒让德多项式
- 第三节：连带勒让德多项式
- 第四节：球函数、球形区域上的狄利克雷问题

斯图姆-刘维尔理论

2 阶常微分方程的一般形式为：区间 (a, b) 内，

$$Lu(x) = p_0(x)\frac{d^2}{dx^2}u + p_1(x)\frac{d}{dx}u + p_2 u, \tag{1}$$

$p_0(x)$ 在区间 (a, b) 内没有零点，但允许在 a, b 点为零点。
定义

$$\langle v|L|u\rangle = \int_a^b v(p_0 u'' + p_1 u' + p_2 u)dx, \tag{2}$$

自伴算子

我们想知道，什么时候有

$$\langle v|L|u\rangle - \langle u|L|v\rangle = 0, \tag{3}$$

于是我们计算

$$\begin{aligned}\int_a^b vp_0u''dx &= \int_a^b p_0vdu' = p_0vu'|_a^b - \int_a^b u'(p_0v)'dx \\ &= p_0vu'|_a^b - \int_a^b p_0'vu'dx - \int_a^b p_0v'u'dx,\end{aligned} \tag{4}$$

对称地，

$$\int_a^b up_0v''dx = p_0v'u|_a^b - \int_a^b p_0'v'udx - \int_a^b p_0v'u'dx, \tag{5}$$

自伴算子

所以有

$$\int_a^b vp_0u''dx - \int_a^b up_0v''dx = p_0(vu' - uv')|_a^b - \int_a^b p_0'(vu' - uv')dx, \quad (6)$$

另外，

$$\int_a^b p_1vu'dx - \int_a^b p_1uv'dx = \int_a^b p_1(vu' - uv')dx. \quad (7)$$

$$\int_a^b p_2vudx - \int_a^b p_2uvdx = 0. \quad (8)$$

所以有

$$\langle v|L|u\rangle - \langle u|L|v\rangle = p_0(v'u - uv')|_a^b - \int_a^b (p_0' - p_1)(v'u - uv')dx. \quad (9)$$

自伴算子

$$\langle v|L|u\rangle - \langle u|L|v\rangle = p_0(v'u - uv')|_a^b - \int_a^b (p_0' - p_1)(v'u - uv')dx. \quad (10)$$

所以，如果有

$$\begin{cases} p_0(vu' - uv')|_a^b = 0, \\ p_0' - p_1 = 0, \forall x \in (a, b). \end{cases} \quad (11)$$

则有 $\langle v|L|u\rangle = \langle u|L|v\rangle$，则称 L 为自伴算子 [1]。

[1] 自伴算子推广到复数，就是量子力学中的厄米算符。

自伴算子的本征方程

广义的本征方程：在 (a, b) 上，

$$Lu(x) + \lambda\omega(x)u(x) = 0, \tag{12}$$

其中，L 是一个自伴算子，λ 称作本征值，$\omega(x)$ 称作权重函数 (weighting function)，$u(x)$ 称作本征函数。

广义的内积

$$\langle v|u\rangle = \int_a^b v(x)\omega(x)u(x)dx. \tag{13}$$

正交则定义为

$$\langle v|u\rangle = 0. \tag{14}$$

不同本征值对应的本征函数正交

若有 (λ_i, u_i) 以及 (λ_j, u_j)，满足 $\lambda_i \neq \lambda_j$，

$$\begin{aligned} Lu_i + \lambda_i \omega u_i &= 0, & (15) \\ Lu_j + \lambda_j \omega u_j &= 0. & (16) \end{aligned}$$

则有

$$\langle u_i|L|u_j\rangle = -\lambda_i\langle u_i|u_j\rangle = \langle u_j|L|u_i\rangle = -\lambda_j\langle u_j|u_i\rangle, \tag{17}$$

所以有

$$\langle u_i|u_j\rangle = 0, \tag{18}$$

即 u_i, u_j 正交。

例：勒让德函数正交性

勒让德微分方程为：$[-1,1]$ 上，

$$(1-x^2)u'' - 2xu' + n(n+1)u = 0, -1 \leq x \leq 1. \tag{19}$$

即 $p_0(x) = 1-x^2, p_1(x) = -2x, p_2(x) = 0, \omega(x) = 1, \lambda = n(n+1)$。所以自然有，$n \neq m$ 时，勒让德函数 P_n, P_m 的正交性

$$\langle P_n | P_m \rangle = \int_{-1}^{1} P_n(x) P_m(x) dx = 0. \tag{20}$$

勒让德多项式　球函数

- 第一节：斯图姆-刘维尔理论
- 第二节：勒让德多项式
- 第三节：连带勒让德多项式
- 第四节：球函数、球形区域上的狄利克雷问题

勒让德函数

复变函数

$$G(x,z)=\frac{1}{\sqrt{1-2xz+z^2}}, \tag{21}$$

其中 $z\in C, x\in R$ 且 $|x|\le 1$。本节所有根式只取主值支，即作为单值函数考虑。若要考虑奇点，则取

$$1-2xz+z^2=(z-z_1)(z-z_2)=0, \Rightarrow z_1=x+i\sqrt{1-x^2}, z_2=x-i\sqrt{1-x^2}. \tag{22}$$

即有两个有限大的孤立奇点 z_1, z_2，$|z_1|=|z_2|=1$，所以这两个奇点都在单位圆上。在单位圆内，$G(x,z)$ 是解析的，做泰勒展开

$$G(x,z)=\sum_{n=0}^{\infty}P_n(x)z^n, \tag{23}$$

$P_n(x)$ 就叫做**勒让德函数**，$G(x,z)$ 称作**勒让德函数的母函数**。

勒让德函数

根据柯西积分公式，很容易得到

$$P_n(x) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C (1 - 2x\zeta + \zeta^2)^{-1/2} \zeta^{-(n+1)} d\zeta, \tag{24}$$

其中 C 为单位圆内包括原点的围线。

另外也可以这样计算：

$$\begin{aligned} &P_0(x) = G(x, 0) = 1, \\ &P_1(x) = \frac{\partial G}{\partial z}|_{z=0} = -\frac{1}{2}(1 - 2xz + z^2)^{-3/2}(2z - 2x)|_{z=0} = x, \\ &\cdots \end{aligned} \tag{25}$$

长相

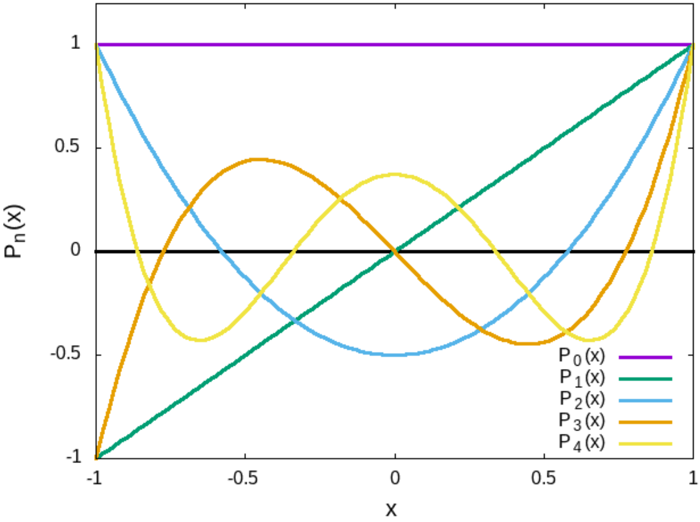

Figure: 勒让德函数 $P_n(x)$。

看图说话

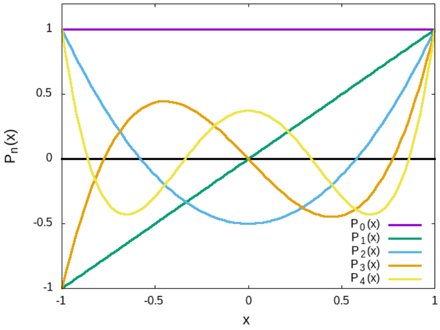

Figure: 勒让德函数 $P_n(x)$。

仅归纳 $P_0(x) \sim P_4(x)$，勒让德函数似乎有如下特点：

1 函数值在 $[-1, 1]$ 之间。

2 P_0, P_2, P_4 为偶函数，P_1, P_3 为奇函数。

3 $P_n(x)$ 与 x 轴有 n 个交点，都在 $(-1, 1)$ 之间。

求取勒让德函数：递推公式

从母函数出发

$$G(x,z)=\frac{1}{\sqrt{1-2xz+z^2}}=\sum_{n=0}^{\infty}P_n(x)z^n, \tag{26}$$

等式两侧求偏导数得到

$$\frac{\partial G}{\partial x}=z(1-2xz+z^2)^{-3/2} = \sum_{n=0}^{\infty}P_n'(x)z^n, \tag{27}$$

$$\frac{\partial G}{\partial z}=(x-z)(1-2xz+z^2)^{-3/2} = \sum_{n=0}^{\infty}P_n(x)nz^{n-1}. \tag{28}$$

比较上面两式，可以得到

$$(x-z)\sum_{n=0}^{\infty}P_n'(x)z^n=z\sum_{n=0}^{\infty}P_n(x)nz^{n-1}. \tag{29}$$

递推公式

两边取 z^n 项系数，得到

$$xP_n'(x) - P_{n-1}'(x) = nP_n(x). \tag{30}$$

另外，由 (28)，有

$$(x-z)\sum_{n=0}^{\infty} P_n(x)z^n = (1-2xz+z^2)\sum_{n=0}^{\infty} P_n(x)nz^{n-1}, \tag{31}$$

取 z^n 项系数，即

$$xP_n(x) - P_{n-1}(x) = (n+1)P_{n+1}(x) - 2nxP_n(x) + (n-1)P_{n-1}(x), \tag{32}$$

即

$$(n+1)P_{n+1}(x) - (2n+1)xP_n(x) + nP_{n-1}(x) = 0. \tag{33}$$

前面我们已经推得了 $P_0(x)=1, P_1(x)=x$，结合上面的递推式，我们可以看出，$P_n(x)$ 就是一个 n **阶的多项式**。

勒让德多项式

$$(n+1)P_{n+1}(x)-(2n+1)xP_n(x)+nP_{n-1}(x)=0. \tag{34}$$

$P_0(x)=1, P_1(x)=x$，所以可以推得

$$P_0(x) = 1, \tag{35}$$
$$P_1(x) = x, \tag{36}$$
$$P_2(x) = \frac{3}{2}x^2-\frac{1}{2}, \tag{37}$$
$$P_3(x) = \frac{5}{2}x^3-\frac{3}{2}x, \tag{38}$$
$$P_4(x) = \frac{35}{8}x^4-\frac{15}{4}x^2+\frac{3}{8}. \tag{39}$$
$$\vdots$$

递推式

很容易由 (30,33) 得到另外两个递推式。对 (33) 求导数，得到

$$(n+1)P'_{n+1}(x)-(2n+1)P_n(x)-(2n+1)xP'_n(x)+nP'_{n-1}(x)=0, \quad (40)$$

而 (30) 乘以 n，有

$$nxP'_n(x)-nP'_{n-1}(x)=n^2P_n(x), \quad (41)$$

上面两式相加，得到

$$(n+1)P'_{n+1}-(n+1)xP'_n=(n+1)^2P_n, \quad (42)$$

即

$$P'_{n+1}(x)-xP'_n(x)=(n+1)P_n(x). \quad (43)$$

(30,43) 相加，得到

$$P'_{n+1}(x)-P'_{n-1}(x)=(2n+1)P_n(x). \quad (44)$$

递推式总结

1. $xP_n'(x) - P_{n-1}'(x) = nP_n(x)$
2. $(n+1)P_{n+1}(x) - (2n+1)xP_n(x) + nP_{n-1}(x) = 0$
3. $P_{n+1}'(x) - xP_n'(x) = (n+1)P_n(x)$
4. $P_{n+1}'(x) - P_{n-1}'(x) = (2n+1)P_n(x)$

勒让德方程的导出

递推式 1 与 3 如下，

$$
\begin{aligned}
xP_n'(x) - P_{n-1}'(x) &= nP_n(x), \\
P_{n+1}'(x) - xP_n'(x) &= (n+1)P_n(x).
\end{aligned}
$$

第一个式子乘以 x，第二个式子做 $n+1 \to n$，得到

$$
\begin{aligned}
x^2P_n'(x) - xP_{n-1}'(x) &= nxP_n(x), \\
P_n'(x) - xP_{n-1}'(x) &= nP_{n-1}(x).
\end{aligned}
$$

上两式相减，得到

$$(1-x^2)P_n' = nP_{n-1} - nxP_n, \tag{45}$$

勒让德方程

$$(1-x^2)P_n' = nP_{n-1} - nxP_n, \tag{46}$$

再求导数，得到

$$\begin{aligned}(1-x^2)P_n'' - 2xP_n' &= nP_{n-1}' - nP_n - nxP_n' \\ &= -nP_n - n(xP_n' - P_{n-1}') \\ &= -nP_n - n^2P_n = -n(n+1)P_n, \end{aligned} \tag{47}$$

上面的推导使用了递推式 1，

$$(1-x^2)P_n'' - 2xP_n' + n(n+1)P_n = 0. \tag{48}$$

换一句话说，P_n 是以下微分方程的解

$$(1-x^2)y'' - 2xy' + n(n+1)y = 0. \tag{49}$$

这就是勒让德方程。

勒让德函数的正交性与归一性

勒让德微分方程为：$[-1,1]$ 上，

$$(1-x^2)u''-2xu'+n(n+1)u=0,-1\leq x\leq 1. \tag{50}$$

即 $p_0(x)=1-x^2, p_1(x)=-2x, p_2(x)=0, \omega(x)=1, \lambda=n(n+1)$。所以自然有，$n\neq m$ 时，勒让德函数 P_n, P_m 的正交性

$$\int_{-1}^{1} P_n(x)P_m(x)dx=0. \tag{51}$$

下面我们论证归一性，或者说，勒让德函数的模方，即

$$\int_{-1}^{1} P_n^2 dx=\frac{2}{2n+1}, \tag{52}$$

归一性

证明：根据 (33) 式，以及正交性，有

$$\begin{aligned}\int_{-1}^{1} P_{n+1}^2 dx &= \frac{1}{n+1}\int_{-1}^{1}(2n+1)xP_nP_{n+1}dx \\ &= \frac{2n+1}{n+1}\int_{-1}^{1} xP_nP_{n+1}dx \\ &= \frac{2n+1}{n+1}\int_{-1}^{1} P_n\frac{(n+2)P_{n+2}+(n+1)P_n}{2n+3}dx \\ &= \frac{2n+1}{2n+3}\int_{-1}^{1} P_n^2 dx, \end{aligned} \tag{53}$$

由于 $\int_{-1}^{1} P_0^2 dx = 2$，所以易得

$$\int_{-1}^{1} P_n^2 dx = \frac{2n-1}{2n+1}\cdots\frac{1}{3}2 = \frac{2}{2n+1}. \tag{54}$$

正交归一性

综合正交性、归一性，得到

$$\int_{-1}^{1} P_n(x) P_m(x) dx = \frac{2\delta_{nm}}{2n+1}. \tag{55}$$

完备性

我们不加证明地给出完备性定理：若任意函数 $f(x)$ 在区间 $[-1,1]$ 上有连续的一阶导数、分段连续的二阶导数，则 $f(x)$ 可以用 $P_n(x)$ 做线性展开，

$$f(x)=\sum_{n=0}^{\infty} c_n P_n(x), \tag{56}$$

右侧的级数形式一致收敛至 $f(x)$。根据正交归一性，很容易写出

$$c_n=\frac{2n+1}{2}\int_{-1}^{1} f(x)P_n(x)dx, \quad n=0,1,2,\cdots \tag{57}$$

[2]

[2]思考：

1 这个展开形式与傅里叶级数展开是多么的一致！像 $\{\cos nx,\sin nx\}$、$\{P_n(x)\}$ 这样的函数族，一定存在无穷多组，而任意“守规矩”的 $f(x)$ 都可以用任意一族函数做线性展开！就像三维空间的 3 个基矢有无穷多种选取方式，函数空间的“基矢”选取也有无穷多种！

2 傅里叶级数通过形式变换 + 取极限，可以变为傅里叶积分，甚至傅里叶变换，勒让德函数展开，是否也能做类似的变形？

多项式形式

我们可以将母函数 $G(x,z)=(1-2xz+z^2)^{-1/2}$ 进行级数展开，得到勒让德函数的多项式形式。

$$G(x,z)=(1-2xz+z^2)^{-1/2}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(2n)!}{2^{2n}(n!)^2}(2xz-z^2)^n, \tag{58}$$

这里使用了泰勒展开 $(1-t)^{-1/2}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(2n)!}{2^{2n}(n!)^2}t^{-1/2-n}$，上式进一步推导，得到

$$G(x,z)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(2n)!}{2^{2n}(n!)^2}z^n\sum_{k=0}^{n}\frac{n!}{k!(n-k)!}(2x)^{n-k}(-z)^k, \tag{59}$$

再做代换 $n+k=m$，得到

$$G(x,z)=\sum_{m=0}^{\infty}z^m\sum_{k=0}^{[m/2]}\frac{(-1)^k(2m-2k)!}{2^m k!(m-k)!(m-2k)!}x^{m-2k}. \tag{60}$$

多项式形式

所以总结下来，勒让德多项式为

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^{[n/2]} \frac{(-1)^k (2n-2k)!}{2^n k!(n-k)!(n-2k)!} x^{n-2k}. \tag{61}$$

罗德里格斯公式 (Rodrigues' Formula)

因为 $\frac{(2n-2k)!}{(n-2k)!}x^{n-2k} = \frac{d^n}{dx^n}x^{2n-2k}$，所以

$$\begin{aligned} P_n(x) &= \sum_{k=0}^{[n/2]} \frac{(-1)^k(2n-2k)!}{2^n k!(n-k)!(n-2k)!} x^{n-2k} \\ &= \sum_{k=0}^{[n/2]} \frac{(-1)^k}{2^n k!(n-k)!} \frac{d^n}{dx^n} x^{2n-2k} \end{aligned} \tag{62}$$

将求导数符号提前，得到

$$\begin{aligned} P_n(x) &= \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} \sum_{k=0}^{[n/2]} \frac{(-1)^k n!}{k!(n-k)!} x^{2n-2k} \\ &= \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2-1)^n \end{aligned} \tag{63}$$

最后一行就是罗德里格斯公式。

施拉夫利积分形式 (Schlaefli Integral)

罗德里格斯公式提供了便利，可以推导勒让德函数的围线积分形式。根据柯西积分公式

$$f^{(n)}(z) = \frac{n!}{2\pi i} \oint_C \frac{f(\zeta)}{(\zeta - z)^{n+1}} d\zeta, \tag{64}$$

若取 $f(z) = (z^2 - 1)^n$，则有

$$\frac{d^n}{dz^n}(z^2 - 1)^n = \frac{n!}{2\pi i} \oint_C \frac{(\zeta^2 - 1)^n}{(\zeta - z)^{n+1}} d\zeta, \tag{65}$$

所以有

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n}(x^2 - 1)^n = \frac{2^{-n}}{2\pi i} \oint_C \frac{(\zeta^2 - 1)^n}{(\zeta - x)^{n+1}} d\zeta. \tag{66}$$

勒让德多项式　球函数

- 第一节：斯图姆-刘维尔理论
- 第二节：勒让德多项式
- 第三节：连带勒让德多项式
- 第四节：球函数、球形区域上的狄利克雷问题

连带勒让德方程

前面说明了，$P_n(x)$ 满足

$$(1-x^2)P_n'' - 2xP_n' + n(n+1)P_n = 0, \tag{67}$$

对整个方程求一次导数，得到

$$(1-x^2)P''' - 2\cdot 2xP_n'' + [n(n+1)-2]P_n' = 0, \tag{68}$$

再次求导，得到

$$(1-x^2)P_n^{(2+2)} - 2(2+1)xP_n^{(2+1)} + [n(n+1)-2(2+1)]P_n^{(2)} = 0, \tag{69}$$

求 m 次导数，得到

$$(1-x^2)P_n^{(m+2)} - 2(m+1)xP_n^{(m+1)} + [n(n+1)-m(m+1)]P_n^{(m)} = 0, \tag{70}$$

即 $y = P_n^{(m)}(x)$ 满足常微分方程

$$(1-x^2)y'' - 2(m+1)xy' + [n(n+1)-m(m+1)]y = 0. \tag{71}$$

连带勒让德方程

如果定义 $z=(1-x^2)^{m/2}y=(1-x^2)^{m/2}P_n^{(m)}(x)$，则有
$y=(1-x^2)^{-m/2}z$,

$$\begin{aligned} y' &= mx(1-x^2)^{-m/2-1}z+(1-x^2)^{-m/2}z', \\ y'' &= (1-x^2)^{-m/2}z''+2mx(1-x^2)^{-m/2-1}z' \\ &\quad +m(1-x^2)^{-m/2-2}z((m+2)x^2+1-x^2) \end{aligned} \tag{72}$$

得到

$$\begin{aligned} (1-x^2)y'' &= (1-x)^{-m/2+1}z''+2mx(1-x^2)^{-m/2}z' \\ &\quad +m(1-x^2)^{-m/2-1}z(1+(m+1)x^2), \\ -2(m+1)xy' &= -2m(m+1)x^2(1-x^2)^{-m/2-1}z \\ &\quad -2(m+1)x(1-x^2)^{-m/2}z', \\ [n(n+1)-m(m+1)]\,y &= [n(n+1)-m(m+1)](1-x^2)^{-m/2}z. \end{aligned}$$

代入 $(1-x^2)y-2(m+1)xy'+[n(n+1)-m(m+1)]y=0$,

连带勒让德方程

整理以后得到

$$(1-x^2)z''-2xz'+[n(n+1)-\frac{m^2}{1-x^2}]z=0. \tag{73}$$

这就是连带勒让德方程，定义连带勒让德多项式

$$P_n^m(x)=(1-x^2)^{m/2}P_n^{(m)}(x). \tag{74}$$

$m=0$ 时退化为勒让德函数

$$P_n^0(x)=P_n(x). \tag{75}$$

连带勒让德函数的正交性

连带勒让德微分方程为：$[-1,1]$ 上，

$$(1-x^2)u'' - 2xu' + [n(n+1) - \frac{m^2}{1-x^2}]u = 0, -1 \le x \le 1. \tag{76}$$

即 $p_0(x) = 1 - x^2, p_1(x) = -2x, p_2(x) = -\frac{m^2}{1-x^2}, \omega(x) = 1, \lambda = n(n+1)$。所以自然有，$n \neq m$ 时，连带勒让德函数 P_n^m 的正交性：$k \neq n$ 时，

$$\int_{-1}^{1} P_k^m(x) P_n^m(x) dx = 0. \tag{77}$$

连带勒让德函数的模方

下面我们求勒让德函数的模方，即 $\int_{-1}^{1}[P_n^m(x)]^2dx$，有多种方法求这个值，这里我们使用教材上的思路

$$\begin{aligned}\int_{-1}^{1}[P_n^m(x)]^2dx &= \int_{-1}^{1}(1-x^2)^m[P_n^{(m)}]^2dx \\ &= \int_{-1}^{1}(1-x^2)^m P_n^{(m)}\frac{d}{dx}P_n^{(m-1)}dx \\ &= -\int_{-1}^{1}P_n^{(m-1)}\frac{d}{dx}[(1-x^2)^m P_n^{(m)}]dx. \end{aligned} \tag{78}$$

在 (70) 中，用 m-1 代替 m，得到

$$(1-x^2)P_n^{(m+1)} - 2mxP_n^{(m)} + [n(n+1)-(m-1)m]P_n^{(m-1)} = 0, \tag{79}$$

两边同乘 $(1-x^2)^{m-1}$，得到

$$\begin{aligned}&(1-x^2)^m P_n^{(m+1)} - 2mx(1-x^2)^{m-1}P_n^{(m)} \\ &+[n(n+1)-(m-1)m](1-x^2)^{m-1}P_n^{(m-1)} = 0,\end{aligned} \tag{80}$$

连带勒让德函数的模方

前两项正是

$$\frac{d}{dx}[(1-x^2)^m P_n^{(m)}], \tag{81}$$

即

$$\frac{d}{dx}[(1-x^2)^m P_n^{(m)}] = -(n+m)(n-m+1)(1-x^2)^{m-1} P_n^{(m-1)}, \tag{82}$$

所以有

$$\begin{aligned} \int_{-1}^{1} [P_n^m(x)]^2 dx &= -\int_{-1}^{1} P_n^{(m-1)} \frac{d}{dx}[(1-x^2)^m P_n^{(m)}] dx \\ &= (n+m)(n-m+1) \int_{-1}^{1} [P_n^{m-1}(x)]^2 dx. \end{aligned} \tag{83}$$

连带勒让德函数正交归一性

根据上面的递推式，得到

$$
\begin{aligned}
& \int_{-1}^{1} [P_n^m(x)]^2 dx \\
= \quad & (n+m)(n+m-1)\cdots(n+1)(n-m+1)(n-m)\cdots n \\
& \times \int_{-1}^{1} [P_n(x)]^2 dx \\
= \quad & \frac{(n+m)!}{(n-m)!} \frac{2}{2n+1}.
\end{aligned} \tag{84}
$$

总结正交性、归一性，得到

$$
\int_{-1}^{1} P_n^m(x) P_k^m(x) dx = \frac{(n+m)!}{(n-m)!} \frac{2\delta_{kn}}{2n+1} \tag{85}
$$

勒让德多项式　球函数

- 第一节：斯图姆-刘维尔理论
- 第二节：勒让德多项式
- 第三节：连带勒让德多项式
- 第四节：球函数、球形区域上的狄利克雷问题

球函数的导出

在静电场问题、热稳态温度分布、量子力学问题中，都会出现拉普拉斯算子

$$\Delta = \nabla^2, \tag{86}$$

其中 $\vec{\nabla} = \vec{e}_x\partial_x + \vec{e}_y\partial_y + \vec{e}_z\partial_z$ 是梯度算符。在球坐标系下，梯度算符可写作

$$\vec{\nabla} = \vec{e}_r\partial_r + \vec{e}_\theta\frac{1}{r}\partial_\theta + \vec{e}_\phi\frac{1}{r\sin\theta}\partial_\phi, \tag{87}$$

三个基矢 $\vec{e}_r, \vec{e}_\theta, \vec{e}_\phi$ 对 r, θ, ϕ 的偏导数为

$$\begin{aligned}
\partial_r\vec{e}_r &= 0, & \partial_r\vec{e}_\theta &= 0, & \partial_r\vec{e}_\phi &= 0,\\
\partial_\theta\vec{e}_r &= \vec{e}_\theta, & \partial_\theta\vec{e}_\theta &= -\vec{e}_r, & \partial_\theta\vec{e}_\phi &= 0,\\
\partial_\phi\vec{e}_r &= \sin\theta\vec{e}_\phi, & \partial_\phi\vec{e}_\theta &= \cos\theta\vec{e}_\phi, & \partial_\phi\vec{e}_\phi &= -(\vec{e}_r - \cos\theta\vec{e}_z)
\end{aligned} \tag{88}$$

利用这些偏导数，可以计算得到

$$\nabla^2 = \vec{\nabla}\cdot\vec{\nabla} = \partial_r^2 + \frac{2}{r}\partial_r + \frac{1}{r^2}\partial_\theta^2 + \frac{1}{r^2}\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\partial_\theta + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\partial_\phi^2. \tag{89}$$

球函数的导出

球坐标下的拉普拉斯方程为

$$\nabla^2 u = 0, \tag{90}$$

将 ∇^2 在球坐标下的表达式代入，并做分离变量法 $u = R(r)Y(\theta,\phi)$，得到

$$\frac{r^2}{R}\left(\frac{d^2}{dr^2}R + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr}\right) = -\frac{1}{Y}\left(\partial_\theta^2 Y + \cot\partial_\theta Y + \frac{1}{\sin^2\theta}\partial_\phi^2 Y\right) = \lambda, \tag{91}$$

即分离出两个微分方程

$$r^2\frac{d^2}{dr^2}R + 2r\frac{dR}{dr} - \lambda R = 0, \tag{92}$$

$$\partial_\theta^2 Y + \cot\theta\partial_\theta Y + \frac{1}{\sin^2\theta}\partial_\phi^2 Y + \lambda Y = 0. \tag{93}$$

此处的 $Y(\theta,\phi)$ 即定义为球函数。

球函数

进一步分解球函数，记 $Y(\theta,\phi)=\Theta(\theta)\Phi(\phi)$，带入球函数的微分方程，得到

$$\frac{\sin^2\theta}{\Theta}\left(\frac{d^2}{d\theta^2}\Theta+\cot\theta\frac{d}{d\theta}\Theta\right)+\frac{1}{\Phi}\frac{d^2}{d\phi^2}\Phi+\lambda\sin^2\theta=0. \tag{94}$$

若取 $x=\cos\theta,\theta\in[0,\pi]$，则有

$$\frac{d}{d\theta} = \frac{dx}{d\theta}\frac{d}{dx}=-\sin\theta\frac{d}{dx}=-\sqrt{1-x^2}\frac{d}{dx}, \tag{95}$$

$$\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta} = -\cos\theta\frac{d}{dx}=-x\frac{d}{dx}, \tag{96}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{d\theta^2} &= -\sin\theta\frac{d}{dx}\left(-\sin\theta\frac{d}{dx}\right)=-\sqrt{1-x^2}\frac{d}{dx}\left(-\sqrt{1-x^2}\frac{d}{dx}\right) \\ &= \sqrt{1-x^2}\left(\sqrt{1-x^2}\frac{d^2}{dx^2}-\frac{x}{\sqrt{1-x^2}}\frac{d}{dx}\right)=(1-x^2)\frac{d^2}{dx^2}-x\frac{d}{dx}.\end{aligned} \tag{97}$$

球函数

所以 Θ 满足的方程为

$$(1-x^2)^2\frac{d^2}{dx^2}\Theta-(1-x^2)2x\frac{d}{dx}\Theta+\lambda(1-x^2)\Theta=m^2\Theta, \tag{98}$$

两边同除 $(1-x^2)$，得到

$$(1-x^2)\frac{d^2}{dx^2}\Theta-2x\frac{d}{dx}\Theta+(\lambda-\frac{m^2}{1-x^2})\Theta=0. \tag{99}$$

这正是连带勒让德方程。总结下来，$u(r,\theta,\phi)=R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$，其中 R,Θ,Φ 分别满足

$$r^2\frac{d^2R}{dr^2}+2r\frac{dR}{dr}-\lambda R=0, \tag{100}$$

$$(1-x^2)\frac{d^2}{dx^2}\Theta-2x\frac{d}{dx}\Theta+(\lambda-\frac{m^2}{1-x^2})\Theta=0, x=\cos\theta, \tag{101}$$

$$\frac{d^2}{d\phi^2}\Phi=-m^2\Phi, \tag{102}$$

球函数

相应的 R, Θ, Φ 的解为

$$R_n(r) = r^n, n = 0, 1, 2, \cdots \tag{103}$$

$$\Phi_m(\phi) = \alpha_m \cos m\phi + \beta_m \sin m\phi, m = 0, 1, 2, \cdots \tag{104}$$

$$\Theta_n^m(\theta) = \gamma_n P_n^m(\cos\theta), \quad m, n = 0, 1, 2, \cdots, m \leq n. \tag{105}$$

所以每个 n, m 对应的 $u(r, \theta, \phi)$ 特解为

$$u_n^m(r, \theta, \phi) = R_n \Phi_m \Theta_n^m = r^n(a_n^m \cos m\phi + b_n^m \sin m\phi) P_n^m(\cos\theta), \tag{106}$$

其中 $a_n^m = \gamma_n \alpha_m, b_n^m = \gamma_n \beta_m$ 都是任意常数。通解为

$$u(r, \theta, \phi) = \sum_{0 \leq m \leq n \leq \infty} u_n^m(r, \theta, \phi). \tag{107}$$

球函数

若有边界条件

$$u(r=l,\theta,\phi)=f(\theta,\phi), \tag{108}$$

则将通解带入，得到

$$f(\theta,\phi)=\sum_{n=0}^{\infty} l^n[\sum_{m=0}^{n}(a_n^m\cos m\phi+b_n^m\sin m\phi)P_n^m(\cos\theta)]. \tag{109}$$

因为 $1,\cos\phi,\cos 2\phi,\cdots,\sin\phi,\sin 2\phi,\cdots$ 在 $[0,2\pi]$ 是构成正交函数系，$P_m^m, P_{m+1}^m,\cdots$ 在 $[-1,1]$ 上构成正交函数系，所以可以得到

$$a_n^0 = \frac{2n+1}{4\pi l^n}\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} f(\theta,\phi)P_n(\cos\theta)\sin\theta d\theta d\phi, \tag{110}$$

$$a_n^m = \frac{(2n+1)(n-m)!}{2\pi l^n(n+m)!}\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} f(\theta,\phi)P_n^m(\cos\theta)\cos m\phi\sin\theta d\theta d\phi, \tag{111}$$

$$b_n^m = \frac{(2n+1)(n-m)!}{2\pi l^n(n+m)!}\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} f(\theta,\phi)P_n^m(\cos\theta)\sin m\phi\sin\theta d\theta d\phi. \tag{112}$$

课后作业

课后习题 3, 4, 5, 6, 10