I en ordinær differensiallikning er den ukjente en funksjon av én variabel, som regel tiden - spenningen over en kondensator, posisjonen til en kloss på en fjær eller temperaturen i en kopp kaffe. Men temperaturen i en stav som varmes opp i den ene enden, er forskjellig fra punkt til punkt, så den ukjente er en funksjon $u(x,t)$ av både posisjonen x og tiden t. En differensiallikning der den ukjente er en funksjon av flere variable, kalles en **partiell differensiallikning**.[1] Her er et femukers kraskjurs.

1 UTLEDNINGER

De mest grunnleggende partielle differensiallikningene kommer fra fysikk. La f være en funksjon av to variable; en romlig koordinat x og tiden t. Matematisk sett er det ingen forskjell på disse, men vi skiller mellom dem på grunn av fysikken. Funksjonsverdiene til f skrives $f(x,t)$, og de deriverte med hensyn på rom og tid skrives henholdsvis

$$\nabla f(x,t) = \frac{\partial f}{\partial x}(x,t) = \partial_x f(x,t) = \lim_{h\to 0} \frac{f(x+h,t) - f(x,t)}{h}$$

og

$$\dot{f}(x,t) = \frac{\partial f}{\partial t}(x,t) = \partial_t f(x,t) = \lim_{h\to 0} \frac{f(x,t+h) - f(x,t)}{h}.$$

Disse kalles **partiellderiverte** og leses henholdsvis "f derivert med hensyn på x" og "f derivert med hensyn på t".[2] De dobbelderiverte skrives

$$\Delta f = \partial_{xx} f = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \qquad \text{og} \qquad \ddot{f} = \partial_{tt} f = \frac{\partial^2 f}{\partial t^2}.$$

Den geometriske tolkningen av de partiellderiverte kommer an på den geometriske tolkingen av f, og denne kan være litt forskjellig alt etter hva vi skal bruke f til. I denne økten skal vi tenke på f som en eller annen målbar fysisk størrelse, for eksempel

- utslaget til en oppspent gitarstreng som vibrerer. Da blir $\dot{f}$ farten og $\ddot{f}$ akselerasjonen til et punkt på strengen, ∇f stigningen til strengen med hensyn på x, og Δf strengens krumning.[3]
- trykket i en stående trykkbølge i en orgelpipe.[4]
- spenningen på en lang transmisjonslinje.[5]
- temperaturen i en stang.
- konsentrasjonen av et eller annet i en endimensjonal ting, for eksempel antall E. Coli per meter i et kloakkrør.

og gjennom dette bli vant til å håndtere funksjoner av to variable. Det er vanlig å bruke u for den generiske ukjente funksjonen, men i anvendelser dukker alle slags bokstaver opp, avhengig av hva som er tradisjon i den bakenforliggende fysikken.

1 La oss begynne med å bli vant til notasjonen. La

$$u(x,t) = e^{-t}\sin x.$$

Finn $\dot{u}$, $\ddot{u}$, ∇u og Δu.

[1] https://en.wikipedia.org/wiki/Partial_differential_equation
[2] https://en.wikipedia.org/wiki/Partial_derivative
[3] https://en.wikipedia.org/wiki/String_vibration
[4] https://en.wikipedia.org/wiki/Standing_wave
[5] https://en.wikipedia.org/wiki/Telegrapher%27s_equations

Den siste tolkningen i listen på forrige side gir oss relativt lett en av de viktigste likningene i matematisk fysikk. La oss tenke at vi har et kloakkrør med kloakk, og la $v(x,t)$ være væskehastigheten til kloakken i meter per sekund og $\rho(x,t)$ tettheten av E. Coli i antall bakterier per meter. Totalt antall bakterier mellom $x=a$ og $x=b$ er

$$\int_a^b \rho(x,t)\,dx$$

og **fluksen**[6] av bakterier over punktet x er

$$J(x,t) = \rho(x,t)v(x,t),$$

gitt i antall bakterier per sekund. Hvis vi ser bort fra at E. Coli faktisk deler seg hele tiden, er det er en rimelig antakelse at bakterier hverken oppstår eller forsvinner i løse luften.

2 Bruk analysens fundamentalteorem og vis at dersom ingen bakterier skal forsvinne, må

$$\int_a^b \partial_t\rho(x,t) + \partial_x\Big(\rho(x,t)v(x,t)\Big)\,dx = 0$$

og følgelig

$$\partial_t\rho(x,t) + \partial_x\Big(\rho(x,t)v(x,t)\Big) = 0.$$

Likningen over er et grunnleggende eksempel på noe som kalles en **bevaringslov**[7] og vi kan spinne videre på den.

3 Vi kan utlede videre likninger ved å gjøre antagelser på ρ og v. Anta konstant hastighet og utled **transportlikningen**

$$\partial_t\rho + v\partial_x\rho = 0 \qquad \text{eller} \qquad \dot\rho + v\nabla\rho = 0.$$

Transportlikningen er ikke så interessant. Vi kan finne en mer interessant likning ved å anta at fluksen i kontinuitetslikningen er gitt ved **Ficks diffusjonslov**[8]

$$J = -D\nabla\rho$$

istedet for $J=\rho v$. Konstanten D kalles **diffusjonskonstanten**.

4 Utled **diffusjonslikningen**[9]

$$\dot\rho = D\Delta\rho$$

ved å sette Ficks lov inn i kontinuitetslikningen.

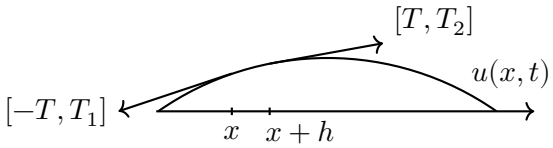
Det er ganske vanlig at en og samme matematiske likning modellerer vidt forskjellige fysiske fenomener. Har du en stang eller ledning med temperatur $u(x,t)$ der varmen kun kan strømme i x-retningen, for eksempel ved at stangen er pakket inn i Glava, utledes på samme måte en likning som spår identisk oppførsel, nemlig varmelikningen

$$\dot u(x,t) = \alpha\Delta u(x,t),$$

der den termiske diffusiviteten α avhenger av stangens tverrsnitt, varmeledningsevne og varmekapasitet.[10]

[6] https://en.wikipedia.org/wiki/Flux
[7] https://en.wikipedia.org/wiki/Conservation_law
[8] https://en.wikipedia.org/wiki/Fick%27s_laws_of_diffusion
[9] https://en.wikipedia.org/wiki/Diffusion_equation
[10] https://en.wikipedia.org/wiki/Thermal_diffusivity

And now for something completely different. Vi tenker at vi har en vibrerende streng med konstant massetetthet ρ (nå i kg/m) spent opp i to punkter på x-aksen, og $u(x,t)$ gir utslaget u fra likevektslinjen. Vi antar at tyngdekraften er neglisjerbar, og at strengen er helt elastisk, slik at strengestrekket, som virker parallelt med strengen, er eneste kraft. Vi antar at hvert punkt på strengen kun beveger seg loddrett, og at den horisontale komponenten av strengestrekket er konstant lik T:

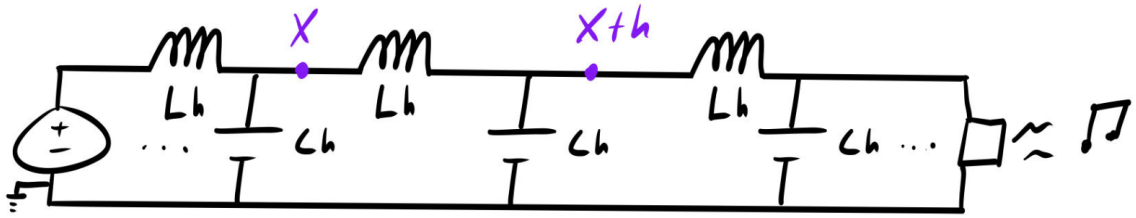


5 Sett opp Newtons andre lov for den lille biten fra x til $x+h$ og utled **bølgelikningen**[11]

$$\ddot{u}(x,t) = c^2 \Delta u(x,t)$$

der $c = \sqrt{\frac{T}{\rho}}$. Denne har benevning meter per sekund og kalles bølgefarten.

En lang transmisjonslinje er ikke en ideell leder. La oss tenke at du har en spenningskilde og en last som sitter ganske langt borte. Hvis ledningen er lang nok,[12] vil den ha litt induktans per meter, og mellom ledningene vil det også være litt kapasitans per meter. Her er en illustrasjon:



For å modellere induktansen på ledningene og kapasitansen mellom dem, tenker vi at det sitter masse av små kondensatorer og spoler bortetter ledningsparet, slik som på figuren. Det kan sitte en last i enden av ledningsparet, men vi antar ingen motstand i selve ledningene. Spenning og strøm vil variere på linjene, og vi tenker på dem som funksjoner av to variable $v(x,t)$ og $i(x,t)$.

6 La L være ledningens induktans per meter, og C ledningens kapasitans per meter. Se på en liten bit av ledningsparet og vis at

$$v(x+h,t) = v(x,t) - Lh\partial_t i(x,t)$$

og at

$$i(x+h,t) = i(x,t) - Ch\partial_t v(x,t)$$

og bruk disse til å utlede telegraflikningene

$$\partial_x v = -L\partial_t i \qquad\qquad \partial_x i = -C\partial_t v$$

og bruk disse til å vise at

$$\ddot{v} = c^2 \Delta v \qquad \text{og at} \qquad \ddot{i} = c^2 \Delta i$$

der $c = \frac{1}{\sqrt{LC}}$ er bølgefarten.

[11] https://en.wikipedia.org/wiki/Wave_equation
[12] https://www.feynmanlectures.caltech.edu/II_24.html

2 ANALYTISKE LØSNINGSTEKNIKKER

Så til løsning. Hvordan løser man en partiell differensiallikning? La oss begynne med det enkleste - transportlikningen. Denne har mange løsninger, men bare én dersom vi tar med et initialkrav. Det er vanlig å starte med observasjonen at ρ må være konstant på et sett med rette linjer. Disse kalles likningens **karakteristiske kurver**.

7 Finn dem.

Det er vanlig å slenge på et initialkrav:

$$\rho(x, 0) = g(x).$$

Transportlikningen er ikke så interessant - løsningen er bare en konsentrasjonsprofil som beveger seg bortover med den konstante farten v. Det er derfor den heter "transportlikningen".

8 Løs transportlikningen med initialkrav. Det er overraskende enkelt om du bruker de karakteristiske kurvene.

Det er et par andre modeller med litt fysisk relevans som kan løses på liknende vis - vi tar dem med en passant. Dersom ρ er oksygentettheten i blodstrømmen din og denne blir transportert ut gjennom blodåreveggene på en måte som er proporsjonal med konsentrasjonen, er

$$\dot{\rho} + v \cdot \nabla\rho + \gamma\rho = 0.$$

en enkel modell dersom $\gamma > 0$.

9 Løs. Bruk de karakteristiske kurvene fra forrige side.

La oss nå tenke at det kommer en blodåre inn på hovedblodåren og sprøyter blod med en annen oksygenkonsentrasjon inn i åren. Dette kan vi modellere ved å slenge på en innsprøytning f på høyresiden slik:

$$\dot{\rho} + v \cdot \nabla\rho = f$$

10 Denne kan du også løse ved å se på hvordan ρ oppfører seg på de karakteristiske kurvene.

Vanligvis starter man med å bestemme seg for at man skal løse likningene på et begrenset intervall på x-aksen. Av hensyn til studentene pleier man å begynne med $[0, \pi]$, for da blir regningen enklest, og av samme grunn spesifiserer man randkravene

$$u(0, t) = u(\pi, t) = 0.$$

Dette betyr at strengen er spent opp i $x = 0$ og $x = \pi$, eller at temperaturen i stangen holdes ved null grader, og nå har vi nok informasjon til å sette i gang og regne.

En klassisk teknikk for å løse partielle differensiallikninger kalles **separasjon av variable** og består i å anta at løsningen kan skrives som et produkt av funksjoner av hver variabel:

$$u(x, t) = z(t)y(x)$$

11 Bruk definisjonen av partiellderivert til å vise at dersom

$$u(x, t) = z(t)y(x)$$

er

$$\dot{u}(x,t) = \dot{z}(t)y(x) \qquad \text{og} \qquad \nabla u(x,t) = z(t)y'(x).$$

12 Bruk separasjon av variable på både varme- og bølgelikningen og oppdag at du blir nødt til å løse **randverdiproblemet**

$$y''(x) - ky(x) = 0 \quad \text{og} \quad y(0) = y(\pi) = 0$$

Konstanten k kalles **separasjonskonstanten**. Randverdiproblemet over har du verktøy nok til å løse, men det er litt uvant i starten. Man må begynne med å skrive opp den karakteristiske likningen til $y'' - ky = 0$ og skrive opp løsningene når $k > 0$, $k = 0$ og $k < 0$.

13 Bare ett av de tre valgene for k over gir løsninger som kan tilfredsstille randkravene $y(0) = y(\pi) = 0$. Finn ut hvilket, og skriv opp alle mulige løsninger.

Hvis du analyserte randverdiproblemet riktig, vil du nå ha kommet fram til at løsningene er

$$y_n(x) = b_n \sin(nx)$$

der b_n er en vilkårlig integrasjonskonstant og n er et naturlig tall. [13] Dette betyr at dersom både bølge- og varmelikningen med disse randkravene har løsninger på formen

$$u_n(x,t) = z(t)y_n(x) = z(t)\sin(nx)$$

og nå gjenstår det å finne z. (Jeg har latt $z(t)$ sluke integrasjonskonstanten, for det kommer nemlig en til når vi finner z, og vi trenger ikke begge.)

14 Vis at for varmelikningen får vi

$$\dot{z}_n(t) + \alpha n^2 z_n(t) = 0,$$

slik at

$$u_n(x,t) = z_n(t)y_n(x) = b_n e^{-\alpha n^2 t}\sin(nx).$$

15 Vis for bølgelikningen at det finnes massevis av løsninger på formen

$$z_n(t) = a_n \cos(cnt) + b_n \sin(cnt)$$

og følgelig at det finnes massevis av **overtoner**

$$u_n(x,t) = (a_n \cos(cnt) + b_n \sin(cnt))\sin(nx).$$

Nå er vi kommet omtrent til det punktet der Joseph Fourier [14] begynte å slite.

16 Vis at dersom vi skal ha tilfredsstilt **initialkravet** $u(x,0) = f(x)$ for varmelikningen, må vi ha

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n \sin(nx).$$

[13] Merk at vi har fått **kvantisering**, som skyldes at vi har et begrenset intervall og randkrav. Dette skal vi komme tilbake til i kvantefysikken mot slutten av semesteret.

[14] Joseph Fourier ble satt i fengsel under den franske revolusjon, dro til Egypt med Napoleon Bonaparte, og regnes som oppdageren av drivhuseffekten. Han oppfant også fourierrekker. De satte opp en statue av ham i hjembyen Auxerre i 1849, men den ble visst rekvirert av staten og smeltet om under andre verdenskrig.

Joseph Fouriers store oppdagelse var formelen for koeffisientene b_n. Eller rettere sagt, andre kjente til formelen, men Fourier kom på den sprø ideen om at du kunne skrive

$$x = 2\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n} \sin(nx).$$

på $[0, \pi)$. Merk at x er skrevet som en lineærkombinasjon av sinuser. Sinusfunksjonene i uttrykket over er nemlig en ortogonal basis for noe. Nettopp hva skal vi komme tilbake til.

I forrige uke kom vi nesten i mål med å løse varmelikningsproblemet

$$\dot{u}(x,t) = \alpha \Delta u(x,t) \qquad u(0,t) = u(\pi,t) = 0 \qquad u(x,0) = f(x).$$

I likhet med Joseph Fourier kom vi frem til at funksjoner på formen

$$u_n(x,t) = b_n e^{-\alpha n^2 t} \sin(nx)$$

tilfredsstiller både differensiallikningen og randkravene, men så stoppet alt opp da vi skulle prøve å tilpasse initialkravet $u(x,0) = f(x)$.

17 Nå er det antagelig lurt å dobbeltsjekke dette, så du er sikker på at du henger med så langt, for denne utledningen kan komme på eksamen.

Initialkravet tenker vi på som at temperaturen i stangen er fordelt på en bestemt måte ved $t = 0$. Dersom vi evaluerer u_n i $t = 0$, får vi

$$u_n(x,0) = b_n \sin(nx) = f(x),$$

og nå skjønner alle at dette kommer ikke til å gå spesielt bra med mindre f er en skalarmultippel av $\sin(nx)$. Men vent litt. Superposisjonsprinsippet må da gjelde. Lineærkombinasjonen

$$u(x,t) = \sum_{n=1}^{N} b_n e^{-\alpha n^2 t} \sin(nx)$$

tilfredsstiller også differensiallikningen og randkravene, så om f er en lineærkombinasjon av sinusfunksjonene i denne summen, må det vel være mulig å finne b_n slik at

$$u(x,0) = \sum_{n=1}^{N} b_n \sin(nx) = f(x)?$$

Svaret på dette er null stress joggedress, og nå skal vi finne koeffisientene. De kan nemlig finnes ved å bruke et standardtriks som vi skal bruke mange mange ganger dette semesteret. Det er vanlig å introdusere trikset i to steg. Først en observasjon:

18 Vis først at sinusfunksjonene i lineærkombinasjonen er ortogonale på $[0, \pi]$:

$$\int_0^{\pi} \sin(mx)\sin(nx)\, dx = \begin{cases} \pi/2 & m = n \\ 0 & m \neq n \end{cases}$$

Og så selve trikset:

19 Gang likningen

$$\sum_{n=1}^{N} b_n \sin(nx) = f(x)$$

med $\sin(mx)$, integrer fra $x = 0$ til $x = \pi$, og vis at dersom likningen kan løses, må

$$b_n = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} f(x) \sin(nx)\, dx.$$

I resonnementet over ligger det som grunnpremiss at f er en lineærkombinasjon av sinusfunksjonene i summen på venstre side. Dersom f er noe annet, bryter alt sammen; det er meningsløst å prøve å løse for eksempel likningen

$$b_1 \sin(x) + b_2 \sin(2x) = x$$

for b_1 og b_2, for det er åpenbart at denne likningen ikke kan løses. Funksjonen $f(x) = x$ kan åpenbart ikke skrives som en lineærkombinasjon av $\sin(x)$ og $\sin(2x)$. Leonhard Euler selv trodde likningen over kun kunne løses så lenge f var en lineærkombinasjon av sinusfunksjoner.

Fouriers sprø ide var å la summen gå mot uendelig. Han tenkte at dersom du bare tok med mange nok sinusfunksjoner, ville

$$\sum_{n=1}^{\infty} b_n \sin(nx) = f(x)$$

dersom

$$b_n = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} f(x) \sin(nx)\, dx$$

uansett hva f er. Dette har vist seg å være sånn omtrent riktig, [15] men Fourier ble faktisk ikke tatt seriøst av andre matematikere til å begynne med, for ideen er rar. Hvis du er ordentlig interessert i matematikk anbefaler jeg nå at du går på nett og finner Stein og Shakarchis klassiker "Fourier Analysis: An Introduction" fra 2003. Hvis ikke, foreslår jeg at du går videre med neste oppgave.

20 La oss prøve. Vi lar $f(x) = x(\pi - x)$. Regn ut

$$b_n = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} f(x) \sin(nx)\, dx,$$

og plott partialsummene

$$\sum_{n=1}^{N} b_n \sin(nx)$$

og f oppå hverandre i python.
(Utregningen av integralet er litt hårete. Hold tungen beint i munnen!)

Hvis du regna riktig i oppgaven over, fikk du

$$b_n = \begin{cases} 0 & \text{jevne } n \\ \frac{8}{\pi n^3} & \text{odde } n \end{cases}$$

slik at

$$x\,(\pi - x) = \frac{8}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n-1)^3} \sin\left((2n-1)x\right).$$

[15] https://en.wikipedia.org/wiki/Fourier_series

21 Skriv opp løsningen til varmeledningsproblemet

$$\dot{u}(x,t) = \alpha \Delta u(x,t) \qquad u(0,t) = u(\pi,t) = 0 \qquad u(x,0) = x\,(\pi - x)$$

og plot løsningen for noen utvalgte tidspunkt, slik at du er sikker på at du forstår omtrent hva du har regna ut.

Randkravene

$$u(0,t) = u(\pi,t) = 0$$

kalles **dirichletrandkrav**. Disse forteller noe om hvordan løsningen skal oppføre seg i endepunktene, for eksempel at temperaturen holdes ved null grader eller at den vibrerende strengen er spent fast der. Nå hadde det sikkert vært på sin plass å regne ut flere eksempler på fourierrekker, slik at vi kunne regne ut flere eksempler på løsninger av akkurat det samme varmeledningsproblemet, men vi skal regne ut ganske mange fourierrekker dette semesteret, så vi haster videre. Hvis vi bytter ut dirichletrandkravene med

$$\nabla u(0,t) = \nabla u(\pi,t) = 0$$

kalles det **neumannrandkrav**. Du husker forhåpentligvis Fouriers varmelov, som sier at varmestrømmen i watt per kvadratmeter er proporsjonal med temperaturgradienten ∇u.

22 Forklar at dersom endepunktene på stangen er isolerte istedet for holdt ved temperaturen 0, må vi løse neumannproblemet

$$\dot{u}(x,t) = \alpha \Delta u(x,t) \qquad \nabla u(0,t) = \nabla u(\pi,t) = 0 \qquad u(x,0) = f(x)$$

Hvis du gjentar alle stegene i løsningen av dirichletproblemet (altså alt vi har gjort dette semesteret frem til nå), kan du løse dette problemet også med bittelitt modifikasjon.

23 Forklar at neumannproblemet har løsning

$$u(x,t) = \frac{1}{2}a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} a_n e^{-\alpha n^2 t}\cos(nx) \qquad a_n = \frac{2}{\pi}\int_0^{\pi} f(x)\cos(nx)\,dx.$$

24 Løs problemet over for initialvarmefordelingen $f(x) = x$.

Vi begynte med varmelikningen, siden det er den det er minst herk med. Nå tar vi det korresponderende opplegget for bølgelikningen. Bølgelikningen er i bunn og grunn bare Newtons andre lov, og vi er vant til fra klassisk mekanikk at man må spesifisere både startposisjon og startfart for å bestemme bevegelsen. For bølgelikningen betyr dette at vi må både spesifisere strengens form og fart før vi slipper den:

$$u(x,0) = f(x) \qquad \dot{u}(x,0) = g(x).$$

Dirichletproblemet blir

$$\ddot{u}(x,t) = c^2 \Delta u(x,t) \qquad u(0,t) = u(\pi,t) = 0 \qquad u(x,0) = f(x) \qquad \dot{u}(x,0) = g(x).$$

(Hvis du bare drar i strengen og så slipper den, er $g = 0$.)

25 Gjenta det du gjorde for varmelikningen over, og forklar at løsningen er

$$u(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} \left(a_n \cos(cnt) + b_n \sin(cnt)\right)\sin(nx)$$

der

$$a_n = \frac{2}{\pi}\int_0^\pi f(x)\sin(nx)\,dx \qquad \text{og} \qquad b_n = \frac{2}{cn\pi}\int_0^\pi g(x)\sin(nx)\,dx.$$

Dersom du har stående luftbølger i en orgelpipe eller et blåseinstrument, vil våre erkefiender fysikerne fortelle at det er neumannrandkrav som gjelder:

$$\ddot{u} = c^2\Delta u \qquad \nabla u(0,t) = \nabla u(\pi,t) = 0 \qquad u(x,0) = f(x) \qquad \dot{u}(x,0) = g(x).$$

26 Forklar at neumannproblemet har løsning

$$u(x,t) = \frac{1}{2}\left(a_0 + b_0 t\right) + \sum_{n=1}^{\infty}\left(a_n\cos(cnt) + b_n\sin(cnt)\right)\cos(nx)$$

der

$$a_n = \frac{2}{\pi}\int_0^\pi f(x)\cos(nx)\,dx \qquad \text{og} \qquad b_n = \frac{2}{cn\pi}\int_0^\pi g(x)\cos(nx)\,dx \quad (n \geq 1),$$

mens

$$b_0 = \frac{2}{\pi}\int_0^\pi g(x)\,dx.$$

Hvis du hiver ut randkravene og heller sier at bølge- og varmelikningen skal løses på hele $\mathbb{R}$, må du gå litt annerledes til verks. Bølgelikningen har mange løsninger; for eksempel passer

$$u(x,t) = \phi(x+ct) + \psi(x-ct)$$

i bølgelikningen uansett hva ϕ og ψ er så lenge begge er to ganger deriverbare.

27 Sjekk dette, og gi en fysisk tolkning.

28 Bruk oppgaven over samt

$$u(x,0) = f(x) \qquad \text{og} \qquad \dot{u}(x,0) = g(x)$$

til å sette opp likningssystem for ϕ og ψ. Gauss litt, integrer, og utled D'Alemberts formel

$$u(x,t) = \frac{1}{2}\left(f(x+ct) + f(x-ct)\right) + \frac{1}{2c}\int_{x-ct}^{x+ct} g(s)\,ds.$$

Det går an å løse varmelikningen på hele $\mathbb{R}$ også, men det er noe mer komplisert. Nå tar vi litt kvantefysikk. Kvantedatamaskinen er på vei. [16] Et moderne studium av kjemi er selvfølgelig utenkelig uten kvantefysikk, og det er umulig å forstå en transistor uten kvantefysikk. Det sies at ingen forstår kvantefysikk. Akkurat nå er jeg den eneste her som ikke forstår kvantefysikk, og etter eksamen kommer heller ikke dere til å forstå kvantefysikk, og så kan dere gå ut i verden og spre deres uvitenhet. Kvantefysikk er litt abstrakt, så det kan være lurt å lese litt om de forskjellige historiske eksperimentene som ledet frem til teorien. [17]

[16] https://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_computing

[17] https://en.wikipedia.org/wiki/History_of_quantum_mechanics

Kvantefysikk bygger på postulatet at alt som er verdt å vite om en partikkel kan hales ut av partikkelens komplekse **partikkelbølgefunksjon**. [18] Denne kalles Ψ (uttales "psi") og finnes ved å løse den berømte **schrödingerlikningen**:

$$i\hbar\dot{\Psi}(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(x,t) + V(x,t)\Psi(x,t)$$

Her er m partikkelens masse og $\hbar = 1.054571817... \cdot 10^{-34}$ Plancks reduserte konstant. Funksjonen V er et energipotensiale. Schrödingerlikningen kan utledes, men det er for komplisert for oss. [19]

Partikkelbølgefunksjonen Ψ har ingen direkte fysiske tolkinger, men

$$|\Psi(x,t)|^2 = \overline{\Psi(x,t)}\Psi(x,t)$$

tolkes som **sannsynlighetstettheten for partikkelens posisjon**. Dette kalles bornfortolkningen, etter Max Born. Dersom partikkelen kan befinne seg et sted langs x-aksen, er sannsynligheten for at den befinner seg mellom a og b gitt ved

$$\int_a^b |\Psi(x,t)|^2 \ dx,$$

og dersom vi antar at partikkelen må befinne seg et sted på x-aksen, må vi ha

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 \ dx = 1.$$

for alle t. Hvis dette kravet er oppfylt, sier vi at Ψ er **normalisert**.

Tidlig i semesteret løste vi det endimensjonale varmeledningsproblemet og den endimensjonale vibrerende strengen ved separasjon av variable. Dette skal vi gjøre for schrödingerlikningen også. Men i kvantefysikk separerer de variable på en helt spesifikk måte. La oss ta unna dette først. For enkelhets skyld skal vi anta at V kun avhenger av x.

29 Sett $\Psi(x,t) = f(t)\psi(x)$ inn i schrödingerlikningen og vis at

$$i\hbar\frac{\dot{f}(t)}{f(t)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\psi''(x)}{\psi(x)} + V(x)$$

Akkurat som for bølge- og varmelikningen, er det slik at

$$i\hbar\frac{\dot{f}(t)}{f(t)} \qquad \text{og} \qquad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\psi''(x)}{\psi(x)} + V(x)$$

må være konstante.

30 Hva slags benevning har denne konstanten?
(Hint: Benevningen til Ψ kan utledes fra at $|\Psi|^2$ er en sannsynlighetstetthet, men det er ikke nødvendig å vite for å løse oppgaven.)

Hvis du ikke skjønte oppgaven over, er det et hint at vi kaller separasjonskonstanten E:

$$i\hbar\frac{\dot{f}(t)}{f(t)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\psi''(x)}{\psi(x)} + V(x) = E$$

[18] https://en.wikipedia.org/wiki/Wave_function
[19] https://en.wikipedia.org/wiki/Path_integral_formulation

31 Bruk likningen over til å vise at

$$f(t) = e^{-Eit/\hbar}$$

samt utlede den **tidsuavhengige Schrödingerlikningen**

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)\psi = E\psi$$

Den tidsuavhengige schrödingerlikningen er en egenvektorlikning, der

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

er lineæroperatoren (denne kalles **hamiltonoperatoren**) og E er egenverdien. Energien til en bitteliten partikkel er visst alltid egenverdien til en eller annen lineæroperator.

Det endimensjonale varmeledningsproblemet og det vibrerende-streng-problemet har en fetter i kvantefysikken, kalt **partikkel-i-boks**:

$$i\hbar\dot{\Psi}(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(x,t) \qquad \Psi(0,t) = \Psi(\pi,t) = 0 \qquad \int_0^\pi |\Psi(x,t)|^2 \, dx = 1$$

Den fysiske tolkningen til partikkel-i-boks er at du har en partikkel som lever på intervallet $[0, \pi]$. Inne på intervallet kan den gjøre som den vil så lenge den respekterer schrödingerlikningen, men i $x = 0$ og $x = \pi$ står det vegger den ikke kan passere. I en typisk fysikkbok vil dette være formulert som $V(0) = V(\pi) = \infty$, men jeg har oversatt det til randkravene

$$\Psi(0,t) = \Psi(\pi,t) = 0$$

slik at det skal bli forståelig for oss. Hele situasjonen fremstår selvfølgelig som litt corny om man ikke har sett det før, men realistiske differensiallikninger kan sjelden løses, og vi må alltid starte med et eller annet problem som er så enkelt at vi i det hele tatt kan regne ut noe som helst.

32 Bestem de tillatte energinivåene E_n ved å bruke randkravene og løsningene til den tidsuavhengige schrödingerlikningen, som blir

$$\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + E\psi = 0$$

og bruk bornfortolkningen til å vise at løsningene til partikkel-i-boks-problemet er

$$\Psi_n(x,t) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}e^{-E_n it/\hbar}\sin nx = \sqrt{\frac{2}{\pi}}e^{-i\frac{\hbar}{2m}n^2 t}\sin nx.$$

(Hint: Det meste av arbeidet i denne oppgaven har du faktisk allerede gjort. Hvis du ser nøye på varmelikningen og schrödingerlikningen, vil du se at det i bunn og grunn er samme likning dersom $V = 0$. Det er kun normaliseringen som gjenstår.)

3 NUMERISKE LØSNINGSTEKNIKKER

Når man skal løse sin første partielle differensiallikning numerisk, er varmelikningen grei å begynne med, for dette er den enkleste å få til. Den deriverte til en funksjon f er

$$f'(x) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

dersom grenseverdien eksisterer. Uttrykket

$$\frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

er stigningstallet til sekanten til f mellom punktene x og $x+h$. For små h er denne sekanten en grei tilnærming til stigningstallet $f(x)$:

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

På papiret er det slik at jo mindre h, desto bedre tilnærming. La $f(x) = e^x$, og la $h = 0.1$. Vi beregner

$$f'(1.5) \approx \frac{e^{1.6} - e^{1.5}}{0.1} = 4.7134.$$

Merk at

$$f'(1.5) = e^{1.5} = 4.4817,$$

så denne tilnærmingen bommer med rundt $2 \cdot 10^{-1}$.

33 Gjenta eksperimentet med $h = 0.01$, $h = 0.001$ osv, og se hva som skjer. Hvor liten h kan du ta før det går åt skogen?

Feilen i forrige oppgave er tydelig proporsjonal med h - deler du h på 10, deler du feilen på 10. En god illustrasjon av lineær feil. Men dette gjelder bare inntil et visst punkt, blir h liten nok blir presisjonen dårligere igjen. Dette er fordi datamaskinen din kun regner med 16 desimaler. For å få en ide om hva som skjer, kan vi anta at f er analytisk og taylorutvikle f i om punktet x:

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{f''(x)}{2}h^2 + \cdots$$

og skrive stigningen til sekanten slik:

$$\frac{f(x+h) - f(x)}{h} = f'(x) + \frac{f''(x)}{2}h + \cdots$$

Dette stigninstallet består av den eksakte verdien for $f'(x)$ pluss resten av taylorrekken til f:

$$\frac{f''(x)}{2}h + \frac{f'''(x)}{6}h^2 + \cdots$$

og denne halen forteller oss noe om feilen. Dersom h er liten vil h være mye større enn h^2, så med mindre og $f'(x)$ gjør noe dumt og blir enorm i x skriver vi

$$\frac{f''(x)}{2}h + \frac{f'''(x)}{6}h^2 + \cdots = O(h)$$

for å signalisere at feilen er proporsjonal med h.

34 Gjenta eksperimentet i forrige oppgave, men nå med formelen

$$\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}=f'(x)$$

og se hva som skjer. Hvor liten h kan du nå ta før det går åt skogen? Bruk taylorrekker til å forklare oppførselen.

Legg merke til hvordan feilen i forrige eksempel er nærmest perfekt kvadratisk - vi får to nye desimaler hver gang vi deler h på 10. Feilen deles altså på 100 når h deles på 10.

35 Hvis du virkelig vil slå på stortrommen, kan du prøve eksperimentet med formelen

$$f'(x)=\frac{f(x-2h)-8f(x-h)+8f(x+h)-f(x+2h)}{12h}.$$

Dersom du trenger en tilnærming for $f''(x)$, kan du bruke den andre ordens sentraldifferansen

$$\frac{f(x+h)-2f(x)+f(x-h)}{h^2}=f''(x)+\frac{f''''(x)}{12}h^2+\cdots$$

Det finnes bedre og mer kompliserte formler, men vi skal ikke plages med dem. Vi skal nå lage en numerisk metode for varmeligningen

$$\dot{u}(x,t)=u''(x,t)$$

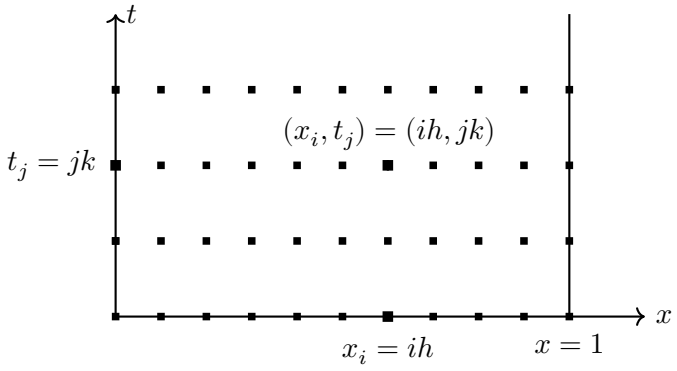
med randkrav

$$u(0,t)=u(1,t)=0$$

og initialkrav

$$u(x,0)=f(x).$$

Når vi skal løse en partiell differensiallikning, må vi holde styr på to gitre - et i x-retningen, og et i t-retningen. Målet er å approksimasjoner til løsningen u i alle gitterpunktene. Vi gitrer opp intervallet $[0,1]$ på x-aksen med gitteravstanden h, og nummererer punktene slik at $x_0=0$ og $x_n=1$. Den positive t-aksen gitrer vi opp med gitteravstanden k, og nummerer slik at $t_0=0$:



Her er i en tellevariabel og ikke den imaginære enheten. Vi kan nå tenke at vi erstatter $u(x,t)$ med $n+1$ envariable funksjoner $u_i(t)$, som approksimerer temperaturendringen i hvert sitt punkt x_i på stangen:

$$u_i(t)\approx u(x_i,t)$$

Den andre ordens differanseformelen for x er

$$u''(x,t)\approx\frac{u(x+h,t)-2u(x,t)+u(x-h,t)}{h^2}$$

og setter vi denne og $u_i(t)$ inn i varmelikningen, får vi dette ordinære differensiallikningssystemet:

$$\dot{u}_i(t) \approx \dot{u}(x_i, t) = u''(x_i, t) \approx \frac{u_{i+1}(t) - 2u_i(t) + u_{i-1}(t)}{h^2}$$

Systemet har $n-1$ likninger, for det er $n+1$ punkter i gitteret på x-aksen, og $u_0 = 0$ og $u_n = 0$ er gitt av randbetingelsene. Systemet løses med en av de numeriske metodene du lærte i TMA4101. Etter diskretiseringen i t, skriver vi approksimasjonen i punktet (x_i, t_j) som u_{ij}:

$$u(x_i, t_j) \approx u_{ij}$$

De tre vanligste metodene som brukes i tid er eksplisitt Euler, implisitt Euler, og trapesmetoden. De korresponderende skjemaene for varmelikningen blir:

Eksplisitt
$$\frac{u_{i,j+1} - u_{ij}}{k} = \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2}$$

Imsplisitt
$$\frac{u_{i,j+1} - u_{ij}}{k} = \frac{u_{i+1,j+1} - 2u_{i,j+1} + u_{i-1,j+1}}{h^2}$$

Crank-Nicolson
$$\frac{u_{i,j+1} - u_{ij}}{k} = \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{2h^2} + \frac{u_{i+1,j+1} - 2u_{i,j+1} + u_{i-1,j+1}}{2h^2}$$

Metodene har litt forskjellige egenskaper.

36 Løs varmelikningen med eksplisitt skjema og initialkrav $u(x, 0) = \sin x$. Prøv forskjellige kombinasjoner av h og k. Prøv for eksempel å sette dem lik hverandre og den ene mye større enn den andre og sånt. Lag animasjon av løsningen slik at du kan se om koden funker.

37 Implisitte metoder er litt vanskeligere å implementere, og litt mer beregningstunge, men det er noen fordeler med dem. Implementer implisitt og test med forskjellige kombinasjoner av h og k slik som i forrige oppgave.

38 Implementer Crank-Nicolson, og sammenlikne de tre metodene for samme h og k med den analytiske løsningen.

4 VEIEN VIDERE

Nå er det naturlig å begynne med partielle diffeereensiallikninger av to romlige variable, for eksempel bølgelikningen for et trommeskinn eller laplaces likning. Jeg har skrevet litt om dette, men det er basert på Greens teorem, så det må skrives litt om. TODO.