详细解答

STEP III 1988，第 7 题

纯数学 · 微分方程与正交性

STEP III 1988，第 7 题

继续阅读之前，请先看题目（原题为英文）。题目载于 STEP Support Programme 的试题资料库：

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

本题在 *Beyond STEP* 第 8.6 节量子振子中有完整的引导式讲解：https://beyondstep.keithmcnulty.org/zh-hans/ch08/quantum-oscillator.html

关键思路

第一部分纯粹是代入（substitution）：把试探函数（trial function）求导两次，再比较 x 各次幂的系数，便可确定 λ。第二部分是经典的“朗斯基技巧”（Wronskian trick）：组合 $y_m y_n' - y_n y_m'$ 的导数中，麻烦的 $\omega^2 x^2$ 项会互相抵消，只剩下 $y_m y_n$ 的一个倍数。之后把这个导数在整条实数线上积分就很容易，因为在 $\pm\infty$ 处的条件令边界项（boundary terms）全部消失。

解答

全篇以撇号表示 $\mathrm{d}/\mathrm{d}x$。把方程写成以下形式会比较方便：

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

$n = 0$ 的情况

取 $y_0 = \mathrm{e}^{-\lambda x^2}$，则

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

代入 $n = 0$ 时的 $(*)$，并约去非零因子 $\mathrm{e}^{-\lambda x^2}$，我们需要

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

比较常数项得 $\lambda = \frac{1}{2}\omega$，这时 x^2 项亦相符，因为 $4\lambda^2 = \omega^2$。（$4\lambda^2 = \omega^2$ 的另一个根 $\lambda = -\frac{1}{2}\omega$ 不满足常数项的要求。）

$n = 1$ 的情况

取 $y_1 = x\,\mathrm{e}^{-\lambda x^2}$，则

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

$n = 1$ 时的方程 $(*)$ 要求 $y_1'' = (\omega^2 x^2 - 3\omega)\,x\,\mathrm{e}^{-\lambda x^2}$，即

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

而这同样恰好在 $\lambda = \frac{1}{2}\omega$ 时成立。因此同一个常数对两个函数都适用：

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

无穷远处的条件

由于 $\lambda = \frac{1}{2}\omega > 0$，凡是形如（多项式）$\times \mathrm{e}^{-\lambda x^2}$ 的函数，当 $x \to \pm\infty$ 时都趋向 0，因为 $\mathrm{e}^{-\lambda x^2}$ 衰减的速度比 x 的任何次幂增长的速度都要快。函数 y_0、y_0'、y_1 和 y_1' 全部属于这种形式（对应的多项式分别是 1、$-2\lambda x$、x 和 $1 - 2\lambda x^2$），所以这四个函数在两端都趋向 0，符合要求。

恒等式

根据积法则（product rule），$y_m' y_n'$ 项互相抵消：

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

现在对 y_n'' 和 y_m'' 都使用 $(*)$：

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

这就是所要求的结果。

正交性

想一想 在尝试证明这个无穷积分等于零之前，我们怎样知道它确实存在？

我们先在有限区间上处理，再让两个端点分别趋向无穷；这样存在性便自然而然地得到。记 $W = y_m y_n' - y_n y_m'$。对任意 $S, R > 0$，把恒等式由 $-S$ 积分至 R，得

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

当 $R \to \infty$ 时，根据题目所给的条件，y_m, y_n, y_m', y_n' 各自趋向 0，所以 $W(R) \to 0$。同理，当 $S \to \infty$ 时 $W(-S) \to 0$。因此右边趋向 0，故积分 $\int_{-\infty}^{\infty} y_m y_n \,\mathrm{d}x$ 收敛（converges），并且

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

若 $m \neq n$，则 $2(m-n)\omega \neq 0$，因为 $\omega > 0$。两边除以它，得

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

正如所求。请留意，这里只用到方程本身和两端的条件：我们从来不需要 y_m 或 y_n 的具体公式。

验算

- 当 $m = 0$、$n = 1$ 时，结果可以直接看出：$y_0 y_1 = x\,\mathrm{e}^{-\omega x^2}$ 是奇函数（odd function），所以它在整条实数线上的积分是 0。
- 一个没那么显然的检验：$y_2 = (2\omega x^2 - 1)\mathrm{e}^{-\omega x^2/2}$ 满足 $n = 2$ 时的方程（不妨自己试试）。利用 $\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-\omega x^2}\,\mathrm{d}x = \sqrt{\pi/\omega}$ 和 $\int_{-\infty}^{\infty} x^2 \mathrm{e}^{-\omega x^2}\,\mathrm{d}x = \frac{1}{2\omega}\sqrt{\pi/\omega}$，可得 $\int y_0 y_2 \,\mathrm{d}x = 2\omega \cdot \frac{1}{2\omega}\sqrt{\pi/\omega} - \sqrt{\pi/\omega} = 0$。
- 数值方面，取 $\lambda = \frac{1}{2}\omega$ 时，方程在随机点上的残差（residual）对 $n = 0, 1, 2$ 都小于 10^{-6}；以有限差分（finite differences）检验，导数恒等式准确至 10^{-4}；而在 $[-30, 30]$ 上使用辛普森法则（Simpson's rule），对 $\omega = 0.5, 1, 2.5$，$\int y_0 y_1$、$\int y_0 y_2$、$\int y_1 y_2$ 全部小于 10^{-15}。

常见错误

- 只比较 x^2 的系数而得出 $\lambda = \pm\frac{1}{2}\omega$：常数项排除了负号（无穷远处的衰减条件亦然）。
- 忘记说明边界项为何消失：这正是同时用到 y_n 和 y_n' 两个条件的地方。
- 除以 $m - n$ 时，没有指出它不等于零，亦没有指出 $\omega > 0$。

STEP 之外

这就是量子谐振子（quantum harmonic oscillator）：y_n 是它的能量态，$(2n+1)\omega$ 是它的能级（相差一个比例常数），而这些函数是埃尔米特多项式（Hermite polynomials）乘以一个高斯函数（Gaussian）。这个正交性（orthogonality）论证是施图姆－刘维尔理论（Sturm–Liouville theory）的一个特例；该理论证明，自伴（self-adjoint）微分算子对应于不同特征值（eigenvalue）的特征函数（eigenfunction）必定正交，正如对称矩阵的特征向量（eigenvector）一样。Boyce 与 DiPrima 所著的 *Elementary Differential Equations*（微分方程入门教材）涵盖边值问题和施图姆－刘维尔理论。

Beyond STEP 详细解答：https://beyondstep.keithmcnulty.org/zh-hans/。解答文字采用 CC0 1.0；题目本身版权属 Cambridge University Press & Assessment 所有（©），本文件不予转载。由机器从英文翻译而成；尚未经审阅。