Skalarprodukte im Funktionenraum und orthogonale Funktionen

Im Allgemeinen muss ein reelles Skalarprodukt $(\bullet, \bullet)$ (wir betrachten reelle Funktionen) folgende Eigenschaften ausweisen:

- Bilinearität (Linearität bezüglich der beiden Argumente):

$$(x+y, z) = (x, z) + (y, z) \text{ und } (x, y+z) = (x, y) + (x, z)$$

$$(x, \lambda y) = (\lambda x, y) = \lambda (x, y) \text{ mit } \lambda \in \mathbb{R}$$

- Symmetrie: $(x, y) = (y, x)$
- Positive Definitheit: $(x, x) \geq 0$ und $(x, x) = 0$ genau dann, wenn $x = 0$ ist

Diese Eigenschaften gelten auf jeden Fall für das aus der Schule bekannte euklidische Skalarprodukt zweier Vektoren $\vec{a}$ und $\vec{b}$:

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = \sum_{n=1}^{3} a_n b_n = a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3 .$$

Man kann jetzt jedoch auch ein Skalarprodukt mit diesen Eigenschaften auf einem reellen Funktionenraum definieren, also einem Vektorraum, der von Funktionen aufgespannt wird. Dies macht man dann über ein Integral wie

$$(f(x), g(x)) = \int_b^a \alpha(x) f(x) g(x) \, \mathrm{d}x$$

wobei $\alpha(x)$ eine weitere Funktion ist. (Oft definiert man das Skalarprodukt so, dass $\alpha(x) = 1$ ist.) Die Eigenschaft der Bilinearität ist eine Eigenschaft des Integrals. Wir wissen nämlich, dass ein Integral über die Summe zweier Funktionen aufgespalten werden kann in die Summe der einzelnen Integrale und dass weiterhin eine Konstante λ vor das Integralzeichen geschrieben werden kann. Die Symmetrie ist auch klar, denn es ist ja völlig egal, welche Funktion man im Integranden zuerst hinschreibt. Die positive Definitheit gilt nicht für jedes Integral. Das Skalarprodukt ist geschickt so zu konstruieren, dass auch dies gewährleistet wird.

Man bezeichnet nun zwei Funktionen $f(x)$ und $g(x)$ als orthogonal, wenn deren Skalarprodukt verschwindet (analog zu Vektoren):

$$(f(x), g(x)) = \int_b^a \alpha(x) f(x) g(x) \, \mathrm{d}x = 0$$

Orthonormiert sind die Funktionen, falls gilt:

$$(f(x), f(x)) = \int_b^a \alpha(x) f(x) f(x) \,\mathrm{d}x = 1$$

Die Funktionen bilden dann ein normiertes Orthogonalsystem (Orthonormalbasis) des Funktionenraums. Betrachten wir nun einige Beispiele hierzu.

Die Legrende-Polynome

Die Legrende-Polynome P_0 sind Lösung der Legrendreschen Differentialgleichung

$$(1 - x^2) P_n''(x) - 2x P_n'(x) + n(n+1) P_n(x) = 0.$$

Man löst diese mit einem Potenzreihenansatz, aus dem sich dann die Rekursionsformel für die Koeffizienten der Polynome ergibt, worauf wir jedoch jetzt nicht weiter eingehen wollen.

Die Polynome sind im Allgemeinen gegeben durch

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} (x^2 - 1)^n$$

und bilden das Orthogonalsystem

$$\int_{-1}^{1} P_m(x) P_n(x) \,\mathrm{d}x = \frac{2}{2n+1} \delta_{mn}.$$

Das Skalarprodukt ist also in diesem Funktionenraum definiert durch das symmetrische Integral über das Intervall $[-1, 1]$, wobei die Funktion $\alpha(x) = 1$ ist.

Die ersten fünf dieser Polynome sind gegeben durch:

$$p_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$p_1 = \sqrt{\frac{3}{2}} x$$

$$p_2 = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{5}{2}} (-1 + 3x^2)$$

$$p_3 = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{7}{2}} (-3x + 5x^3)$$

$$p_4 = \frac{3}{8\sqrt{2}}(3 - 30x^2 + 35x^4)$$

$$p_5 = \frac{1}{8}\sqrt{\frac{11}{2}}(15x - 70x^3 + 63x^5)$$

Wir wollen nun eine Funktion nach diesen Polynomen entwickeln, also durch sie annähern (approximieren). Zu berechnen ist also:

$$\sin(x) = C_0p_0 + C_1p_1 + C_2p_2 + C_3p_3 + C_4p_4 + C_5p_5 + \dots$$

Die Koeffizienten C_0, C_1, ... ergeben sich dadurch, dass man die Orthogonalität und Normiertheit der Legrende-Polynome im zugewiesenen Skalarprodukt ausnutzt:

$$\int\limits_{-1}^{+1} \sin(x)p_0 \,\mathrm{d}x = C_0 \underbrace{\int\limits_{-1}^{+1} p_0^2 \,\mathrm{d}x}_{=1} + C_1 \underbrace{\int\limits_{-1}^{+1} p_0p_1 \,\mathrm{d}x}_{=0} + C_2 \underbrace{\int\limits_{-1}^{+1} p_0p_2 \,\mathrm{d}x}_{=0} + C_3 \underbrace{\int\limits_{-1}^{+1} p_0p_3 \,\mathrm{d}x}_{=0}$$
$$+ C_0 \underbrace{\int\limits_{-1}^{+1} p_0p_4 \,\mathrm{d}x}_{=0} + C_0 \underbrace{\int\limits_{-1}^{+1} p_0p_5 \,\mathrm{d}x}_{=0} = C_0$$

Damit ergibt sich durch Berechnung des Integrals auf der linken Seite:

$$C_0 = \int\limits_{-1}^{+1} \sin(x)p_0 \,\mathrm{d}x = 0$$

Der zweite Koeffizient folgt durch dasselbe Schema:

$$\int\limits_{-1}^{+1} \sin(x)p_1 \,\mathrm{d}x = C_0 \underbrace{\int\limits_{-1}^{+1} p_0p_1 \,\mathrm{d}x}_{=0} + C_1 \underbrace{\int\limits_{-1}^{+1} p_1^2 \,\mathrm{d}x}_{=1} + C_2 \underbrace{\int\limits_{-1}^{+1} p_1p_2 \,\mathrm{d}x}_{=0} + C_3 \underbrace{\int\limits_{-1}^{+1} p_1p_3 \,\mathrm{d}x}_{=0}$$
$$+ C_0 \underbrace{\int\limits_{-1}^{+1} p_1p_4 \,\mathrm{d}x}_{=0} + C_0 \underbrace{\int\limits_{-1}^{+1} p_1p_5 \,\mathrm{d}x}_{=0} = C_1$$

$$C_1 = \int\limits_{-1}^{+1} \sin(x)p_1 \,\mathrm{d}x = \sqrt{6}(\sin(1) - \cos(1))$$

Analog ergibt sich somit:

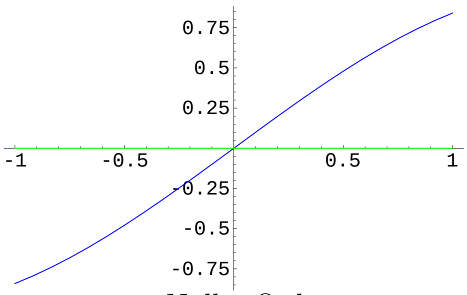
$$C_2 = \int_{-1}^{+1} \sin(x) p_2 \,\mathrm{d}x = 0$$

$$C_3 = \int_{-1}^{+1} \sin(x) p_3 \,\mathrm{d}x = \sqrt{14}(14\cos(1) - 9\sin(1))$$

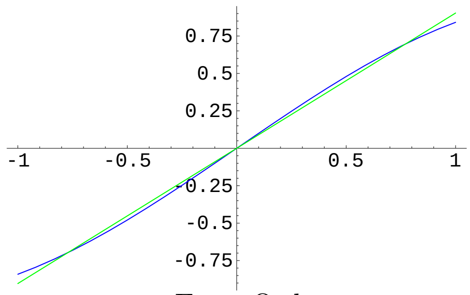
$$C_4 = \int_{-1}^{+1} \sin(x) p_4 \,\mathrm{d}x = 0$$

$$C_5 = \int_{-1}^{+1} \sin(x) p_5 \,\mathrm{d}x = \sqrt{22}(540\sin(1) - 841\cos(1))$$

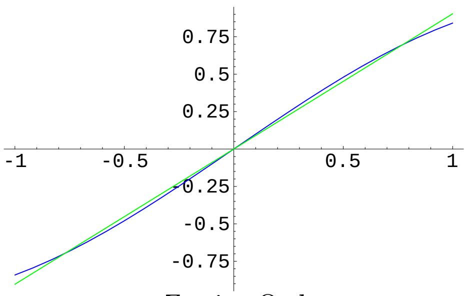
Wir erkennen, dass die Koeffizienten der geraden Polynome gerade verschwinden. Dies muss natürlich auch so sein, da die Sinusfunktion selbst ungerade ist und somit nur als Überlagerung von ungeraden Polynomen dargestellt werden kann. Betrachten wir nun die einzelnen Approximationen in Schaubildern:



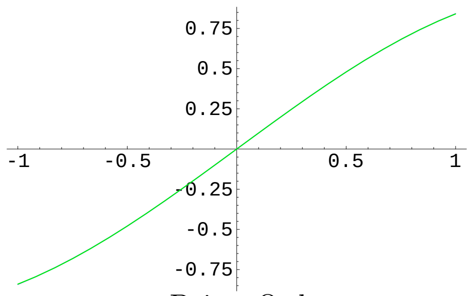
Nullte Ordnung



Erste Ordnung



Zweite Ordnung



Dritte Ordnung

Schon die dritte Ordnung reicht aus, um den Sinus im Intervall $[-1, 1]$ fast perfekt darzustellen.

Die Laguerre-Polynome

Die Laguerre-Polynome sind Lösungen der Hermiteschen Differentialgleichung

$$xL_n''(x) + (1-x)L_n'(x) + nL_n(x) = 0.$$

Im Allgemeinen sind sie gegeben durch

$$L_n(x) = \exp(x)\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}(x^n \exp(-x))$$

und erfüllen die Orthogonalitätsrelation

$$\int\limits_0^\infty \exp(-x)L_m(x)L_n(x)\,\mathrm{d}x = n!^2\delta_{nm}.$$

Die ersten dieser Polynome sind gegeben durch:

$$L_0(x) = 1$$

$$L_1(x) = -x + 1$$

$$L_2(x) = x^2 - 4x + 2$$

$$L_3(x) = -x^3 + 9x^2 - 18x + 6$$

$$L_4(x) = x^4 - 16x^3 + 72x^2 - 96x + 24$$

Wir wollen durch diese Polynome die Funktion $\exp(x/2)$ approximieren:

$$\exp\left(\frac{x}{2}\right) = C_0L_0 + C_1L_1 + C_2L_2 + C_3L_3 + C_4L_4 + \ldots$$

Um die einzelnen Koeffizienten C_0, C_1, ... zu berechnen, gehen wir wieder so vor wie im letzten Abschnitt. Wir multiplizieren obige Gleichung nacheinander mit den Polynomen

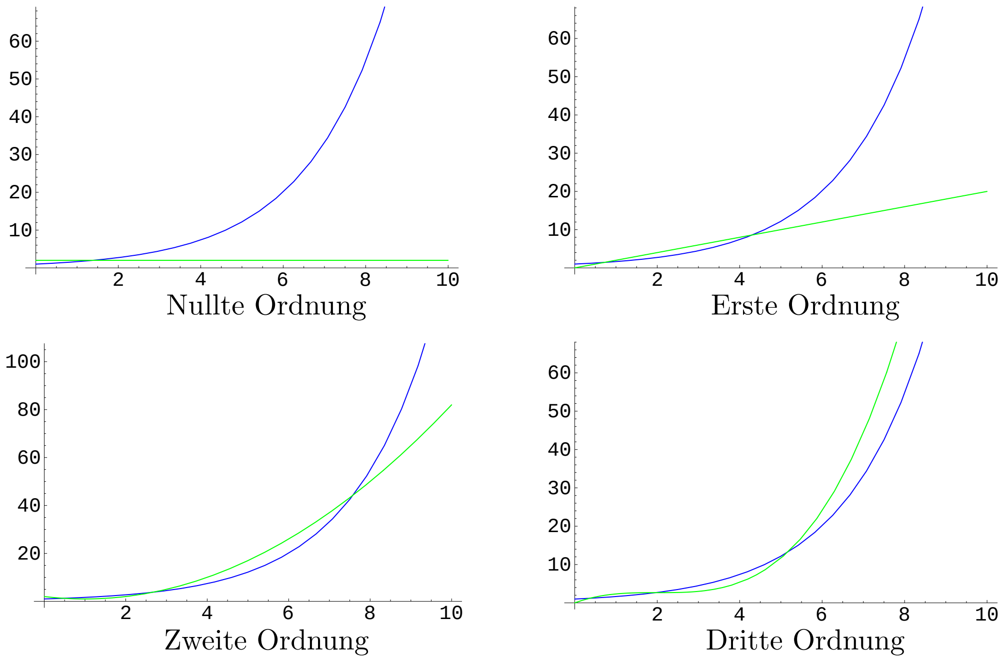
L_0, L_1, …, integrieren und nutzen die Orthogonalitätsbeziehung aus:

$$\int_0^\infty \exp(-x)\exp\left(\frac{x}{2}\right)\,\mathrm{d}x = C_0 \underbrace{\int_0^\infty \exp(-x) L_0^2\,\mathrm{d}x}_{=1} + C_1 \underbrace{\int_0^\infty \exp(-x) L_0 L_1\,\mathrm{d}x}_{=0}$$
$$+ C_2 \underbrace{\int_0^\infty \exp(-x) L_0 L_2\,\mathrm{d}x}_{=0} + C_3 \underbrace{\int_0^\infty \exp(-x) L_0 L_3\,\mathrm{d}x}_{=0}$$
$$+ C_4 \underbrace{\int_0^\infty \exp(-x) L_0 L_4\,\mathrm{d}x}_{=0}$$

Damit ergibt sich also:

$$C_0 = \int_0^\infty \exp\left(-\frac{x}{2}\right)\,\mathrm{d}x = 2$$

Analog folgt $C_1 = -2$, $C_2 = 2$, $C_3 = -2$, $C_4 = 2$, …. Schauen wir uns die entsprechenden Schaubilder der Approximationen wieder an:

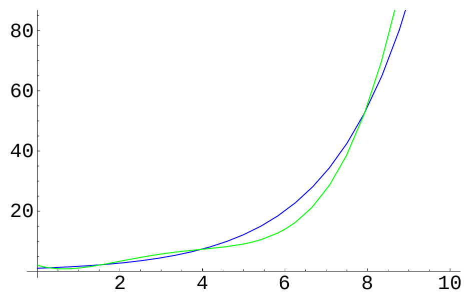


Nullte Ordnung

Erste Ordnung

Zweite Ordnung

Dritte Ordnung



Vierte Ordnung

Die Annäherung des Polynoms an die Funktion $\exp(-x^2/2)$ ist auf jeden Fall erkennbar. Zur besseren Annäherung müsste man noch mehr Ordnungen in der Entwicklung mitnehmen.

Der Gradient in Kugelkoordinaten

Kugelkoordinaten sind definiert über:

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r \sin\vartheta \cos\varphi \\ r \sin\vartheta \sin\varphi \\ r \cos\vartheta \end{pmatrix} \text{ mit } r \in [0, \infty),\ \vartheta \in [0, \pi] \text{ und } \varphi \in [0, 2\pi]$$

Mittels der Kettenregel gilt:

$$\frac{\partial}{\partial r} f(x(r,\vartheta,\varphi), y(r,\vartheta,\varphi), z(r,\vartheta,\varphi)) = \left(\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial r} \right) f(x,y,z)$$

Für die anderen beiden Koordinaten ϑ und φ funktioniert dies analog. Das Ganze lässt sich nun in Matrixform wie folgt ausschreiben:

$$\begin{pmatrix} \partial/\partial r \\ \partial/\partial\vartheta \\ \partial/\partial\varphi \end{pmatrix} = \mathcal{J} \begin{pmatrix} \partial/\partial x \\ \partial/\partial y \\ \partial/\partial z \end{pmatrix} \text{ mit } \mathcal{J} = \frac{\partial(x,y,z)}{\partial(r,\vartheta,\varphi)} = \begin{pmatrix} \partial x/\partial r & \partial x/\partial\vartheta & \partial x/\partial\varphi \\ \partial y/\partial r & \partial y/\partial\vartheta & \partial y/\partial\varphi \\ \partial z/\partial r & \partial z/\partial\vartheta & \partial z/\partial\varphi \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} \sin\vartheta\cos\varphi & r\cos\vartheta\cos\varphi & -r\sin\vartheta\sin\varphi \\ \sin\vartheta\sin\varphi & r\cos\vartheta\sin\varphi & r\sin\vartheta\cos\varphi \\ \cos\vartheta & -r\sin\vartheta & 0 \end{pmatrix}$$

Die Matrix $\mathcal{J}$ vermittelt also den Übergang zwischen den partiellen Ableitungen der Kugelkoordinaten und der kartesischen Koordinaten. Man bezeichnet $\mathcal{J}$ als Jacobi-Matrix.

Der Rücktransformation funktioniert mittels der inversen Jacobi-Matrix:

$$\begin{pmatrix} \partial/\partial x \\ \partial/\partial y \\ \partial/\partial z \end{pmatrix} = \mathcal{J}^{-1} \begin{pmatrix} \partial/\partial r \\ \partial/\partial \vartheta \\ \partial/\partial \varphi \end{pmatrix}$$

$$\text{mit } \mathcal{J}^{-1} = \frac{\partial(r,\vartheta,\varphi)}{\partial(x,y,z)} = \begin{pmatrix} \sin\vartheta\cos\varphi & \sin\vartheta\sin\varphi & \cos\vartheta \\ 1/r\cos\vartheta\cos\varphi & 1/r\cos\vartheta\sin\varphi & -1/r\sin\vartheta \\ -\sin\varphi/(r\sin\vartheta) & \cos\varphi/(r\sin\vartheta) & 0 \end{pmatrix}$$

Ganz wichtig ist, dass sich jedoch bei einer Koordinatentransformation auch die Basisvektoren mittransformieren. Diese Transformation der Basisvektoren lässt sich in folgender Form schreiben:

$$\begin{pmatrix} \vec{e}_x \\ \vec{e}_y \\ \vec{e}_z \end{pmatrix} = \mathcal{S} \begin{pmatrix} \vec{e}_r \\ \vec{e}_\vartheta \\ \vec{e}_\varphi \end{pmatrix} \text{ mit } \mathcal{S} = \begin{pmatrix} \sin\vartheta\cos\varphi & \cos\vartheta\cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\vartheta\sin\varphi & \cos\vartheta\sin\varphi & \cos\varphi \\ \cos\vartheta & -\sin\vartheta & 0 \end{pmatrix}$$

Die Matrix $\mathcal{S}$ hängt mit der Jacobi-Matrix $\mathcal{J}$ zusammen über

$$\mathcal{J} = \mathcal{S}\cdot\mathcal{G} \text{ mit } \mathcal{G} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & r & 0 \\ 0 & 0 & r\sin\vartheta \end{pmatrix}$$

Nun können wir den Gradienten in Kugelkoordinaten sehr schön herleiten, wobei – wie gesagt – die Basis auch mittransformiert werden muss (wird oft vergessen):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x}\vec{e}_x + \frac{\partial}{\partial y}\vec{e}_y + \frac{\partial}{\partial z}\vec{e}_z &= \mathcal{J}^{-1}\mathcal{S}\left(\frac{\partial}{\partial r}\vec{e}_r + \frac{\partial}{\partial\vartheta}\vec{e}_\vartheta + \frac{\partial}{\partial\varphi}\vec{e}_\varphi\right) = \\ &= \mathcal{G}^{-1}\mathcal{S}^{-1}\mathcal{S}\left(\frac{\partial}{\partial r}\vec{e}_r + \frac{\partial}{\partial\vartheta}\vec{e}_\vartheta + \frac{\partial}{\partial\varphi}\vec{e}_\varphi\right) \\ &= \mathcal{G}^{-1}\left(\frac{\partial}{\partial r}\vec{e}_r + \frac{\partial}{\partial\vartheta}\vec{e}_\vartheta + \frac{\partial}{\partial\varphi}\vec{e}_\varphi\right) \text{ mit } \mathcal{G}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1/r & 0 \\ 0 & 0 & 1/(r\sin\vartheta) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Also gilt schlussendlich:

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial x}\vec{e}_x + \frac{\partial}{\partial y}\vec{e}_y + \frac{\partial}{\partial z}\vec{e}_z = \frac{\partial}{\partial r}\vec{e}_r + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\vec{e}_\vartheta + \frac{1}{r\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\vec{e}_\varphi}$$