Гапеев Д.А.
РК6-51Б

Задача 3.9 по вычислительной математике

Ортогональные системы функций весьма широко используются в прикладной математике. Например, частью решения уравнения Шрёдингера для атома с одним электроном являются так называемые многочлены Лаггера $L_k(x)$, где k обозначает степень многочлена, которые задаются следующей рекурсивной формулой:

$$L_{k+1} = \frac{1}{k+1}[(2k+1-x)L_k(x) - kL_{k-1}(x)], \tag{1}$$

где $L_0(x) = 1$ и $L_1(x) = 1 - x$. Многочлены Лагерра составляют систему функций, ортогональных на интервале $[0; \infty)$ с весом $\omega(x) = e^{-x}$. Требуется продемонстрировать, что это верно для первых трёх многочленов $L_0(x), L_1(x)$ и $L_2(x)$.

Решение:

Используя формулу (1), найдем $L_2(x)$:

$$L_2 = \frac{1}{2}[(3-x)(1-x) - 1] = \frac{1}{2}(x^2 - 4x + 2)$$

Определение. Множество функций $\{\phi_1, ..., \phi_n\}$ называется ортогональной системой функций с весом $\omega(x)$ на интервале $[a, b]$, если:

$$< \phi_i(x), \phi_j(x) >_\omega = \int\limits_a^b \omega(x)\phi_i(x)\phi_j(x)\mathrm{d}x = \alpha_i\delta_{ij}, \tag{2}$$

где, $\alpha_i > 0$. Если $< \phi_i(x), \phi_j(x) >_\omega = \delta_{ij}$, то система называется ортонормированной.

Найдем скалярные произведения многочленов. Если $i \neq j$, то:

$$\begin{gathered}\int\limits_0^\infty L_0(x)L_1(x)\omega(x)\mathrm{d}x = \int\limits_0^\infty (1(1-x)e^{-x})\mathrm{d}x = (x-1)e^{-x} + \int\limits_0^\infty -e^{-x}\mathrm{d}x = \\ = xe^{-x}\Big|_0^\infty = 0\end{gathered} \tag{3}$$

$$\int_0^\infty L_1(x)L_2(x)\omega(x)\mathrm{d}x = \int_0^\infty ((1-x)\frac{1}{2}(x^2-4x+2)e^{-x})\mathrm{d}x =$$
$$= \frac{1}{2}(x^3-5x^2+6x-2)e^{-x} + \frac{1}{2}\int_0^\infty (-3x^2+10x-6)e^{-x}\mathrm{d}x =$$
$$= \frac{1}{2}((x^3-5x^2+6x-2)e^{-x} + (3x^2-10x+6)e^{-x}) + \frac{1}{2}\int_0^\infty (-6x+10)e^{-x}\mathrm{d}x =$$
$$= \frac{1}{2}e^{-x}(x^3-2x^2-4x+4) + \frac{1}{2}e^{-x}(6x-10) + \frac{1}{2}\int_0^\infty 6e^{-x}\mathrm{d}x =$$
$$= (\frac{1}{2}e^{-x}(x^3-2x^2+2x-6) + \frac{1}{2}e^{-x}6)\Big|_0^\infty =$$
$$= (\frac{1}{2}e^{-x}(x^3-2x^2+2x))\Big|_0^\infty = 0 \tag{4}$$

$$\int_0^\infty L_0(x)L_2(x)\omega(x)\mathrm{d}x = \int_0^\infty (1 * \frac{1}{2}(x^2-4x+2)e^{-x})\mathrm{d}x =$$
$$= \frac{1}{2}((-x^2+4x-2)e^{-x} - \int_0^\infty (4-2x)e^{-x}\mathrm{d}x) = \tag{5}$$
$$= \frac{1}{2}((-x^2+4x-2)e^{-x} - (2x-4)e^{-x} + \int_0^\infty 2e^{-x}\mathrm{d}x) =$$
$$= \frac{1}{2}((-x^2+2x+2)e^{-x} - 2e^{-x})\Big|_0^\infty = \frac{1}{2}(-x^2+2x)e^{-x}\Big|_0^\infty = 0$$

Если $i = j$, то :

$$\int_0^\infty L_0(x)L_0(x)\omega(x)\mathrm{d}x = \int_0^\infty (1 * 1 * e^{-x})\mathrm{d}x = -e^{-x}\Big|_0^\infty = 1 \tag{6}$$

$$
\begin{gathered}
\int\limits_0^\infty L_1(x)L_1(x)\omega(x)\mathrm{d}x = \int\limits_0^\infty((1-x)^2e^{-x})\mathrm{d}x = \\
= (-x^2+2x-1)e^{-x} + \int\limits_0^\infty((2x-2)e^{-x})\mathrm{d}x = \\
= (-x^2+2x-1)e^{-x} - 2(x-1)e^{-x} + 2\int\limits_0^\infty e^{-x}\mathrm{d}x = \\
= ((-x^2+1)e^{-x} - 2e^{-x})\Big|_0^\infty = (-(x^2+1)e^{-x})\Big|_0^\infty = 1
\end{gathered} \tag{7}
$$

$$
\begin{gathered}
\int\limits_0^\infty L_2(x)L_2(x)\omega(x)\mathrm{d}x = \int\limits_0^\infty(\frac{1}{4}(x^2-4x+2)^2e^{-x})\mathrm{d}x = \\
= \frac{1}{4}(-(x^2-4x+2)^2e^{-x} - \int\limits_0^\infty(-4x^3+24x^2-40x+16)e^{-x}\mathrm{d}x) = \\
= \frac{1}{4}(-(x^2+4x-2)^2e^{-x} + (-4x^3+24x^2-40x+16)e^{-x} - \\
4\int\limits_0^\infty(-3x^2+12x-10)e^{-x}\mathrm{d}x) = \frac{1}{4}((-x^4+4x^3+4x^2-24x-12)e^{-x} - \\
4(3\mathrm{x}^2-12x+10)e^{-x} - 4\int\limits_0^\infty(12-6x)e^{-x}\mathrm{d}x) = \\
= \frac{1}{4}((-x^4+4x^3-8x^2+24x-28)e^{-x} - 24(x-1)e^{-x})\Big|_0^\infty = \\
= \frac{1}{4}((-x^4+4x^3-8x^2-4)e^{-x})\Big|_0^\infty = 1
\end{gathered} \tag{8}
$$

Значит равенство для скалярного произведения выглядит следующим образом:

$$
< L_i(x), L_j(x) >_\omega = 1 * \delta_{ij} \tag{9}
$$

Равенство (9) подтверждает, что первые три многочлена Лаггера составляют систему функций, ортогональных на интервале $[0;\infty]$ с весом $\omega(x) = e^{-x}$. Более того, так как $\alpha_i = 1$, то система ортонормальная.