

数学物理方法

第十章 二阶线性常微分方程的级数解法 和一般本征值问题

第 5 节 Sturm-Liouville 本征值问题

余钊焕

中山大学物理学院

<https://yzhxxzxy.github.io>


更新日期：2025 年 7 月 1 日





§5 Sturm-Liouville 本征值问题

§5.1 Sturm-Liouville 本征值问题的一般提法

 二阶线性齐次常微分方程的一般形式为 $y''(x) + p(x)y'(x) + q(x)y(x) = 0$

 为了下面符号上的方便，将它改写为 $y''(x) + P(x)y'(x) + Q(x)y(x) = 0$

 从数理方程分离变量得到的常微分方程一般含有待定常数，记作 λ


 λ 通常包含在 $Q(x)$ 之中，将它分解为 $Q(x) = \lambda\tilde{\rho}(x) - \tilde{Q}(x)$ ，则方程化为


$$y''(x) + P(x)y'(x) - \tilde{Q}(x)y(x) + \lambda\tilde{\rho}(x)y(x) = 0$$


§5 Sturm-Liouville 本征值问题

§5.1 Sturm-Liouville 本征值问题的一般提法


 二阶线性齐次常微分方程的一般形式为 $y''(x) + p(x)y'(x) + q(x)y(x) = 0$

 为了下面符号上的方便，将它改写为 $y''(x) + P(x)y'(x) + Q(x)y(x) = 0$

 从数理方程分离变量得到的常微分方程一般含有待定常数，记作 λ

 λ 通常包含在 $Q(x)$ 之中，将它分解为 $Q(x) = \lambda\tilde{\rho}(x) - \tilde{Q}(x)$ ，则方程化为

$$y''(x) + P(x)y'(x) - \tilde{Q}(x)y(x) + \lambda\tilde{\rho}(x)y(x) = 0$$


 两边同乘以 $k(x) \equiv \exp\left(\int_{x_0}^x P(\xi) d\xi\right)$ ，得

$$k(x)y''(x) + k(x)P(x)y'(x) - k(x)\tilde{Q}(x)y(x) + \lambda k(x)\tilde{\rho}(x)y(x) = 0$$


 左边前两项满足

$$k(x)y''(x) + k(x)P(x)y'(x) = k(x)y''(x) + k'(x)y'(x) = \frac{d}{dx} \left[k(x) \frac{dy(x)}{dx} \right]$$


Sturm-Liouville 方程

 从而 $k(x)y''(x) + k(x)P(x)y'(x) - k(x)\tilde{Q}(x)y(x) + \lambda k(x)\tilde{\rho}(x)y(x) = 0$ 化为

$$\frac{d}{dx} \left[k(x) \frac{dy(x)}{dx} \right] - q(x)y(x) + \lambda \rho(x)y(x) = 0 \quad (a < x < b)$$


 其中 $q(x) \equiv k(x)\tilde{Q}(x)$, $\rho(x) \equiv k(x)\tilde{\rho}(x)$, (a, b) 为求解区间

 这个形式的方程称为 **Sturm-Liouville 型方程**

 $\rho(x)$ 称为**权函数**

 以上推导说明**二阶线性齐次常微分方程的一般形式**与 **Sturm-Liouville 形式等价**

 **Sturm-Liouville 形式**对于本节的讨论是方便的

 **物理问题**在**区间** (a, b) 上一般有 $k(x) \geq 0$, $q(x) \geq 0$, $\rho(x) \geq 0$, 下面举的例子将验证这些条件

Sturm-Liouville 本征值问题



Sturm-Liouville 方程

$$\frac{d}{dx} \left[k(x) \frac{dy(x)}{dx} \right] - q(x)y(x) + \lambda \rho(x)y(x) = 0$$
$$(a < x < b)$$

是由数理方程**分离变量**得到的



因而在**区间端点** a 、 b 通常附有**边界条件**



满足**边界条件**的解并不一定存在，除非 λ 取某些特定值



这样的 λ 值称为**本征值**，相应的解称为**本征函数**



此方程与**边界条件**一起构成 **Sturm-Liouville 本征值问题**



Jacques Charles François Sturm
(1803–1855)



Joseph Liouville
(1809–1882)

边界条件的类型

🔍 **本征值问题**的类型由**边界条件**的类型决定，主要有以下几种

1 第一、二、三类边界条件

🟡 比如**本征值问题**
$$\begin{cases} y''(x) + \lambda y(x) = 0 & (a < x < b) \\ (\alpha y' - \beta y)|_{x=a} = 0, & (\gamma y' + \delta y)|_{x=b} = 0 \end{cases}$$


🌰 其中 $\alpha, \beta, \gamma, \delta \geq 0$ ，但 α 和 β 不同时为 0， γ 和 δ 不同时为 0

🚬 与 Sturm-Liouville 方程比较可知 $k(x) = 1$ ， $q(x) = 0$ ， $\rho(x) = 1$


边界条件的类型

 **本征值问题**的类型由**边界条件**的类型决定，主要有以下几种


1 第一、二、三类边界条件

 比如**本征值问题**
$$\begin{cases} y''(x) + \lambda y(x) = 0 & (a < x < b) \\ (\alpha y' - \beta y)|_{x=a} = 0, & (\gamma y' + \delta y)|_{x=b} = 0 \end{cases}$$


 其中 $\alpha, \beta, \gamma, \delta \geq 0$ ，但 α 和 β 不同时为 0， γ 和 δ 不同时为 0

 与 Sturm-Liouville 方程比较可知 $k(x) = 1$ ， $q(x) = 0$ ， $\rho(x) = 1$

2 自然边界条件 (与坐标系奇点相关)

 比如 **Legendre 方程**的本征值问题
$$\begin{cases} \frac{d}{dx} \left[(1-x^2) \frac{dy}{dx} \right] + \lambda y = 0 & (-1 < x < 1) \\ |y(\pm 1)| < \infty \end{cases}$$


 与 Sturm-Liouville 方程比较可知 $k(x) = 1 - x^2$ ， $q(x) = 0$ ， $\rho(x) = 1$

 注意 $k(\pm 1) = 0$ ，而 $x = \pm 1$ 处均有**自然边界条件**


自然边界条件的第二个例子


第二个例子是 **Bessel 方程的本征值问题**

$$\begin{cases} \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left(\rho \frac{dR}{d\rho} \right) + \left(\lambda - \frac{m^2}{\rho^2} \right) R = 0 & (0 < \rho < a) \\ R(0) = 0 \ (m \neq 0) \text{ 或 } |R(0)| < \infty \ (m = 0), & \alpha R'(a) + \beta R(a) = 0 \end{cases}$$


 作变量替换 $\rho \rightarrow x$ 和 $R \rightarrow y$ ，改写成

$$\begin{cases} \frac{d}{dx} \left(x \frac{dy}{dx} \right) - \frac{m^2}{x} y + \lambda xy = 0 & (0 < x < a) \\ y(0) = 0 \ (m \neq 0) \text{ 或 } |y(0)| < \infty \ (m = 0), & \alpha y'(a) + \beta y(a) = 0 \end{cases}$$

 其中 $\alpha, \beta \geq 0$ ，但 α 和 β 不同时为 0

 $x = 0$ 处的边界条件是**自然边界条件**

 与 Sturm-Liouville 方程比较可知 $k(x) = x$ ， $q(x) = \frac{m^2}{x}$ ， $\rho(x) = x$

 注意 $k(0) = 0$ ，而 $x = 0$ 处有**自然边界条件**

自然边界条件的第三个例子

● 第三个例子是球 Bessel 方程的本征值问题

$$\begin{cases} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \lambda R + k^2 r^2 R = 0 & (0 < r < a) \\ R(0) = 0 \text{ 或 } |R(0)| < \infty, \quad \alpha R'(a) + \beta R(a) = 0 \end{cases}$$

📖 作变量替换 $r \rightarrow x$, $R \rightarrow y$, $\lambda \rightarrow \lambda_l$, $k^2 \rightarrow \lambda$, 改写成

$$\begin{cases} \frac{d}{dx} \left(x^2 \frac{dy}{dx} \right) - \lambda_l y + \lambda x^2 y = 0 & (0 < x < a) \\ y(0) = 0 \ (l \in \mathbb{N}^+) \text{ 或 } |y(0)| < \infty \ (l = 0), \quad \alpha y'(a) + \beta y(a) = 0 \end{cases}$$

🍷 其中 $\alpha, \beta \geq 0$, 但 α 和 β 不同时为 0; $x = 0$ 处的边界条件是自然边界条件

👉 与 Sturm-Liouville 方程比较可知 $k(x) = x^2$, $q(x) = \lambda_l$, $\rho(x) = x^2$

🔧 注意 $k(0) = 0$, 而 $x = 0$ 处有自然边界条件

🍱 $\lambda_l = l(l+1)$ ($l \in \mathbb{N}$) 不是该问

题本征值, 而是由角向方程中连带

Legendre 方程的本征值问题决定

自然边界条件的第三个例子

● 第三个例子是球 Bessel 方程的本征值问题

$$\begin{cases} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \lambda R + k^2 r^2 R = 0 & (0 < r < a) \\ R(0) = 0 \text{ 或 } |R(0)| < \infty, \quad \alpha R'(a) + \beta R(a) = 0 \end{cases}$$

📖 作变量替换 $r \rightarrow x$, $R \rightarrow y$, $\lambda \rightarrow \lambda_l$, $k^2 \rightarrow \lambda$, 改写成

$$\begin{cases} \frac{d}{dx} \left(x^2 \frac{dy}{dx} \right) - \lambda_l y + \lambda x^2 y = 0 & (0 < x < a) \\ y(0) = 0 \ (l \in \mathbb{N}^+) \text{ 或 } |y(0)| < \infty \ (l = 0), \quad \alpha y'(a) + \beta y(a) = 0 \end{cases}$$

📖 其中 $\alpha, \beta \geq 0$, 但 α 和 β 不同时为 0; $x = 0$ 处的边界条件是自然边界条件

📖 与 Sturm-Liouville 方程比较可知 $k(x) = x^2$, $q(x) = \lambda_l$, $\rho(x) = x^2$

🔧 注意 $k(0) = 0$, 而 $x = 0$ 处有自然边界条件

📖 $\lambda_l = l(l+1)$ ($l \in \mathbb{N}$) 不是该问题本征值, 而是由角向方程中连带 Legendre 方程的本征值问题决定

📖 一般来说, 端点 a (或 b) 处出现自然边界条件的充要条件是 $k(a) = 0$ (或 $k(b) = 0$)

周期性边界条件

3 周期性边界条件

🍪 如果 $k(a) = k(b)$, $q(a) = q(b)$, $\rho(a) = \rho(b)$

👉 则可以对 **Sturm-Liouville 方程** 附加 **周期性边界条件** $y(a) = y(b)$ 和 $y'(a) = y'(b)$

🟡 比如本征值问题

$$\begin{cases} y''(x) + \lambda y(x) = 0 & (0 < x < 2\pi) \\ y(0) = y(2\pi), \quad y'(0) = y'(2\pi) \end{cases}$$

🍲 这里有 $k(x) = 1$, $q(x) = 0$, $\rho(x) = 1$

周期性边界条件

3 周期性边界条件

🍪 如果 $k(a) = k(b)$, $q(a) = q(b)$, $\rho(a) = \rho(b)$

👉 则可以对 **Sturm-Liouville 方程** 附加 **周期性边界条件** $y(a) = y(b)$ 和 $y'(a) = y'(b)$

🟡 比如 **本征值问题**

$$\begin{cases} y''(x) + \lambda y(x) = 0 & (0 < x < 2\pi) \\ y(0) = y(2\pi), & y'(0) = y'(2\pi) \end{cases}$$

🍲 这里有 $k(x) = 1$, $q(x) = 0$, $\rho(x) = 1$

✍ 以前对 **角向方程** $\Phi''(\phi) + \lambda \Phi(\phi) = 0$ 用过 **自然的周期性边界条件**

$$\Phi(\phi) = \Phi(\phi + 2\pi)$$

🍲 对两边取 $\phi = 0$ 得 $\Phi(0) = \Phi(2\pi)$, 在 $\phi = 0$ 处对两边求导得 $\Phi'(0) = \Phi'(2\pi)$

§5.2 Sturm-Liouville 本征值问题的一般结论

🌌 对于物理问题，Sturm-Liouville 方程

$$\frac{d}{dx} \left[k(x) \frac{dy(x)}{dx} \right] - q(x)y(x) + \lambda \rho(x)y(x) = 0 \quad (a < x < b)$$

中的系数满足 $k(x) \geq 0$ ， $q(x) \geq 0$ ， $\rho(x) \geq 0$ ，上面所举的例子均满足这些条件

🌍 在这样的前提下，Sturm-Liouville 本征值问题有以下一般结论

1 所有本征值都是非负的，即 $\lambda \geq 0$

↶ 注 有了这个结论，以后求解本征值问题时，只要方程的系数满足上述条件，就可以立即排除 $\lambda < 0$ 的可能性

🌀 这为方程比较复杂的情况（比如 Bessel 方程的本征值问题）带来极大的便利

§5.2 Sturm-Liouville 本征值问题的一般结论


 对于物理问题，Sturm-Liouville 方程

$$\frac{d}{dx} \left[k(x) \frac{dy(x)}{dx} \right] - q(x)y(x) + \lambda \rho(x)y(x) = 0 \quad (a < x < b)$$

中的系数满足 $k(x) \geq 0$ ， $q(x) \geq 0$ ， $\rho(x) \geq 0$ ，上面所举的例子均满足这些条件

 在这样的前提下，Sturm-Liouville 本征值问题有以下一般结论

1 所有本征值都是非负的，即 $\lambda \geq 0$

 **注** 有了这个结论，以后求解本征值问题时，只要方程的系数满足上述条件，就可以立即排除 $\lambda < 0$ 的可能性

 这为方程比较复杂的情况（比如 Bessel 方程的本征值问题）带来极大的便利

 **证明** 将 Sturm-Liouville 方程两边同乘以 $y^*(x)$ ，移项，得

$$\lambda \rho(x)|y(x)|^2 = q(x)|y(x)|^2 - y^*(x) \frac{d}{dx} \left[k(x) \frac{dy(x)}{dx} \right]$$

对方程两边积分

☀ 两边对 x 从 a 到 b 积分, 有

$$\lambda \int_a^b \rho(x)|y(x)|^2 dx = \int_a^b q(x)|y(x)|^2 dx - \int_a^b y^*(x) \frac{d}{dx} \left[k(x) \frac{dy(x)}{dx} \right] dx$$

☁ 由 $y^*(x) \frac{d}{dx} \left[k(x) \frac{dy(x)}{dx} \right] = \frac{d}{dx} \left[k(x)y^*(x) \frac{dy(x)}{dx} \right] - \left[\frac{dy(x)}{dx} \right]^* k(x) \frac{dy(x)}{dx}$ 得

$$\begin{aligned} \lambda \int_a^b \rho(x)|y(x)|^2 dx &= \int_a^b q(x)|y(x)|^2 dx - \int_a^b \{ [k(x)y^*(x)y'(x)]' - k(x)|y'(x)|^2 \} dx \\ &= \int_a^b q(x)|y(x)|^2 dx - k(x)y^*(x)y'(x) \Big|_a^b + \int_a^b k(x)|y'(x)|^2 dx \end{aligned}$$

对方程两边积分

☀ 两边对 x 从 a 到 b 积分, 有

$$\lambda \int_a^b \rho(x)|y(x)|^2 dx = \int_a^b q(x)|y(x)|^2 dx - \int_a^b y^*(x) \frac{d}{dx} \left[k(x) \frac{dy(x)}{dx} \right] dx$$

☁ 由 $y^*(x) \frac{d}{dx} \left[k(x) \frac{dy(x)}{dx} \right] = \frac{d}{dx} \left[k(x)y^*(x) \frac{dy(x)}{dx} \right] - \left[\frac{dy(x)}{dx} \right]^* k(x) \frac{dy(x)}{dx}$ 得

$$\begin{aligned} \lambda \int_a^b \rho(x)|y(x)|^2 dx &= \int_a^b q(x)|y(x)|^2 dx - \int_a^b \{ [k(x)y^*(x)y'(x)]' - k(x)|y'(x)|^2 \} dx \\ &= \int_a^b q(x)|y(x)|^2 dx - k(x)y^*(x)y'(x) \Big|_a^b + \int_a^b k(x)|y'(x)|^2 dx \\ &\geq k(x)y^*(x)y'(x) \Big|_b^a = k(a)y^*(a)y'(a) - k(b)y^*(b)y'(b) \end{aligned}$$

☁ 本征函数 $y(x)$ 是非平庸的, 除可能的若干零点外应不为零

☁ $q(x) \geq 0$ 和 $k(x) \geq 0$ 意味着 $\int_a^b q(x)|y(x)|^2 dx \geq 0$ 和 $\int_a^b k(x)|y'(x)|^2 dx \geq 0$

☂ 由此得到第三步不等式

不等式分析一

$$\lambda \int_a^b \rho(x) |y(x)|^2 dx \geq k(a)y^*(a)y'(a) - k(b)y^*(b)y'(b)$$

☂ 注意 $\rho(x) \geq 0$ ，而且一般只在端点处才可能取零，因此 $\int_a^b \rho(x) |y(x)|^2 dx > 0$

🔥 只需要证明不等式右边非负，就证明了 $\lambda \geq 0$

不等式分析一

$$\lambda \int_a^b \rho(x) |y(x)|^2 dx \geq k(a)y^*(a)y'(a) - k(b)y^*(b)y'(b)$$

☂ 注意 $\rho(x) \geq 0$ ，而且一般只在端点处才可能取零，因此 $\int_a^b \rho(x) |y(x)|^2 dx > 0$

🔥 只需要证明不等式右边非负，就证明了 $\lambda \geq 0$

☁️ 先看不等式右边第一项，它对应于 $x = a$ 处的边界条件

● 若是第一类边界条件，则 $y(a) = 0$

● 若是第二类边界条件，则 $y'(a) = 0$

● 若是第三类边界条件 $\alpha y'(a) - \beta y(a) = 0$ ($\alpha, \beta > 0$)，则 $y'(a) = \frac{\beta}{\alpha} y(a)$ ，而且有 $k(a) > 0$ 和 $y(a) \neq 0$ ，从而 $k(a)y^*(a)y'(a) = \frac{\beta}{\alpha} k(a)|y(a)|^2 > 0$

● 若是自然边界条件，则 $k(a) = 0$

⚡ 在以上各种边界条件下，总有 $k(a)y^*(a)y'(a) \geq 0$

不等式分析二

$$\lambda \int_a^b \rho(x) |y(x)|^2 dx \geq k(a)y^*(a)y'(a) - k(b)y^*(b)y'(b)$$



再看不等式右边第二项，它对应于 $x = b$ 处的边界条件

- 若是第一类边界条件，则 $y(b) = 0$
- 若是第二类边界条件，则 $y'(b) = 0$
- 若是第三类边界条件 $\gamma y'(b) + \delta y(b) = 0$ ($\gamma, \delta > 0$)，则 $y'(b) = -\frac{\delta}{\gamma} y(b)$ ，而且有 $k(b) > 0$ 和 $y(b) \neq 0$ ，从而 $-k(b)y^*(b)y'(b) = \frac{\delta}{\gamma} k(b)|y(b)|^2 > 0$
- 若是自然边界条件，则 $k(b) = 0$



在以上各种边界条件下，总有 $-k(b)y^*(b)y'(b) \geq 0$ ，于是不等式右边是非负的

不等式分析二

$$\lambda \int_a^b \rho(x) |y(x)|^2 dx \geq k(a)y^*(a)y'(a) - k(b)y^*(b)y'(b)$$

☁️ 再看不等式右边第二项，它对应于 $x = b$ 处的边界条件

● 若是第一类边界条件，则 $y(b) = 0$

● 若是第二类边界条件，则 $y'(b) = 0$

● 若是第三类边界条件 $\gamma y'(b) + \delta y(b) = 0$ ($\gamma, \delta > 0$)，则 $y'(b) = -\frac{\delta}{\gamma} y(b)$ ，而且有 $k(b) > 0$ 和 $y(b) \neq 0$ ，从而 $-k(b)y^*(b)y'(b) = \frac{\delta}{\gamma} k(b)|y(b)|^2 > 0$

● 若是自然边界条件，则 $k(b) = 0$

❄️ 在以上各种边界条件下，总有 $-k(b)y^*(b)y'(b) \geq 0$ ，于是不等式右边是非负的

🌀 对于周期性边界条件，有 $y(a) = y(b)$ 、 $y'(a) = y'(b)$ 和 $k(a) = k(b)$ ，从而推出 $k(a)y^*(a)y'(a) - k(b)y^*(b)y'(b) = 0$

🌈 因此，不论何种边界条件，不等式右边总是非负的，故 $\lambda \geq 0$

证毕


本征值的性质

2 存在**无穷多分立**的**本征值** λ_n ($n \in \mathbb{N}^+$)，相应的**本征函数**为 $y_n(x)$ ，满足

$$\lambda_1 < \lambda_2 < \cdots < \lambda_n < \lambda_{n+1} < \cdots, \quad \text{且} \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \lambda_n = +\infty;$$

除了**周期性边界条件**的情况，本征值都是**非简并**的，且 $y_{n+1}(x)$ 比 $y_n(x)$ 多一个零点

 注 这一结论的**证明很困难**，这里直接承认它

 由于考虑的是**二阶**常微分方程，如果本征值有简并，其**简并度**只能是 2

本征值的性质

2 存在**无穷多分立**的**本征值** $\lambda_n (n \in \mathbb{N}^+)$ ，相应的**本征函数**为 $y_n(x)$ ，满足

$$\lambda_1 < \lambda_2 < \cdots < \lambda_n < \lambda_{n+1} < \cdots, \quad \text{且} \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \lambda_n = +\infty;$$

除了**周期性边界条件**的情况，本征值都是**非简并**的，且 $y_{n+1}(x)$ 比 $y_n(x)$ 多一个**零点**

注 这一结论的**证明很困难**，这里直接承认它

由于考虑的是**二阶**常微分方程，如果本征值有简并，其**简并度**只能是 2

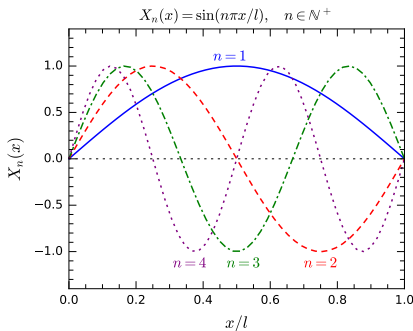
例如，对于本征值问题

$$\begin{cases} X''(x) + \lambda X(x) = 0 & (0 < x < l) \\ X(0) = 0, \quad X(l) = 0 \end{cases}$$

本征值和本征函数为

$$\lambda_n = \left(\frac{n\pi}{l}\right)^2, \quad X_n(x) = \sin \frac{n\pi x}{l}, \quad n \in \mathbb{N}^+$$


$X_{n+1}(x)$ 比 $X_n(x)$ 多一个**零点**




带权正交

3 对应于不同本征值的本征函数在区间 $[a, b]$ 上带权正交，即

$$\int_a^b y_m^*(x) y_n(x) \rho(x) dx = 0 \quad (\lambda_m \neq \lambda_n)$$


 注 本征函数族的正交性对于后面计算广义 Fourier 级数的系数非常重要


 有时很难直接验证本征函数族的正交性，这个结论带来很大的便利

带权正交

3 对应于不同本征值的本征函数在区间 $[a, b]$ 上带权正交，即

$$\int_a^b y_m^*(x) y_n(x) \rho(x) dx = 0 \quad (\lambda_m \neq \lambda_n)$$

 注 本征函数族的正交性对于后面计算广义 Fourier 级数的系数非常重要

 有时很难直接验证本征函数族的正交性，这个结论带来很大的便利


 与三角函数族的正交性相比，这里有两点推广


- 一是多了权函数 $\rho(x)$ ，如果 $\rho(x) = 1$ ，就是普通正交
- 二是考虑了本征函数是复值函数的情况（自变量仍是实数），如 $\{e^{im\phi}, e^{-im\phi}\}_{m=0}^{\infty}$

带权正交

3 对应于不同本征值的本征函数在区间 $[a, b]$ 上带权正交，即

$$\int_a^b y_m^*(x) y_n(x) \rho(x) dx = 0 \quad (\lambda_m \neq \lambda_n)$$

 注 本征函数族的正交性对于后面计算广义 Fourier 级数的系数非常重要


 有时很难直接验证本征函数族的正交性，这个结论带来很大的便利

 与三角函数族的正交性相比，这里有两点推广

● 一是多了权函数 $\rho(x)$ ，如果 $\rho(x) = 1$ ，就是普通正交

● 二是考虑了本征函数是复值函数的情况（自变量仍是实数），如 $\{e^{im\phi}, e^{-im\phi}\}_{m=0}^{\infty}$

 如果有简并，则对应于同一本征值的两个本征函数不一定相互正交

 但是，总可以取它们的两个适当线性组合，使组合后的两个函数相互正交，且仍对应于同一本征值，这种做法是线性代数中的 Schmidt 正交化

 最终，可以使所有的本征函数相互正交

Schmidt 正交化

🛹 设本征值 λ_n 对应于两个本征函数 $y_{n1}(x)$ 和 $y_{n2}(x)$

🛴 它们不是正交的，其内积不等于零，即

$$(y_{n2}, y_{n1}) \equiv \int_a^b y_{n2}^*(x) y_{n1}(x) \rho(x) dx \neq 0$$

🚲 取线性组合 $y_{na}(x) = y_{n1}(x)$ 和 $y_{nb}(x) = y_{n2}(x) - \kappa y_{n1}(x)$

🛵 κ 为常数，则 $y_{na}(x)$ 和 $y_{nb}(x)$ 也是 λ_n 对应的本征函数

🚗 令 $(y_{nb}, y_{na}) = (y_{n2}, y_{n1}) - \kappa^* (y_{n1}, y_{n1}) = 0$ ，则


$$\kappa^* = \frac{(y_{n2}, y_{n1})}{(y_{n1}, y_{n1})}, \quad \kappa = \frac{(y_{n2}, y_{n1})^*}{(y_{n1}, y_{n1})} = \frac{(y_{n1}, y_{n2})}{(y_{n1}, y_{n1})}$$

🚗 于是， $y_{na}(x) = y_{n1}(x)$ 与 $y_{nb}(x) = y_{n2}(x) - \frac{(y_{n1}, y_{n2})}{(y_{n1}, y_{n1})} y_{n1}(x)$ 是相互正交的



Erhard Schmidt
(1876–1959)

证明 $\lambda_m \neq \lambda_n$ 时 $y_n(x)$ 与 $y_m(x)$ 的正交性

 **证明** 将 $y_n(x)$ 的方程 $\frac{d}{dx} \left[k(x) \frac{dy_n(x)}{dx} \right] - q(x)y_n(x) + \lambda_n \rho(x)y_n(x) = 0$ 两边同乘以 $y_m^*(x)$, 得


$$y_m^*(x)[k(x)y_n'(x)]' - q(x)y_m^*(x)y_n(x) + \lambda_n \rho(x)y_m^*(x)y_n(x) = 0$$



对上式**交换 m 和 n** , 取**复共轭**, 有

$$y_n(x)[k(x)y_m'^*(x)]' - q(x)y_n(x)y_m^*(x) + \lambda_m \rho(x)y_n(x)y_m^*(x) = 0$$

证明 $\lambda_m \neq \lambda_n$ 时 $y_n(x)$ 与 $y_m(x)$ 的正交性

 **证明** 将 $y_n(x)$ 的方程 $\frac{d}{dx} \left[k(x) \frac{dy_n(x)}{dx} \right] - q(x)y_n(x) + \lambda_n \rho(x)y_n(x) = 0$ 两边同乘以 $y_m^*(x)$, 得

$$y_m^*(x)[k(x)y_n'(x)]' - q(x)y_m^*(x)y_n(x) + \lambda_n \rho(x)y_m^*(x)y_n(x) = 0$$

 对上式**交换 m 和 n** , 取**复共轭**, 有

$$y_n(x)[k(x)y_m'^*(x)]' - q(x)y_n(x)y_m^*(x) + \lambda_m \rho(x)y_n(x)y_m^*(x) = 0$$

减

 **两式相减**, 得到

$$\begin{aligned} & (\lambda_m - \lambda_n)\rho(x)y_n(x)y_m^*(x) \\ &= y_m^*(x)[k(x)y_n'(x)]' - y_n(x)[k(x)y_m'^*(x)]' \\ &= y_m^*(x)[k(x)y_n'(x)]' + k(x)y_m'^*(x)y_n'(x) - y_n(x)[k(x)y_m'^*(x)]' - k(x)y_m'^*(x)y_n'(x) \\ &= [k(x)y_m^*(x)y_n'(x) - k(x)y_m'^*(x)y_n(x)]' \end{aligned}$$


分析一

 从 a 到 b 积分, 推出

$$\begin{aligned} (\lambda_m - \lambda_n) \int_a^b \rho(x) y_n(x) y_m^*(x) dx &= \int_a^b [k(x) y_m^*(x) y_n'(x) - k(x) y_m'^*(x) y_n(x)]' dx \\ &= k(x) [y_m^*(x) y_n'(x) - y_m'^*(x) y_n(x)] \Big|_a^b \end{aligned}$$


 对于周期性边界条件, 有 $k(a) y_m^*(a) y_n'(a) = k(b) y_m^*(b) y_n'(b)$, 上式右边显然为零

分析一

 从 a 到 b 积分，推出

$$\begin{aligned} (\lambda_m - \lambda_n) \int_a^b \rho(x) y_n(x) y_m^*(x) dx &= \int_a^b [k(x) y_m^*(x) y_n'(x) - k(x) y_m'^*(x) y_n(x)]' dx \\ &= k(x) [y_m^*(x) y_n'(x) - y_m'^*(x) y_n(x)] \Big|_a^b \end{aligned}$$

 对于周期性边界条件，有 $k(a) y_m^*(a) y_n'(a) = k(b) y_m^*(b) y_n'(b)$ ，上式右边显然为零


 对于其它边界条件，以 $x = a$ 代入 $k(x) [y_m^*(x) y_n'(x) - y_m'^*(x) y_n(x)]$ 将得到零

● 若 $x = a$ 处为自然边界条件，则 $k(a) = 0$

● 若 $x = a$ 处为第一、二、三类边界条件，则有 $\alpha y_n'(a) - \beta y_n(a) = 0$ 和


$$\alpha y_m'^*(a) - \beta y_m^*(a) = 0, \text{ 改写成 } \begin{pmatrix} y_n'(a) & -y_n(a) \\ y_m'^*(a) & -y_m^*(a) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = 0$$

 由于 α 和 β 不全为零，系数行列式 $\begin{vmatrix} y_n'(a) & -y_n(a) \\ y_m'^*(a) & -y_m^*(a) \end{vmatrix}$ 必为零

 即 $-y_m^*(a) y_n'(a) + y_m'^*(a) y_n(a) = 0$

分析二

$$(\lambda_m - \lambda_n) \int_a^b \rho(x) y_n(x) y_m^*(x) dx = k(x) [y_m^*(x) y_n'(x) - y_m'^*(x) y_n(x)] \Big|_a^b$$


 对于其它边界条件，以 $x = b$ 代入 $k(x)[y_m^*(x)y_n'(x) - y_m'^*(x)y_n(x)]$ 将得到零

● 若 $x = b$ 处为自然边界条件，则 $k(b) = 0$

● 若 $x = b$ 处为第一、二、三类边界条件，则有 $\gamma y_n'(b) + \delta y_n(b) = 0$ 和


$$\gamma y_m'^*(b) + \delta y_m^*(b) = 0, \text{ 改写成 } \begin{pmatrix} y_n'(b) & y_n(b) \\ y_m'^*(b) & y_m^*(b) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma \\ \delta \end{pmatrix} = 0$$

 由于 γ 和 δ 不全为零，系数行列式 $\begin{vmatrix} y_n'(b) & y_n(b) \\ y_m'^*(b) & y_m^*(b) \end{vmatrix}$ 必为零

 即 $-y_m^*(b)y_n'(b) + y_m'^*(b)y_n(b) = 0$

分析二

$$(\lambda_m - \lambda_n) \int_a^b \rho(x) y_n(x) y_m^*(x) dx = k(x) [y_m^*(x) y_n'(x) - y_m'^*(x) y_n(x)] \Big|_a^b$$


 对于其它边界条件，以 $x = b$ 代入 $k(x)[y_m^*(x)y_n'(x) - y_m'^*(x)y_n(x)]$ 将得到零

● 若 $x = b$ 处为自然边界条件，则 $k(b) = 0$

● 若 $x = b$ 处为第一、二、三类边界条件，则有 $\gamma y_n'(b) + \delta y_n(b) = 0$ 和

$$\gamma y_m'^*(b) + \delta y_m^*(b) = 0, \text{ 改写成 } \begin{pmatrix} y_n'(b) & y_n(b) \\ y_m'^*(b) & y_m^*(b) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma \\ \delta \end{pmatrix} = 0$$

 由于 γ 和 δ 不全为零，系数行列式 $\begin{vmatrix} y_n'(b) & y_n(b) \\ y_m'^*(b) & y_m^*(b) \end{vmatrix}$ 必为零

 即 $-y_m^*(b)y_n'(b) + y_m'^*(b)y_n(b) = 0$

 因此，不论何种边界条件，总有 $k(x)[y_m^*(x)y_n'(x) - y_m'^*(x)y_n(x)] \Big|_a^b = 0$

 考虑到 $\lambda_m \neq \lambda_n$ ，即得 $\int_a^b \rho(x) y_n(x) y_m^*(x) dx = 0$

证毕



本征函数族的完备性

4 本征函数族 $\{y_n(x)\}_{n=1}^{\infty}$ 在区间 $[a, b]$ 上是完备的

🌴 从而，区间 $[a, b]$ 上任意一个解析良好的函数 $f(x)$ ，只要与本征函数族满足相同的边界条件，就一定可以用 $\{y_n(x)\}_{n=1}^{\infty}$ 展开为广义 Fourier 级数 $f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} f_n y_n(x)$

🔍 注 这个结论显然很重要，因为本征函数族的完备性是分离变量法的理论基础

🌵 完备性的证明比较困难，这里只要求掌握结论

本征函数族的完备性

4 本征函数族 $\{y_n(x)\}_{n=1}^{\infty}$ 在区间 $[a, b]$ 上是完备的

从而，区间 $[a, b]$ 上任意一个解析良好的函数 $f(x)$ ，只要与本征函数族满足相同的边界条件，就一定可以用 $\{y_n(x)\}_{n=1}^{\infty}$ 展开为广义 Fourier 级数 $f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} f_n y_n(x)$

注 这个结论显然很重要，因为本征函数族的完备性是分离变量法的理论基础

完备性的证明比较困难，这里只要求掌握结论

定义本征函数的模 $\|y_n(x)\| \equiv \sqrt{\int_a^b y_n^*(x) y_n(x) \rho(x) dx}$ ，结合带权正交关系，有

$$\int_a^b y_n^*(x) y_k(x) \rho(x) dx = \delta_{nk} \|y_k(x)\|^2$$

$$\int_a^b y_n^*(x) f(x) \rho(x) dx = \sum_{k=1}^{\infty} \int_a^b y_n^*(x) f_k y_k(x) \rho(x) dx = \sum_{k=1}^{\infty} f_k \delta_{nk} \|y_k(x)\|^2 = f_n \|y_n(x)\|^2$$

于是，展开系数的计算公式为 $f_n = \frac{1}{\|y_n(x)\|^2} \int_a^b y_n^*(x) f(x) \rho(x) dx \quad (n \in \mathbb{N}^+)$