1.4 Selbstadjungierte Differenzialoperatoren [Arfken 8.1-2]

Im Kapitel 1.3 wurde die allgemeine Struktur linearer Basistransformationen in Funktionenräumen diskutiert. Jetzt möchten wir unterschiedliche Basen als Eigenfunktionen linearer Differenzialoperatoren verstehen.

(Man spricht hier vom „Sturm-Liouville-Problem".)
1803–1855 1809–1882

Sei vorerst $f: [a,b] \to \mathbb{R}$ eine mindestens zweimal differenzierbare Funktion, und $\mathcal{L}$ ein linearer Differenzialoperator zweiter Ordnung:

$$\mathcal{L} := p_0(x)\frac{d^2}{dx^2} + p_1(x)\frac{d}{dx} + p_2(x)\,.$$

Die Funktion $p_0(x)$ sei zweimal differenzierbar und besitze keine Nullstellen im (a,b); $p_1(x)$ sei einmal differenzierbar; $p_2(x)$ sei kontinuierlich.

Wir betrachten das Skalarprodukt $\langle g|\mathcal{L}f\rangle := \int_a^b dx\, g(x)\,\mathcal{L}f(x)$.
Unter welchen Umständen* ist $\langle g|\mathcal{L}f\rangle = \langle \mathcal{L}g|f\rangle$?

* Vgl. mit linearer Algebra: Eine lineare Abbildung sei „selbstadjungiert", wenn
$\langle \vec{u}, M(\vec{v})\rangle = \langle M(\vec{u}), \vec{v}\rangle \;\forall\, \vec{u},\vec{v}$.
Die entsprechende Matrix ist symmetrisch, denn

$$M_{ji} = \langle \vec{e}_j, M(\vec{e}_i)\rangle \underset{\text{Skalarprodukt}}{=} \langle M(\vec{e}_i), \vec{e}_j\rangle \underset{\text{Selbstadj.}}{=} \langle \vec{e}_i, M(\vec{e}_j)\rangle = M_{ij}\,.$$

Führe partielle Integrationen durch:

$$\langle g|\mathcal{L}f\rangle = \int_a^b dx\, g\left[p_0\frac{d^2f}{dx^2} + p_1\frac{df}{dx} + p_2 f\right]$$

$$g p_1 \frac{df}{dx} = \frac{d}{dx}(g p_1 f) - f\frac{d}{dx}(g p_1) = \frac{d}{dx}(g p_1 f) - f p_1' g - f p_1 g'$$

$$g p_0 \frac{d^2 f}{dx^2} = \frac{d}{dx}\left(g p_0 \frac{df}{dx}\right) - \frac{df}{dx}\frac{d}{dx}(g p_0)$$
$$= \frac{d}{dx}\left(g p_0\frac{df}{dx}\right) - \frac{d}{dx}\left(f\frac{d}{dx}(g p_0)\right) + f\frac{d^2(g p_0)}{dx^2}$$
$$= \frac{d}{dx}\left(g p_0 f' - f p_0 g' - f p_0' g\right) + f\left(g'' p_0 + 2g' p_0' + g p_0''\right)$$

$$= \Big[g(p_1 - p_0')f + g p_0 f' - f p_0 g'\Big]_a^b + \int_a^b dx\, f\left[p_0\frac{d^2 g}{dx^2} + (2p_0' - p_1)\frac{dg}{dx} + (p_0'' - p_1' + p_2)\,g\right]$$

Das Integral hat die gewünschte Form, falls $\begin{cases} 2p_0' - p_1 = p_1 \\ p_0'' - p_1' + p_2 = p_2 \end{cases}$,
d.h. $\boxed{p_0' = p_1}$.

Falls der Randterm wegfällt (mehr dazu später), gilt also $\langle g|\mathcal{L}f\rangle = \langle \mathcal{L}g|f\rangle$, und $\mathcal{L}$ wird selbstadjungiert genannt.
Ein selbstadjungierter Differenzialoperator stellt eine Verallgemeinerung einer symmetrischen Matrix dar.

Allgemeine Form des selbstadjungierten Operators

Seite 13 mit $p_0' = p_1$: $\mathcal{L} = p_0 \frac{d^2}{dx^2} + p_0' \frac{d}{dx} + p_2$.

Wenn wir $p_0 \to p$ und $p_2 \to q$ setzen, ist also

$$\boxed{\mathcal{L} f(x) = \frac{d}{dx}\left[p(x) \frac{df}{dx} \right] + q(x) f(x)} .$$

Beispiele: MMP II → Laplace-Operator in Kugelkoordinaten:

$$\nabla^2 f = \underbrace{\frac{\partial^2 f}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial f}{\partial r}}_{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left[r^2 \frac{\partial f}{\partial r}\right]} + \frac{1}{r^2}\left[\underbrace{\frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan\theta}\frac{\partial f}{\partial \theta}}_{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left[\sin\theta \frac{\partial f}{\partial \theta}\right]} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} \right]$$

Bemerkungen:

* Ob $\mathcal{L}$ selbstadjungiert ist oder nicht, hängt von der gewählten Klasse der Funktionen ab, insbesondere von den Randbedingungen bei $x = a$ und $x = b$.

* Auch ein anderer $\mathcal{L}$, mit $p_0' \neq p_1$, kann in die gewünschte Form gebracht werden: Multiplikation durch $\frac{1}{p_0(x)} \exp\left[\int^x dt \frac{p_1(t)}{p_0(t)} \right]$ ergibt nämlich

$$\frac{1}{p_0(x)} \exp\left[\int^x dt \frac{p_1}{p_0}\right] \left\{ p_0 f'' + p_1 f' + p_2 f \right\}$$

$$= \exp\left[\int^x dt \frac{p_1}{p_0}\right] f'' + \frac{p_1}{p_0} \exp\left[\int^x dt \frac{p_1}{p_0}\right] f' + \frac{p_2}{p_0} \exp\left[\int^x dt \frac{p_1}{p_0}\right] f$$

$$= \frac{d}{dx}\left\{ \underbrace{\exp\left[\int^x dt \frac{p_1}{p_0}\right]}_{=:\, p(x)} f' \right\} + \underbrace{\frac{p_2}{p_0} \exp\left[\int^x dt \frac{p_1}{p_0}\right]}_{=:\, q(x)} f .$$

(Hier spielt die Voraussetzung $p_0(x) \neq 0$ eine wichtige Rolle.)

* Wie ist es bei Differenzialoperatoren erster Ordnung? Setze $p_0(x) \to 0$ auf Seite 13

$$\Rightarrow \int_a^b dx\, g\left[p_1 \frac{df}{dx} + p_2 f \right] = \left[g p_1 f \right]_a^b + \int_a^b dx\, f \left[-p_1 \frac{dg}{dx} + (-p_1' + p_2) g \right]$$

$$\Rightarrow \begin{cases} p_1 = -p_1 \\ -p_1' = 0 \end{cases} \Rightarrow p_1 = 0 \Rightarrow \text{nicht möglich!}$$

Eigenwerte und Eigenfunktionen

Man würde erwarten: $\mathcal{L} f(x) = \lambda f(x)$, $f(x) \neq 0$.

Dies wird aber ein wenig verallgemeinert, und mit neuer Notation ausgedrückt:

Definition: Wenn es eine nichttriviale Funktion, $u(x) \neq 0$, gibt, die die gegebenen Randbedingungen sowie die Differenzialgleichung

$$\mathcal{L} u(x) + \lambda w(x) u(x) = 0$$

erfüllt, dann wird $u(x)$ die Eigenfunktion zum Eigenwert λ genannt. Die Funtion $w(x)$, genannt die Gewichtsfunktion, sei positiv, $w(x) > 0$, ausser einzelner Punkte mit $w(x) = 0$.

Bemerkungen:

* Mit Notation von Seite 14:

$$\underbrace{\frac{1}{w} \left\{ -\frac{d}{dx} p \frac{d}{dx} - q \right\}}_{\text{„Sturm-Liouville-Operator"}} u(x) = \lambda u(x)$$

* Es gibt keinen eindeutigen Unterschied zwischen $q(x)u(x)$ und $\lambda w(x) u(x)$. Normalerweise wird der „bekannte" Teil von $\mathcal{L}$ ohne Ableitungen als $q(x)$ interpretiert, während $\lambda w(x)$ den „zu bestimmenden" Eigenwert enthält.

* Wie wir im Kapitel 1.5 sehen werden, sind die Eigenfunktionen orthogonal zueinander nur wenn die Gewichtsfunktion als Teil der Definition des Skalarprodukts betrachtet wird:

$$\langle u_i | u_j \rangle := \int_a^b dx \; w(x) \, u_i(x) \, u_j(x) \, .$$

So könnte auch die Betrachtung aus Seite 13 neu interpretiert werden:

$$\langle g | \mathcal{L} f \rangle = \int_a^b dx \; w(x) \, g(x) \underbrace{\frac{1}{w(x)} \mathcal{L}}_{-(\text{Sturm-Liouville-Operator})} f(x) \, .$$

Randbedingungen

Randterm aus Seite 13 (mit $p_0' = p_1$, $p_0 \to p$): $\left[g\,p\,f' - f\,p\,g' \right]_a^b$.

Dieser verschwindet, wenn

* alle Funktionen bei $x=a$ und $x=b$ verschwinden: $f(b)=f(a)=g(b)=g(a)=0$.
  Dann spricht man von Dirichlet- Randbedingungen.
  1805–1859
* alle Ableitungen bei $x=a$ und $x=b$ verschwinden: $f'(b)=f'(a)=g'(b)=g'(a)=0$.
  Dann spricht man von Neumann – Randbedingungen.
  1832–1925
* eine allgemeinere Möglichkeit: $\cos(\alpha)\,\Psi(a) + \sin(\alpha)\,p(a)\,\Psi'(a) = 0$;
  $\cos(\beta)\,\Psi(b) + \sin(\beta)\,p(b)\,\Psi'(b) = 0$,

  wobei $\Psi = f, g$ und die Winkel α, β frei gewählt werden können.

  Denn: $g(a)\,p(a)\,f'(a) - f(a)\,p(a)\,g'(a)$
  $= g(a)\left(-\frac{\cos(\alpha)}{\sin(\alpha)}\right) f(a) - f(a)\left(-\frac{\cos(\alpha)}{\sin(\alpha)}\right) g(a) = 0$, und ähnlich bei $x=b$.

* eine andere Möglichkeit ist, dass eine Kürzung zwischen a und b stattfindet, z.B. wenn die Funktionen und ihre Ableitungen periodisch sind. (Genauer: $\Psi(b) = \Psi(a)$ & $p(b)\Psi'(b) = p(a)\Psi'(a)$.)

Beispiel: $\mathcal{L} := \frac{d^2}{dx^2}$; $a := 0$; $b := 2\pi$; $w(x) := 1$

$$\Rightarrow \quad \frac{d^2u}{dx^2} + \lambda u = 0$$

$\boxed{\lambda > 0}$ $\Rightarrow$ $u = A\cos(\sqrt{\lambda}x) + B\sin(\sqrt{\lambda}x)$.

* Dirichlet: $(u(0)=u(2\pi)=0)$
  $u(0) = A = 0$
  $u(2\pi) = B\sin(\sqrt{\lambda}\cdot 2\pi) = 0 \Rightarrow \sqrt{\lambda} = \frac{n}{2}, n \in \mathbb{N}^+$.

* Neumann: $(u'(0) = u'(2\pi) = 0)$

  $u' = \sqrt{\lambda}\left(-A\sin(\sqrt{\lambda}x) + B\cos(\sqrt{\lambda}x)\right)$

  $u'(0) = \sqrt{\lambda}B = 0 \Rightarrow B = 0$ oder $\lambda = 0$

  (i) $\lambda = 0 \Rightarrow u = A \Rightarrow u'(2\pi) = 0$
  $\Rightarrow$ Ok!

  (ii) $B = 0 \Rightarrow u = A\cos(\sqrt{\lambda}x)$
  $\Rightarrow u'(2\pi) = -\sqrt{\lambda}A\sin(\sqrt{\lambda}2\pi)$
  $= 0$
  $\Rightarrow \sqrt{\lambda} = \frac{n}{2}, \; n \in \mathbb{N}^+$

  (i) & (ii): Eigenwerte sind wie beim Dirichlet, ausser dass $\lambda=0$ jetzt erlaubt ist.

* periodisch:
  $$\begin{cases} u(2\pi) = u(0) \Leftrightarrow A = A\cos(\sqrt{\lambda}2\pi) + B\sin(\sqrt{\lambda}2\pi) \\ u'(2\pi) = u'(0) \Leftrightarrow B = B\cos(\sqrt{\lambda}2\pi) - A\sin(\sqrt{\lambda}2\pi) \end{cases}$$

  Eine nichttriviale Lösung existiert falls

  $$\det\begin{pmatrix} \cos(\sqrt{\lambda}2\pi) - 1 & \sin(\sqrt{\lambda}2\pi) \\ -\sin(\sqrt{\lambda}2\pi) & \cos(\sqrt{\lambda}2\pi) - 1 \end{pmatrix} = 0,$$

  d.h. $\left[\cos(\sqrt{\lambda}2\pi) - 1\right]^2 + \sin^2(\sqrt{\lambda}2\pi) = 0$,

  d.h. $\sin(\sqrt{\lambda}2\pi) = 0 \;\wedge\; \cos(\sqrt{\lambda}2\pi) = 1$,

  d.h. $\sqrt{\lambda} = n, \quad n \in \mathbb{Z}$.

$\boxed{\lambda < 0}$ $\Rightarrow$ $u = A\,e^{-\sqrt{|\lambda|}x} + B\,e^{\sqrt{|\lambda|}x}$

* Dirichlet: $(u(0)=u(2\pi)=0)$
  $u(0) = A + B = 0 \Rightarrow B = -A$
  $u(2\pi) = A\left(e^{-\sqrt{|\lambda|}2\pi} - e^{\sqrt{|\lambda|}2\pi}\right) = 0 \Rightarrow \lambda = 0$ ↯
  Keine negativen Eigenwerte existieren!

—— o —— o ——