# Ćwiczenia 5
# Przegląd wielomianów ortogonalnych

Analiza IV

20 marca

*Though this be madness, yet there is method in 't.*

## 1 Rozwiązania

### Zadanie 1

(i) Punkt $x = 0$ jest punktem nieosobliwym tego równania, więc możemy radośnie rozwinąć funkcję $u$ w szereg:

$$u(x) = \sum_n a_n x^n. \tag{1}$$

Podstawiając to do równania Hermite'a otrzymujemy:

$$\sum_{n=0} a_n n(n-1)x^{n-2} - \sum_{n=0} 2a_n n x^n + \sum_{n=0} 2\lambda a_n x^n = 0. \tag{2}$$

Przesuwając zmienną sumowania w pierwszej sumie dostajemy zależność rekurencyjną

$$a_{n+2} = a_n \frac{2(n-\lambda)}{(n+2)(n+1)}. \tag{3}$$

(ii) Gdy $n \to \infty$, nasza rekurencja zachowuje się jak:

$$a_{n+2} = a_n \left(\frac{2}{n} + O(n^2)\right), \tag{4}$$

a zatem (dla dużych $N$) [1]

$$a_{2N} \sim a_0 \frac{2^N}{(2N)!!} = a_0 \frac{1}{N!}, \tag{5}$$

czyli dla dużych $x$ (bo dla nich duże $n$ są decydujące)

$$u(x) \sim a_0 \sum_{n=0} \frac{x^{2n}}{n!} = a_0 e^{x^2}. \tag{6}$$

a zatem funkcja falowa $\psi \sim a_0 e^{\frac{x^2}{2}}$ nie jest całkowalna z kwadratem. Aby temu zaradzić nasz szereg musiał się w pewnym momencie urwać. Wtedy $u$ jest wielomianem, a funkcja falowa zanika bardzo szybko w nieskończoności, więc jest całkowalna z kwadratem. Warunek to urwanie się szeregu to $\lambda = n$. Wówczas $u$ jest wielomianem $n$-tego stopnia o takiej samej parzystości jak $n$.

[1] Ograniczamy się dla prostoty do przypadku parzystego. Analogiczny przypadek nieparzysty pozostawiamy Czytelnikowi_czce. Ze struktury naszego równania wynika, że parzysta i nieparzysta część ńie mieszają się ze sobą".

(iii) Zauważmy, że

$$0 = \int_{\mathbb{R}} dx e^{-x^2} u_{\lambda'} \left(\partial_{xx}^2 - 2x\partial_x + 2\lambda\right) u_\lambda \tag{7}$$

Całkując dwa razy przez części możemy "przerzucićóperator z nawiasu na $u_{\lambda'}$:

$$0 = \int_{\mathbb{R}} dx e^{-x^2} \left(\partial_{xx}^2 - 2x\partial_x + 2\lambda\right) u_{\lambda'} u_\lambda = 2(\lambda - \lambda') \int_{\mathbb{R}} dx e^{-x^2} u_{\lambda'} u_\lambda, \tag{8}$$

gdzie w drugiej równości wykorzystaliśmy równanie Hermite'a. A zatem, jeżeli $\lambda \neq \lambda'$, to

$$0 = \int_{\mathbb{R}} dx e^{-x^2} u_{\lambda'} u_\lambda. \tag{9}$$

**Zadanie 2**

(i) $0$ jest punktem regularnym równania Legendre'a, a zatem rozwińmy $u$ w szereg wokół tegoż punktu

$$u(x) = \sum_{n=0} a_n x^n. \tag{10}$$

Wstawiając to do naszego równania otrzymujemy

$$\left(1 - x^2\right) \sum_{n=0} n(n-1) a_n x^{n-2} - 2x \sum_{n=0} n a_n x^{n-1} + l(l+1) \sum_{n=0} a_n x^n = 0. \tag{11}$$

Grupując wyrazy i zmieniając indeksowanie otrzymujemy

$$\sum_{n=0} (n+2)(n+1) a_{n+2} x^n = \sum_{n=0} \left[n(n+1) - l(l+1)\right] a_n x^n, \tag{12}$$

skąd otrzymujemy prostą relację rekurencyjną

$$a_{n+2} = \frac{n(n+1) - l(l+1)}{(n+2)(n+1)} a_n. \tag{13}$$

W granicy $n \to \infty$ mamy w szczególności

$$a_{n+2} = \left(1 + O(n^{-1})\right) a_n, \tag{14}$$

a zatem asymptotycznie szereg zadający $u$ będzie szeregiem geometrycznym. Wiemy, że ten szereg przestaje być zbieżny, gdy $|x| = 1$. Zatem, jeżeli żądamy, by $u$ było regularne na całym odcinku $[-1, 1]$, nasze rozwinięcie musi się w pewnym momencie uciąć – wtedy rozwiązanie jest wielomianem. Prowadzi to do warunku

$$n(n+1) = l(l+1), \tag{15}$$

dla pewnego $n$, a zatem $l$ jest skwantowane: $l = n$ lub $l = -(n+1)$. Bez straty ogólności będziemy dalej przyjmować $l \geq 0$. Podsumowując: wszystkie regularne funkcje istnieją dla $l \in \mathbb{Z}$, są to wielomiany i można je wyznaczyć z relacji rekurencyjnej między współczynnikami (13).

(ii) W tym celu wystarczy pokazać, że są one ortogonalne. Fakt, że wtedy stanowią bazę wynika natychmiast z twierdzenia zawartego w Teorii. Zauważmy, że

$$0 = \int_{-1}^{1} dx P_{l'} \left(\left(1 - x^2\right) \partial_x^2 - 2x\partial_x + l(l+1)\right) P_l. \tag{16}$$

Całkując to równanie dwa razy przez części[2] dostajemy

$$0 = \int_{-1}^{1} dx \left(\left(1 - x^2\right) \partial_x^2 - 2x\partial_x + l(l+1)\right) P_{l'} P_l = \left(l(l+1) - l'(l'+1)\right) \int_{-1}^{1} dx P_{l'} P_l, \tag{17}$$

więc jeśli $l \neq l'$, to $P_l$ jest prostopadłe do $P_{l'}$.

[2] proszę sprawdzić, że wszystkie wyrazy brzegowe znikają! Matematycznie odpowiada to temu, że wyrażenie w nawiasie jest hermitowskie.

(iii) Nasze równanie rekurencyjne na współczynniki ma skok 2, więc mamy osobne rozwiązania parzyste i nieparzyste. Rozwiązania najniższych rzędów są oczywiście proporcjonalne do 1 i $x$, warunek normalizacji w jedynce ustala stałe proporcjonalności na jeden.
Oczywiście $(x^2-1)^n$ jest wielomianem stopnia $2n$, więc $\frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n$ jest wielomianem stopnia $n$. Wykażemy teraz, że są one ortogonalne. Niech $m < n$:

$$\int_{-1}^{1} \frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n \frac{d^m}{dx^m}(x^2-1)^m = (-1)^n \int_{-1}^{1} (x^2-1)^n \frac{d^{m+n}}{dx^{m+n}}(x^2-1)^m = 0. \tag{18}$$

W pierwszej równości przecałkowaliśmy przez części $n$ razy[3], a w drugiej wykorzystaliśmy fakt, że $\frac{d^{m+n}}{dx^{m+n}}(x^2-1)^m = 0$ jeśli $n > m$, bo różniczkujemy wielomian stopnia $2m$ aż $(m+n)$ razy.
Sprawdźmy, że spełniony też jest warunek normalizacji $P_l(1) = 1$. Chcemy ewaluować $\frac{d^m}{dx^m}(x^2-1)^m$ w $x = 1$. Łatwo zauważyć, że na mocy reguły Leibniza

$$\frac{d^m}{dx^m}(x^2-1)^m|_{x=1} = \frac{d^m}{dx^m}(x-1)^m(x+1)^m|_{x=1} = m!2^m. \tag{19}$$

A zatem wielomiany $P_n(x)$ zdefiniowane za pomocą formuły Rodriguesa mają stopień $n$, są parami ortogonalne i odpowiednio unormowane. Ale istnieje tylko jedna taka rodzina wielomianów[4], więc muszą być to wielomiany Legendre'a.
Wykorzystamy teraz formułę Rodriguesa do policzenia ich normy w $L^2([-1,1])$. Mamy

$$\int_{-1}^{1} dx \frac{d^n}{dx^n}\left(x^2-1\right)^n \frac{d^n}{dx^n}\left(x^2-1\right)^n = (-1)^n \int_{-1}^{1} dx \frac{d^{2n}}{dx^{2n}}\left(x^2-1\right)^n (x^2-1)^n = (2n)! \int_{-1}^{1} dx \left(1-x^2\right)^n, \tag{20}$$

gdzie po drodze całkowaliśmy przez części i zróżniczkowaliśmy $2n$ razy wielomian $(x^2-1)^n$ (jest to wielomian stopnia $2n$, więc tylko pochodna wiodącego wyrazu nie znika). Pozostaje nam policzenie tej całki:

$$\int_{-1}^{1} dx \left(1-x^2\right)^n = 2\int_{0}^{1} dx x^{2\cdot\frac{1}{2}-1}\left(1-x^2\right)^{(n+1)-1} = B(\frac{1}{2}, n+1) = \frac{\Gamma(\frac{1}{2})\Gamma(n+1)}{\Gamma(n+\frac{3}{2})}, \tag{21}$$

gdzie $B(x,y)$ jest funkcją Beta, a $\Gamma(x)$ jest funkcją Gamma. Z definicji funkcji $\Gamma$ mamy relację rekurencyjną:

$$\Gamma\left(n+\frac{3}{2}\right) = \left(n+\frac{1}{2}\right)\Gamma\left(n+\frac{1}{2}\right) = \ldots = \left(n+\frac{1}{2}\right)\left(n-\frac{1}{2}\right)\ldots\frac{1}{2}\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = 2^{-n-1}(2n+1)!!\Gamma\left(\frac{1}{2}\right), \tag{22}$$

oraz

$$\Gamma(n+1) = n!, \tag{23}$$

a zatem

$$\int_{-1}^{1} dx P_n^2(x) = \frac{1}{2^{2n}(n!)^2}\frac{(2n)!}{(2n+1)!!}2^{n+1}n! = \frac{2}{2^n n!}\frac{(2n)!!}{2n+1} = \frac{2}{2^n n!}\frac{2^n n!}{2n+1} = \frac{2}{2n+1}, \tag{24}$$

czego należało dowieść.

(iv) Ponieważ rozważane równanie jest symetryczne względem $m \mapsto -m$, będziemy bez straty ogólności zakładać, że $m \in \mathbb{N}$. Punkty $\pm 1$ są punktami regularnie osobliwymi naszego równania, więc zacznijmy od zbadania jakiego typu osobliwość może się tam pojawić. Rozwiązując równanie indeksowe w tym punkcie znajdujemy, że rozwiązania zachowują się na otoczeniu $x = 1$ jak

$$u = (1-x)^{\pm\frac{m}{2}} f(x), \tag{25}$$

gdzie $f$ jest funkcją holomorficzną. Chcemy, aby rozwiązanie było regularne, więc wybieramy asymptotykę z plusem. Analogiczne zachowanie będzie w $x = -1$, więc podstawmy

$$u(x) = (1-x^2)^{\frac{m}{2}} f(x) \tag{26}$$

[3] Proszę się upewnić, że odpowiednie wyrazy brzegowe znikają
[4] Wynika to z jednoznaczności procedury ortogonalizacji Gramma-Schmidta

do naszego równania:

$$\left(1-x^2\right) f'' - 2(m+1)xf'(x) + \left(l(l+1) - m(m+1)\right) f(x) = 0. \tag{27}$$

Równanie przypomina bardzo równanie z $m = 0$, możemy je niemal natychmiast rozwiązać metodą Frobeniusa. Żądanie by szereg się urwał prowadzi do warunku:

$$l = m + n, \tag{28}$$

więc w szczególności $l \in \mathbb{N}$ oraz $m \geq l$.
Jest pewien haczyk: dlaczego urywamy ten szereg? Jest on (tak jak poprzednio) rozbieżny geometrycznie, ale teraz przed $f$ stoi $(1-x^2)^{\frac{m}{2}}$, więc mogłoby się wydawać że, że dla dostatecznie dużych $m$, to wyrażenie byłoby regularne. Łatwo jednak się przekonać, że jeżeli $a_{n+2} = a_n\left(1 + O(n^{-1})\right)$, to rozwiązanie może mieć asymptotykę nie tylko jak $(1-x^2)^{-1}$, ale równie dobrze $(1-x^2)^{-2}$, czy z dowolną inną potęgą. Musimy zatem bardziej się napracować, aby sprawdzić, czy te funkcje (już po pomnożeniu przez $(1-x^2)^{\frac{m}{2}}$) są regularne czy nie. Ale wiemy z metody Frobeniusa, że rozwiązania przy $x \to 1$ zachowują się jak $(1-x)^{\pm\frac{m}{2}}$. Skoro rozwiązanie nie zachowuje się jak $(1-x)^{\frac{m}{2}}$, to zachowuje się jak $(1-x)^{-\frac{m}{2}}$.

(v) Zróżniczkujmy równanie (27) po $x$:

$$(1-x^2)\left(\frac{df}{dx}\right)'' - 2\left(m+1+1\right)x\left(\frac{df}{dx}\right)' + \left(l(l+1) - (m+1)(m+1+1)\right)\left(\frac{df}{dx}\right) = 0, \tag{29}$$

więc widzimy, że $\frac{df_l^m}{dx}$ jest rozwiązaniem dla $m+1$. Znamy rozwiązania z $l = 0$ (są zadane przez formułę Rodriguesa), więc dostajemy natychmiast:

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{\frac{m}{2}}\frac{d^m}{dx^m}P_l = \frac{(-1)^l}{2^l l!}\frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}}(x^2-1)^l. \tag{30}$$

Nic nas nie powstrzymuje jednak przed zaczęciem we wzorze (27) od $m = -l$ i w ten sposób dowodzimy tej formuły (z dokładnością do stałych całkowania, o których łatwo się przekonać, że znikają) dla wszystkich $m \in [-l, l]$. Proszę się przekonać, że w istocie $P_l^{-m}$ jest proporcjonalne do $P_l^m$. Ponieważ różniczkowanie zamienia wielomiany na wielomiany, to widzimy, że $P_l^m$ są wielomianami, gdy $2|m$.
Pokażemy teraz ortogonalność i wyznaczymy normy w $L^2$. Niech najpierw $l > k$:

$$\begin{aligned}\int_{-1}^{1} dx P_l^m(x)P_k^m(x) &= C\int_{-1}^{1} dx(1-x^2)^m\frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}}(x^2-1)^l\frac{d^{k+m}}{dx^{k+m}}(x^2-1)^k = \\ &= (-1)^{l+m}C\int_{-1}^{1} dx(x^2-1)^l\frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}}\left((1-x^2)^m\frac{d^{k+m}}{dx^{k+m}}(x^2-1)^k\right),\end{aligned} \tag{31}$$

gdzie $C$ jest stałą i przecałkowaliśmy wiele razy przez części[5]. Wyrażenie w nawiasie jest wielomianem stopnia $2m + (2k - k - m) = (k + m)$, który różniczkujemy $l + m$ razy. Skoro $l > k$, to pochodna jest równa 0. A zatem, jeżeli $l \neq k$, to $P_l^m$ i $P_k^m$ są prostopadłe. Pozostaje nam przypadek $l = k$. Wówczas

$$\begin{gathered} C = \frac{1}{2^{2l}(l!)^2} \\ \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}}\left((1-x^2)^m\frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}}(x^2-1)^l\right) = (-1)^m\frac{(2l)!(l+m)!}{(l-m)!},\end{gathered} \tag{32}$$

ponieważ tylko wiodący wyraz ma nieznikającą pochodną. Otrzymujemy zatem:

$$\int_{-1}^{1} dx P_l^m(x)P_k^m(x) = \frac{(2l)!(l+m)!}{(l-m)!(l!)^2 2^{2l}}\int_{-1}^{1} dx\left(1-x^2\right)^l = \frac{(2l)!(l+m)!}{(l-m)!(l!)^2 2^{2l}}\frac{2^{l+1}l!}{(2l+1)!!}, \tag{33}$$

gdzie użyliśmy wyniku z (21). Upraszczając wszystko otrzymujemy:

$$\int_{-1}^{1} P_l^m(x)P_k^m(x) = \delta_{lk}\frac{2}{2l+1}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}. \tag{34}$$

[5] Już standardowo: proszę się upewnić, że wyrazy brzegowe znikają

(vi) *(Przytoczone poniżej rozumowanie pochodzi od Andrien-Marie Legendre'a. Historycznie zdefiniował on swoje wielomiany właśnie jako kolejne wyrazy w rozwinięciu multipolowym (czyli korzystając z funkcji tworzącej)*
Niech $x' \in \mathbb{R}^3$. Wówczas $\Phi(x) = |x - x'|$ spełnia (trójwymiarowe) równanie Laplace'a poza punktem $x = x'$[6]. Przyjmijmy, że $x'$ ma (kartezjańskie) współrzędne $(0, 0, 1)$. Wówczas, we współrzędnych sferycznych funkcja $\Phi$ ma postać

$$\Phi(x) = \left(1 - 2\cos\theta r + r^2\right)^{-\frac{1}{2}} . \tag{35}$$

Możemy rozwinąć tę funkcję w szereg potęgowy w $r$ traktując $\cos\theta$ jak ustalony parametr:

$$\Phi(x) = \sum_{l=0} r^l f_l(\cos\theta), \tag{36}$$

gdzie $f_l$ to wielomian od $\cos\theta$. Jak zobaczymy na końcu, szereg ten jest zbieżny, gdy $r < 1$ (gdybyśmy byli zainteresowani $r > 1$, to zrobiliśmy bardzo podobne rozwinięcie w $r^{-1}$).
Zacznijmy od sprawdzenia jak $f_l$ są unormowane. Podstawiając $\theta = 0$ (czyli ustawiamy punkt na półosi $z > 0$) dostajemy:

$$\left(1 - 2r + r^2\right)^{-\frac{1}{2}} = \sum_{l=0} r^l f_l(1), \tag{37}$$

ale lewa strona to po po prostu $(1 - r)^{-1}$, a znamy rozwinięcie w szereg tego wyrażenia. Zatem $f_l(1) = 1$. Wykorzystajmy teraz fakt, że $\Phi$ jest rozwiązaniem równania Laplace'a na $\mathbb{R}^3\{x'\}$. Laplasjan we współrzędnych sferycznych ma postać

$$\Delta\Phi = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\Phi) + \frac{1}{r}\left(\frac{1}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\Phi + \frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\Phi + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\Phi\right). \tag{38}$$

Przykładając tenże laplasjan obustronnie do (36) i różniczkując wyraz po wyrazie[7] dostajemy:

$$0 = \Delta\Phi(x) = \sum_{l=0} r^{l-1}\left[l(l+1)f_l(\cos\theta) - \cos\theta f'(\cos\theta) + \sin^2\theta f_l''(\cos\theta) - \cos\theta f_l'(\cos\theta)\right], \tag{39}$$

gdzie $'$ oznacza różniczkowanie po argumencie funkcji $f$ (czyli po $\cos\theta$). Skoro lewa strona strona jest równa zero, to każdy wyraz w naszym rozwinięciu musi z osobna znikać. Kładąc $z = \cos\theta \in [-1, 1]$ otrzymujemy równanie

$$(1 - z^2)f_l''(z) - 2zf_l'(z) + l(l+1)f_l(z), \tag{40}$$

czyli już rozwiązane przez nas równanie Legendre'a. Co więcej, funkcje $f$ spełniają normalizację $f(1) = 1$, a zatem są dokładnie równe wielomianom Legendre'a, więc mamy rozwinięcie:

$$\left(1 - 2\cos\theta r + r^2\right)^{-\frac{1}{2}} = \sum_{l=0} r^l P_l(\cos\theta). \tag{41}$$

Kładąc znów $\cos\theta = z$ dostajemy tezę. Funkcja charakterystyczna ujawnia zatem powiązanie między równaniem Legendre'a, a operatorem Laplace'a–Beltramiego. Pogłębieniu tej obserwacji poświęcimy następne zajęcia.
*(w fizyce rozwinięcie w wielomiany Legendre'a jest niezwykle użyteczne, choć zazwyczaj ma ono znaczenie dla $r > 1$ – prowadzi ono wtedy do rozwinięcia multipolowego w elektrodynamice.)*

**Zadanie 3**

$$u'' + \left(\frac{2}{\rho} - 1\right)u' + \left(\frac{\lambda - 1}{\rho} - \frac{l\,(l+1)}{\rho^2}\right)u = 0, \tag{42}$$

Okiem nieuzbrojonym dostrzegamy, że 0 jest punktem regularnie osobliwym tego równania. Rozwiązania równania indeksowego to $r = l$ oraz $r = -(l+1) \leq -1$. Zauważmy, że to drugie rozwiązanie musimy odrzucić. Jeżeli $\psi \sim r^{-1}$, to wtedy $\psi^\star \frac{1}{r}\psi \sim \frac{1}{r^3}$, a to

[6] Proszę się przekonać rachunkiem bezpośrednim, że tak w istocie jest
[7] proszę zastanowić się czemu jest to dopuszczalne

nie jest całkowalne w 3 wymiarach, więc taka funkcja falowa miałaby nieskończoną energię potencjalną[8]. Zatem będziemy poszukiwać rozwiązań w postaci

$$u = \rho^l f. \tag{43}$$

Wstawiając je do (42) i porządkując wszystko otrzymujemy

$$\rho f'' + f'\left(2l + 2 - \rho\right) + f\left(\lambda - 1 - l\right) = 0. \tag{44}$$

Standardowo poszukujemy rozwiązania w postaci szeregu potęgowego:

$$f(\rho) = \sum_{n=0} a_n \rho^n, \tag{45}$$

co prowadzi do

$$\sum_{n=0} a_n \rho^{n-1} n\left(n + 2l + 1\right)) = \sum_{n=0} a_n \rho^n \left(n + l + 1 - \lambda\right). \tag{46}$$

Zmieniając zmienną sumowania dostajemy relację rekurencyjną:

$$a_{n+1} = a_n \frac{n + l + 1 - \lambda}{(n+1)(n+2+2l)}. \tag{47}$$

Asymptotyka dla dużych $n$ jest postaci:

$$a_{n+1} = \frac{a_n}{n}, \tag{48}$$

skąd wynika, że $f \sim e^\rho$ dla dużych $\rho$. Ale to oznacza, że funkcja falowa $\psi(\rho) = e^{-\frac{\rho}{2}} \rho^l f \sim e^{\frac{\rho}{2}}$, więc nie jest całkowalna. Aby temu zaradzić, musimy po raz kolejny urwać szereg czyli wyzerować licznik. Widzimy, że prowadzi to do warunku:

$$\lambda = n + l + 1 \geq l + 1 \tag{49}$$

dla pewnej liczby naturalnej $n$. W szczególności, oznacza to $\lambda \in \mathbb{Z}_+$.
Pytanie: z jaką wagą wielomiany $f$ (przy ustalonym $l$) będą tworzyły bazę ortonormalną na półprostej $\mathbb{R}_{\geq 0}$?
*(Widać, że w ogólności funkcje u nie mogą tej bazy tworzyć, bo dla l* $\neq 0$ *nie ma wśród nich wielomianu stałego.)*

[8]Często można znaleźć w podręcznikach argument jakoby wtedy funkcja $\psi$ nie była całkowalna w kwadracie. Oczywiście, nie jest to prawda w 3 wymiarach. Jeżeli komuś nie przeszkadza nieskończona energia potencjalna, a ma bardziej matematyczne inklinacje, to można dostrzec, że wtedy $V\psi$ zachowuje się jak $r^{-2}$, więc $\hat{V}$ wyprowadza funkcję falową z przestrzeni Hilberta, więc takie rozwiązanie nie należy do dziedziny $\hat{V}$ i równanie Schrödingera nie ma od samego początku sensu dla takiej funkcji.