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：2024 年 12 月 3 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 $k(x)\equiv\exp\left(\int_{x_0}^{x}P(\xi)\,\mathrm{d}\xi\right)$，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

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

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

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

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

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[k(x)\frac{\mathrm{d}y(x)}{\mathrm{d}x}\right] - q(x)y(x) + \lambda\rho(x)y(x) = 0$$

$$(a < x < b)$$

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 $\begin{cases} y''(x)+\lambda y(x)=0 \quad (a<x<b) \\ (\alpha y'-\beta y)\big|_{x=a}=0, \quad (\gamma y'+\delta y)\big|_{x=b}=0 \end{cases}$

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 $\begin{cases} y''(x) + \lambda y(x) = 0 \quad (a < x < b) \\ (\alpha y' - \beta y)\big|_{x=a} = 0, \quad (\gamma y' + \delta y)\big|_{x=b} = 0 \end{cases}$

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** $\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[(1 - x^2)\dfrac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right] + \lambda y = 0 \quad (-1 < x < 1) \\ |y(\pm 1)| < \infty \end{cases}$

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**

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

- 作**变量替换** $\rho\to x$ 和 $R\to y$，改写成

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

- 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 $k(x)=x$，$q(x)=\dfrac{m^2}{x}$，$\rho(x)=x$
- 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**

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

- 作**变量替换** $r\to x$，$R\to y$，$\lambda\to\lambda_l$，$k^2\to\lambda$，改写成

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(x^2\dfrac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right)-\lambda_l y+\lambda x^2 y=0 \quad (0<x<a) \\ y(0)=0 \ \text{或} \ |y(0)|<\infty, \quad \alpha y'(a)+\beta y(a)=0 \end{cases}$$

- 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**
- λ_l **不是该问题**的本征值，而是

由**角向方程的本征值问题**决定的

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**

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

作**变量替换** $r \to x$，$R \to y$，$\lambda \to \lambda_l$，$k^2 \to \lambda$，改写成

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(x^2\dfrac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right) - \lambda_l y + \lambda x^2 y = 0 \quad (0 < x < a) \\ y(0) = 0 \ \text{或}\ |y(0)| < \infty, \quad \alpha y'(a) + \beta y(a) = 0 \end{cases}$$

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**

λ_l **不是该问题**的本征值，而是由**角向方程的本征值问题**决定的

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**

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

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**

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

这里有 $k(x)=1$，$q(x)=0$，$\rho(x)=1$

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

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

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

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

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

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

对方程两边积分

两边对 x 从 a 到 b 积分，有

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

由 $y^*(x) \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[k(x)\dfrac{\mathrm{d}y(x)}{\mathrm{d}x}\right] = \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[k(x)y^*(x)\dfrac{\mathrm{d}y(x)}{\mathrm{d}x}\right] - \left[\dfrac{\mathrm{d}y(x)}{\mathrm{d}x}\right]^* k(x)\dfrac{\mathrm{d}y(x)}{\mathrm{d}x}$ 得

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

对方程两边积分

两边对 x 从 a 到 b 积分，有

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

由 $y^*(x)\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[k(x)\dfrac{\mathrm{d}y(x)}{\mathrm{d}x}\right] = \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[k(x)y^*(x)\dfrac{\mathrm{d}y(x)}{\mathrm{d}x}\right] - \left[\dfrac{\mathrm{d}y(x)}{\mathrm{d}x}\right]^* k(x)\dfrac{\mathrm{d}y(x)}{\mathrm{d}x}$ 得

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

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 $\int_a^b q(x)|y(x)|^2\,\mathrm{d}x \geq 0$ 和 $\int_a^b k(x)|y'(x)|^2\,\mathrm{d}x \geq 0$

由此得到第三步不等式

不等式分析一

$$\lambda\int_a^b \rho(x)|y(x)|^2\,\mathrm{d}x \geq k(a)y^*(a)y'(a)-k(b)y^*(b)y'(b)$$

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

🔥 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

$$\lambda\int_a^b \rho(x)|y(x)|^2\,\mathrm{d}x \geq k(a)y^*(a)y'(a)-k(b)y^*(b)y'(b)$$

- 注意 $\rho(x)\geq 0$，而且一般只在端点处才可能取零，因此 $\int_a^b \rho(x)|y(x)|^2\,\mathrm{d}x > 0$
- 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 $y'(a)=\dfrac{\beta}{\alpha}y(a)$，而且有 $k(a)>0$ 和 $y(a)\neq 0$，从而 $k(a)y^*(a)y'(a)=\dfrac{\beta}{\alpha}k(a)|y(a)|^2>0$
- 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

$$\lambda \int_a^b \rho(x)|y(x)|^2\,\mathrm{d}x \geq k(a)y^*(a)y'(a) - k(b)y^*(b)y'(b)$$

- 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 $y'(b)=-\dfrac{\delta}{\gamma}y(b)$，而且有 $k(b)>0$ 和 $y(b)\neq 0$，从而 $-k(b)y^*(b)y'(b)=\dfrac{\delta}{\gamma}k(b)|y(b)|^2>0$
- 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

$$\lambda \int_a^b \rho(x)|y(x)|^2 \, \mathrm{d}x \geq k(a)y^*(a)y'(a) - k(b)y^*(b)y'(b)$$

- 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 $y'(b) = -\dfrac{\delta}{\gamma} y(b)$，而且有 $k(b) > 0$ 和 $y(b) \neq 0$，从而 $-k(b)y^*(b)y'(b) = \dfrac{\delta}{\gamma} k(b)|y(b)|^2 > 0$
- 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 $\lambda_n\ (n \in \mathbb{N}^+)$，相应的本征函数为 $y_n(x)$，满足

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

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

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

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

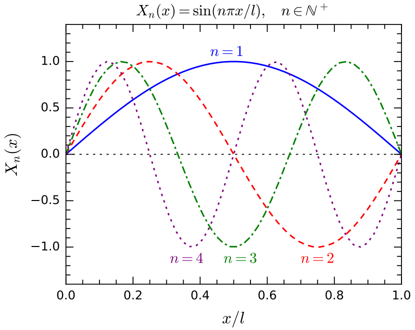
例如，对于本征值问题

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

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

$$\int_a^b y_m^*(x) y_n(x) \rho(x)\, \mathrm{d}x = 0 \quad (\lambda_m \neq \lambda_n)$$

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

$$\int_a^b y_m^*(x)y_n(x)\rho(x)\,\mathrm{d}x = 0 \quad (\lambda_m \neq \lambda_n)$$

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 $\{\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\phi}, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\phi}\}_{m=0}^{\infty}$

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

$$\int_a^b y_m^*(x)y_n(x)\rho(x)\,\mathrm{d}x=0\quad(\lambda_m\neq\lambda_n)$$

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 $\{\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\phi},\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\phi}\}_{m=0}^{\infty}$

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

证明正交性

证明 将 $y_n(x)$ 的方程 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[k(x)\dfrac{\mathrm{d}y_n(x)}{\mathrm{d}x}\right] - q(x)y_n(x) + \lambda_n\rho(x)y_n(x) = 0$ 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

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

证明正交性

证明 将 $y_n(x)$ 的方程 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[k(x)\dfrac{\mathrm{d}y_n(x)}{\mathrm{d}x}\right]-q(x)y_n(x)+\lambda_n\rho(x)y_n(x)=0$ 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

减

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

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

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

- 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

$$(\lambda_m-\lambda_n)\int_a^b \rho(x)y_n(x)y_m^*(x)\,\mathrm{d}x = \int_a^b [k(x)y_m^*(x)y_n'(x)-k(x)y_m'^*(x)y_n(x)]'\,\mathrm{d}x$$
$$= k(x)[y_m^*(x)y_n'(x)-y_m'^*(x)y_n(x)]\Big|_a^b$$

- 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 $\alpha y_m'^*(a)-\beta y_m^*(a)=0$，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

$$(\lambda_m - \lambda_n)\int_a^b \rho(x)y_n(x)y_m^*(x)\,\mathrm{d}x = k(x)[y_m^*(x)y_n'(x) - y_m'^*(x)y_n(x)]\Big|_a^b$$

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 $\gamma y_m'^*(b)+\delta y_m^*(b)=0$，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

$$(\lambda_m-\lambda_n)\int_a^b \rho(x)y_n(x)y_m^*(x)\,\mathrm{d}x = k(x)[y_m^*(x)y_n'(x)-y_m'^*(x)y_n(x)]\Big|_a^b$$

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 $\gamma y_m'^*(b)+\delta y_m^*(b)=0$，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 $\displaystyle\int_a^b \rho(x)y_n(x)y_m^*(x)\,\mathrm{d}x=0$　　**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 $f(x)=\sum\limits_{n=1}^{\infty} f_n y_n(x)$

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 $\|y_n(x)\| \equiv \sqrt{\int_a^b y_n^*(x) y_n(x) \rho(x)\,\mathrm{d}x}$，结合带权正交关系，有

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

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

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