2.6 Zur Orthonormierung und Vollständigkeit [Arfken 10.3-4]

Wenn es mehrere Eigenfunktionen zum selben Eigenwert gibt (man spricht dann von „Entartung"), sind Eigenfunktionen nicht automatisch orthogonal zueinander. Mit Hilfe des Gram-Schmidt-Verfahrens (vgl. Seite 16) kann eine gegebene Basis aber immer orthonormiert werden.

Sei $\langle u_n | u_m \rangle = \int_a^b dx\, w(x)\, u_n^*(x) u_m(x)$ und $\{u_n(x)\}$, $n = 1, 2, \ldots$, eine Menge linear unabhängiger Funktionen. Wir definieren:

* $$|v_1\rangle := \frac{|u_1\rangle}{\| u_1 \|} \quad ; \quad \| u_1 \| = \sqrt{\int_a^b dx\, w(x)\, |u_1(x)|^2} \, .$$

$$\Leftrightarrow \quad \langle v_1 | v_1 \rangle = \frac{\langle u_1 | u_1 \rangle}{\| u_1 \|^2} = 1 \, .$$

* Betrachte $|u_2\rangle - \alpha |v_1\rangle$. Wähle α so, dass diese Funktion orthogonal zu $|v_1\rangle$ ist:

$$0 = \langle v_1 | u_2 \rangle - \alpha \underbrace{\langle v_1 | v_1 \rangle}_{1} \quad \Rightarrow \quad \alpha = \langle v_1 | u_2 \rangle$$

Die Funktion
$$|u_2\rangle - \langle v_1 | u_2 \rangle |v_1\rangle = |u_2\rangle - \frac{\langle u_1 | u_2 \rangle}{\| u_1 \|^2} |u_1\rangle$$
kann nicht Nullfunktion sein, weil $|u_1\rangle$ und $|u_2\rangle$ linear unabhängig sind. Deshalb ist $\| u_2 - \alpha v_1 \| \neq 0$, und wir erhalten $|v_2\rangle$:

$$|v_2\rangle := \frac{|u_2\rangle - \langle v_1 | u_2 \rangle |v_1\rangle}{\| u_2 - \langle v_1 | u_2 \rangle v_1 \|} \, .$$

* Induktiv:

$$|v_{k+1}\rangle := \frac{|u_{k+1}\rangle - \sum_{i=1}^{k} \langle v_i | u_{k+1} \rangle |v_i\rangle}{\| u_{k+1} - \sum_{i=1}^{k} \langle v_i | u_{k+1} \rangle v_i \|} \, .$$

Diese ist orthogonal zu <u>jeder</u> $|v_\ell\rangle$, $\ell \leq k$:

$$\langle v_\ell | v_{k+1} \rangle = \frac{1}{\| \ldots \|} \left\{ \langle v_\ell | u_{k+1} \rangle - \sum_{i=1}^{k} \langle v_i | u_{k+1} \rangle \underbrace{\langle v_\ell | v_i \rangle}_{\delta_{\ell i}} \right\}$$

$$= \frac{1}{\| \ldots \|} \left\{ \langle v_\ell | u_{k+1} \rangle - \langle v_\ell | u_{k+1} \rangle \right\} = 0 \, .$$

* Das Ganze gilt nur im abzählbaren Fall. Glücklicherweise ist dies keine große Beschränkung in der Physik, weil Entartung in der Regel von abzählbarer Art ist (normalerweise sogar endlich).

Beispiel : Legendre-Polynome sind orthogonale Polynome auf dem Intervall $[-1,1]$ mit Gewichtsfunktion $w(x)=1$.

(Die entsprechende Differenzialgleichung lautet
$$\frac{d}{dx}\left[(1-x^2)\frac{df}{dx}\right] + n(n+1)f = 0 \quad ;$$
als Randbedingung kann $(1-x^2)f'\big|_{x=\pm 1} = 0$ gewählt werden.)

Ansatz: $u_n(x) = x^n, \quad n = 0,1,2,\dots$

* $\|u_0\| = \sqrt{\int_{-1}^{+1} dx\ 1^2} = \sqrt{2} \Rightarrow v_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}$

* $u_1(x) = x$

$$\Rightarrow \langle v_0|u_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\int_{-1}^{+1} dx\ x = \frac{1}{\sqrt{2}}\cdot\left[\frac{x^2}{2}\right]_{-1}^{1} = 0$$

$$\Rightarrow v_1(x) = \frac{u_1(x) - \langle v_0|u_1\rangle v_0(x)}{\|\dots\|}$$

$$= \frac{x}{\|\dots\|}, \quad \text{wobei}$$

$$\|\dots\| = \sqrt{\int_{-1}^{+1} dx\ x^2} = \sqrt{\left[\frac{x^3}{3}\right]_{-1}^{1}} = \sqrt{\frac{2}{3}}$$

$$\Rightarrow v_1(x) = \sqrt{\frac{3}{2}}\,x \,.$$

* $u_2(x) = x^2$

$$\Rightarrow \langle v_0|u_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\int_{-1}^{+1} dx\, x^2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\frac{x^3}{3}\right]_{-1}^{1} = \frac{\sqrt{2}}{3}$$

$$\langle v_1|u_2\rangle = \sqrt{\frac{3}{2}}\int_{-1}^{+1} dx\, x^3 = 0$$

$$\Rightarrow v_2(x) = \frac{x^2 - \frac{\sqrt{2}}{3}\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}}{\|\dots\|} = \frac{x^2-\frac{1}{3}}{\|\dots\|}, \quad \text{wobei}$$

$$\|\dots\| = \sqrt{\int_{-1}^{+1} dx\,\left(x^2-\frac{1}{3}\right)^2} = \sqrt{\int_{-1}^{+1} dx\,\left(x^4-\frac{2}{3}x^2+\frac{1}{9}\right)}$$

$$= \sqrt{\frac{2}{5}-\frac{2}{3}\cdot\frac{2}{3}+\frac{2}{9}} = \sqrt{\frac{2(9-5)}{9\cdot 5}} = \frac{2}{3}\sqrt{\frac{2}{5}}$$

$$\Rightarrow v_2(x) = \frac{3}{2}\sqrt{\frac{5}{2}}\left(x^2-\frac{1}{3}\right)^{+}.$$

+ Durch Gram-Schmidt finden wir nichttriviale Lösungen der Differenzialgleichung, ohne diese gar nicht zu lösen!

(Bemerkung: Aus historischen Gründen werden Legendre-Polynome als $P_n(x) := \sqrt{\frac{2}{2n+1}}\, v_n(x)$ definiert. Folglich gilt $\int_{-1}^{+1} dx\ P_m(x)P_n(x) = \frac{2\delta_{mn}}{2n+1}$. Wenn auch die Vorzeichen angemessen gewählt werden, gilt dann $P_n(1)=1\ \forall n$. Als Koordinate x dient oft $\cos\theta$, wobei θ den Winkel bzgl. z-Achse der Kugelkoordinaten bezeichnet.)

Vollständigkeit:

Bei einer allgemeinen Basis aus Eigenfunktionen kann die Frage der Vollständigkeit ähnlich wie bei der Fourier-Reihe betrachtet werden: in der Praxis können Basen als „punktweise" vollständig behandelt werden (vgl. Seite 42), während mathematisch gesehen nur Vollständigkeit „im quadratischen Mittel" vorhanden ist (vgl. S. 43).

Sei $f(x)$ eine Funktion mit gegebenen Randbedingungen, und $\{v_n(x)\}$, $n = 1, 2, \ldots$, eine orthonormierte Basis.

Die Koordinaten bzgl. dieser Basis:

$$c_n = \langle v_n | f \rangle = \int_a^b dx\, w(x)\, v_n^*(x)\, f(x) .$$

Die vorläufige Darstellung von f in dieser Basis:

$$f_D(x) = \lim_{k \to \infty} f_D^{(k)}(x) \quad ;$$

$$f_D^{(k)}(x) = \sum_{n=1}^{k} c_n v_n(x) .$$

Die Basis ist „punktweise" vollständig, wenn

$$f_D(x) = f(x), \quad \text{d.h.}$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \underbrace{\int_a^b dy\, w(y)\, v_n^*(y)\, f(y)}_{c_n}\, v_n(x) = f(x) \quad \forall x \in (a,b)$$

$$\text{„}\Rightarrow\text{"} \quad \boxed{\sum_{n=1}^{\infty} v_n(x)\, v_n^*(y) = \frac{\delta(x-y)}{w(y)}} .$$

Weniger restriktiv und mathematisch besser definiert ist Konvergenz im quadratischen Mittel. Sei L_2 der Raum quadratisch integrierbarer Funktionen, „Hilbert-Raum".

Es gilt:

$$0 \leq \| f - f_D^{(k)} \|_{L_2}^2$$

$$= \langle f - \sum_{n=1}^{k} c_n v_n \,|\, f - \sum_{m=1}^{k} c_m v_m \rangle$$

$$= \| f \|^2 - \sum_{n=1}^{k} c_n^* \underbrace{\langle v_n | f \rangle}_{c_n} - \sum_{m=1}^{k} c_m \underbrace{\langle f | v_m \rangle}_{c_m^*} + \sum_{n,m=1}^{k} c_n^* c_m \underbrace{\langle v_n | v_m \rangle}_{\delta_{nm}}$$

$$= \| f \|^2 - \sum_{n=1}^{k} |c_n|^2$$

$$\Leftrightarrow \quad \boxed{\sum_{n=1}^{k} |c_n|^2 \leq \| f \|^2}$$

„Besselsche Ungleichung"

(vgl. Seite 43; da waren $|v_n\rangle$ anders normiert, deshalb gab es ein zusätzliches $\frac{1}{2\pi}$)

Für bestimmte Klassen von Funktionen wird aus der Ungleichung im Limes $k \to \infty$ eine Gleichung:

$$\boxed{\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = \|f\|^2}$$

„Parsevalsche Identität"

Dann gilt auch

$$\lim_{k \to \infty} \|f - f_D^{(k)}\|^2 = 0 ,$$

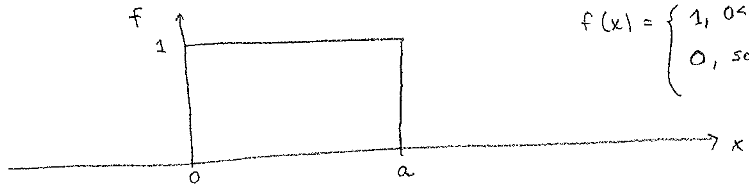
d.h. Konvergenz der Darstellung im quadratischen Mittel ist vorhanden.

Im <u>überabzählbaren Fall</u> ist die entsprechende Bedingung

$$\int dk\, |\tilde{f}(k)|^2 = \|f\|^2 .$$

Notation aus Seite 48

<u>Beispiel:</u>



$$f(x) = \begin{cases} 1, & 0<x<a \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Fourier-Integral, vgl. Seite 45

$$\tilde{f}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, f(x) e^{-ikx} = \int_0^a dx\, e^{-ikx} = \frac{1}{-ik}\left(e^{-ika} - 1\right)$$

$$= \frac{1}{-ik} e^{\frac{-ika}{2}} \left(e^{\frac{-ika}{2}} - e^{\frac{ika}{2}}\right)$$

$$|\tilde{f}(k)| = \frac{2}{k}\left|\sin\left(\frac{ak}{2}\right)\right|$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} |\tilde{f}(k)|^2 = \frac{2}{\pi} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} dk\, \frac{1}{k^2} \sin^2\left(\frac{ak}{2}\right) \qquad \Big| \; k = \frac{2q}{a}, \; dk = \frac{2}{a} dq$$

$$= \frac{a}{\pi} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dq\, \frac{\sin^2(q)}{q^2}}_{\pi}$$

$$= a .$$

$$\|f\|^2 = \int_0^a dx = a \qquad \Rightarrow \quad \text{OK!}$$

<u>Zusammenfassung:</u> Wenn $f \in L_2$, garantiert die Besselsche Ungleichung, dass auch $\tilde{f} \in L_2$. Wenn die Parsevalsche Identität erfüllt ist, gilt $\|f - f_D\|_{L_2} = 0$, d.h. keine Information ging verloren, d.h. die Transformation ist keine Projektion, d.h. die gewählte Basis ist „vollständig" für die gewählte Klasse von Funktionen.*

---

* Dies alles „im quadratischen Mittel".