풀이

STEP III 1988, 문제 7

순수수학 • 미분방정식과 직교성

STEP III 1988, 7번 문제

더 읽어 나가기 전에 문제부터 읽어 보자. 이 문제는 STEP Support Programme의 문제 데이터베이스에 있다:

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

이 문제는 *Beyond STEP*의 8.6 절 **양자 진동자**에서 단계별 안내와 함께 자세히 다룬다:
https://beyondstep.keithmcnulty.org/ko/ch08/quantum-oscillator.html

핵심 아이디어

첫 번째 부분은 순전히 대입(substitution)의 문제이다. 시험 함수를 두 번 미분하고 x의 거듭제곱의 계수를 비교하면 λ가 결정된다. 두 번째 부분은 고전적인 "론스키안(Wronskian) 기법"이다. 결합 $y_m y_n' - y_n y_m'$의 도함수에서는 다루기 까다로운 $\omega^2 x^2$ 항들이 소거되고 $y_m y_n$의 상수배만 남는다. 그러면 이 도함수를 실수 전체에서 적분하는 것은 쉽다. $\pm\infty$에서의 조건 때문에 경계항(boundary terms)이 사라지기 때문이다.

풀이

이 풀이 전체에서 프라임은 $\mathrm{d}/\mathrm{d}x$를 나타낸다. 방정식을 다음과 같이 써 두면 편리하다.

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

$n = 0$인 경우

$y_0 = \mathrm{e}^{-\lambda x^2}$이라 하면

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

이를 $n = 0$일 때의 $(*)$에 대입하고 0이 아닌 인수 $\mathrm{e}^{-\lambda x^2}$을 약분하면, 다음이 성립해야 한다.

$$4\lambda^2 x^2 - 2\lambda = \omega^2 x^2 - \omega \quad \text{모든} x.$$

상수항을 비교하면 $\lambda = \frac{1}{2}\omega$이고, 이때 $4\lambda^2 = \omega^2$이므로 x^2 항도 일치한다. ($4\lambda^2 = \omega^2$의 다른 근 $\lambda = -\frac{1}{2}\omega$는 상수항 조건을 만족하지 않는다.)

$n = 1$인 경우

$y_1 = x\,\mathrm{e}^{-\lambda x^2}$이라 하면

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

$n = 1$일 때의 방정식 $(*)$는 $y_1'' = (\omega^2 x^2 - 3\omega)\,x\,\mathrm{e}^{-\lambda x^2}$을 요구한다. 즉

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

이고, 이 역시 정확히 $\lambda = \frac{1}{2}\omega$일 때 성립한다. 따라서 두 함수 모두에 **같은** 상수가 통한다.

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

무한대에서의 조건

$\lambda = \frac{1}{2}\omega > 0$이므로, (다항식)$\times \mathrm{e}^{-\lambda x^2}$ 꼴의 함수는 모두 $x \to \pm\infty$일 때 0으로 수렴(converge)한다. $\mathrm{e}^{-\lambda x^2}$이 감소하는 속도가 x의 어떤 거듭제곱이 증가하는 속도보다도 빠르기 때문이다. 함수 y_0, y_0', y_1, y_1'은 모두 이 꼴이므로(각각의 다항식은 1, $-2\lambda x$, x, $1 - 2\lambda x^2$이다), 네 함수 모두 양 끝에서 0으로 수렴하여 요구 조건을 만족한다.

항등식

곱의 미분법(product rule)에 의해 $y_m' y_n'$ 항들이 소거된다.

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

이제 y_n''과 y_m'' 모두에 $(*)$를 적용하면

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

이고, 이것이 구하는 결과이다.

직교성

> **생각해 보기** 이상적분이 0임을 보이기 전에, 그 적분이 애초에 존재한다는 것은 어떻게 알 수 있을까?

먼저 유한 구간에서 다룬 다음 양 끝을 각각 따로 무한대로 보낸다. 그러면 존재성은 저절로 따라온다. $W = y_m y_n' - y_n y_m'$이라 하자. 임의의 $S, R > 0$에 대하여 항등식을 $-S$부터 R까지 적분하면

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

$R \to \infty$일 때 주어진 조건에 의해 y_m, y_n, y_m', y_n'이 각각 0으로 수렴하므로 $W(R) \to 0$이다. 마찬가지로 $S \to \infty$일 때 $W(-S) \to 0$이다. 따라서 우변이 0으로 수렴하므로, 적분 $\int_{-\infty}^{\infty} y_m y_n \,\mathrm{d}x$는 수렴하고

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

$m \neq n$이면 $\omega > 0$이므로 $2(m-n)\omega \neq 0$이다. 이것으로 나누면

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

이 되어 증명이 끝난다. 이 논증에는 방정식과 양 끝 조건만 필요했다는 점에 주목하자. y_m이나 y_n의 식은 전혀 필요하지 않았다.

검산

- $m = 0, n = 1$인 경우는 결과가 바로 자명하다. $y_0 y_1 = x\,\mathrm{e}^{-\omega x^2}$은 홀함수(odd function)이므로 실수 전체에서의 적분은 0이다.
- 덜 자명한 검사: $y_2 = (2\omega x^2 - 1)\mathrm{e}^{-\omega x^2/2}$는 $n = 2$일 때의 방정식을 만족한다(직접 확인해 보라). $\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-\omega x^2}\,\mathrm{d}x = \sqrt{\pi/\omega}$와 $\int_{-\infty}^{\infty} x^2 \mathrm{e}^{-\omega x^2}\,\mathrm{d}x = \frac{1}{2\omega}\sqrt{\pi/\omega}$를 이용하면 $\int y_0 y_2 \,\mathrm{d}x = 2\omega \cdot \frac{1}{2\omega}\sqrt{\pi/\omega} - \sqrt{\pi/\omega} = 0$을 얻는다.
- 수치적으로, $\lambda = \frac{1}{2}\omega$일 때 $n = 0, 1, 2$에 대해 임의의 점에서 방정식의 잔차(residual)는 10^{-6} 미만이었다. 도함수 항등식은 유한 차분(finite differences)으로 10^{-4} 이내에서 성립했다. 또 $[-30, 30]$에서 심프슨 공식(Simpson's rule)을 적용하면 $\omega = 0.5, 1, 2.5$에 대해 $\int y_0 y_1$, $\int y_0 y_2$, $\int y_1 y_2$가 모두 10^{-15}보다 작았다.

흔한 실수

- x^2의 계수만 비교하여 $\lambda = \pm\frac{1}{2}\omega$를 얻는 것: 상수항 조건이 음의 부호를 배제한다(무한대에서의 감소 조건도 마찬가지이다).

- 경계항이 사라지는 이유를 밝히지 않는 것: 바로 이 부분에서 y_n에 대한 조건과 y_n'에 대한 조건이 모두 쓰인다.
- $m - n$이 0이 아니라는 것과 $\omega > 0$이라는 것을 언급하지 않고 $m - n$으로 나누는 것.

STEP 너머

이것은 양자 조화 진동자(quantum harmonic oscillator)이다. y_n은 그 에너지 상태이고, $(2n + 1)\omega$는 (상수배를 제외하면) 그 에너지 준위이며, 이 함수들은 에르미트 다항식(Hermite polynomials)에 가우스 함수(Gaussian)를 곱한 것이다. 직교성(orthogonality) 논증은 슈투름–리우빌 이론(Sturm–Liouville theory)의 특수한 경우이다. 이 이론은 자기수반 미분 연산자(self-adjoint differential operator)의 서로 다른 고윳값(eigenvalue)에 대응하는 고유함수(eigenfunction)들이 항상 직교함을 보여 준다. 이는 대칭행렬(symmetric matrix)의 고유벡터(eigenvector)들이 직교하는 것과 같다. Boyce와 DiPrima의 *Elementary Differential Equations*(기초 미분방정식)는 경곗값 문제와 슈투름–리우빌 이론을 다룬다.

Beyond STEP 풀이: https://beyondstep.keithmcnulty.org/ko/. 풀이 글은 CC0 1.0이다. 문제 자체의 저작권은 © Cambridge University Press & Assessment에 있으며 여기에 싣지 않는다. 영어 원문을 기계 번역하였으며 아직 검토되지 않았다.