1.6 Zur Orthonormierung und Vollständigkeit [Arfken 5.1, 8.3]

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 kann eine gegebene Basis aber immer orthonormiert werden.

1850-1916 1876-1959

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:

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

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

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

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

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 jeder $|v_\ell\rangle$, $\ell \leq k$:

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

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

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

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

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

* $u_1(x) = x$

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

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

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

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

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

* $u_2(x) = x^2$

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

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

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

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

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

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

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

$$f = x^2 - \tfrac{1}{3}$$
$$\frac{df}{dx} = 2x$$
$$\frac{d}{dx}\left[(1-x^2)2x\right] = 2 - 6x^2 = -6\left(x^2-\tfrac{1}{3}\right)$$
$$n=2 \Rightarrow n(n+1) = +6\,!$$

(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 6), während mathematisch gesehen nur Vollständigkeit „im quadratischen Mittel" vorhanden ist (vgl. S. 7).

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:

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

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

Die Basis ist „punktweise" vollständig, wenn

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

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

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

Weniger restriktiv und mathematisch besser definiert ist Konvergenz im quadratischen Mittel. Sei L_2 der Raum quadratisch integrierbarer Funktionen, „Hilbert-Raum".
1862 – 1943

Es gilt:

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

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

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

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

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

„Besselsche Ungleichung"
1784 – 1846

(vgl. Seite 7; 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" (1755-1836)

Dann gilt auch

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

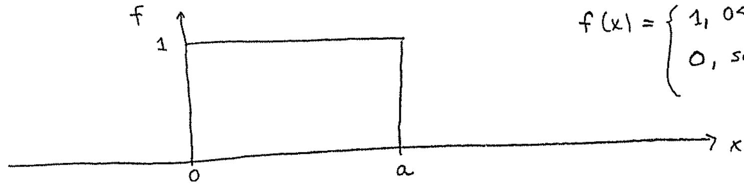
d.h. Konvergenz im quadratischen Mittel ist vorhanden.

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

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

(Notation aus Seite 12)

Beispiel:



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

(Fourier-Integral, vgl: Seite 9)

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

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

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

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

$$= \frac{a}{\pi} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dq \, \frac{\sin^2(q)}{q^2}}_{\pi \text{ (z.B. Seite 60)}}$$

$$= a .$$

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

Zusammenfassung: 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".