# Παράδειγμα

Να λυθεί το πρόβλημα Cauchy για την εξίσωση διάχυσης:

$$u_t - D u_{xx} = 0 \quad (1) \; ; \; D \in \mathbb{R}: \text{ συντελεστής διάχυσης.}$$

$$-\infty < x < +\infty \,, \quad t > 0$$

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

Μετασχηματίζουμε κατά Fourier, χρησιμοποιώντας το χωρικό μετ/σμό Fourier:

$$\begin{cases} \hat{u}(k,t) = \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} u(x,t)\, e^{-ikx}\, dx \\ u(x,t) = \dfrac{1}{2\pi} \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} \hat{u}(k,t)\, e^{+ikx}\, dk \end{cases}$$

(1): $\hat{u}_t + k^2 D \hat{u} = 0$ (υπενθυμίζεται $\partial/\partial x \to +ik$)

$$\Rightarrow \hat{u}_t = -k^2 D \hat{u} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \hat{u}(k,t) = C(k)\, e^{-k^2 D t} \; ; \; \text{για } t=0: \; \hat{u}(k,0) = C(k)$$

Αρχ. συνθήκη: $u(x,0) = f(x) \Rightarrow \hat{u}(k,0) = \hat{f}(k)$ $\Rightarrow$

$$\Rightarrow \boxed{\hat{u}(k,t) = \hat{f}(k)\, e^{-k^2 D t}} \Rightarrow u = \mathcal{F}^{-1}[\hat{u}] \Rightarrow \boxed{u(x,t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{f}(k)\, e^{-k^2 D t + ikx}\, dk}$$

Επίσης είχαμε βρει ότι $\mathcal{F}\left[e^{-\alpha t^2}\right] = \sqrt{\dfrac{\pi}{a}}\, e^{-\omega^2/4\alpha}$ (*)

οπότε

$$\mathcal{F}^{-1}\left[e^{-Dtk^2}\right] = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-Dtk^2 + ikx}\, dk = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi}{Dt}}\, e^{-x^2/4Dt}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{4\pi D t}}\, e^{-\frac{x^2}{4Dt}}$$

(*) $\mathcal{F}^{-1}[f(-\omega)] = \dfrac{1}{2\pi} F(t)$

$$\Rightarrow \mathcal{F}^{-1}\left[e^{-Dt(-k)^2}\right] = \frac{1}{\sqrt{4\pi D t}}\, e^{-\frac{x^2}{4Dt}}$$

Έτσι έχουμε καταλήξει ότι

$$\hat{u}(k,t) = \hat{f}(k)\, e^{-k^2 D t}$$

που θυμίζει (το δεξιό μέλος) την ιδιότητα της συνέλιξης:

$$f_1(t) * f_2(t) \longrightarrow F_1(\omega) F_2(\omega)$$

Άρα: $u(x,t) = \mathcal{F}^{-1}\left[\hat{f}(k)\, e^{-k^2 D t}\right] = f(t) * \mathcal{F}^{-1}\left[e^{-k^2 D t}\right] \Rightarrow$

$$\Rightarrow u(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{4\pi D t}} f(x')\, e^{-\frac{(x-x')^2}{4Dt}}\, dx' \Rightarrow$$

$$\boxed{u(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D t}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x')\, e^{-\frac{(x-x')^2}{4Dt}}\, dx'}$$

<u>Παράδειγμα</u>: Έστω $u(x,0) = f(x) = A\delta(x)$ [π.χ. ρίχνουμε μια σταγόνα μελάνι στη θάλασσα]

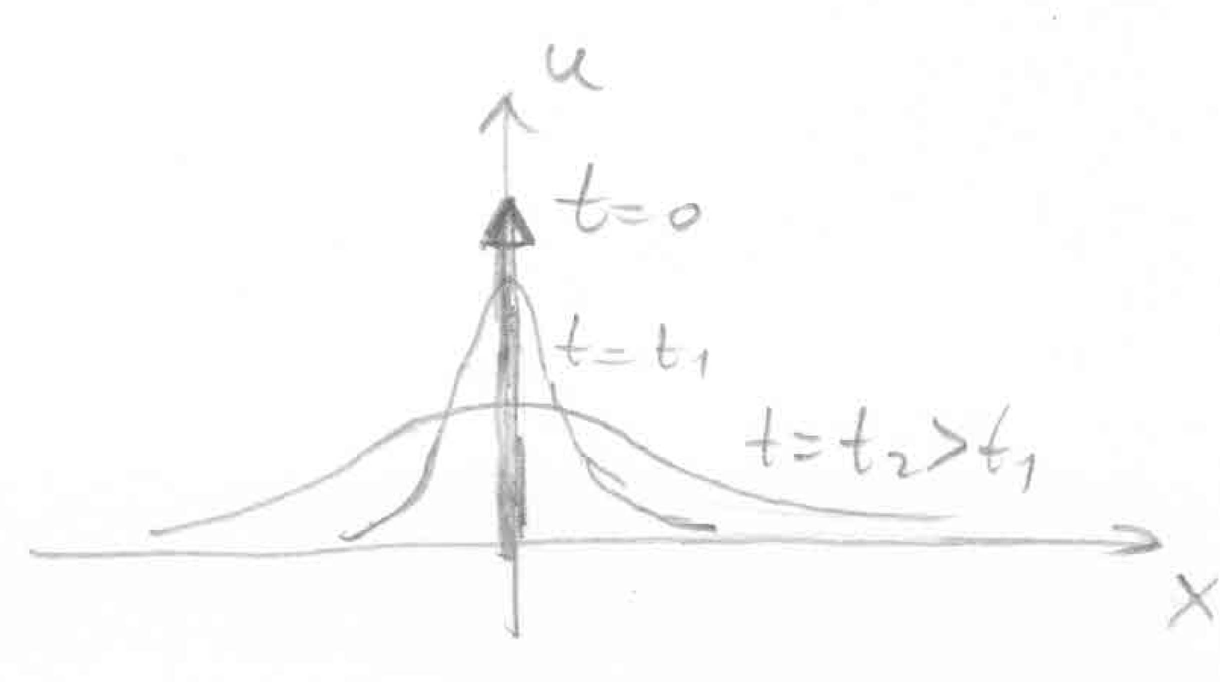
Τότε:

$$u(x,t) = \frac{A}{\sqrt{4\pi D t}} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x')\, e^{-\frac{(x-x')^2}{4Dt}}\, dx' = \frac{A}{\sqrt{4\pi D t}}\, e^{-\frac{x^2}{4Dt}}$$

$$= \frac{A}{\sqrt{2\pi}\sqrt{2Dt}}\, e^{-\frac{x^2}{2(2Dt)}} \xrightarrow{\text{Gaussian}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\sigma}\, e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$$

Άρα: η λύση είναι Gaussian με κέντρο $x=0$ (εκεί που έπεσε η σταγόνα), με εύρος $\sigma = \sqrt{2Dt}$

$\Rightarrow \sigma \nearrow$ καθώς $t \nearrow$



# Η εξίσωση Schrödinger.

Ένα θεμελιώδες μοντέλο που απαντάται στην κβαντομηχανική (αλλά και σε άλλες περιοχές της φυσικής) είναι η εξίσωση Schrödinger

$$i\hbar\psi_t = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(\vec{r})\psi,$$

όπου η κυματοσυνάρτηση $\psi(\vec{r},t)$ ενός σωματιδίου είναι μια μιγαδική συνάρτηση, με $|\psi(\vec{r},t)|^2$ να αναπαριστά την πυκνότητα πιθανότητας να έχει το σωματίδιο σε χρόνο $t$ τη θέση $\vec{r}$, οπότε $\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi|^2 d\vec{r} = 1$. Σε μία διάσταση, και απουσία εξωτερικού δυναμικού ($V(\vec{r})=0$) είναι:

$$i\hbar\psi_t = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi_{xx}$$

($m$ είναι η μάζα του σωματιδίου και $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, με $h$ τη σταθερά του Planck). Η παραπάνω εξίσωση γράφεται και ως

$$\psi_t = i\frac{\hbar}{2m}\psi_{xx}$$

που θυμίζει την εξίσωση διάχυσης $u_t = Du_{xx}$, αλλά με ένα καθαρά φανταστικό συντελεστή διάχυσης, $D = i(\hbar/2m)$.

Η παρατήρηση αυτή έχει αξία δεδομένου ότι τα προβλήματα της εξίσωσης διάχυσης και Schrödinger ταυτίζονται αν θεωρήσει κανείς τις αλλαγές

$$D \to iD \quad \text{ή ισοδύναμα} \quad t \to it$$

Έτσι η λύση του προβλήματος διάχυσης μπορεί να χρησιμοποιηθεί, με αυτές τις αλλαγές, για να βρεθεί η λύση του αντίστοιχου προβλήματος Cauchy για την εξίσωση Schrödinger.

Πρέπει όμως να τονισθεί ότι η φυσική είναι διαφορετική, αφού στην περίπτωση της εξίσωσης διάχυσης έχουμε <u>διάχυση</u> ενώ στην εξίσωση Schrödinger έχουμε <u>διασπορά</u> της αρχικά εντοπισμένης κυματομορφής.

# Παραδείγματα

Να λυθεί το πρόβλημα Cauchy για την εξίσωση Schrödinger, που γράφεται στη μορφή:

$$iu_t + u_{xx} = 0 \qquad (1) \qquad u \in \mathbb{C}$$

$$-\infty < x < +\infty, \quad t>0$$

$$u(x,0) = u_0 = A e^{-\alpha x^2} \qquad (1') \qquad A>0,\ \alpha>0$$

Στην κβαντομηχανική, το πρόβλημα αυτό σχετίζεται με την εξέλιξη ενός ελεύθερου Γκαουσσιανού κυματοπακέτου που, όπως θα δούμε, διασπείρεται στο χρόνο. Επίσης, επειδή η $u(x,t)$ αναπαριστά πυκνότητα πιθανότητας, ισχύει η κανονικοποίηση

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |u|^2 dx = 1$$

Άρα η σταθερά $A$ πρέπει να προσδιοριστεί από την κανονικοποίηση:

$$A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\alpha x^2} dx = 1 .$$

Επειδή το ολοκλήρωμα ισούται με $\sqrt{\pi/2\alpha}$, θα είναι:

$$A = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/4}.$$

Για να λύσουμε το πρόβλημα Cauchy, θα εργαστούμε όπως και στην περίπτωση της εξίσωσης διάχυσης. Πρώτα βρίσκουμε τη σχέση διασποράς, υποθέτοντας λύσεις της μορφής $u = u_0 e^{i(kx-\omega t)}$. Η σχέση διασποράς είναι:

$$\omega = k^2$$

Στη συνέχεια, παίρνοντας τον χωρικό μετ/σμό Fourier της εξίσωσης Schrödinger, βρίσκουμε:

$$(1): \; i\hat{u}_t - k^2\hat{u} = 0 \Rightarrow \hat{u}(k,t) = \hat{u}_0(k) \cdot e^{-ik^2 t}$$

όπου $\hat{u}_0(k)$ είναι ο μετ/σμός Fourier της $u_0(x)$.

Άρα, τελικά:

$$u(x,t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{u}_0(k) e^{-ik^2 t + ikx} \, dk \qquad (2)$$

Επειδή η $u_0(x) = Ae^{-\alpha x^2}$ θα είναι

$$\hat{u}_0(k) = \mathcal{F}\left[Ae^{-\alpha x^2}\right] = A\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}\, e^{-\frac{k^2}{4\alpha}}$$

Άρα η (2) γίνεται:

$$u(x,t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} A\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}\, e^{-\frac{k^2}{4\alpha} - ik^2 t}\, e^{ikx}\, dk \Rightarrow$$

$$u(x,t) = \frac{A}{\sqrt{4\pi\alpha}}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-pk^2}\, e^{ikx}\, dk \qquad (3)$$

όπου $p = \frac{1}{4\alpha} + it = \frac{1+4i\alpha t}{4\alpha} \in \mathbb{C} \quad (4)$

Έτσι, σύμφωνα με την (3), πρέπει να υπολογίσουμε τον αντίστροφο μετ/σμό Fourier της μιγαδικής Γκαουσσιανής $e^{-pk^2}$, $p \in \mathbb{C}$.

Έτσι, θα δείξουμε (βλ. παράρτημα) ότι:

$$e^{-px^2} \overset{\mathcal{F}}{\longleftrightarrow} \sqrt{\frac{\pi}{p}}\, e^{-\frac{k^2}{4p}}, \qquad (5)$$

$$\forall p \in \mathbb{C} : Re(p) > 0,$$

όπως ακριβώς συμβαίνει και με την περίπτωση της πραγματικής Γκαουσσιανής.

Από (5), χρησιμοποιώντας τη συμμετρική ιδιότητα:

$$\mathcal{F}^{-1}[f(-k)] = \frac{1}{2\pi}F(x) \Rightarrow 2\pi\,\mathcal{F}^{-1}\left[e^{-pk^2}\right] = \sqrt{\frac{\pi}{p}}\, e^{-\frac{x^2}{4p}}$$

Άρα η (3) γίνεται:

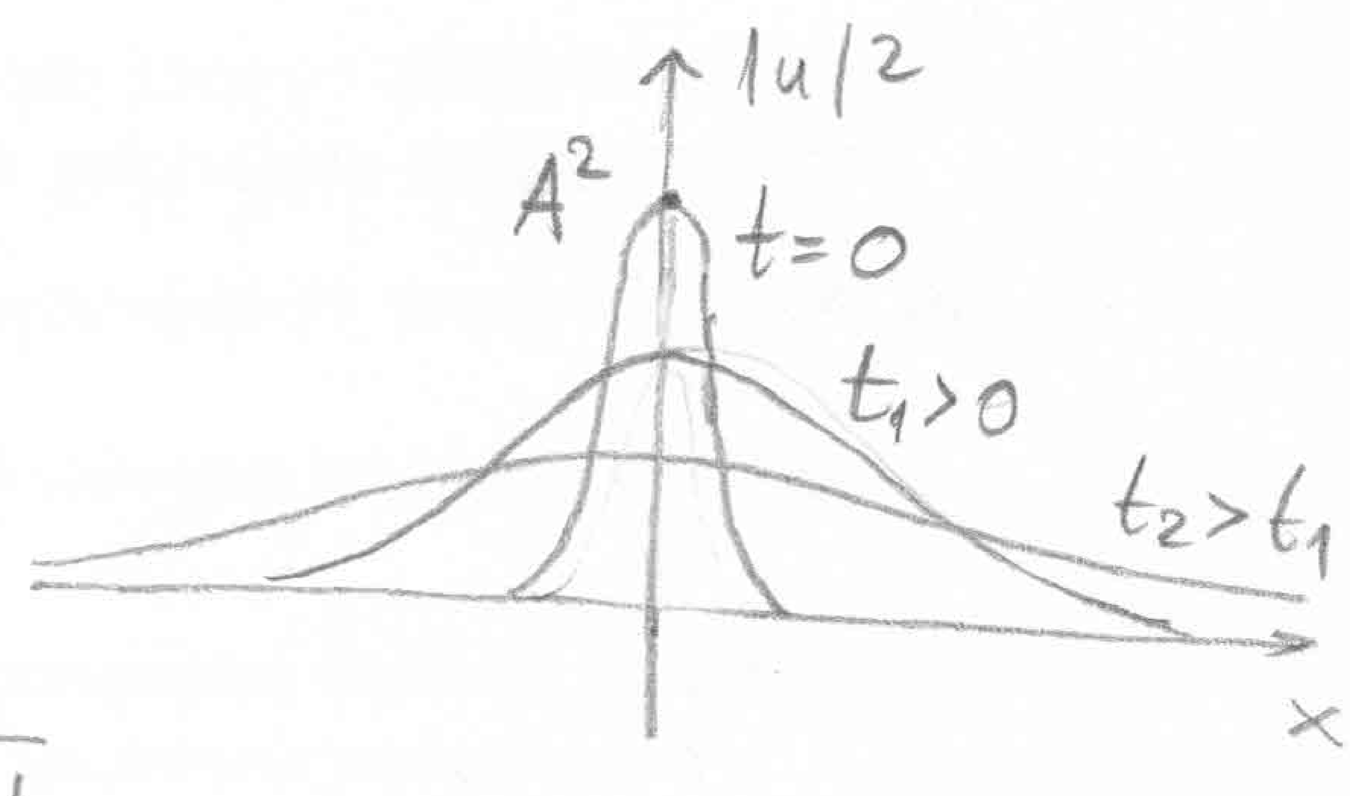
$$u(x,t) = \frac{A}{\sqrt{4\pi\alpha}} \sqrt{\frac{\pi}{p}}\, e^{-\frac{x^2}{4p}} \Rightarrow \text{(χρησιμοποιώντας την (4))}$$

$$u(x,t) = \frac{A}{\sqrt{1+4i\alpha t}}\, e^{-\frac{\alpha x^2}{1+4i\alpha t}}, \quad (6)$$

που είναι η λύση του προβλήματος. Αξίζει να σημειωθεί ότι για $t=0$ η (6) δίνει πίσω την αρχ. συνθήκη (1').

Το συμπέρασμα είναι ότι η αρχική Γκαουσσιανή διατηρεί το σχήμα της (αφού η (6) είναι πάλι Γκαουσσιανή) αλλά το πλάτος της μειώνεται με το χρόνο ενώ το εύρος της αυξάνεται με το χρόνο (βλ. σχήμα).

Πιο συγκεκριμένα, παρατηρούμε ότι η αρχική Γκαουσσιανή έχει εύρος $\sigma(0) = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}}$, ενώ σε




χρόνο $t$ είναι $\sigma(t) = \sigma(0)\sqrt{1+4i\alpha t}$,

οπότε $|\sigma^2(t)| = \sigma^2(0)\left[1+(4\alpha t)^2\right]^{1/2}$. Άρα, για παράδειγμα, όταν $t = \frac{1}{4\alpha}$ το εύρος του αρχικού Γκαουσσιανού παλμού αυξάνεται κατά $\sqrt{2}$, κ.ο.κ.