解答例

STEP III 1988、第 7 問

純粋数学 ・ 微分方程式と直交性

STEP III 1988、問 7

先に進む前に、まず問題を読んでおこう。問題は STEP Support Programme の問題データベースにある：

step.maths.org/questions/88-s3-q7

この問題は、*Beyond STEP* の第 8.6 節「**量子振動子**」で詳しく解説されている：https://beyondstep.keithmcnulty.org/ja/ch08/quantum-oscillator.html

鍵となる考え方

前半は純粋な代入の問題である。試行関数を 2 回微分し、x のべきの係数を比較すれば λ が決まる。後半は古典的な「ロンスキアン（Wronskian）の技法」である。組合せ $y_m y_n' - y_n y_m'$ を微分すると、厄介な $\omega^2 x^2$ の項が打ち消し合い、$y_m y_n$ の定数倍だけが残る。$\pm\infty$ での条件によって境界項（boundary terms）が消えるので、この導関数を実数直線全体で積分するのは容易である。

解答

以下、プライムは $\mathrm{d}/\mathrm{d}x$ を表す。方程式を次の形に書いておくと便利である。

$$y_n'' = \left(\omega^2 x^2 - (2n+1)\omega\right) y_n. \tag{$*$}$$

$n = 0$ の場合

$y_0 = \mathrm{e}^{-\lambda x^2}$ とすると、

$$y_0' = -2\lambda x\, \mathrm{e}^{-\lambda x^2}, \qquad y_0'' = (4\lambda^2 x^2 - 2\lambda)\, \mathrm{e}^{-\lambda x^2}.$$

これを $n = 0$ の $(*)$ に代入し、0 でない因子 $\mathrm{e}^{-\lambda x^2}$ で割ると、次が必要である。

$$4\lambda^2 x^2 - 2\lambda = \omega^2 x^2 - \omega \quad \text{すべての} x.$$

定数項を比較すると $\lambda = \frac{1}{2}\omega$ を得る。このとき $4\lambda^2 = \omega^2$ であるから、x^2 の項も一致する。（$4\lambda^2 = \omega^2$ のもう一つの根 $\lambda = -\frac{1}{2}\omega$ は定数項の条件を満たさない。）

$n = 1$ の場合

$y_1 = x\,\mathrm{e}^{-\lambda x^2}$ とすると、

$$\begin{aligned} y_1' &= (1 - 2\lambda x^2)\,\mathrm{e}^{-\lambda x^2}, \\ y_1'' &= \bigl(-4\lambda x - 2\lambda x(1 - 2\lambda x^2)\bigr)\mathrm{e}^{-\lambda x^2} = (4\lambda^2 x^3 - 6\lambda x)\,\mathrm{e}^{-\lambda x^2}. \end{aligned}$$

$n = 1$ の方程式 $(*)$ は $y_1'' = (\omega^2 x^2 - 3\omega)\,x\,\mathrm{e}^{-\lambda x^2}$ を要求する。すなわち

$$4\lambda^2 x^3 - 6\lambda x = \omega^2 x^3 - 3\omega x \quad \text{すべての} x,$$

であり、これもちょうど $\lambda = \frac{1}{2}\omega$ のときに成り立つ。したがって、両方の関数に対して同じ定数が使える。

$$\lambda = \tfrac{1}{2}\omega, \qquad y_0 = \mathrm{e}^{-\omega x^2/2}, \qquad y_1 = x\,\mathrm{e}^{-\omega x^2/2}.$$

無限遠での条件

$\lambda = \frac{1}{2}\omega > 0$ であるから、（多項式）$\times \mathrm{e}^{-\lambda x^2}$ の形の関数はすべて $x \to \pm\infty$ のとき 0 に収束（converge）する。$\mathrm{e}^{-\lambda x^2}$ は x のどんなべきが増大するよりも速く減衰するからである。関数 y_0、y_0'、y_1、y_1' はいずれもこの形である（多項式はそれぞれ 1、$-2\lambda x$、x、$1 - 2\lambda x^2$）。よって 4 つとも両端で 0 に収束し、要求どおりである。

恒等式

積の微分法（product rule）により、$y_m' y_n'$ の項は打ち消し合う。

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\bigl(y_m y_n' - y_n y_m'\bigr) = y_m' y_n' + y_m y_n'' - y_n' y_m' - y_n y_m'' = y_m y_n'' - y_n y_m''.$$

ここで y_n'' と y_m'' の両方に $(*)$ を用いると、

$$\begin{aligned} y_m y_n'' - y_n y_m'' &= \bigl(\omega^2 x^2 - (2n+1)\omega\bigr) y_m y_n - \bigl(\omega^2 x^2 - (2m+1)\omega\bigr) y_m y_n \\ &= \bigl((2m+1) - (2n+1)\bigr)\omega\, y_m y_n \\ &= 2(m-n)\,\omega\, y_m y_n, \end{aligned}$$

となり、求める結果が得られる。

直交性

考えてみよう 積分が 0 であることを示そうとする前に、そもそもこの無限積分が存在することはどうしてわかるのだろうか？

まず有限区間で考え、両端を別々に無限大へ飛ばす。そうすれば存在は自動的に従う。$W = y_m y_n' - y_n y_m'$ とおく。任意の $S, R > 0$ に対し、恒等式を $-S$ から R まで積分すると

$$2(m-n)\,\omega \int_{-S}^{R} y_m y_n \,\mathrm{d}x = W(R) - W(-S).$$

$R \to \infty$ のとき、与えられた条件により y_m, y_n, y_m', y_n' はいずれも 0 に収束するので、$W(R) \to 0$ である。同様に $S \to \infty$ のとき $W(-S) \to 0$ である。したがって右辺は 0 に収束し、積分 $\int_{-\infty}^{\infty} y_m y_n \,\mathrm{d}x$ は収束して

$$2(m-n)\,\omega \int_{-\infty}^{\infty} y_m y_n \,\mathrm{d}x = 0.$$

$m \neq n$ ならば、$\omega > 0$ であるから $2(m-n)\omega \neq 0$ である。これで割ると

$$\int_{-\infty}^{\infty} y_m(x)\, y_n(x) \,\mathrm{d}x = 0,$$

となり、示すべきことが得られた。この議論に必要なのは方程式と端での条件だけであることに注意しよう。y_m や y_n の具体的な式は一度も必要なかった。

検算

- $m = 0$、$n = 1$ の場合、結果は直接明らかである。$y_0 y_1 = x\,\mathrm{e}^{-\omega x^2}$ は奇関数（odd function）なので、実数直線全体での積分は 0 である。
- もう少し非自明な確認：$y_2 = (2\omega x^2 - 1)\mathrm{e}^{-\omega x^2/2}$ は $n = 2$ の方程式を満たす（確かめてみよ）。$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-\omega x^2}\,\mathrm{d}x = \sqrt{\pi/\omega}$ と $\int_{-\infty}^{\infty} x^2 \mathrm{e}^{-\omega x^2}\,\mathrm{d}x = \frac{1}{2\omega}\sqrt{\pi/\omega}$ を用いると、$\int y_0 y_2 \,\mathrm{d}x = 2\omega \cdot \frac{1}{2\omega}\sqrt{\pi/\omega} - \sqrt{\pi/\omega} = 0$ を得る。
- 数値的には、$\lambda = \frac{1}{2}\omega$ のとき、ランダムな点での方程式の残差（residual）は $n = 0, 1, 2$ について 10^{-6} 未満であった。導関数の恒等式は差分（finite differences）により 10^{-4} の精度で成り立った。また、$[-30, 30]$ 上のシンプソンの公式（Simpson's rule）により、$\omega = 0.5, 1, 2.5$ に対して $\int y_0 y_1$、$\int y_0 y_2$、$\int y_1 y_2$ はすべて 10^{-15} より小さくなった。

よくある間違い

- x^2 の係数だけを比較して $\lambda = \pm\frac{1}{2}\omega$ としてしまうこと。定数項により負の符号は除外される（無限遠での減衰からも除外される）。
- 境界項が消える理由を述べ忘れること。まさにここで、y_n と y_n' に関する両方の条件が使われるのである。
- $m - n$ が 0 でないことと $\omega > 0$ であることに触れずに $m - n$ で割ること。

STEP のその先へ

これは量子調和振動子（quantum harmonic oscillator）である。y_n はそのエネルギー状態、$(2n+1)\omega$ は（定数倍を除いて）そのエネルギー準位であり、これらの関数はエルミート多項式（Hermite polynomials）とガウス関数（Gaussian）の積である。直交性の議論はスツルム–リウヴィル理論（Sturm–Liouville theory）の特別な場合である。この理論は、自己随伴（self-adjoint）な微分作用素の固有関数（eigenfunctions）のうち固有値（eigenvalues）が異なるものは常に直交することを示す。これは対称行列の固有ベクトルの場合とまったく同様である。Boyce と DiPrima による *Elementary Differential Equations*（初等微分方程式）は、境界値問題（boundary-value problems）とスツルム–リウヴィル理論を扱っている。

Beyond STEP 解答集：https://beyondstep.keithmcnulty.org/ja/。解答本文は CC0 1.0 である。問題そのものは © Cambridge University Press & Assessment に帰属し、ここには掲載していない。英語版から機械翻訳したものであり、まだ校閲を経ていない。