

Fizyka dla firm — Matematyka

30. Wielomiany ortogonalne

P. F. Góra

https://zfs.fais.uj.edu.pl/pawel_gora

5 kwietnia 2023

Materiał tego wykładu nie wchodzi w zakres wymagań egzaminacyjnych

Przestrzeń L_2

Rozważmy pewien przedział $D \subset \mathbb{R}$ — domknięty lub niewłaściwy. Interesować będą nas trzy przypadki:

$$D = \begin{cases} [-1, 1] & \text{lub} \\ [0, +\infty) & \text{lub} \\ (-\infty, +\infty) \end{cases} \quad (1)$$

Zauważmy, że za pomocą liniowej zmiany zmiennych każdy przedział domknięty można przeprowadzić w przedział $[-1, 1]$, a każdy przedział jednostronnie nieskończony w przedział $[0, +\infty)$.

Niech będzie określona funkcja $w(x)$ o tej własności, że $\forall x \in D : w(x) > 0$. Rozważmy teraz zbiór funkcji $f : D \rightarrow \mathbb{C}$ (funkcje zespolone argumentu

rzeczywistego). Dodatkowo utożsammy ze sobą wszystkie funkcje różniące się pomiędzy sobą co najwyżej dla przeliczalnej liczby argumentów. Definiuję

$$L_2(D, w) = \left\{ f : D \rightarrow \mathbb{C} : \int_D w(x) |f(x)|^2 dx < +\infty \right\} \quad (2)$$

Jest to zbiór funkcji *całkowalnych z kwadratem* z wagą $w(x)$ na przedziale D .

Twierdzenie: Przestrzeń $L_2(D, w)$ jest przestrzenią liniową.

Jedynym nietrywialnym punktem jest stwierdzenie, że kombinacja liniowa funkcji całkowalnych z kwadratem jest całkowalna z kwadratem. Istotnie,

$$\begin{aligned} \int_D w(x) |\alpha f(x) + \beta g(x)|^2 dx &\leq \int_D w(x) (|\alpha f(x)|^2 + |\beta g(x)|^2) dx \\ &= |\alpha|^2 \int_D w(x) |f(x)|^2 dx \\ &\quad + |\beta|^2 \int_D w(x) |g(x)|^2 dx < +\infty \quad (3) \end{aligned}$$

Iloczyn skalarny w L_2

Niech $f, g \in L_2(D, w)$. Wówczas operacja

$$\langle f|g \rangle = \int_D w(x) f^*(x) g(x) dx \quad (4)$$

jest **iloczynem skalarnym**.

Iloczyn skalarny (4) generuje normę i metrykę w $L_2(D, w)$.

$$\|f\| = \sqrt{\langle f|f \rangle} = \sqrt{\int_D w(x) |f(x)|^2 dx} \quad (5)$$

$$d(f, g) = \|f - g\| = \sqrt{\langle f - g|f - g \rangle} = \sqrt{\int_D w(x) |f(x) - g(x)|^2 dx} \quad (6)$$

Przykład 1

Wielomiany są całkowalne z kwadratem na przedziale $[-1, 1]$ z wagą 1. Zatem, dla przykładu,

$$d(x^2, ax^3) = \|x^2 - ax^3\| = \sqrt{\int_{-1}^1 (x^2 - ax^3)^2 dx} = \sqrt{\frac{2a^2}{7} + \frac{2}{5}} \quad (7)$$

Jest to, zdefiniowana w przestrzeni $L_2([-1, 1], 1)$, odległość *między funkcjami* x^2, ax^3 .

Zupełność

Posiadając pojęcie metryki, możemy zdefiniować granicę ciągów elementów $L_2(D, w)$ (ciągów funkcji całkownych z kwadratem), zastępując w definicjach wartości bezwzględne przez odległość $d(f, g) = \|f - g\|$. Możemy także zdefiniować ciągi Cauchy'ego: Niech $\{f_n \in L_2(D, w)\}_{n=1}^{\infty}$ będzie pewnym ciągiem funkcyjnym. Mówimy, że jest to ciąg Cauchy'ego, jeżeli

$$\forall \varepsilon > 0 \exists n_0 \forall n, m > n_0 : d(f_n - f_m) < \varepsilon \quad (8)$$

Twierdzenie: W przestrzeni $L_2(D, w)$ wszystkie ciągi Cauchy'ego są zbieżne, to znaczy wszystkie ciągi Cauchy'ego posiadają granice, które same należą do $L_2(D, w)$.

Przestrzeń o tej własności nazywam *przestrzenią zupełną*. (Np zbiór liczb wymiernych **nie** jest zupełny, bo ciągi wymierne mogą być zbieżne do liczb niewymiernych.)

Zupełną przestrzeń liniową z zadaniem iloczynem skalarnym nazywam **przestrzenią Hilberta**.

Całkowalność wielomianów

Rozpatrzmy przestrzeń $L_2([-1, 1], 1)$, czyli zbiór wszystkich funkcji o tej własności, że

$$\int_{-1}^1 |f(x)|^2 dx < +\infty \quad (9)$$

1. Wielomian dowolnego stopnia należy do tej przestrzeni. Istotnie, wielomiany są funkcjami ciągłymi, kwadraty ich modułów są funkcjami ciągłymi, a wszystkie funkcje ciągłe na przedziale domkniętym są na tym przedziale całkowne.

2. Wielomiany różnych stopni są liniowo niezależne. Istotnie,

$$\sim \exists \alpha, \beta \in \mathbb{C}, \alpha \neq 0 \wedge \beta \neq 0 : \alpha x^n + \beta x^m \equiv 0 \text{ dla } n \neq m \quad (10)$$

3. Wymiar przestrzeni liniowej to liczba niezależnych liniowo wektorów, jakie się w niej znajdują.

Wypływa stąd wniosek, że przestrzeń $L_2([-1, 1], 1)$ jest nieskończenie wymiarowa.

Ponieważ można łatwo pokazać, że dla dowolnego wielomianu $Q(x)$

$$\int_0^{\infty} |Q(x)|^2 e^{-x} dx < +\infty \quad (11a)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |Q(x)|^2 e^{-x^2} dx \quad (11b)$$

powtarzając powyższe rozumowanie udowadniamy, że przestrzenie $L_2([0, \infty), e^{-x})$, $L_2((-\infty, \infty), e^{-x^2})$ są nieskończenie wymiarowe.

Wielomiany Legendre'a

Skonstruujmy bazę w przestrzeni $L_2([-1, 1], 1)$. Bazą z pewnością jest baza jednomianów $\{1, x, x^2, x^3, \dots, x^n \dots\}$, gdyż każdą funkcję całkowalną z kwadratem da się rozwinąć w szereg Taylora (co najwyżej poza skończoną ilością punktów). Baza jednomianów jest jednak niewygodna. Skonstruujmy **wielomiany ortogonalne**.

Wielomianami Legendre'a nazywam wielomiany $\{P_n(x)\}_{n=0}^{\infty}$, gdzie P_n jest wielomianem stopnia n , spełniające

$$\langle P_n | P_m \rangle = \int_{-1}^1 P_n(x) P_m(x) dx = \frac{2}{2n+1} \delta_{mn} \quad (12)$$

Innymi słowy, wielomiany Legendre'a mają tę własność, że iloczyn skalarny wielomianów różnego stopnia znika. W związku z własnościami

iloczynu skalarnego, wielomiany takie nazywamy *ortogonalnymi*. Współczynnik po prawej dobrano w ten sposób, aby inne wzory wyglądały “ładnie”.

Idea konstrukcji wielomianów spełniających (12) jest całkiem prosta: Przyjmijmy, że $P_0 = 1$. Wówczas z warunku ortogonalności $P_1 = x$; zauważmy, że $\int_{-1}^1 x^2 dx = 2/3 = 2/(2 \cdot 1 + 1)$. P_2 musi być ortogonalny tak do $P_0 = 1$, jak i do $P_1 = x$, stąd $P_2 = \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2}$. I tak dalej.

Pierwsze sześć wielomianów Legendre'a ma postać

$$P_0(x) = 1 \quad (13a)$$

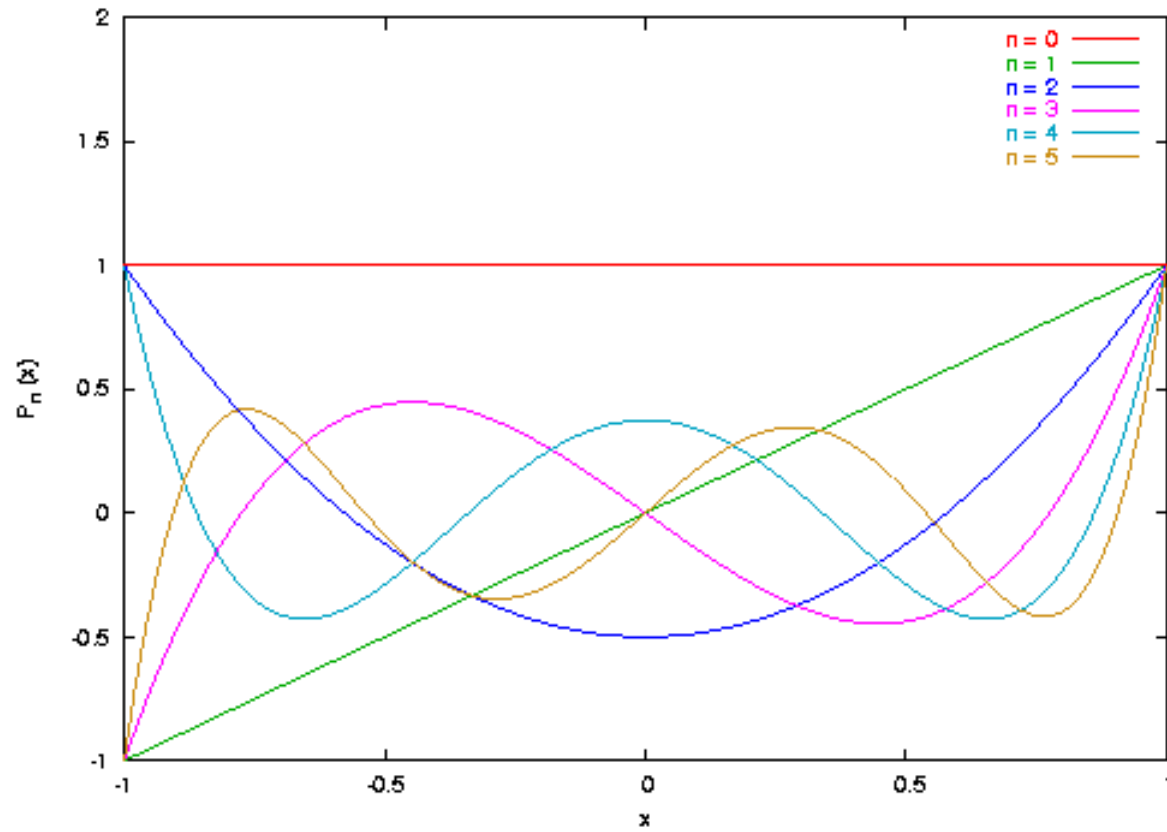
$$P_1(x) = x \quad (13b)$$

$$P_2(x) = \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2} \quad (13c)$$

$$P_3(x) = \frac{5}{2}x^3 - \frac{3}{2}x \quad (13d)$$

$$P_4(x) = \frac{35}{8}x^4 - \frac{30}{8}x^2 + \frac{3}{8} \quad (13e)$$

$$P_5(x) = \frac{63}{8}x^5 - \frac{70}{8}x^3 + \frac{15}{8}x \quad (13f)$$



Własności wielomianów Legendre'a

1. Wielomiany Legendre'a stopnia parzystego zawierają wyłącznie parzyste potęgi x i są funkcjami parzystymi: $P_{2n}(-x) = P_{2n}(x)$. Wielomiany Legendre'a stopnia nieparzystego zawierają wyłącznie nieparzyste potęgi x i są funkcjami nieparzystymi: $P_{2n+1}(-x) = -P_{2n+1}(x)$.
2. Wszystkie miejsca zerowe wielomianów Legendre'a są rzeczywiste, jednokrotne i leżą w przedziale $(-1, 1)$.
3. Z ortogonalności wielomianów Legendre'a do wielomianu P_0 wynika, że

$$\int_{-1}^1 P_n(x) dx = 0, \quad n \geq 1 \quad (14)$$

Rozkład w bazie wielomianów Legendre'a

Z tego, cośmy dotąd powiedzieli, wynika, że funkcje $\{\sqrt{\frac{2n+1}{2}}P_n(x)\}_{n=0}^{\infty}$, czyli unormowane wielomiany Legendre'a, stanowią bazę ortonormalną w przestrzeni $L_2([-1, 1], 1)$. Oznacza to, że każdą funkcję należącą do tej przestrzeni można przedstawić jako

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n \sqrt{\frac{2n+1}{2}} P_n(x) \quad (15a)$$

gdzie

$$\alpha_n = \langle P_n | f \rangle = \int_{-1}^1 \sqrt{\frac{2n+1}{2}} P_n(x) f(x) dx \quad (15b)$$

Niech $\{\alpha_n, \beta_n\}$ będą współczynnikami rozkładu (15) funkcji, odpowiednio, $f(x), g(x)$. Obliczmy iloczyn skalarny

$$\begin{aligned}
 \langle f|g \rangle &= \int_{-1}^1 f^*(x) g(x) dx \\
 &= \sum_{n,m=0}^{\infty} \alpha_n^* \beta_m \sqrt{\frac{2n+1}{2}} \sqrt{\frac{2m+1}{2}} \int_{-1}^1 P_n(x) P_m(x) dx \\
 &= \sum_{n,m=0}^{\infty} \alpha_n^* \beta_m \sqrt{\frac{2n+1}{2}} \sqrt{\frac{2m+1}{2}} \frac{2}{2n+1} \delta_{nm} \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n^* \beta_n
 \end{aligned} \tag{16}$$

Jest to (nieskończona) suma iloczynów po współrzędnych ☺

Rozkład jedności

$$\sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} P_l(x) P_l(y) = \delta(x-y) \quad (17)$$

gdzie $\delta(x-y)$ jest deltą Diraca, a $x, y \in [-1, 1]$. Jest to odpowiednik rozkładu jedności znanego dla macierzy symetrycznych rzeczywistych i hermitowskich w przestrzeniach skończeniowymiarowych.

Wzór rekurencyjny

Można udowodnić, że dla $n \geq 1$

$$(n+1)P_{n+1}(x) = (2n+1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x) \quad (18)$$

Wielomiany Legendre'a można zdefiniować za pomocą następującej formuły Rodriguesa:

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} \left((x^2 - 1)^n \right) \quad (19a)$$

Wielomiany Legendre'a można zdefiniować także poprzez funkcję tworzącą

$$\frac{1}{\sqrt{1 - 2xt + t^2}} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x) t^n, \quad x \in [-1, 1] \quad (19b)$$

lub jako rozwiązania równania Legendre'a nieosobliwe w zerze:

$$\frac{d}{dx} \left[(1 - x^2) \frac{dP_n(x)}{dx} \right] + n(n + 1)P_n(x) = 0, \quad n \in \mathbb{N} \quad (19c)$$

Równoważność definicji (12), (19a), (19b) i (19c) *dalece* wykracza poza ramy niniejszego wykładu.

Znaczenie wielomianów Legendre'a

Poza swoim znaczeniem czysto formalnym, wielomiany Legendre'a pojawiają się wszędzie tam, gdzie bada się obiekty o symetrii obrotowej. W szczególności pojawiają się one w funkcjach własnych kwantowego momentu pędu. Wielomiany te są także użyteczne w innych zagadnieniach nauki i techniki, na przykład w optymalizacji pewnych sieci neuronowych.

Wielomiany Czebyszewa

Zauważmy że

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} &= \left| \begin{array}{l} x = \cos t \\ dx = -\sin t dt \\ -1 \rightarrow \pi \\ 1 \rightarrow 0 \end{array} \right| \\ &= - \int_{\pi}^0 \frac{\sin t}{\sqrt{1-\cos^2 t}} dt = \int_0^{\pi} dt \\ &= \pi < +\infty \end{aligned} \tag{20}$$

Powyższa całka istnieje i jest skończona, mimo że funkcja podcałkowa jest rozbieżna na krańcach przedziału całkowania. Jednocześnie $(1 - x^2)^{-1/2} > 0$ dla wszystkich $x \in (-1, 1)$. Może to więc być funkcja wagowa. Rozważamy zatem przestrzeń

$$L_2([-1, 1], (1-x^2)^{-1/2}) = \left\{ f : [-1, 1] \rightarrow \mathbb{C} : \int_{-1}^1 \frac{|f(x)|^2}{\sqrt{1-x^2}} dx < +\infty \right\} \quad (21)$$

Można pokazać, że jest to nieskończenie wymiarowa przestrzeń liniowa.

Wielomiany T_k

Zdefiniujmy funkcje, które (nieco na wyrost) nazwiemy **wielomianami Czebyszewa**

$$T_k(x) = \cos(k \cdot \arccos(x)), \quad x \in [-1, 1], \quad k \in \mathbb{N} \quad (22)$$

Obliczmy

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 \frac{T_k(x)T_l(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx &= - \int_{\pi}^0 \frac{T_k(\cos t)T_l(\cos t)}{\sqrt{1-\cos^2 t}} \sin t dt \\ &= \int_0^{\pi} \cos(kt) \cos(lt) dt = \frac{\pi}{2} \delta_{kl} \end{aligned} \quad (23)$$

$$\left(\int_{-1}^1 (T_0(x))^2 (1-x^2)^{-1/2} dx = \pi \right)$$

Jeżeli w przestrzeni (21) wprowadzimy iloczyn skalarny

$$\langle f|g \rangle = \int_{-1}^1 \frac{f^*(x)g(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx \quad (24)$$

powyższy wynik oznacza, że funkcje $\{T_k\}$ stanowią układ ortogonalny względem tego iloczynu skalarnego, a po unormowaniu tworzą bazę ortonormalną w przestrzeni (21).

Najniższe wielomiany Czebyszewa

$$T_0(x) = \cos(0 \cdot \arccos(x)) = \cos 0 = 1 \quad (25a)$$

$$T_1(x) = \cos(\arccos(x)) = x \quad (25b)$$

$$\begin{aligned} T_2(x) &= \cos(2\arccos(x)) = 2\cos^2(\arccos(x)) - 1 \\ &= 2x^2 - 1 \end{aligned} \quad (25c)$$

$$\begin{aligned} T_3(x) &= \cos(3\arccos(x)) = \cos(2\arccos(x) + \arccos(x)) \\ &= \cos(2\arccos(x))\cos(\arccos(x)) \\ &\quad - \sin(2\arccos(x))\sin(\arccos(x)) \\ &= (2\cos^2(\arccos(x)) - 1)\cos(\arccos(x)) \\ &\quad - 2\sin(\arccos(x))\cos(\arccos(x))\sin(\arccos(x)) \\ &= (2x^2 - 1)x - 2(1 - x^2)x = 4x^3 - 3x \end{aligned} \quad (25d)$$

Wzór rekurencyjny

Wielomiany Czebyszewa spełniają następującą relację rekurencyjną dla $k \geq 1$

$$T_{k+1}(x) = 2x T_k(x) - T_{k-1}(x) \quad (26)$$

Korzystając z tożsamości trygonometrycznych, pokażemy, że wzór (26) sam jest tożsamością.

Dowód:

Dla uproszczenia notacji, niech $u = \arccos x$.

Wówczas $\cos(lu) = T_l(x)$.

Mamy teraz

$$\begin{aligned}T_{k+1}(x) &= \cos((k+1)u) = \cos(ku + u) \\&= \cos(ku) \cos u - \sin(ku) \sin u = xT_k(x) - \sin(ku) \sin u \\&= xT_k(x) - (\sin(k-1)u \cos u + \cos(k-1)u \sin u) \sin u \\&= xT_k(x) - x \sin(k-1)u \sin u - T_{k-1}(x) \sin^2 u \\&= xT_k(x) - x (\cos(k-1)u \cos u - \cos(ku)) \\&\quad - T_{k-1}(x)(1-x^2) \\&= xT_k(x) - x^2 T_{k-1}(x) + xT_k(x) - T_{k-1}(x) + x^2 T_{k-1} \\&= 2xT_k(x) - T_{k-1}(x),\end{aligned}\tag{27}$$

co kończy dowód.

Wielomiany Czebyszewa są wielomianami

Z (25) widzimy, że najniższe “wielomiany” Czebyszewa są wielomianami. Relacja rekurencyjna (26) pozwala konstruować kolejne “wielomiany” Czebyszewa znając dwa poprzednie. Ponieważ relacja ta obejmuje wyłącznie operacje algebraiczne — mnożenie przez zmienną, mnożenie przez stałą i dodawanie — kolejne konstruowane funkcje $T_k(x)$ są wielomianami. Widzimy zatem, że “wielomiany” Czebyszewa faktycznie są wielomianami, a ponadto **unormowane wielomiany Czebyszewa stanowią układ wielomianów ortogonalnych**, a zatem także bazę ortonormalną, w przestrzeni (21).

Uwaga: Definicja (22) obowiązuje tylko dla $x \in [-1, 1]$. Ponieważ jednak wielomiany Czebyszewa są wielomianami, można je przedłużyć na całą

oś rzeczywistą, \mathbb{R} , a nawet na całą płaszczyznę zespoloną, \mathbb{C} . Można udowodnić, że dla dowolnego $x \in \mathbb{R}$,

$$T_k(x) = \frac{\left(x - \sqrt{1 - x^2}\right)^k + \left(x + \sqrt{1 - x^2}\right)^k}{2} \quad (28)$$

co z kolei łatwo jest uogólnić na argumenty zespolone.

Własności wielomianów Czebyszewa

1. $T_k(-x) = (-1)^k T_k(x)$.
2. Miejsca zerowe wielomianów Czebyszewa są jednokrotne, rzeczywiste i leżą w przedziale $(-1, 1)$. Miejsca zerowe wielomianów Czebyszewa wysokich rzędów zagęszczają się w pobliżu krańców przedziału.
3. Wielomiany Czebyszewa są wielomianami o najmniejszym wahaniu: wielomian $\frac{1}{2^{k-1}} T_k(x)$ ma współczynnik wiodący (współczynnik przy najwyższej potęgze) równy 1 oraz tę własność, że spośród wszystkich wielomianów stopnia k o współczynniku wiodącym równym 1, różnica pomiędzy najmniejszą a największą wartością wielomianu na przedziale $[-1, 1]$ jest najmniejsza dla wielomianów Czebyszewa.

Wielomiany Czebyszewa mają *olbrzymie* znaczenie w analizie numerycznej i w teorii aproksymacji.

Wielomiany Laguerre'a

Wielomiany Laguerre'a są wielomianami ortogonalnymi w przestrzeni

$$L_2([0, \infty), e^{-x}) = \left\{ f : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{C} : \int_0^{\infty} |f(x)|^2 e^{-x} dx < +\infty \right\} \quad (29)$$

Jest to także nieskończeniewymiarowa przestrzeń liniowa, w której zadajemy iloczyn skalarny

$$\langle f|g \rangle = \int_0^{\infty} f^*(x)g(x) e^{-x} dx \quad (30)$$

Ponieważ wielomiany Laguerre'a są ważne w jednostronnym przedziale

niewłaściwym $[0, \infty)$, ich własności parzystości są nieistotne.

Wielomiany Laguerre'a można definiować albo poprzez formułę Rodriguesa

$$L_n(x) = \frac{e^x}{n!} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x} x^n) \quad (31a)$$

lub jako regularne w zerze rozwiązania równania różniczkowego

$$x \frac{d^2 L_n}{dx^2} + (1 - x) \frac{dL_n}{dx} + nL_n(x) = 0 \quad (31b)$$

Wielomiany Laguerre'a spełniają zależność rekurencyjną ($n \geq 1$)

$$(n + 1)L_{n+1}(x) = (2n + 1 - x)L_n(x) - nL_{n-1}(x) \quad (32)$$

Wielomiany Laguerre'a są niezbędne w mechanice kwantowej jako części radialne funkcji własnych kwantowego atomu wodoru.

Wielomiany Hermite'a

Wielomiany Hermite'a są wielomianami ortogonalnymi w przestrzeni

$$L_2((-\infty, +\infty), e^{-x^2}) = \left\{ f : (-\infty, +\infty) \rightarrow \mathbb{C} : \int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2 e^{-x^2} dx < +\infty \right\} \quad (33)$$

Jest to także nieskończeniewymiarowa przestrzeń liniowa, w której zadajemy iloczyn skalarny

$$\langle f|g \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f^*(x)g(x) e^{-x^2} dx \quad (34)$$

Wielomiany Hermite'a można definiować poprzez formułę Rodriguesa

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} \quad (35a)$$

lub jako regularne w zerze rozwiązania równania różniczkowego

$$\frac{d^2 H_n}{dx^2} + (2n + 1 - x^2)H_n(x) = 0 \quad (35b)$$

i spełniają relację rekurencyjną

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - H'_n(x). \quad (36)$$

Ponadto $H_n(-x) = (-1)^n H_n(x)$.

Wielomiany Hermite'a określają funkcje własne kwantowego oscylatora harmonicznego, wobec czego są absolutnie niezbędne w mechanice kwantowej.

Uwaga: Wszystkie rozważane w tym wykładzie przestrzenie funkcyjne $L_2([-1, 1], 1)$, $L_2([-1, 1], (1 - x^2)^{-1/2})$, $L_2([0, \infty), e^{-x})$, $L_2((-\infty, \infty), e^{-x^2})$ wraz z określonymi na nich iloczynami skalarnymi i zadanymi przez nie metryki, są przestrzeniami Hilberta, to znaczy są zupełne: wszystkie ciągi Cauchy'ego elementów tych przestrzeni są w tych przestrzeniach zbieżne.