

数学物理方程

张渭滨 编著

清华大学出版社

数学物理方程

张渭滨 编著

清华大学出版社
北京

内 容 简 介

本书是编者根据多年来为多个专业的学生讲授数学物理方程的教学经验编写而成的. 全书共分 11 章, 主要内容包括以正交函数族为主线的数学预备知识, 数学物理方程的建立与各种解法, 对勒让德多项式及贝塞尔函数在各种物理问题上的应用作了较深入的讨论, 书末还附有近 50 种不同物理问题解的一览表.

本书可作为物理学科、电子学科、信息学科, 以及其他工科本科生的教材, 也可作为工程技术人员的参考书.

版权所有, 侵权必究. 侵权举报电话: 010-62782989 13501256678 13801310933

图书在版编目(CIP)数据

数学物理方程/张渭滨编著. —北京: 清华大学出版社, 2007. 8

ISBN 978-7-302-15419-8

I. 数… II. 张… III. 数学物理方程 IV. O175.24

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2007)第 085784 号

责任编辑: 刘 颖 王海燕

责任校对: 焦丽丽

责任印制: 何 芊

出版发行: 清华大学出版社

<http://www.tup.com.cn>

c-service@tup.tsinghua.edu.cn

社 总 机: 010-62770175

投稿咨询: 010-62772015

地 址: 北京清华大学学研大厦 A 座

邮 编: 100084

邮购热线: 010-62786544

客户服务: 010-62776969

印 刷 者: 北京市清华园胶印厂

装 订 者: 三河市春园印刷有限公司

经 销: 全国新华书店

开 本: 185×230 印 张: 23.5

字 数: 486 千字

版 次: 2007 年 8 月第 1 版

印 次: 2007 年 8 月第 1 次印刷

印 数: 1~4000

定 价: 29.80 元

本书如存在文字不清、漏印、缺页、倒页、脱页等印装质量问题, 请与清华大学出版社出版部联系调换. 联系电话: 010-62770177 转 3103 产品编号: 024478-01

前 言

数学物理方程在理论物理、应用物理、力学、电子通信、天文、气象、地质、海洋科学和工程技术各个领域中均有广泛的应用,可以说在许多科学与技术领域中,研究深入到一定层次,数学物理方程是必不可少的数学工具. 由于它既是数学课程,又是物理课程,因此对于工科学生,尤其是对于在高等数学及大学物理的学习不太深入的学生而言,学习这门课程有一定的困难. 因此,编写一种适于工科学生学习的数学物理方程教材,使学生在学习过程中,既能在数学理论上不必花费过多精力,又能以较鲜明的物理思路去掌握这种数学工具并解决一些实际物理与工程问题,就显得十分必要.

20多年来,作者经历了从物理专业到应用物理专业再到电子科学与技术专业三个专业的数学物理方程的教学工作,学生学习本课程的学时数也从110学时一再压缩到目前的54学时,深感缺乏一种适于少课时的数学物理方程教材. 本教材是作者在20多年从事数学物理方法、数学物理方程两门课程的教学与研究的基础上,结合国内外相关教材的优点编写而成. 作者努力的方向是使学生在较少的时间内学到该课程的基本知识,搭建起关于本课程的数学物理框架;同时,培养学生分析与解决一些实际问题的能力.

比较中国和美国的教方法,中国教学强调推理和抽象思维,理论系统严谨,而美国的教学偏重整体框架的建构,鼓励学生独立思考,两种教学方法各有长处与短处. 作者力图在这两种方法的互相补充上作一些尝试. 比如按正交函数族展开的方法,在很多大学课程中都涉及(大学物理、线性代数、高等数学中的傅里叶级数、数学物理方程、信号与系统、电路分析、电动力学、量子力学,乃至群论等研究生课程),学生往往孤立地、单科性地学习,不善于融会贯通,建立起整体框架. 作者先后教授上述大部分课程,深感建立这种整体框架的重要性,因此着重在这种思想方法上面作些努力与尝试.

由于不同学校、不同专业要求相差较大,本书的另一个特点是给不同要求的教学提供较大的选择性. 全书选材适当,编排合理. 为便于少课时学生更深入的学习,教材中编入一些打星号(*)的内容. 对少课时的教学,跳过这些打星号的章节,并不影响教学内容的连贯性. 对于电子类工科学生,第2,3章内容已在信号与系统、自动控制原理等课程中学过,可让学生自己复习,不必再讲述.

本书还把一些物理问题的解分门别类列于附录中以便于查阅,同时也作为对由于课

时较少而不能全面讲授相关内容的一种补偿。

由于作者水平有限,错误与不当之处在所难免,恳请读者批评指正。

本书出版得到了华侨大学教材出版基金会资助,谨此致谢。

张渭滨

2007年春写于泉州

目 录

第 1 章 数学预备知识	1
1.1 数学物理方程简介	1
1.2 正交函数族	3
1.3 δ 函数	6
1.3.1 δ 函数的定义	6
1.3.2 δ 函数的性质	7
1.3.3 δ 函数的辅助函数	9
1.4 正交曲面坐标系	10
1.4.1 正交曲面坐标系	10
1.4.2 梯度、散度及拉氏算符表达式	11
1.4.3 球坐标下的梯度、散度和拉氏算符表达式	12
1.4.4 柱坐标下梯度、散度和拉氏算符表示式	13
1.5 二阶线性常微分方程的级数解法	13
1.5.1 二阶线性齐次常微分方程的常点与奇点	13
1.5.2 在常点附近 $LW=0$ 的级数解	14
1.5.3 z_0 是 $P(z)$ 和 $Q(z)$ 的一阶极点时 $LW=0$ 在 z_0 的邻域的级数解	15
1.5.4 已知 $LW=0$ 的一个解 $W_1 \neq 0$, 求与 W_1 线性无关的另一个解 W_2	18
1.5.5 在正则奇点附近 $LW=W''+PW'+QW=0$ 的级数解	20
习题 1	22
第 2 章 傅里叶变换	23
2.1 周期函数的傅里叶展开——傅里叶级数	23
2.1.1 周期函数的傅里叶级数	23
2.1.2 奇函数与偶函数的傅里叶级数	24
2.1.3 复指数形式的傅里叶级数	24
2.2 有限区间上非周期函数的傅里叶级数	26

2.3	傅里叶变换	29
2.3.1	傅里叶变换	29
2.3.2	多重傅里叶变换	32
2.3.3	傅里叶变换的性质	33
	习题 2	36
第 3 章	拉普拉斯变换	38
3.1	拉普拉斯变换的定义	38
3.1.1	从傅里叶变换到拉普拉斯变换	38
3.1.2	一些常见函数的拉普拉斯变换	39
3.2	拉普拉斯变换的基本性质	41
3.3	拉普拉斯逆变换	43
3.3.1	部分分式展开前的准备	44
3.3.2	部分分式展开法	44
3.3.3	用留数法求拉普拉斯逆变换	48
3.4	应用拉普拉斯变换解常微分方程	49
	习题 3	52
第 4 章	数学物理方程导论	55
4.1	有关数学物理方程的一些基本概念	55
4.1.1	数学物理方程和它的阶	55
4.1.2	线性、非线性、拟线性, 齐次与非齐次	56
4.1.3	通解	56
4.1.4	线性微分算子	57
4.1.5	叠加原理	58
4.2	数学物理方程的导出	59
4.2.1	弦的横振动方程	60
4.2.2	均匀杆的纵振动方程	61
4.2.3	电报方程	62
4.2.4	二维波动方程	63
4.2.5	热传导方程	64
4.2.6	扩散方程	67
4.3	边界条件与初始条件	68
4.3.1	初始条件	69

4.3.2	边界条件	70
4.3.3	第一类边界条件	70
4.3.4	第二类边界条件	71
4.3.5	第三类边界条件	72
4.3.6	衔接条件	74
4.3.7	例题	75
* 4.4	二阶线性偏微分方程的分类	78
4.4.1	两个自变量的二阶线性偏微分方程的分类	78
4.4.2	多于两个自变量的二阶线性偏微分方程的分类	83
4.5	一维波动方程的达朗贝尔解	84
4.5.1	一维波动方程 $u_{tt} - a^2 u_{xx} = 0$ 的通解	84
4.5.2	无界弦的自由振动问题	84
4.5.3	半无界弦(杆)的自由振动	85
4.5.4	两端固定的有界弦的自由振动	86
4.5.5	一端扰动引起的半无界弦振动	87
4.5.6	无限长弦的强迫振动	88
4.5.7	例题	90
* 4.6	某些基本定解问题的唯一性定理	92
4.6.1	推广的格林公式	92
4.6.2	定解问题解唯一性的另一种表述	93
4.6.3	三维波动方程定解问题的唯一性	93
4.6.4	热传导方程定解问题的唯一性	94
4.6.5	拉普拉斯方程定解问题的唯一性	95
	习题 4	96
第 5 章	分离变量法	99
5.1	齐次方程的分离变量法	99
5.1.1	一维振动方程在第一类齐次边界条件下的分离变量	99
5.1.2	一维振动方程在第二类齐次边界条件下的分离变量	103
5.1.3	一维热传导方程在第一类齐次边界条件下的分离变量	105
5.1.4	一维热传导方程在第二类齐次边界条件下的分离变量	106
5.1.5	例题	107
5.2	非齐次振动方程与输运方程的分离变量	114
5.3	非齐次边界条件下的分离变量	121

5.4 二维泊松方程	133
习题 5	135
第 6 章 正交曲面坐标系中的分离变量	139
6.1 球坐标系与柱坐标系中的分离变量	139
6.1.1 拉普拉斯方程的分离变量	139
6.1.2 波动方程的分离变量	143
6.1.3 输运方程的分离变量	143
6.1.4 亥姆霍兹方程的分离变量	144
6.2 圆内狄利克雷问题	148
习题 6	157
第 7 章 常微分方程的本征值问题	159
7.1 分离变量法与本征值问题	159
7.2 施图姆-刘维尔方程的本征值问题	160
7.2.1 施图姆-刘维尔方程(S-L 方程)	160
7.2.2 S-L 方程的本征值问题	161
7.2.3 非奇异 S-L 方程本征值问题的基本性质	163
7.2.4 已知 $Ly=ly$ 的通解,求本征值与本征函数	163
7.2.5 定理	166
习题 7	166
第 8 章 勒让德多项式	168
8.1 勒让德多项式的定义	168
8.1.1 勒让德方程的本征值与本征函数	169
8.1.2 勒让德多项式	170
8.1.3 勒让德多项式的微分表示——罗德里格斯公式	172
8.1.4 $P_l(1)$ 的计算	173
8.2 勒让德多项式的正交性与归一化因子	173
8.2.1 函数族 $\{P_l(x)\}$ 的正交性	173
8.2.2 正交函数族 $\{P_l(x)\}$ 的归一化因子	175
8.2.3 $P_l(x)$ 的生成公式	176
8.2.4 $P_l(x)$ 的递推公式	177
8.2.5 利用递推公式验证 $P_l(x)$ 满足勒让德方程	179

8.2.6	证明 $ P_l(x) \leq 1$	179
8.2.7	正交函数族 $\{P_l(x)\}$ 的完备性	180
8.2.8	傅里叶-勒让德级数	181
8.2.9	勒让德多项式的性质	184
8.3	具有轴对称的物理问题例解	186
* 8.4	连带勒让德函数	200
8.4.1	连带勒让德函数的定义	200
8.4.2	连带勒让德函数的微分表示	201
8.4.3	连带勒让德函数的正交归一关系	202
8.4.4	广义傅里叶级数	203
8.4.5	连带勒让德函数的递推公式	205
* 8.5	球函数	206
8.5.1	球函数的定义	206
8.5.2	球函数的正交关系	207
8.5.3	球函数的正交归一化因子	207
8.5.4	以球函数为基函数的广义傅里叶级数	207
8.5.5	加法公式	208
8.5.6	非轴对称下拉普拉斯方程的定解问题	210
习题 8	213
第 9 章	贝塞尔函数	215
9.1	贝塞尔函数的定义	215
9.1.1	可化为贝塞尔方程的常微分方程	215
9.1.2	贝塞尔方程的级数解	216
9.1.3	三类贝塞尔函数	219
9.1.4	贝塞尔函数的递推公式	219
9.2	半奇数阶贝塞尔函数和 $J_n(x)$ 在 $x \rightarrow \infty$ 时的渐近表达式	221
9.2.1	半奇数阶的贝塞尔函数 $J_{n+\frac{1}{2}}(x)$	221
9.2.2	$J_\nu(x)$ 在 $x \rightarrow \infty$ 时的渐近表达式	222
9.2.3	$J_n(x)$ 振荡特性与 $J_n(x)$ 的零点	224
9.3	$J_n(x)$ 的生成公式和积分表达式	225
9.3.1	$J_n(x)$ 的生成函数	225
9.3.2	$J_n(x)$ 的积分表达式	226

9.3.3	$I = \int_0^{\infty} e^{-ax} J_0(bx) dx$ 的计算 (a, b 为常数, 且 $a > 0$)	227
9.3.4	加法公式	228
9.4	贝塞尔方程的本征值问题	230
9.4.1	贝塞尔方程对应的施图姆-刘维尔本征值问题	230
9.4.2	本征函数的正交性	232
9.4.3	归一化因子 $N_l = \int_0^a r R_l^2(r) dr$	233
9.4.4	傅里叶-贝塞尔级数	235
9.4.5	应用举例	237
* 9.5	球贝塞尔函数	240
9.5.1	球贝塞尔函数	240
9.5.2	球贝塞尔函数在 $x \rightarrow 0$ 及 $x \rightarrow \infty$ 的渐近公式	242
9.5.3	球形区域内的本征值问题	242
* 9.6	修正的贝塞尔函数	245
9.7	利用各种贝塞尔函数解边值问题例解	250
9.7.1	关于球贝塞尔函数的例题	250
9.7.2	关于第二类贝塞尔函数(诺依曼函数)的例题	251
9.7.3	关于第三类贝塞尔函数的例题	253
9.7.4	第一类贝塞尔函数应用于解边值问题	255
9.8	常用公式	267
9.8.1	各种贝塞尔函数	267
9.8.2	递推公式	269
9.8.3	奇异性与渐近展开	269
9.8.4	生成公式与积分表达式	270
9.8.5	加法公式	271
9.8.6	含贝塞尔函数的积分	271
9.8.7	归一化因子(把 $f(x)$ 在区间 $[0, a]$ 上作傅里叶-贝塞尔级数展开)	272
	习题 9	272
* 第 10 章	格林函数	276
10.1	格林函数的基本概念	276
10.2	泊松方程的格林函数	277
10.2.1	格林公式	277

10.2.2	调和函数的性质	278
10.2.3	泊松方程的基本积分公式	279
10.2.4	泊松方程的格林函数	280
10.2.5	格林函数的对称性	282
10.2.6	积分公式表	283
10.3	亥姆霍兹方程的格林函数	285
10.3.1	借助格林函数表示原边值问题的解	285
10.3.2	自由格林函数	286
10.4	用镜像法求拉普拉斯方程的格林函数	290
10.4.1	镜像法	290
10.4.2	圆内(或球内)狄氏问题的镜像法	292
10.4.3	例题	293
10.5	热传导方程初值问题的格林函数解法	296
10.5.1	一维热传导方程	296
10.5.2	三维热传导方程	297
10.5.3	三维非齐次热传导定解问题	298
10.6	波动方程初值问题的格林函数解法	300
10.6.1	初始速度不为零的波动方程的格林函数解	300
10.6.2	初始位移不为零的波动方程的格林函数解	302
10.6.3	非齐次波动方程的格林函数解	303
10.6.4	二维波动初值问题的格林函数解法	304
10.7	推广的格林公式	305
10.7.1	伴随算符与自伴算符	305
10.7.2	广义格林公式	306
10.7.3	椭圆型方程第一类边值问题的格林函数及解的积分形式	306
10.7.4	椭圆型方程第二类边值问题的格林函数及解的积分形式	308
10.7.5	抛物型方程的格林函数及解的积分公式	308
10.7.6	双曲型方程的格林函数及解的积分公式	310
	习题 10	312
	第 11 章 积分变换法与差分法	314
11.1	傅里叶变换法	314
11.2	拉普拉斯变换法	317
11.3	差分法	320

习题 11	325
附录 A 傅里叶变换表	326
附录 B 拉普拉斯变换表	329
附录 C Γ 函数	332
附录 D 高斯函数与误差函数	335
附录 E 贝塞尔函数 $J_0(x)$ 与 $J_1(x)$ 数表	337
附录 F 勒让德多项式与连带勒让德函数	339
附录 G 一些常见的数理方程边值问题解一览表	341
习题答案	349
参考文献	364

第 1 章 数学预备知识

1.1 数学物理方程简介

自 17 世纪牛顿、莱布尼茨发明微积分后,科学家在利用微积分处理力学、物理学中各种问题的过程中导出了大量的微分方程.在这些微分方程中,有些是常微分方程,比如力学中质点的运动方程($m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = \mathbf{f}$),但更多的是偏微分方程.欧拉、拉格朗日等科学家在研究流体力学、声音传播和膜振动等问题时,拉普拉斯在研究势函数和潮汐理论时,傅里叶在研究热传导以及麦克斯韦在研究电磁理论时都导出一些偏微分方程,近代量子力学中出现的波动方程也是偏微分方程.我们把物理研究中出现的偏微分方程称为数学物理方程.数学物理方程中的变量通常是多维空间的坐标与时间.为了方便起见,本书采用以下偏微分记号:

$$u_x = \frac{\partial u}{\partial x},$$

$$u_{xx} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2},$$

$$\nabla u = \frac{\partial u}{\partial x} \mathbf{i} + \frac{\partial u}{\partial y} \mathbf{j} + \frac{\partial u}{\partial z} \mathbf{k},$$

$$\nabla^2 u = \Delta u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2},$$

式中 $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ 是直角坐标系 x, y, z 三个坐标轴正方向上的单位矢量, Δ 为拉普拉斯算子(或简称为拉氏算子).

下面举几个常见的数学物理方程的例子.

(1) 静电场中电势 u 满足拉普拉斯方程或泊松方程,即

$$\Delta u = 0 \tag{1.1}$$

或

$$\Delta u = \frac{1}{\epsilon_0} \rho. \tag{1.2}$$

方程(1.1)称为拉普拉斯方程,适于空间无自由电荷分布的情况;方程(1.2)称为泊松方程,适于空间有自由电荷分布的情况(电荷体密度分布为 ρ).

(2) 波动方程

$$u_{tt} - a^2 \Delta u = 0 \quad (1.3)$$

或

$$u_{tt} - a^2 \Delta u = f(x, y, z, t). \quad (1.4)$$

方程(1.3)适于无力源的情况,是齐次方程;方程(1.4)适于有力源分布 $f(x, y, z, t)$ 的情况,是非齐次方程. 对于一维的情况,方程(1.3)和(1.4)简化为

$$u_{tt} - a^2 u_{xx} = 0 \quad \text{和} \quad u_{tt} - a^2 u_{xx} = f(x, t).$$

(3) 热传导方程与扩散方程

$$u_t - a^2 \Delta u = 0 \quad (1.5)$$

或

$$u_t - a^2 \Delta u = f(x, y, z, t). \quad (1.6)$$

方程(1.5)适于空间无热源分布的情况,是齐次方程;方程(1.6)适于空间有热源分布 $f(x, y, z, t)$ 的情况,是非齐次方程. 对于一维情况,方程(1.5)和(1.6)简化为

$$u_t - a^2 u_{xx} = 0 \quad \text{和} \quad u_t - a^2 u_{xx} = f(x, t).$$

(4) 描述电磁场运动的麦克斯韦方程组

$$\begin{cases} \nabla \cdot \mathbf{D} = \rho, \\ \nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \\ \nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \\ \nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{j}_0 + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \end{cases}$$

式中 \mathbf{D} 为电位移矢量, \mathbf{E} 为电场强度矢量, \mathbf{B} 为磁感应强度矢量, \mathbf{H} 为磁场强度矢量, ρ 为空间自由电荷体密度分布, \mathbf{j}_0 为传导电流密度矢量. $\nabla \cdot \mathbf{D}$ 表示电位移矢量的散度, $\nabla \times \mathbf{E}$, $\nabla \times \mathbf{H}$ 分别表示电场强度矢量与磁场强度矢量的旋度. 在直角坐标系中,散度定义为

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \left(\frac{\partial}{\partial x} \mathbf{i} + \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{j} + \frac{\partial}{\partial z} \mathbf{k} \right) \cdot (D_x \mathbf{i} + D_y \mathbf{j} + D_z \mathbf{k}) = \frac{\partial D_x}{\partial x} + \frac{\partial D_y}{\partial y} + \frac{\partial D_z}{\partial z}. \quad (1.7)$$

散度是一个标量.

而旋度定义为

$$\nabla \times \mathbf{E} = \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ E_x & E_y & E_z \end{vmatrix} = \left(\frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} \right) \mathbf{i} + \left(\frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} \right) \mathbf{j} + \left(\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right) \mathbf{k}. \quad (1.8)$$

旋度是一个矢量.

散度与旋度在其他正交坐标系中的表示式将在 1.4 节中介绍.

(5) 量子力学薛定谔波动方程

$$j \hbar u_t + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta u = Vu. \quad (1.9)$$

该方程描述了微观粒子在势场 $V(x, y, z, t)$ 中的波函数 $u(x, y, z, t)$ 的变化规律. 式中 j 是虚数单位, $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, h 为普朗克常数.

上面介绍的数学物理方程都是二阶线性偏微分方程. 关于数学物理方程更深入的讨论将在 4.1 节介绍.

1.2 正交函数族

函数分解成正交函数族线性组合的原理与几何空间中任意矢量可分解为正交基矢量线性组合的原理完全一样.

在二维空间, 选定互相垂直的两个基矢量 i 与 j , 则二维空间中任意矢量 a 都可以唯一地表示为这两个基矢量的线性组合, 即

$$a = xi + yj,$$

式中 x, y 分别是矢量 a 在基矢量 i 与 j 方向上的投影, 称 x, y 为矢量 a 在该坐标系中的坐标(分量). 这样, 我们就建立了数组 (x, y) 与矢量 a 的一一对应关系. 换言之, 在二维空间, i 与 j 构成了正交完备的基矢量族, 它可以无误差地表示二维空间上的任何矢量. 若取 i 与 j 的长度为一个单位, 则称 i, j 是二维空间的一组正交归一完备的基矢量族.

同理, 在三维空间中, 若选定一组正交归一完备的基矢量族 i, j, k , 则三维空间中任一矢量 a 都可以唯一地表示为 i, j, k 的线性组合, 即

$$a = xi + yj + zk.$$

在数学物理中, 经常会碰到一些相互之间可以相加以及与数相乘的对象, 例如齐次方程组的解、复数以及在分析中已经定义了加法和与数相乘运算的某个区间上的函数等, 虽然这些对象与三维空间中的普通矢量在性质上毫无共同之处, 但仍可以把这些对象称为矢量, 并根据对加法与数乘的定义建立起 n 维线性空间的概念.

在 n 维线性空间中, 若选定互为正交的 n 个基矢量 x_1, x_2, \dots, x_n , 则 n 维线性空间中任一矢量 a 可唯一地表示为基矢量族 x_1, x_2, \dots, x_n 的线性组合, 即

$$a = c_1 x_1 + c_2 x_2 + \dots + c_n x_n,$$

c_1, c_2, \dots, c_n 为矢量 a 在此正交坐标系中的坐标(分量). 至于正交的概念, 在三维空间中, 正交指两矢量相互垂直, 比较直观, 容易理解. 但 n 维空间 ($n > 3$) 并不存在于客观世界, 不能再用互相垂直来定义正交. 在 n 维空间中, 正交指内积(点乘)为零, 即

$$\mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_j = \begin{cases} k, & i = j, \\ 0, & i \neq j. \end{cases} \quad (1.10)$$

若 $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n$ 是归一矢量族, 则式(1.10)改为

$$\mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_j = \begin{cases} 1, & i = j, \\ 0, & i \neq j. \end{cases} \quad (1.11)$$

n 维向量空间的概念可以推广到 n 维函数空间. 考虑在 $[a, b]$ 上连续的两个函数 $f(x)$ 与 $g(x)$, 它们的内积定义为

$$(f(x), g(x)) = \int_a^b f^*(x)g(x)\rho(x)dx, \quad (1.12)$$

式中“ $*$ ”表示共轭, $\rho(x)$ 为权函数. 内积为零, 则称两函数相互正交.

设有 n 个在区间 $[a, b]$ 上连续的函数 $\varphi_1(x), \varphi_2(x), \dots, \varphi_n(x)$, 若满足

$$(\varphi_i(x), \varphi_j(x)) = \int_a^b \varphi_i^*(x)\varphi_j(x)\rho(x)dx = \begin{cases} 1, & i = j, \\ 0, & i \neq j, \end{cases} \quad (1.13)$$

则称 $\{\varphi_n(x)\}$ 为正交归一的函数族.

在 n 维函数空间中选定正交归一函数族 $\varphi_1(x), \varphi_2(x), \dots, \varphi_n(x)$, 若 n 维函数空间任一函数 $f(x)$ 均可唯一地表示为 $\{\varphi_n(x)\}$ 的线性组合, 即

$$f(x) = \sum_{i=1}^n c_i \varphi_i(x), \quad (1.14)$$

则称 $\{\varphi_n(x)\}$ 为 n 维函数空间中一组正交归一完备的基函数族. 若函数族 $\{\varphi_n(x)\}$ 不是完备的, 则式(1.14)不是等式, $\sum_{i=1}^n c_i \varphi_i(x)$ 不能准确地表达 $f(x)$, 而是存在误差

$$\epsilon(x) = f(x) - \sum_{i=1}^n c_i \varphi_i(x).$$

除了 n 维空间外, 在物理学中, 特别是在量子力学中, 还必须考虑无限维函数空间, 其中最重要的是希尔伯特空间. 希尔伯特空间的元素是定义在区间 $a \leq x \leq b$ 上的平方可积的复数函数. 这里的正交函数概念仍是 n 维空间中正交函数族概念的推广, 这种函数的一个重要例子是

$$\{e^{jn\pi x}\}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

由于有

$$\int_0^{2\pi} e^{-jm\pi x} e^{jn\pi x} dx = \begin{cases} 2\pi, & m = n, \\ 0, & m \neq n, \end{cases} \quad \rho(x) = 1$$

所以函数族 $\{e^{jn\pi x}\}$ 是正交的, 但不是归一的. 若选函数族为

$$\left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{jn\pi x} \right\}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots,$$

则该函数族就是正交归一的函数族. 下面讨论函数族的完备性问题.