6.1. L^2-Skalarprodukt. Stellen Sie in der Übungstunde Fragen, falls Sie mit dieser Aufgabe Mühe haben.

6.2. Orthonormalbasis eines Skalarproduktraums.

Wir berechnen mittels der Darstellung $v_k = \sum_{i=1}^n \langle v_k, v_i\rangle v_i$, der Linearität des Skalarproduktes im ersten Argument und der Symmetrie des Skalarproduktes

$$1 = \langle v_k, v_k\rangle = \left\langle \sum_{i=1}^n \langle v_k, v_i\rangle v_i, v_k \right\rangle = 1^2 + \sum_{k\neq i=1,\dots,n} \langle v_k, v_i\rangle^2.$$

Es folgt

$$\sum_{k\neq i=1,\dots,n} \langle v_k, v_i\rangle^2 = 0.$$

Da alle Summanden nicht-negativ sind, folgt, dass $\langle v_k, v_i\rangle = 0$ für alle $i \neq k$. Das heisst, dass die Vektoren $v_1, \dots, v_n$ paarweise orthogonal zueinander sind.

6.3. Anfangswertproblem für die räumlich eindimensionale Wärmeleitungsgleichung mit periodischer Bedingung.

(i) Gemäss einem Satz aus der Vorlesung wissen wir, dass die Lösung gegeben ist durch

$$u(t,x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \widehat{v}_k e^{-k^2 t + ikx}.$$

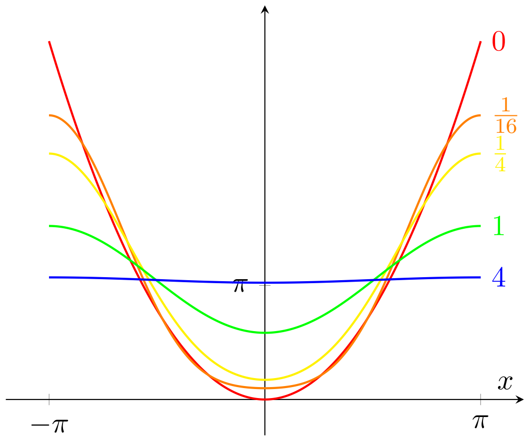
Aus der Übungsserie 5 wissen wir, dass

$$\widehat{v}_0 = \frac{\pi^2}{3}, \qquad \widehat{v}_k = \frac{2(-1)^k}{k^2}, \quad \forall k \neq 0.$$

Wir können also schreiben

$$u(t,x) = \frac{\pi^2}{3} + \sum_{0\neq k=-\infty}^{\infty} \frac{2(-1)^k}{k^2} e^{-k^2 t + ikx} = \frac{\pi^2}{3} + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{4(-1)^k}{k^2} e^{-k^2 t} \cos(kx).$$

(ii) Auf dem Bild ist die Funktion $u(t,x)$ zu den Zeiten $t = 0, \frac{1}{16}, \frac{1}{4}, 1, 4$ für x im Intervall $(-\pi, \pi)$ zu sehen:



(iii) Sei $\varepsilon > 0$. Wir definieren

$$C := \sum_{k=2}^{\infty} \frac{4}{k^2},$$
$$t_0 := -\frac{\log \frac{\varepsilon}{C}}{3}.$$

Sei $t \geq t_0$. Wir haben

$$\left| \sum_{-1,0,1 \neq k=-\infty,\dots,\infty} \widehat{v}_k e^{-k^2 t + ikx} \right| = \left| \sum_{k=2}^{\infty} \frac{4(-1)^k}{k^2} e^{-k^2 t} \cos(kx) \right|$$
$$< e^{-4t} \sum_{k=2}^{\infty} \frac{4}{k^2}$$
$$\leq e^{-3t_0} C e^{-t}$$
$$= \varepsilon e^{-t}$$

(iv) Sei $\varepsilon = 10^{-3}$. Wir berechnen explizit

$$C = \sum_{k=2}^{\infty} \frac{4}{k^2} = 4\left(\frac{\pi^2}{6} - 1\right), \qquad t_0 \approx 2.6.$$

Also gilt $t = 3 \geq t_0$. Nach der obigen Teilaufgabe haben wir daher für $x = 0$

$$\left| u(t,x) - \sum_{k=-1,0,1} \widehat{v}_k e^{-k^2 t + ikx} \right| = \left| \sum_{-1,0,1 \neq k=-\infty,\dots,\infty} \widehat{v}_k e^{-k^2 t + ikx} \right| \leq 10^{-3} e^{-3}.$$

Nun berechnen wir

$$\sum_{k=-1,0,1} \widehat{v}_k e^{-k^2 t + ikx} = \frac{\pi^2}{3} - 4e^{-t}\cos(x) = \frac{\pi^2}{3} - 4e^{-3}\cos(0) \approx 3.09072 \approx u(3,0),$$

wobei wir auf 5 Stellen nach dem Komma gerundet haben. Der Fehler wird durch das Runden um weniger als 10^{-5} vergrössert. Daher weicht die Zahl 3.09072 um weniger als $10^{-3}e^{-3} + 10^{-5}$ von $u(3,0)$ ab, wie gewünscht.

(v) Sei $x \in \mathbb{R}$. Wir behaupten, dass $u(t,x)$ strebt gegen $\frac{\pi^2}{3}$ wenn t nach unendlich strebt. Nach der obigen Teilaufgabe gilt

$$\left| u(t,x) - \frac{\pi^2}{3} \right| = \left| \sum_{k=1}^{\infty} \frac{4(-1)^k}{k^2} e^{-k^2 t} \cos(kx) \right| \leq \frac{4\pi^2}{6} e^{-t}.$$

Aus der Tatsache $e^{-t} \to 0$ für $t \to \infty$ folgt, dass

$$u(t,x) \to \frac{\pi^2}{3}$$

für $t \to \infty$.

6.4. Ungerade Fortsetzung einer Funktion und die Wärmeleitungsgleichung.

(i) Die ungerade Fortsetzung w der Funktion v auf dem Intervall $[-\pi, \pi]$ ist gegeben durch

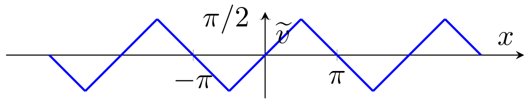
$$w(x) = \begin{cases} v(x) & \text{falls } x \in [0, \pi], \\ v(-x) & \text{falls } x \in [-\pi, 0). \end{cases}$$

Nun können wir $\widetilde{v}$ definieren, indem wir w wie gewöhnlich 2π periodisch fortsetzen. Das heisst, dass

$$\widetilde{v}(x) := w(x - 2j\pi)$$

für $x \in [(2j-1)\pi, (2j+1)\pi]$ und $j \in \mathbb{Z}$.

(ii) Die Funktion $\widetilde{v}$ auf dem Intervall $[-3\pi, 3\pi)$:



(iii) Wir wissen aus der Vorlesung, dass die Funktion

$$u(t,x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \widehat{v}_k e^{-k^2 t + ikx} = \widehat{v}_0 + \sum_{k=1}^{\infty} \left(a_k \cos(kx) + b_k \sin(kx)\right) e^{-k^2 t}$$

die Wärmeleitungsgleichung $u_t = u_{xx}$ mit $u(0,x) = v(x)$ für $x \in \mathbb{R}$ lösst. Wir berechnen

$$\widehat{v}_0 = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \widetilde{v}(x)\ dx = 0$$

Da $\widetilde{v}$ ungerade ist, gilt

$$a_k = 0$$

und wir berechnen

$$\begin{aligned}
b_k &= \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \widetilde{v}(x) \sin(kx)\ dx \\
&= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{0} \widetilde{v}(x) \sin(kx)\ dx + \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \widetilde{v}(x) \sin(kx)\ dx \\
&= \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} \widetilde{v}(x) \sin(kx)\ dx \\
&= \frac{2}{\pi} \left(\int_0^{\pi/2} x \sin(kx)\ dx + \int_{\pi/2}^{\pi} (\pi - x) \sin(kx)\ dx \right) \\
&= \frac{2}{\pi} \left(-\frac{\pi \cos(\frac{k\pi}{2})}{2k} + \int_0^{\pi/2} \frac{\cos(kx)}{k}\ dx + \frac{\pi \cos(\frac{k\pi}{2})}{2k} - \int_{\pi/2}^{\pi} \frac{\cos(kx)}{k}\ dx \right) \\
&= \frac{2}{\pi k^2} \left(\sin\left(\frac{\pi k}{2}\right) - 0 - 0 + \sin\left(\frac{\pi k}{2}\right) \right) \\
&= \begin{cases} 0 & \text{falls } k \text{ gerade ist,} \\ \frac{4}{\pi k^2} & \text{falls } \frac{k-1}{2} \text{ gerade ist,} \\ -\frac{4}{\pi k^2} & \text{falls } \frac{k-1}{2} \text{ ungerade ist.} \end{cases}
\end{aligned}$$

Wir können also schreiben

$$u(t,x) = \frac{4}{\pi} \sum_{j=0}^{\infty} \left[\frac{\sin\big((4j+1)x\big)\ e^{-(4j+1)^2 t}}{(4j+1)^2} - \frac{\sin\big((4j+3)x\big)\ e^{-(4j+3)^2 t}}{(4j+3)^2} \right].$$

Wir bemerken, dass $u(t,0) = u(t,\pi) = 0$. Also hat u die gewünschten Eigenschaften. Des Weiteren ist diese Lösung eindeutig aufgrund eines Satzes aus der Vorlesung. Das heisst, dass die Informationen aus der Aufgabenstellung vollständig das physikalische Phänomen beschreiben.

6.5. Wärmeleitungskern. Wir leiten zuerst nach der Variablen x ab und erhalten mittels der Kettenregel

$$\Phi_x(t,x) = -\frac{x\ e^{-\frac{x^2}{4t}}}{2t\sqrt{4\pi t}}.$$

Ein weiteres Mal nach x mittels der Produkt- und der Kettenregel Ableiten ergibt

$$\Phi_{xx}(t,x) = \frac{x^2\ e^{-\frac{x^2}{4t}}}{4t^2\sqrt{4\pi t}} - \frac{e^{-\frac{x^2}{4t}}}{2t\sqrt{4\pi t}}.$$

Wir leiten nun nach der Variablen t ab und erhalten mittels der Produkt- und der Kettenregel

$$\Phi_t(t,x) = \frac{x^2\ e^{-\frac{x^2}{4t}}}{4t^2\sqrt{4\pi t}} - \frac{e^{-\frac{x^2}{4t}}}{2t\sqrt{4\pi t}}.$$

Offensichtlich erfüllt Φ die Wärmeleitungsgleichung $\Phi_t = \Phi_{xx}$.

6.6. Lösung der Wellengleichung für eine räumlich periodische Funktion mit Hilfe der räumlichen Fourierreihenentwicklung.

Sei $f : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ eine 2π-periodische stetig differenzierbare Funktion und $k \in \mathbb{Z}$. Mit Hilfe partieller Integration haben wir

$$\begin{aligned} \widehat{f'}_k &= \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} f'(x)e^{-ikx}dx \\ &= \frac{1}{2\pi}\left(f(x)e^{-ikx}\Big|_{x=0}^{2\pi} - \int_0^{2\pi} f(x)(-ik)e^{-ikx}dx\right) \\ &= 0 + ik\widehat{f}_k. \end{aligned} \tag{1}$$

Daraus folgt, dass

$$\widehat{f''}_k = -k^2\widehat{f}_k, \tag{2}$$

falls f zweimal stetig differenzierbar ist. Sei jetzt $u : (0,\infty)\times\mathbb{R} \to \mathbb{C}$ eine zweimal stetig differenzierbare Funktion, sodass $u^t := u(t,\cdot)$ 2π-periodisch ist für jedes $t > 0$. Aus (2) folgt, dass u die Wellengleichung mit $c = 1$,

$$u_{tt} = u_{xx},$$

genau dann löst, falls

$$\frac{d^2}{dt^2}\widehat{u^t}_k = -k^2\widehat{u^t}_k, \qquad \text{für alle } k \in \mathbb{Z}. \tag{3}$$

Das ist ein unendliches System linearer *gewöhnlicher* DG zweiter Ordnung für die *räumlichen Fourierkoeffizienten* von u. Wir haben also die Wellengleichung als ein System gewöhnlicher DG umgeschrieben. Seien v, w jetzt 2π-periodische Funktionen, wobei v zweimal stetig differenzierbar ist und w stetig differenzierbar ist. Dann löst u die Anfangsbedingungen

$$u^0 = u(0, \cdot) = v, \qquad u_t^0 = u_t(0, \cdot) = w$$

genau dann, wenn

$$\widehat{u^0}_k = \widehat{v}_k, \qquad \frac{d}{dt}\bigg|_{t=0} \widehat{u^t}_k = \widehat{u^0_t}_k = \widehat{w}_k \qquad \text{für jedes } k \in \mathbb{Z}. \tag{4}$$

Das ist ein unendliches System von Anfangsbedingungen für die räumlichen Fourierkoeffizienten von u. Die Funktion u löst die Wellengleichung mit Anfangsbedingungen gegeben durch v, w daher genau dann, falls jeder räumlich Fourierkoeffizient von u die gewöhnliche DG (3) mit Anfangsbedingungen (4) löst.

Wir nehmen jetzt an, dass u die Wellengleichung mit Anfangsbedingungen v, w löst. Mit Hilfe der Fourierreihenentwicklung können wir die Funktion u aus den räumlichen Fourierkoeffizienten zurückgewinnen. Wir bestimmen die Fourierkoeffizienten, indem wir die Lösung des Anfangswertproblems (3,4) bestimmen. Das charakteristische Polynom der PDG (3) ist gegeben durch $p(\lambda) = \lambda^2 + k^2$ und die Lösung ist daher gegeben durch

$$\widehat{u^t}_k = A_k \, e^{ikt} + B_k \, e^{-ikt}.$$

Aus den Anfangsbedingungen (4) folgt, dass

$$\begin{aligned} A_k + B_k = \widehat{v}_k, &\qquad ik(A_k - B_k) = \widehat{w}_k, \\ \text{also} \qquad A_k = \frac{\widehat{v}_k}{2} - \frac{i\widehat{w}_k}{2k}, &\quad B_k = \frac{\widehat{v}_k}{2} + \frac{i\widehat{w}_k}{2k}. \end{aligned}$$

Es gilt daher

$$\begin{aligned} u(t, x) &= \sum_{k=-\infty}^{\infty} \widehat{u^t}_k e^{ikx} \\ &= \sum_{k=-\infty}^{\infty} \left(\frac{\widehat{v}_k}{2} - \frac{i\widehat{w}_k}{2k} \right) e^{ik(x+t)} + \left(\frac{\widehat{v}_k}{2} + \frac{i\widehat{w}_k}{2k} \right) e^{ik(x-t)} \\ &= \frac{v(x+t) + v(x-t)}{2} + \frac{1}{2} \int_{x-t}^{x+t} w(y) dy \\ &\quad \text{(wegen (1) mit } f(x) := \int_0^x w(y) dy \text{ und mit } f(x) := \int_x^0 w(y) dy). \end{aligned}$$

Das ist die d'Alembertsche Formel für die Lösung der Wellengleichung mit Anfangsbedingungen v, w. (Ein Satz aus der Vorlesung besagt, dass die durch diese Formel gegebene Funktion auch tatsächlich die Wellengleichung mit Anfangsbedingungen v, w löst.)

6.7. Zeitumkehrinvarianz der Wellengleichung und der Schrödingergleichung mit zeitunabhängiger potentiellen Energie.

(i) Wir berechnen die zeitliche Ableitung von $\widetilde{u}$,

$$\widetilde{u}_{\widetilde{t}}(\widetilde{t}, x) = -u_t(-\widetilde{t}, x),$$

und die zweite zeitliche Ableitung von $\widetilde{u}$,

$$\widetilde{u}_{\widetilde{t}\widetilde{t}}(\widetilde{t}, x) = u_{tt}(-\widetilde{t}, x).$$

Wir berechnen die räumliche Ableitung von $\widetilde{u}$

$$\widetilde{u}_{x_j}(\widetilde{t}, x) = u_{x_j}(-\widetilde{t}, x)$$

und die zweite räumliche Ableitung von $\widetilde{u}$

$$\widetilde{u}_{x_j x_j}(\widetilde{t}, x) = u_{x_j x_j}(-\widetilde{t}, x).$$

Daher folgt

$$\begin{aligned}\widetilde{u}_{\widetilde{t}\widetilde{t}}(\widetilde{t}, x) =& u_{tt}(-\widetilde{t}, x) = c^2 \Delta u(-\widetilde{t}, x)\\ &= c^2 \sum_{j=1}^n u_{x_j x_j}(-\widetilde{t}, x) = c^2 \sum_{j=1}^n \widetilde{u}_{x_j x_j}(\widetilde{t}, x) = c^2 \Delta \widetilde{u}(\widetilde{t}, x).\end{aligned}$$

Wir sehen, dass $\widetilde{u}$ die Wellengleichung erfüllt.

(ii) Wir berechnen

$$\widetilde{u}_{\widetilde{t}}(\widetilde{t}, x) = -\overline{u_t(-\widetilde{t}, x)}$$

und

$$\Delta \widetilde{u}(\widetilde{t}, x) = \overline{\Delta u(-\widetilde{t}, x)}.$$

Daher gilt

$$\begin{aligned} i\hbar\, \widetilde{u}_{\widetilde{t}} &= -i\hbar\, \overline{u_t(-\widetilde{t}, x)} = \overline{i\hbar u_t(-\widetilde{t}, x)} = \overline{-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta u(-\widetilde{t}, x) + V u(-\widetilde{t}, x)}\\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \widetilde{u}(\widetilde{t}, x) + V \widetilde{u}(\widetilde{t}, x).\end{aligned}$$

Wir sehen, dass $\widetilde{u}$ die Schrödingergleichung erfüllt.

6.8. Lesen. Haben Sie den Unterabschnitt gelesen?