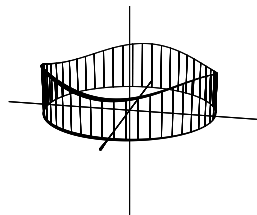
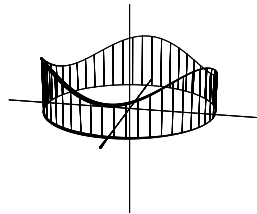
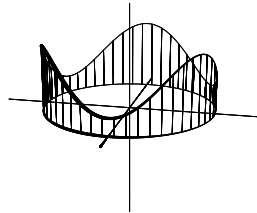


Dictaat Wiskunde 3

Bas Janssens

5 april 2016



Voorwoord

Dit is het dictaat voor het college ‘Wiskunde 3 voor Scheikundigen’, dat plaatsvond aan de Universiteit Utrecht in de periode februari–april 2016. Aan bod komen een aantal onderwerpen uit de *dunstkreis* van de Fouriertheorie, zoals de Fouriertransformatie voor periodieke en niet-periodieke functies, lineaire homogene en inhomogene differentiaalvergelijkingen, en een aantal lineaire PDE’s die zich op het grensvlak van natuur- en scheikunde ophouden, met name de warmtevergelijking en de Schrödingervergelijking. De onderwerpen worden benaderd vanuit het gezichtspunt van de lineaire algebra, dus met vectorruimten, inproducten, en operatoren met hun eigenwaarden en eigenvectoren. Ten slotte wil ik graag vermelden dat ik bij het schrijven van dit dictaat veel heb gehad aan de syllabus ‘Wiskundige Technieken 3’ van mijn voorganger Jan Stienstra.

Bas Janssens, april 2016

Inhoudsopgave

1	Lineaire ruimten en inproducten	3
1.1	Optelling, scalarvermenigvuldiging en inproduct in $\mathbb{R}^3$	3
1.2	Deelvectorruimten van $\mathbb{R}^3$	8
1.3	De vectorruimten $\mathbb{R}^N$ en $\mathbb{C}^N$	12
1.4	Algemene definitie van vectorruimte en inproduct	17
2	Fouriertheorie voor periodieke functies	30
2.1	De Fouriercoëfficiënten	31
2.2	Stelling van Parseval	33
2.3	Eigenschappen van de Fouriercoëfficiënten	34
2.4	Benadering met goniometrische functies	36
2.5	Convergentie van de Fourierreeks	38
3	Lineaire differentiaalvergelijkingen	40
3.1	Lineaire differentiaalvergelijkingen in meer variabelen	40
3.2	Lineaire afbeeldingen en differentiaalvergelijkingen	41
3.3	Oplossingen van lineaire differentiaalvergelijkingen	43
3.4	Hermitische operatoren	57
3.5	Differentiaaloperatoren met constante coëfficiënten	63
4	Fouriertheorie voor integreerbare functies	65
4.1	De inversiestelling van Fourier	66
4.2	De Stelling van Plancherel	69
4.3	Eigenschappen van de Fouriertransformatie	70
4.4	Differentiaaloperatoren met constante coëfficiënten	76
5	Inhomogene lineaire differentiaalvergelijkingen	78
5.1	Inhomogene vergelijkingen in een vectorruimte V	78
5.2	Een vervalproces met bron	80
5.3	De warmtevergelijking	82
5.4	Oplossingen voor een oneindig lange draad	86
5.5	convolutie en δ -functies	89

1 Lineaire ruimten en inproducten

De *lineaire algebra* kent drie fundamentele operaties: de optelling, de scalaire vermenigvuldiging en het inproduct. Het belang van deze drie operaties is dat ze niet alleen de Euclidische ruimte van vectoren in drie dimensies goed beschrijven, maar ook bijvoorbeeld de quantummechanische toestandsruimte van kwadratisch integreerbare golf functies.

1.1 Optelling, scalarvermenigvuldiging en inproduct in $\mathbb{R}^3$

Op de ruimte $\mathbb{R}^3$ van driedimensionale vectoren zit van nature een *optelling*. Als $\vec{v} = (x, y, z)$ en $\vec{v}' = (x', y', z')$ twee vectoren in $\mathbb{R}^3$ zijn, dan is hun som

$$\vec{v} + \vec{v}' = (x + x', y + y', z + z') \quad (1)$$

weer een vector in $\mathbb{R}^3$.

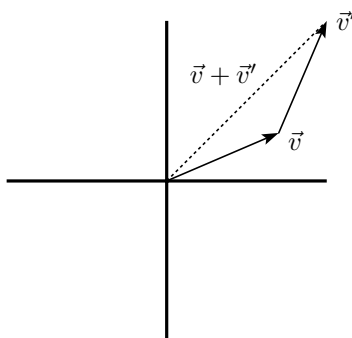


FIG. 1: Optellen van $\vec{v}$ en $\vec{v}'$

Verder heeft $\mathbb{R}^3$ een *scalaire vermenigvuldiging*. Als $\vec{v} = (x, y, z)$ een vector in $\mathbb{R}^3$ is, en λ is een reëel getal, dan is het product

$$\lambda \vec{v} = (\lambda x, \lambda y, \lambda z) \quad (2)$$

wederom een vector in $\mathbb{R}^3$. De *tegengestelde* van $\vec{v}$ is de vector $-\vec{v} = (-1)\vec{v}$, en het *verschil* $\vec{v} - \vec{v}'$ is de som van $\vec{v}$ en de tegengestelde van $\vec{v}'$, $\vec{v} - \vec{v}' = \vec{v} + (-\vec{v}')$.

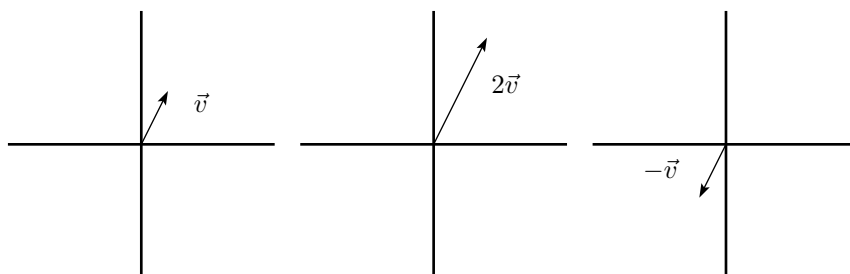


FIG. 2: De vectoren $\lambda \vec{v}$ voor $\lambda = 1, 2$ en -1 .

We schrijven $\vec{0} = (0, 0, 0)$ voor de *nulvector* in $\mathbb{R}^3$. De optelling en scalaire vermenigvuldiging in $\mathbb{R}^3$ voldoen aan een aantal voor de hand liggende rekenregels:

- V1) Een vector $\vec{v}$ verandert niet als je hem met 1 vermenigvuldigt, of als je er de nulvector bij optelt, $1\vec{v} = \vec{v}$ en $\vec{0} + \vec{v} = \vec{v}$. Als je een vector $\vec{v}$ bij zijn tegengestelde $-\vec{v}$ optelt, krijg je de nulvector, $\vec{v} - \vec{v} = \vec{0}$.
- V2) Het maakt niet uit in welke volgorde je vectoren $\vec{v}$ en $\vec{v}'$ bij elkaar optelt, of met een getal λ vermenigvuldigt. Preciezer: er geldt $\vec{v} + \vec{v}' = \vec{v}' + \vec{v}$, $\vec{v} + (\vec{v}' + \vec{v}'') = (\vec{v} + \vec{v}') + \vec{v}''$, en $\lambda(\vec{v} + \vec{v}') = \lambda\vec{v} + \lambda\vec{v}'$.
- V3) Het maakt niet uit of je twee getallen λ en μ eerst met elkaar vermenigvuldigt en dan met een vector $\vec{v}$, of andersom: $\lambda(\mu\vec{v}) = (\lambda\mu)\vec{v}$. Hetzelfde geldt voor het optellen van getallen: $(\lambda + \mu)\vec{v} = \lambda\vec{v} + \mu\vec{v}$.

Opgave 1.1. Teken de plaatjes die horen bij de rekenregels V2 en V3.

Opgave 1.2. Verifieer V1, V2 en V3 aan de hand van de formules (1) en (2).

Behalve de optelling en scalaire vermenigvuldiging bezit $\mathbb{R}^3$ nog een fundamentele operatie: het *inproduct* van twee vectoren $\vec{v} = (x, y, z)$ en $\vec{v}' = (x', y', z')$ is het getal

$$(\vec{v}, \vec{v}') = xx' + yy' + zz'. \quad (3)$$

Voor het inproduct gelden de verdere rekenregels:

- I1) Het inproduct respecteert optelling en scalaire vermenigvuldiging:
 $(\vec{v}, \vec{v}' + \vec{v}'') = (\vec{v}, \vec{v}') + (\vec{v}, \vec{v}'')$ en $(\vec{v}, \lambda\vec{v}') = \lambda(\vec{v}, \vec{v}')$.
- I2) Het inproduct is symmetrisch: $(\vec{v}, \vec{v}') = (\vec{v}', \vec{v})$.
- I3) Het inproduct van een vector met zichzelf is niet negatief, $(\vec{v}, \vec{v}) \geq 0$. Bovendien is $(\vec{v}, \vec{v}) = 0$ alleen mogelijk als $\vec{v} = \vec{0}$.

Dit laatste geldt omdat $(\vec{v}, \vec{v}) = x^2 + y^2 + z^2$ het kwadraat van de *lengte* van de vector $\vec{v}$ in $\mathbb{R}^3$ is. De lengte $\|\vec{v}\|$ van $\vec{v}$ valt dus uit te drukken in termen van het inproduct,

$$\|\vec{v}\| = \sqrt{(\vec{v}, \vec{v})}. \quad (4)$$

Opgave 1.3. Strikt genomen volgt uit de formules in I1 alleen dat de *rechterkant* van het inproduct optelling en scalaire vermenigvuldiging respecteert. Gebruik de symmetrie (I2) om te laten zien dat dit automatisch ook geldt voor de *linkerkant*: $(\vec{v} + \vec{v}', \vec{v}'') = (\vec{v}, \vec{v}'') + (\vec{v}', \vec{v}'')$ en $(\lambda\vec{v}, \vec{v}'') = \lambda(\vec{v}, \vec{v}'')$.

1.1.1 Inproducten en rotaties

We hebben gezien dat lengte uit te drukken is in termen van het inproduct. Omgekeerd drukken we nu het inproduct van $\vec{v}$ en $\vec{v}'$ uit in de lengtes van $\vec{v}$, van $\vec{v}'$ en van hun verschil $\vec{v} - \vec{v}'$. We zien dan direct dat inproducten niet veranderen onder rotaties, eenvoudigweg omdat lengtes dat ook niet doen.

Door gebruik te maken van de rekenregels I1) en I2) zien we dat

$$\begin{aligned} (\vec{v} - \vec{v}', \vec{v} - \vec{v}') &\stackrel{I1}{=} (\vec{v} - \vec{v}', \vec{v}) - (\vec{v} - \vec{v}', \vec{v}') \\ &\stackrel{\text{Opg. 1.3}}{=} (\vec{v}, \vec{v}) - (\vec{v}', \vec{v}) - (\vec{v}, \vec{v}') + (\vec{v}', \vec{v}'), \\ &\stackrel{I2}{=} (\vec{v}, \vec{v}) - 2(\vec{v}, \vec{v}') + (\vec{v}', \vec{v}'). \end{aligned}$$

We halen de term $(\vec{v}, \vec{v}')$ naar de linkerkant, en zien dat het inproduct $(\vec{v}, \vec{v}')$ uitgedrukt kan worden in de kwadratische lengtes $(\vec{v}, \vec{v}) = \|\vec{v}\|^2$, $(\vec{v}', \vec{v}') = \|\vec{v}'\|^2$ en $(\vec{v} - \vec{v}', \vec{v} - \vec{v}') = \|\vec{v} - \vec{v}'\|^2$ als

$$\begin{aligned}(\vec{v}, \vec{v}') &= \frac{1}{2}((\vec{v}, \vec{v}) + (\vec{v}', \vec{v}') - (\vec{v} - \vec{v}', \vec{v} - \vec{v}')) \\ &= \frac{1}{2}(\|\vec{v}\|^2 + \|\vec{v}'\|^2 - \|\vec{v} - \vec{v}'\|^2).\end{aligned}\quad (5)$$

Volgens de stelling van Pythagoras geldt $\|\vec{v} - \vec{v}'\|^2 = \|\vec{v}\|^2 + \|\vec{v}'\|^2$ dan en slechts dan als $\vec{v}$ loodrecht staat op $\vec{v}'$.

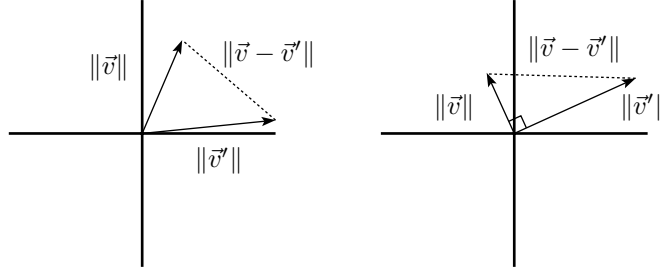


FIG. 3: In de rechterfiguur geldt $\vec{v} \perp \vec{v}'$, en dus $\|\vec{v} - \vec{v}'\|^2 = \|\vec{v}\|^2 + \|\vec{v}'\|^2$.

Hieruit volgt direct dat de orthogonaliteit van twee vectoren uitgedrukt kan worden in termen van het inproduct.

Propositie 1.1. *Twee vectoren $\vec{v}$ en $\vec{v}'$ in $\mathbb{R}^3$ staan loodrecht op elkaar, $\vec{v} \perp \vec{v}'$, precies dan als hun inproduct nul is, $(\vec{v}, \vec{v}') = 0$.*

Bewijs. Volgens formule (5) geldt $(\vec{v}, \vec{v}') = 0$ precies dan als $\|\vec{v}\|^2 + \|\vec{v}'\|^2 = \|\vec{v} - \vec{v}'\|^2$. Volgens de stelling van Pythagoras is dit het geval dan en slechts dan als $\vec{v}$ loodrecht op $\vec{v}'$ staat. $\square$

Opmerking 1. Strikt genomen nemen we hierboven aan dat $\vec{v} \neq \vec{0}$ en $\vec{v}' \neq \vec{0}$. We *definiëren* nu eenvoudig dat de nulvector $\vec{0}$ loodrecht staat op elke andere vector. Behalve dat hiermee Propositie 1.1 gered is, blijkt dit ook in andere opzichten een handige conventie te zijn.

Een afbeelding $L: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ die vectoren naar vectoren overvoert, heet *lineair* als zij optelling en scalaire vermenigvuldiging respecteert,

$$L(\vec{v} + \vec{v}') = L(\vec{v}) + L(\vec{v}') \quad \text{L1)}$$

$$L(\lambda \vec{v}) = \lambda L(\vec{v}). \quad \text{L2)}$$

Een *lineaire isometrie* is een lineaire afbeelding $R: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ die bovendien lengtes behoudt,

$$\|Rv\| = \|v\|. \quad \text{L3)}$$

In het bijzonder is elke rotatie die de oorsprong vast laat een isometrie; bij rotatie van een vector verandert immers de lengte niet.

Opgave 1.4. Maak een schets van L1), L2) en L3), waar R een rotatie van $\pi/4$ (ofwel 45°) om de z -as is, en $\vec{v} = (1, 0, 0)$, $\vec{v}' = (3, 1, 0)$.

Formule (5) heeft nu het volgende interessante gevolg.

Propositie 1.2. *Het inproduct is behouden onder isometrie,*

$$(R(\vec{v}), R(\vec{v}')) = (\vec{v}, \vec{v}').$$

Bewijs. Formule (5) drukt het inproduct uit in lengtes, en lengtes zijn behouden onder isometrie. Dus zijn ook inproducten behouden onder isometrie.

Voor wie dit liever in formules ziet: voor iedere isometrie R geldt $\|R\vec{v}\| = \|\vec{v}\|$, $\|R\vec{v}'\| = \|\vec{v}'\|$, en $\|R(\vec{v} - \vec{v}')\| = \|R(\vec{v}) - R(\vec{v}')\| = \|\vec{v} - \vec{v}'\|$. In combinatie met formule 5 levert dit

$$\begin{aligned} (R(\vec{v}), R(\vec{v}')) &= \frac{1}{2} (\|R(\vec{v})\|^2 + \|R(\vec{v}')\|^2 - \|R(\vec{v}) - R(\vec{v}')\|^2) \\ &= \frac{1}{2} (\|\vec{v}\|^2 + \|\vec{v}'\|^2 - \|\vec{v} - \vec{v}'\|^2) = (\vec{v}, \vec{v}'). \end{aligned}$$

We concluderen dat $(R(\vec{v}), R(\vec{v}')) = (\vec{v}, \vec{v}')$ voor alle $\vec{v}, \vec{v}'$ in $\mathbb{R}^3$. □

Met andere woorden: niet alleen lengtes en hoeken, maar ook inproducten zijn behouden zijn onder rotaties.

1.1.2 Inproducten en hoeken

We kunnen nu inproducten uitrekenen door de vectoren in een gunstige positie te roteren. De volgende propositie beschrijft het inproduct in termen van lengtes en hoeken.

Propositie 1.3. *Maken twee vectoren $\vec{v}$ en $\vec{v}'$ in $\mathbb{R}^3$ een hoek θ , dan geldt*

$$(\vec{v}, \vec{v}') = \|\vec{v}\| \|\vec{v}'\| \cos(\theta). \quad (6)$$

Bewijs. Roteer de vectoren $\vec{v}$ en $\vec{v}'$ zó dat $\vec{v}$ parallel wordt aan de z -as, en in positieve richting wijst. Roteer daarna om de z -as totdat $\vec{v}'$ zich in het x - z -vlak bevindt. We hebben dan $\vec{v} = (0, 0, z)$ met $z \geq 0$, en $\vec{v}' = (x', 0, z')$.

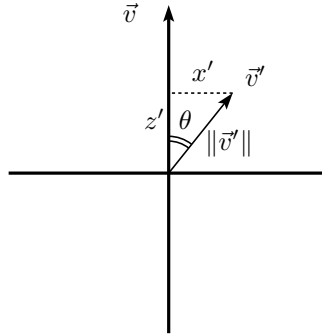


FIG. 4: In deze rechthoekige driehoek geldt $\cos(\theta) = z'/\|\vec{v}'\|$.

Onder rotatie blijven lengtes, hoeken, en inproducten behouden. Zowel het linker- als het rechterlid van (6) blijven na rotatie dus hetzelfde. We berekenen het rechterlid $\|\vec{v}\| \|\vec{v}'\| \cos(\theta)$. In figuur 4 zien we dat $\|\vec{v}\| = z$ en $\cos(\theta) = z'/\|\vec{v}'\|$, zodat

$$\|\vec{v}\| \|\vec{v}'\| \cos(\theta) = z \cdot \|\vec{v}'\| \cdot (z'/\|\vec{v}'\|) = zz'.$$

Het linkerlid $(\vec{v}, \vec{v}')$ heeft dezelfde waarde, $(\vec{v}, \vec{v}') = 0 \cdot x' + 0 \cdot 0 + z \cdot z' = zz'$. □

Opgave 1.5. Wat zegt Formule 6 als $\theta = 0$? Wat als $\theta = \pi/2$ (ofwel 90°)? Wat als $\theta = \pi$ (ofwel 180°)? Zijn er eenvoudiger manieren om dit in te zien?

Als we de variabele θ vrij maken in formule 6, dan vinden we

$$\cos(\theta) = \frac{(\vec{v}, \vec{v}')}{\|\vec{v}\| \|\vec{v}'\|}, \quad \text{ofwel} \quad \theta = \arccos\left(\frac{(\vec{v}, \vec{v}')}{\|\vec{v}\| \|\vec{v}'\|}\right). \quad (7)$$

Merk op dat de lengtes $\|\vec{v}\|$ en $\|\vec{v}'\|$ kunnen worden uitgedrukt in termen van het inproduct met behulp van de formule $\|\vec{v}\| = \sqrt{(\vec{v}, \vec{v})}$. Zo gezien geeft (7) een formule voor de hoek θ in termen van louter inproducten.

Opgave 1.6. Bereken de hoek tussen $\vec{v} = (0, 0, 1)$ en $\vec{v}' = (1, 0, 1)$, en maak een tekening. Doe hetzelfde voor $\vec{v} = (0, 0, 1)$ en $\vec{v}' = (1, 0, -1)$. Voor welke hoeken is $(\vec{v}, \vec{v}') > 0$? En wanneer is $(\vec{v}, \vec{v}') < 0$?

Opgave 1.7. Wat is de hoek tussen $\vec{v} = (4, 2, 6)$ en $\vec{v}' = (-3, 3, 1)$? Is de hoek tussen $\vec{v} = (4, 2, 7)$ en $\vec{v}' = (-3, 3, 1)$ stomp of scherp?

Opgave 1.8. In een methaanmolecuul zit het koolstofatoom in de oorsprong $(0, 0, 0)$, terwijl de vier waterstofatomen zich in de hoekpunten $(\pm 1, 0, -1/\sqrt{2})$ en $(0, \pm 1, 1/\sqrt{2})$ van een tetraëder bevinden. Maak een schets en bereken de bindingshoeken. Bereken ook de hoek tussen twee snijdende ribben.

1.1.3 Orthonormale bases in $\mathbb{R}^3$

Een *basis* van $\mathbb{R}^3$ is een drietal vectoren $\vec{b}_0$, $\vec{b}_1$ en $\vec{b}_2$ zo dat iedere vector $\vec{v}$ op precies één manier geschreven kan worden als

$$\vec{v} = \lambda_0 \vec{b}_0 + \lambda_1 \vec{b}_1 + \lambda_2 \vec{b}_2.$$

We eisen dus dat de *basiscoëfficiënten* λ_0 , λ_1 en λ_2 eenduidig bepaald zijn door $\vec{v}$.

Een basis heet *orthogonaal* als de verschillende basisvectoren loodrecht op elkaar staan, $\vec{b}_i \perp \vec{b}_j$ voor $i \neq j$. Ze heet *orthonormaal* als bovendien alle basisvectoren lengte 1 hebben.

De *standaardbasis* van $\mathbb{R}^3$ is $e_0 = (1, 0, 0)$, $e_1 = (0, 1, 0)$ en $e_2 = (0, 0, 1)$. Iedere vector $\vec{v} = (x, y, z)$ valt te schrijven als

$$\vec{v} = xe_0 + ye_1 + ze_2,$$

en de basiscoëfficiënten $\lambda_0 = x$, $\lambda_1 = y$, en $\lambda_2 = z$ zijn eenduidig bepaald door $\vec{v}$. De standaardbasis is orthonormaal; de basisvectoren $\vec{e}_i$ hebben lengte 1 omdat $\|\vec{e}_i\|^2 = (\vec{e}_i, \vec{e}_i) = 1$, en ze staan loodrecht op elkaar omdat $(\vec{e}_i, \vec{e}_j) = 0$ als $i \neq j$.

De eis dat een basis orthonormaal is, valt volledig uit te drukken in termen van het inproduct. Een basisvector $\vec{b}_i$ heeft lengte 1 als $\|\vec{b}_i\|^2 = (\vec{b}_i, \vec{b}_i) = 1$, en $\vec{b}_i \perp \vec{b}_j$ als $(\vec{b}_i, \vec{b}_j) = 0$. Een basis $\vec{b}_i$ is dus orthonormaal als

$$(\vec{b}_i, \vec{b}_j) = \delta_{ij}.$$

Hier is δ_{ij} de *Kronecker delta*, met $\delta_{ij} = 1$ als $i = j$, en $\delta_{ij} = 0$ als $i \neq j$.

Opgave 1.9. Bepaal voor de volgende vectoren $\vec{b}_0$, $\vec{b}_1$ en $\vec{b}_2$ of zij een basis vormen van $\mathbb{R}^3$. Zoja, Druk dan voor $\vec{v} = (x, y, z)$ de basiscoëfficiënten λ_0 , λ_1 en λ_2 uit in x , y en z . (Maak liefst een schets.) Is de basis orthonormaal?

a) $\vec{b}_0 = (1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2}, 0)$, $\vec{b}_1 = (1/\sqrt{2}, -1/\sqrt{2}, 0)$, en $\vec{b}_2 = (0, 0, 1)$.

b) $\vec{b}_0 = (1, 0, -1)$, $\vec{b}_1 = (0, 1, -1)$, en $\vec{b}_2 = (0, 0, 1)$.

c) $\vec{b}_0 = (1, 1, -1)$, $\vec{b}_1 = (1, 1, 0)$, $\vec{b}_2 = (1, 1, 1)$.

Opgave 1.10. Zij $\vec{b}_0 = \frac{1}{5}(4, -3, 0)$ en $\vec{b}_1 = (0, 1, 1)$. We veranderen nu $\vec{b}_1$ door er een veelvoud van $\vec{b}_0$ van af te trekken, $\vec{b}'_1 = \vec{b}_1 - \alpha\vec{b}_0$. Voor welke waarde van α geldt $\vec{b}_0 \perp \vec{b}'_1$?

Voor een *orthogonale* basis $\vec{b}_i$ is er een simpele manier om de basiscoëfficiënten λ_0 , λ_1 en λ_2 van een vector $\vec{v}$ te bepalen.

Propositie 1.4. De basiscoëfficiënten λ_i van een vector $\vec{v}$ ten opzichte van een orthogonale basis $\vec{b}_i$ zijn

$$\lambda_i = (\vec{b}_i, \vec{v}) / (\vec{b}_i, \vec{b}_i). \quad (8)$$

Bewijs. We berekenen eerst λ_0 . Als $\vec{v} = \lambda_0\vec{b}_0 + \lambda_1\vec{b}_1 + \lambda_2\vec{b}_2$, dan geldt

$$(\vec{b}_0, \vec{v}) = (\vec{b}_0, \lambda_0\vec{b}_0 + \lambda_1\vec{b}_1 + \lambda_2\vec{b}_2) \stackrel{I1}{=} \lambda_0(\vec{b}_0, \vec{b}_0) + \lambda_1(\vec{b}_0, \vec{b}_1) + \lambda_2(\vec{b}_0, \vec{b}_2).$$

Omdat de basis $\vec{b}_i$ orthogonaal is, geldt $(\vec{b}_0, \vec{b}_1) = (\vec{b}_0, \vec{b}_2) = 0$. We hebben dus $(\vec{b}_0, \vec{v}) = \lambda_0 \cdot (\vec{b}_0, \vec{b}_0) + \lambda_1 \cdot 0 + \lambda_2 \cdot 0 = \lambda_0(\vec{b}_0, \vec{b}_0)$, en vinden $\lambda_0 = (\vec{b}_0, \vec{v}) / (\vec{b}_0, \vec{b}_0)$. De berekening van λ_1 en λ_2 gaat net zo. $\square$

Als een basis niet alleen *orthogonaal*, maar zelfs *orthonormaal* is, dan geldt $(\vec{b}_i, \vec{b}_i) = 1$. We vinden dan

$$\lambda_i = (\vec{b}_i, \vec{v}). \quad (9)$$

Voor een basis niet orthogonaal is, geldt geen van beide formules.

Opgave 1.11. Controleer dat $\vec{b}_0 = (1, -1, 0)$, $\vec{b}_1 = (1, 1, 1)$, en $\vec{b}_2 = (1, 1, -2)$ een orthogonale basis is. Loop het bewijs van Propositie 1.4 na voor de vector $\vec{v} = (1, 0, 0)$. Wat zijn de basiscoëfficiënten λ_0 , λ_1 en λ_2 ? Neem de proef op de som door $\lambda_0\vec{b}_0 + \lambda_1\vec{b}_1 + \lambda_2\vec{b}_2$ te berekenen.

Opgave 1.12. Herhaal de vorige opgave voor $\vec{v} = (x, y, z)$.

Opgave 1.13. Is de basis $\vec{b}_0 = (1, 1, 3)$, $\vec{b}_1 = (2, 1, -1)$, $\vec{b}_2 = (-4, 7, -1)$ van $\mathbb{R}^3$ orthogonaal? Is zij orthonormaal? Bepaal de basiscoëfficiënten λ_i van een vector $\vec{v} = (x, y, z)$.

Opgave 1.14. Maak van de basis $\vec{b}_i$ uit opgave 1.13 een *orthonormale* basis. (Deel hiervoor elke vector door zijn lengte, $\vec{b}'_i = \vec{b}_i / \|\vec{b}_i\|$.) Bereken de basiscoëfficiënten λ'_i ten opzichte van $\vec{b}'_i$, en vergelijk ze met de coëfficiënten λ_i uit 1.13. Wat valt je op?

1.2 Deelvectorruimten van $\mathbb{R}^3$

Een *deelvectorruimte* V van $\mathbb{R}^3$ is een verzameling vectoren $\vec{v}$ die de nulvector bevat, en gesloten is onder optelling en scalaire vermenigvuldiging. Met andere woorden:

D1) De nulvector $\vec{0}$ zit in V .

D2) Als $\vec{v}$ en $\vec{v}'$ vectoren zijn in V , dan is ook $\vec{v} + \vec{v}'$ een vector in V .

D3) Als $\vec{v}$ een vector is in V , dan voor ieder getal λ ook $\lambda\vec{v}$ een vector in V .

De enige deelvectorruimte van dimensie 0 is de oorsprong $V = \{\vec{0}\}$. Ze bevat één vector $\vec{v} = \vec{0}$, waarvan alle sommen en scalaire veelvouden weer $\vec{0}$ zijn.

Een deelvectorruimte van dimensie 1 is een *lijn* ℓ door de oorsprong. De som van twee vectoren $\vec{v}$ en $\vec{v}'$ op de lijn ℓ ligt dan wederom op ℓ , en ieder veelvoud $\lambda\vec{v}$ van een vector $\vec{v}$ op ℓ ligt zelf weer op ℓ . Let op: een lijn die niet door de oorsprong gaat, is ook geen deelvectorruimte. Sommen en veelvouden van vectoren liggen dan namelijk niet op de lijn.

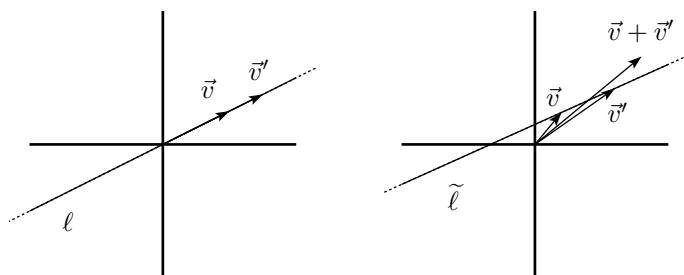


FIG. 5: De lijn ℓ gaat door de oorsprong; als $\vec{v}$ en $\vec{v}'$ op ℓ liggen, dan doen $\vec{v} + \vec{v}'$ en $\lambda\vec{v}$ dat ook. De lijn $\tilde{\ell}$ gaat niet door de oorsprong; de vectoren $\vec{v}$ en $\vec{v}'$ liggen op $\tilde{\ell}$, maar hun som $\vec{v} + \vec{v}'$ niet.

Een deelvectorruimte van dimensie 2 is een *vlak* door de oorsprong. Om dezelfde reden als voorheen is een vlak dat niet door de oorsprong gaat, ook geen deelvectorruimte.

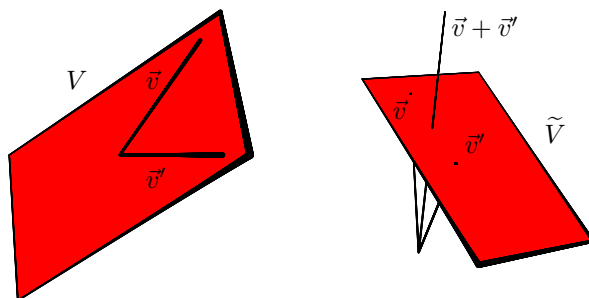


FIG. 6: Het vlak V gaat door de oorsprong; de som van $\vec{v}$ en $\vec{v}'$ ligt weer op V . Het vlak $\tilde{V}$ gaat niet door de oorsprong; $\vec{v}$ en $\vec{v}'$ liggen in $\tilde{V}$, maar $\vec{v} + \vec{v}'$ niet.

De enige deelvectorruimte van dimensie 3 is de gehele ruimte $\mathbb{R}^3$.

1.2.1 Bases van deelvectorruimten

De rekenregels V1–V3 en I1–I3 voor vectoren in $\mathbb{R}^3$ gelden natuurlijk ook in iedere deelvectorruimte V van $\mathbb{R}^3$. We kunnen dus allerlei definities en stellingen voor $\mathbb{R}^3$ ook formuleren voor haar deelruimten V .

Zo is een *basis* van V een stel vectoren $\vec{b}_i$ zó dat elke vector $\vec{v}$ in V op precies één manier geschreven kan worden als

$$\vec{v} = \sum_{i=0}^{n-1} \lambda_i \vec{b}_i.$$

Het aantal basisvectoren, n , is de dimensie van de ruimte. Een lijn ($n = 1$) heeft een basis $\vec{b}_0$, een vlak ($n = 2$) heeft een basis $\vec{b}_0, \vec{b}_1$, en de gehele driedimensionale ruimte ($n = 3$) heeft een basis $\vec{b}_0, \vec{b}_1, \vec{b}_2$.

Uiteraard heet een basis weer *orthogonaal* als $(\vec{b}_i, \vec{b}_j) = 0$ voor $i \neq j$, en *orthonormaal* als $(\vec{b}_i, \vec{b}_j) = \delta_{ij}$. In een lijn bestaat een basis uit één vector $\vec{b}_0$, en is dus automatisch orthogonaal. In een vlak V is een basis $\vec{b}_0, \vec{b}_1$ orthogonaal als $(\vec{b}_0, \vec{b}_1) = 0$. Als $\vec{v}$ een vector in een vlak V met orthogonale basis $\vec{b}_0, \vec{b}_1$ is, dan vind je de *basiscoëfficiënten* λ_0 en λ_1 weer door

$$\lambda_0 = (\vec{b}_0, \vec{v})/(\vec{b}_0, \vec{b}_0), \quad \lambda_1 = (\vec{b}_1, \vec{v})/(\vec{b}_1, \vec{b}_1). \quad (10)$$

Het argument hiervoor is hetzelfde als in Propositie 1.4.

Opgave 1.15. Controleer (10) aan de hand van het bewijs van Propositie 1.4.

Het vlak V van vectoren $\vec{v} = (x, y, z)$ in $\mathbb{R}^3$ met $x + z = 0$ is bijvoorbeeld een lineaire deelruimte. Het bevat de nulvector $\vec{0}$, want $0 + 0 = 0$. Als $\vec{v}$ in V zit, dan zit ook $\lambda\vec{v}$ in V , want als $x + z = 0$, dan geldt ook $\lambda x + \lambda z = 0$. Ten slotte zit de som $\vec{v} + \vec{v}'$ in V als $\vec{v}$ en $\vec{v}'$ in V zitten, want als $x + z = 0$ en $x' + z' = 0$, dan geldt ook $(x + x') + (z + z') = 0$.

Deze deelruimte V heeft een basis $\vec{b}_0 = (1, 0, -1)$, $\vec{b}_1 = (0, 1, 0)$. Deze is orthogonaal, $(\vec{b}_0, \vec{b}_1) = 0$, dus de basiscoëfficiënten van een vector $\vec{v}$ in V zijn $\lambda_0 = (x - z)/2$ en $\lambda_1 = y$. Merk op dat voor een vector $\vec{v}$ in V geldt dat $z = -x$; je kunt ook $\lambda_0 = x$ schrijven.

1.2.2 Projecties

Stel dat $\vec{v} = (x, y, z)$ een vector in $\mathbb{R}^3$ is, en V een deelvectorruimte van $\mathbb{R}^3$. Dan is de *projectie* $P(\vec{v})$ van $\vec{v} = (x, y, z)$ op V de vector in V die het dichtst bij $\vec{v}$ ligt. Er geldt dan $(\vec{v} - P(\vec{v})) \perp V$.

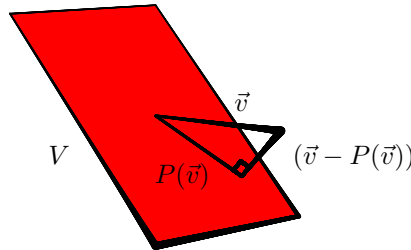


FIG. 7: De projectie $P(\vec{v})$ van $\vec{v}$ op het vlak V .

Als je een orthogonale basis van V hebt, dan vind je de projectie van een vector $\vec{v}$ in $\mathbb{R}^3$ op precies dezelfde manier als je de basiscoëfficiënten van een vector $\vec{v}$ in V vindt.

Propositie 1.5. Als $\vec{b}_i$ een orthogonale basis is van V , en $\vec{v}$ is een vector in $\mathbb{R}^3$, dan is

$$P(\vec{v}) = \sum_{i=0}^{n-1} \lambda_i \vec{b}_i \quad (11)$$

met $\lambda_i = (\vec{b}_i, \vec{v}) / (\vec{b}_i, \vec{b}_i)$.

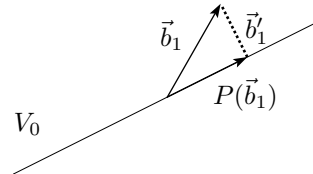
Bewijs. Omdat $P(\vec{v})$ in V zit en $\vec{b}_i$ een basis is van V , zijn er coëfficiënten λ_i zó dat (11) geldt. Om die te vinden, gebruiken we dat $\vec{v} - P(\vec{v})$ loodrecht op V staat, en dus ook loodrecht op elke basisvector $\vec{b}_j$. We zien dan, dat $0 = (\vec{b}_j, \vec{v} - \sum_{i=0}^{n-1} \lambda_i \vec{b}_i) = (\vec{b}_j, \vec{v}) - \lambda_j (\vec{b}_j, \vec{b}_j)$, en dus $\lambda_j = (\vec{b}_j, \vec{v}) / (\vec{b}_j, \vec{b}_j)$. $\square$

1.2.3 Orthogonaliseren van een basis

Orthogonale bases zijn vaak makkelijk om mee te werken. Als $\vec{b}_0, \dots, \vec{b}_{n-1}$ een basis van V is, kunnen we deze *orthogonaliseren* door steeds van iedere basisvector $\vec{b}_i$ de projectie op alle vorige basisvectoren $\vec{b}_j$ met $j < i$ af te trekken. We verkrijgen dan een orthogonale basis $\vec{b}'_i$.

- 0) We beginnen met $\vec{b}_0$. Deze vormt de basis van de lijn $V_0 = \{\lambda_0 \vec{b}_0; \lambda_0 \in \mathbb{R}\}$. We maken $\vec{b}_0$ de eerste vector van onze orthogonale basis $\vec{b}'_i$, $\vec{b}'_0 = \vec{b}_0$.
- 1) De tweede basisvector $\vec{b}'_1$ is het verschil van $\vec{b}_1$ en zijn projectie $P(\vec{b}_1)$ op de lijn V_0 . We vinden $\vec{b}'_1 = \vec{b}_1 - P(\vec{b}_1)$. Met Propositie 1.5 volgt nu de formule

$$\vec{b}'_1 = \vec{b}_1 - \frac{(\vec{b}'_0, \vec{b}_1)}{(\vec{b}'_0, \vec{b}'_0)} \vec{b}'_0.$$



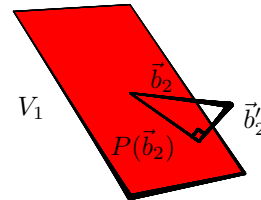
We hebben dan $\vec{b}'_0 \perp \vec{b}'_1$. Omdat $\vec{b}_0, \vec{b}_1$ en $\vec{b}'_0, \vec{b}'_1$ in elkaar kunnen worden uitgedrukt, is $\vec{b}'_0, \vec{b}'_1$ een (orthogonale!) basis van het vlak

$$V_1 = \{\lambda_0 \vec{b}'_0 + \lambda_1 \vec{b}'_1; \lambda_0, \lambda_1 \in \mathbb{R}\}$$

opgespannen door $\vec{b}'_0$ en $\vec{b}'_1$.

- 2) Vervolgens trekken we van $\vec{b}_2$ zijn projectie $P(\vec{b}_2)$ op het vlak V_1 af, $\vec{b}'_2 = \vec{b}_2 - P(\vec{b}_2)$. We hebben dan $\vec{b}'_2 \perp \vec{b}'_0$ en $\vec{b}'_2 \perp \vec{b}'_1$. Omdat $\vec{b}'_0, \vec{b}'_1$ een *orthogonale* basis van V_1 is, vinden we met Propositie 1.5 de uitdrukking

$$\vec{b}'_2 = \vec{b}_2 - \frac{(\vec{b}'_0, \vec{b}_2)}{(\vec{b}'_0, \vec{b}'_0)} \vec{b}'_0 - \frac{(\vec{b}'_1, \vec{b}_2)}{(\vec{b}'_1, \vec{b}'_1)} \vec{b}'_1.$$



Als $\vec{b}_i$ een basis is, is $\vec{b}'_i$ dat ook. De twee zijn immers in elkaar uit te drukken.

Uiteraard hoeven alleen al deze stappen af als we met een basis $\vec{b}_0, \vec{b}_1, \vec{b}_2$ van $\mathbb{R}^3$ beginnen. Voor een basis $\vec{b}_0, \vec{b}_1$ van een vlak V volstaan stap 0 en 1, en voor een basis $\vec{b}_0$ van een lijn zijn we direct bij stap 0 klaar.

1.3 De vectorruimten $\mathbb{R}^N$ en $\mathbb{C}^N$

In §1.1 hebben we vooral gebruik gemaakt van de rekenregels V1, V2 en V3 voor de optelling en de scalaire vermenigvuldiging, en van de rekenregels I1, I2 en I3 voor het inproduct. Het feit dat we werkten in $\mathbb{R}^3$, waar vectoren bestaan uit drietallen reële getallen $\vec{v} = (x, y, z)$, is duidelijk van secundair belang. We kunnen, met de nodige kleine veranderingen, precies hetzelfde doen voor de ruimte $\mathbb{R}^2$, waar vectoren bestaan uit tweetallen reële getallen $\vec{v} = (x, y)$.

1.3.1 De vectorruimten $\mathbb{R}^N$

Maar wiskundig is er geen enkele reden ons te beperken tot 2 of 3 dimensies. In de N -dimensionale ruimte $\mathbb{R}^N$ is een vector $\vec{v}$ een N -tal reële getallen $\vec{v} = (x_0, \dots, x_{N-1})$. We definiëren de som van $\vec{v}$ en $\vec{v}'$ als de vector

$$\vec{v} + \vec{v}' = (x_0 + x'_0, \dots, x_{N-1} + x'_{N-1}). \quad (12)$$

Het scalaire product van het getal λ en de vector $\vec{v}$ is gedefinieerd als

$$\lambda \vec{v} = (\lambda x_0, \dots, \lambda x_{N-1}), \quad (13)$$

en de speciale nulvector is $\vec{0} = (0, \dots, 0)$.

Propositie 1.6. *In $\mathbb{R}^N$ voldoen de bovenstaande optelling, scalaire vermenigvuldiging en nulvector aan de rekenregels V1, V2 en V3.*

Bewijs. Opgave. □

We definiëren het *inproduct* van twee vectoren $\vec{v}$ en $\vec{v}'$ in $\mathbb{R}^N$ als

$$(\vec{v}, \vec{v}') = x_0 x'_0 + \dots + x_{N-1} x'_{N-1}. \quad (14)$$

Propositie 1.7. *Dit inproduct voldoet aan de rekenregels I1, I2 en I3.*

Bewijs. Opgave. □

Redeneringen en begrippen die alleen van de rekenregels V1, V2, V3 en I1, I2, I3 afhangen, gelden dus onverkort voor $\mathbb{R}^N$. We definiëren bijvoorbeeld de *lengte* of *norm* van een vector als $\|\vec{v}\| := \sqrt{(\vec{v}, \vec{v})}$. We zullen later zien dat net als in $\mathbb{R}^3$ de ongelijkheid van Cauchy-Schwarz geldt, $|(\vec{v}, \vec{v}')| \leq \|\vec{v}\| \|\vec{v}'\|$. Het getal $(\vec{v}, \vec{v}')/(\|\vec{v}\| \|\vec{v}'\|)$ ligt dus tussen de -1 en de 1 , en we definiëren de *hoek* tussen $\vec{v}$ en $\vec{v}'$ als

$$\theta := \arccos \left(\frac{(\vec{v}, \vec{v}')}{\|\vec{v}\| \|\vec{v}'\|} \right). \quad (15)$$

In zekere zin draaien we dus de interpretatie van deze formule om; in §1.1 wisten we wat hoeken in $\mathbb{R}^3$ zijn, en leidden we daar (15) uit af. Nu gebruiken we deze formule om het begrip ‘hoek’ in dimensie $N > 3$ überhaupt zin te geven. We noemen twee vectoren $\vec{v}$ en $\vec{v}'$ in $\mathbb{R}^N$ *orthogonaal* als $(\vec{v}, \vec{v}') = 0$.

1.3.2 Bases en deelvectorruimten

Ook het begrippen *basis* en *deelvectorruimte* blijven hetzelfde. Wel hebben we nu meer dan 3 basisvectoren nodig; de *standaardbasis* van $\mathbb{R}^N$ is bijvoorbeeld $\vec{e}_0, \dots, \vec{e}_{N-1}$, waar $\vec{e}_i = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)$ een 1 heeft op plaats $i + 1$. Het aantal basisvectoren n in een basis $\vec{b}_0, \dots, \vec{b}_{n-1}$ van $V \subseteq \mathbb{R}^N$ is ten hoogste N , $n \leq N$. De orthogonalisatieprocedure verloopt precies zo als in §1.2.3, behalve dat hij niet na hooguit twee, maar na hooguit $n - 1$ stappen ophoudt.

Een voorbeeld van een n -dimensionale deelvectorruimte van $\mathbb{R}^N$ is de verzameling vectoren van de vorm $\vec{v} = (x_0, x_1, \dots, x_{n-1}, 0, \dots, 0)$. Een basis hiervan wordt gevormd door de eerste n vectoren van de standaardbasis, $\vec{e}_0, \dots, \vec{e}_{n-1}$. De deelvectorruimten in de volgende opgaven zijn niet van deze vorm.

Opgave 1.16. Stel $V \subseteq \mathbb{R}^5$ is de verzameling van vectoren $\vec{v} = (x_0, \dots, x_4)$ met $x_0 + \dots + x_4 = 0$.

- Waarom is V een deelvectorruimte van $\mathbb{R}^5$?
- Laat zien dat $\vec{b}_0 = (1, -1, 0, 0, 0)$, $\vec{b}_1 = (0, 1, -1, 0, 0)$, $\vec{b}_2 = (0, 0, 1, -1, 0)$, $\vec{b}_3 = (0, 0, 0, 1, -1)$ een basis is van V .
- Orthogonaliseer deze basis.

Opgave 1.17. Geef een orthogonale basis van de 999-dimensionale deelvectorruimte $V \subseteq \mathbb{R}^{1000}$, die bestaat uit vectoren $\vec{v} = (x_0, \dots, x_{999})$ waarvan de coëfficiënten optellen tot nul, $x_0 + \dots + x_{999} = 0$.

Als een deelvectorruimte $V \subseteq \mathbb{R}^N$ een *orthogonale* basis $\vec{b}_i$ heeft, dan is de projectie $P(\vec{v})$ van de vector $\vec{v} = (x_0, \dots, x_{N-1})$ op de ruimte V weer gegeven door

$$P(\vec{v}) = \sum_{i=0}^{n-1} \lambda_i \vec{b}_i \quad (16)$$

met $\lambda_i = (\vec{b}_i, \vec{v}) / (\vec{b}_i, \vec{b}_i)$.

Opgave 1.18 (Lineaire Regressie). We zoeken de functie $f(x) = \alpha + \beta x$ die de meetwaarden $(x_0, y_0), \dots, (x_{N-1}, y_{N-1})$ het best benadert, in de zin dat de som van de kwadraten van de gemaakte fout minimaal is. We zoeken dus de waarden van α en β die

$$\Delta^2 := \sum_{i=0}^{N-1} (f(x_i) - y_i)^2 \quad (17)$$

minimaliseren. Definiëer de vectoren $\vec{v}$, $\vec{b}_0$ en $\vec{b}_1$ in $\mathbb{R}^N$ door

$$\vec{v} = (y_0, \dots, y_{N-1}) \quad \vec{b}_0 = (1, \dots, 1) \quad \vec{b}_1 = (x_0, \dots, x_{N-1}).$$

- Laat zien dat $\Delta = \|\alpha \vec{b}_0 + \beta \vec{b}_1 - \vec{v}\|^2$. Deze uitdrukking wordt dus geminimaliseerd als $\alpha \vec{b}_0 + \beta \vec{b}_1$ de projectie $P(\vec{v})$ van $\vec{v}$ op de deelruimte opgespannen door $\vec{b}_0$ en $\vec{b}_1$ is.
- Orthogonaliseer $\vec{b}_0, \vec{b}_1$ tot $\vec{b}'_0, \vec{b}'_1$.

- c) Wat zijn de basiscoëfficiënten λ_0 en λ_1 in $P(\vec{v}) = \lambda_0 \vec{b}'_0 + \lambda_1 \vec{b}'_1$? Druk je antwoord uit in de gemiddelden

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} x_i, \quad \bar{y} = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} y_i$$

en de (co)variantie

$$\text{Cov}(x, y) = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}), \quad \text{Var}(x) = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} (x_i - \bar{x})^2.$$

- d) Druk de projectie uit in de oorspronkelijke basis, en bepaal α en β in de uitdrukking $P(\vec{v}) = \alpha \vec{b}_0 + \beta \vec{b}_1$.

Het resultaat van deze opgave is wellicht de moeite om te onthouden:

Propositie 1.8 (Lineaire regressie). *De waarden van α en β waarvoor de functie $f = \alpha + \beta x$ de meetpunten $(x_0, y_0), \dots, (x_{N-1}, y_{N-1})$ het best benadert (in de zin dat de kwadratische fout (17) minimaal is) zijn*

$$\beta = \frac{\text{Cov}(x, y)}{\text{Var}(x)}, \quad \alpha = \bar{y} - \beta \bar{x}.$$

1.3.3 De vectorruimten $\mathbb{C}^N$

We spelen hetzelfde spel met de ruimte $\mathbb{C}^N$, waar een vector bestaat uit een N -tal *complexe* getallen $\vec{v} = (z_0, \dots, z_{N-1})$. Je kunt een vector $\vec{v}$ nu ook met een *complex* getal λ vermenigvuldigen.

We definiëren de som van twee vectoren $\vec{v}$ en $\vec{v}'$ weer als

$$\vec{v} + \vec{v}' = (z_0 + z'_0, \dots, z_{N-1} + z'_{N-1}). \quad (18)$$

De scalarvermenigvuldiging van een vector $\vec{v}$ in $\mathbb{C}^N$ met een *complex* getal λ is

$$\lambda \vec{v} = (\lambda z_0, \dots, \lambda z_{N-1}). \quad (19)$$

De speciale nulvector in $\mathbb{C}^N$ is uiteraard $\vec{0} = (0, \dots, 0)$.

Propositie 1.9. *In $\mathbb{C}^N$ voldoen de optelling, scalaire vermenigvuldiging en nulvector aan de rekenregels V1, V2 en V3. (Hierbij mogen de getallen λ en μ complex zijn.)*

Bewijs. Opgave. □

Opgave 1.19. Zij $\vec{v}$ de vector $\vec{v} = (1, i)$ in $\mathbb{C}^2$. Bereken $i\vec{v}$, $2i\vec{v}$, en $(1 + 2i)\vec{v}$.

Opgave 1.20. Bereken $(1 - i)\vec{v} + \vec{v}'$ voor $\vec{v} = (1, 1 + i, i)$, $\vec{v}' = (i, 1, 2 - i)$ in $\mathbb{C}^3$.

We definiëren het *inproduct* op $\mathbb{C}^N$ als

$$\langle \vec{v}, \vec{v}' \rangle = \bar{z}_0 z'_0 + \dots + \bar{z}_{N-1} z'_{N-1}. \quad (20)$$

Hierbij is $\bar{z} = x - iy$ de complex geconjugeerde van $z = x + iy$. Dit inproduct voldoet aan de eisen I1 en I3, maar *niet* aan I2.

Uit formule (20) volgt direct dat aan I1 voldaan is, maar in plaats van de verwachte symmetrie $(\vec{v}, \vec{v}') = (\vec{v}', \vec{v})$, vinden we de vergelijking

$$\langle \vec{v}', \vec{v} \rangle = \bar{z}'_0 z_0 + \dots + \bar{z}'_{N-1} z_{N-1} = \overline{\bar{z}_0 z'_0 + \dots + \bar{z}_{N-1} z'_{N-1}} = \overline{\langle \vec{v}, \vec{v}' \rangle}.$$

In plaats van I2 geldt dus

$$\langle \vec{v}', \vec{v} \rangle = \overline{\langle \vec{v}, \vec{v}' \rangle}. \quad (21)$$

Voor I3 merken we op dat $\bar{z}z = x^2 + y^2$. Voor de vector $\vec{v} = (z_0, \dots, z_{N-1})$ met coëfficiënten $z_i = x_i + iy_i$ geldt dus

$$\langle \vec{v}, \vec{v} \rangle = x_0^2 + y_0^2 + \dots + x_{N-1}^2 + y_{N-1}^2. \quad (22)$$

Dit is altijd groter of gelijk aan nul, en $\langle \vec{v}, \vec{v}' \rangle$ is nul precies dan als alle x_i en y_i gelijk zijn aan nul. Dit betekent dat de vector $\vec{v}$ gelijk is aan de nulvector $\vec{0}$.

Opgave 1.21. Bereken $\langle \vec{v}, \vec{v}' \rangle$ voor:

- a) $\vec{v} = (1, -i)$ en $\vec{v}' = (1, i)$
- b) $\vec{v} = (1, i)$ en $\vec{v}' = (1, i)$
- c) $\vec{v} = (1, -i)$ en $\vec{v}' = (1, -i)$

Opgave 1.22. Als $\vec{v} = (z_0, z_1)$ en $\vec{v}' = (z'_0, z'_1)$ vectoren in $\mathbb{C}^2$ zijn, en $\lambda = i$, ga na dat $\langle \vec{v}, \lambda \vec{v}' \rangle = \lambda \langle \vec{v}, \vec{v}' \rangle$ $\langle \lambda \vec{v}, \vec{v}' \rangle = \bar{\lambda} \langle \vec{v}, \vec{v}' \rangle$.

Opgaven 1.23, 1.24, 1.25 en 1.26 horen bij elkaar, en vormen de opmaat voor Fouriertheorie.

Opgave 1.23. De vectoren $\vec{b}_0$ en $\vec{b}_1$ in $\mathbb{C}^2$ zijn gegeven door $\vec{b}_0 = (1, 1)$ en $\vec{b}_1 = (1, -1)$. Bepaal $\langle \vec{b}_0, \vec{b}_0 \rangle$, $\langle \vec{b}_1, \vec{b}_1 \rangle$ en $\langle \vec{b}_0, \vec{b}_1 \rangle$.

Opgave 1.24. Zij $\omega = e^{2\pi i/3} = (-\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{3}i)$.

- a) Wat is ω^2 , ω^3 , ω^4 , enzovoorts? Wat is ω^{-1} , ω^{-2} , ω^{-3} , ω^{-4} , ...? Wat is $\bar{\omega}$, $\bar{\omega}^2$, $\bar{\omega}^3$, $\bar{\omega}^4$, ...? Maak een plaatje in het complexe vlak.
- b) De vectoren $\vec{b}_0$, $\vec{b}_1$ en $\vec{b}_2$ in $\mathbb{C}^3$ zijn gegeven door en $\vec{b}_0 = (1, 1, 1)$, $\vec{b}_1 = (1, \omega, \omega^2)$, en $\vec{b}_2 = (1, \omega^2, \omega) = (1, \omega^2, \omega)$. Bepaal de inproducten $\langle \vec{b}_i, \vec{b}_j \rangle$ tussen al deze vectoren.

Opgave 1.25. De vectoren $\vec{b}_0, \vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ in $\mathbb{C}^4$ zijn gegeven door $\vec{b}_0 = (1, 1, 1, 1)$, $\vec{b}_1 = (1, i, i^2, i^3)$, $\vec{b}_2 = (1, i^2, i^4, i^6) = (1, -1, 1, -1)$, en $\vec{b}_3 = (1, i^3, i^6, i^9) = (1, -i, -1, i)$. Bepaal de inproducten $\langle \vec{b}_i, \vec{b}_j \rangle$ tussen al deze vectoren.

Opgave 1.26. Kijk nog eens naar Opgave 1.23, 1.24 en 1.25. Zie je de overeenkomsten? (Hint: $e^{2\pi i/2} = -1$, $e^{2\pi i/3} = \omega$, $e^{2\pi i/4} = i$.) Kies je favoriete getal $n > 4$, formuleer de bijbehorende opgave, en raad het antwoord.

Omdat $\langle \vec{v}, \vec{v}' \rangle$ niet negatief is, kunnen we de *lengte* of *norm* weer probleemloos definiëren als $\|\vec{v}\| := \sqrt{\langle \vec{v}, \vec{v} \rangle}$. Het begrip *hoek* ligt in $\mathbb{C}^N$ iets complexer. We zullen later zien dat ook in $\mathbb{C}^N$ de ongelijkheid van Cauchy-Schwarz geldt, $|\langle \vec{v}, \vec{v}' \rangle| \leq \|\vec{v}\| \|\vec{v}'\|$. Toch kunnen we de hoek tussen de vectoren $\vec{v}$ en $\vec{v}'$ niet definiëren aan de hand van het quotiënt $\langle \vec{v}, \vec{v}' \rangle / \|\vec{v}\| \|\vec{v}'\|$, omdat dit een imaginair

deel kan hebben. We behelpen ons door de hoek tussen de *lijnen* opgespannen door $\vec{v}$ en $\vec{v}'$ te definiëren aan de hand van de absolute waarde van dit quotiënt,

$$\theta := \arccos \left(\frac{|\langle \vec{v}, \vec{v}' \rangle|}{\|\vec{v}\| \|\vec{v}'\|} \right). \quad (23)$$

Merk op dat $0 \leq |\langle \vec{v}, \vec{v}' \rangle| \leq 1$, zodat deze hoek tussen de *lijnen* altijd *scherp* is.

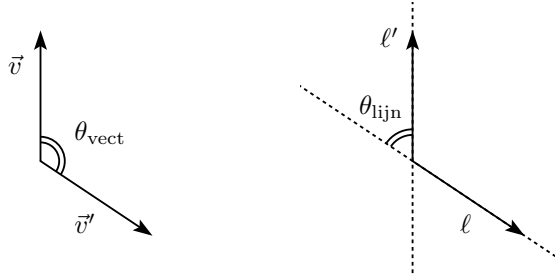


FIG. 8: Zelfs als de hoek θ_{vect} tussen twee vectoren $\vec{v}$ en $\vec{v}'$ stomp is, is de hoek θ_{lijn} tussen de bijbehorende lijnen ℓ en ℓ' altijd scherp.

1.3.4 De Fourierbasis van $\mathbb{C}^N$

We construeren een speciale basis van $\mathbb{C}^N$, met behulp van het complexe getal $\omega = e^{2\pi i/N} = \cos(2\pi/N) + i \sin(2\pi/N)$.

Lemma 1.10. *De uitdrukking $1 + \omega^m + \omega^{2m} + \dots + \omega^{(N-1)m}$ is gelijk aan N als $m \in \{\dots, -2N, -N, 0, N, 2N, \dots\}$, en anders 0 .*

Bewijs. Als m een veelvoud is van N , dan geldt $\omega^m = 1$. In het bijzonder is dan $1 + \omega^m + \dots + \omega^{(N-1)m} = 1 + \dots + 1 + \dots + 1 = N$.

Als dit niet het geval is, dan is ook $\omega^m \neq 1$. We berekenen $(1 - \omega^m)(1 + \omega^m + \dots + \omega^{(N-1)m})$. Door de eerste haakjes uit te werken zien we dat dit gelijk is aan

$$\begin{aligned} (1 - \omega^m)(1 + \omega^m + \dots + \omega^{(N-1)m}) &= \\ (1 + \omega^m + \dots + \omega^{(N-1)m}) - (\omega^m + \dots + \omega^{(N-1)m} + \omega^{Nm}) &= \\ 1 - \omega^{Nm} &= 0. \end{aligned}$$

In de laatste stap gebruiken we dat $\omega^N = 1$, zodat $1 - \omega^{mN} = 1 - (\omega^N)^m = 0$. Omdat ω^m niet 1 is, geldt echter $(1 - \omega^m) \neq 0$. Dus moet de tweede factor $(1 + \omega^m + \dots + \omega^{(N-1)m})$ gelijk zijn aan nul. $\square$

Opgave 1.27. Teken de machten van ω in het complexe vlak voor $N = 3$ en $N = 8$, en vergeet hierbij vooral niet ω^0 . Illustreer Lemma 1.10 voor $m = 0, 1, 2$ met $N = 3$, en voor $m = 0, 1, 2, 4$ met $N = 8$.

We definiëren de *Fourierbasis* $\vec{b}_0, \dots, \vec{b}_{N-1}$ van $\mathbb{C}^N$ door

$$\vec{b}_k = (1, \omega^k, \omega^{2k}, \dots, \omega^{(N-1)k}). \quad (24)$$

Met Lemma 1.10 zien we nu dat $\langle \vec{v}_k, \vec{v}_{k'} \rangle = N\delta_{kk'}$. (De Kronecker-delta $\delta_{kk'}$ is 1 als $k = k'$, en anders 0.)

Propositie 1.11. *De vectoren $\vec{b}_k$ vormen een orthogonale basis van $\mathbb{C}^N$. In het bijzonder is het inproduct $\langle \vec{v}_k, \vec{v}_{k'} \rangle = N\delta_{kk'}$.*

Bewijs. Door gebruik te maken van $\bar{\omega} = \omega^{-1}$, zien we dat

$$\begin{aligned}\langle \vec{v}_k, \vec{v}_{k'} \rangle &= \left(\bar{1} \cdot 1 + \bar{\omega}^k \omega^{k'} + \bar{\omega}^{2k} \omega^{2k'} + \dots + \bar{\omega}^{(N-1)k} \omega^{(N-1)k'} \right) \\ &= \left(1 + \omega^{(k'-k)} + \omega^{2(k'-k)} + \dots + \omega^{(N-1)(k'-k)} \right).\end{aligned}$$

Volgens Lemma 1.10 is dit N als $k - k' = 0$, en anders 0 . Het orthogonale stelsel $\vec{b}_k$ bestaat uit N vectoren, en moet dus een basis zijn. $\square$

Het is gebruikelijk om de basiscoëfficiënten van $\vec{v}$ ten opzichte van de Fourierbasis (24) aan te duiden met c_k . Voor elke vector $\vec{v} \in \mathbb{C}^N$ geldt dus

$$\vec{v} = \sum_{k=0}^{N-1} c_k \vec{b}_k. \quad (25)$$

De basiscoëfficiënten c_k vinden we op de vertrouwde manier. Substitueer de uitdrukking $\vec{v} = \sum_{k'=0}^{N-1} c_{k'} \vec{b}_{k'}$ in $\langle \vec{b}_k, \vec{v} \rangle$, en merk op dat $\langle \vec{b}_k, \vec{b}_{k'} \rangle$ gelijk is aan nul als $k \neq k'$. Je verkrijgt dan $\langle \vec{b}_k, \vec{v} \rangle = c_k \langle \vec{b}_k, \vec{b}_k \rangle$, en dus $c_k = \langle \vec{b}_k, v \rangle / \langle \vec{b}_k, \vec{b}_k \rangle = \frac{1}{N} \langle \vec{b}_k, v \rangle$. Samenvattend vinden we

$$\vec{v} = \sum_{k=0}^{N-1} c_k \vec{b}_k \quad \text{met} \quad c_k = \frac{1}{N} \langle \vec{b}_k, v \rangle.$$

We schrijven dit uit in termen van de componenten v_n van de vector $\vec{v} = (v_0, \dots, v_{N-1})$. Omdat de n -de component van $\vec{b}_k$ gelijk is aan $\omega^{kn} = e^{2\pi i kn/N}$, vinden we $v_n = \sum_{k=0}^{N-1} c_k e^{2\pi i kn/N}$, met $c_k = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} v_n e^{-2\pi i kn/N}$.

Stelling 1.12 (Discrete Fouriertransformatie). *Iedere vector $\vec{v} \in \mathbb{C}^N$ kan geschreven worden als*

$$v_n = \sum_{k=0}^{N-1} c_k e^{2\pi i kn/N}, \quad (26)$$

met Fouriercoëfficiënten

$$c_k = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} v_n e^{-2\pi i kn/N}. \quad (27)$$

De Fouriertransformatie is dus een *basistransformatie*. Formule (27) geeft de basiscoëfficiënten c_k voor de Fourierbasis $\vec{b}_k$, in termen van de basiscoëfficiënten v_n in de standaardbasis $\vec{e}_n$. Omgekeerd geeft (26) de v_n in termen van c_k .

1.4 Algemene definitie van vectorruimte en inproduct

We vangen al deze voorbeelden met één definitie: het begrip *vectorruimte*. Hier verschuift de aard van de vectoren waar je mee werkt naar de achtergrond, terwijl de rekenregels juist op de voorgrond treden. Het interesseert ons niet langer *wat* de vectoren zijn, als je er maar mee kunt rekenen zoals je gewend bent.

Definitie 1.13 (Vectorruimte). Een *vectorruimte* is een verzameling V van ‘vectoren’, met een *optelling* die aan ieder tweetal vectoren $\vec{v}$ en $\vec{v}'$ de vector $\vec{v} + \vec{v}'$ toevoegt, een *scalaire vermenigvuldiging* die aan een getal λ en een vector $\vec{v}$ de vector $\lambda\vec{v}$ toevoegt, en een speciale nulvector $\vec{0}$. We eisen dat de volgende rekenregels gelden:

- V1) Een vector $\vec{v}$ verandert niet als je hem met 1 vermenigvuldigt, of als je er de nulvector bij optelt, $1\vec{v} = \vec{v}$ en $\vec{0} + \vec{v} = \vec{v}$. Als je een vector bij zijn tegengestelde $-\vec{v} := (-1)\vec{v}$ optelt, krijg je de nulvector $\vec{0}$.
- V2) Het maakt niet uit in welke volgorde je vectoren $\vec{v}$ en $\vec{v}'$ bij elkaar optelt, of met een getal λ vermenigvuldigt. Preciezer: er geldt $\vec{v} + \vec{v}' = \vec{v}' + \vec{v}$, $\vec{v} + (\vec{v}' + \vec{v}'') = (\vec{v} + \vec{v}') + \vec{v}''$, en $\lambda(\vec{v} + \vec{v}') = \lambda\vec{v} + \lambda\vec{v}'$.
- V3) Het maakt niet uit of je twee getallen λ en μ eerst met elkaar vermenigvuldigt en dan met een vector $\vec{v}$, of andersom: $\lambda(\mu\vec{v}) = (\lambda\mu)\vec{v}$. Hetzelfde geldt voor het optellen van getallen: $(\lambda + \mu)\vec{v} = \lambda\vec{v} + \mu\vec{v}$.

Een vectorruimte heet *complex* als de getallen λ en μ in V2 en V3 niet alleen reëel, maar ook complex mogen zijn.

We hebben gezien dat de optelling en scalaire vermenigvuldiging in $\mathbb{R}^N$ en $\mathbb{C}^N$ aan de eisen V1, V2 en V3 voldoen. De ruimten $V = \mathbb{R}^N$ en $V = \mathbb{C}^N$ zijn dus vectorruimten, en $V = \mathbb{C}^N$ is zelfs een complexe vectorruimte.

Een vectorruimte V met een *inproduct* heet ook wel een *inproductruimte*. Ook bij de algemene definitie van het inproduct stellen we de rekenregels centraal, in casu I1, I2 en I3.

Definitie 1.14. Een *inproduct* op een (complexe of reële) vectorruimte V is een manier om aan elk tweetal vectoren $\vec{v}$ en $\vec{v}'$ een (complex of reëel) getal $\langle \vec{v}, \vec{v}' \rangle$ toe te kennen, zodanig dat:

- I1) Het inproduct optelling en scalaire vermenigvuldiging respecteert : $\langle \vec{v}, \vec{v}' + \vec{v}'' \rangle = \langle \vec{v}, \vec{v}' \rangle + \langle \vec{v}, \vec{v}'' \rangle$ en $\langle \vec{v}, \lambda\vec{v}' \rangle = \lambda\langle \vec{v}, \vec{v}' \rangle$.
- I2) Het inproduct voldoet aan $\langle \vec{v}, \vec{v}' \rangle = \overline{\langle \vec{v}', \vec{v} \rangle}$.
- I3) Er geldt $\langle \vec{v}, \vec{v} \rangle \geq 0$, en $\langle \vec{v}, \vec{v} \rangle = 0$ is alleen mogelijk als $\vec{v} = \vec{0}$.

Voor het inproduct in een reële vectorruimte schrijven we $(\vec{v}, \vec{v}')$. Aangezien dit een reëel getal is, vereenvoudigt I2 tot $(\vec{v}', \vec{v}) = (\vec{v}, \vec{v}')$.

We hebben gezien dat de inproducten op $\mathbb{R}^N$ en $\mathbb{C}^N$ inderdaad aan deze eisen voldoen. De vectorruimten $V = \mathbb{R}^N$ en $V = \mathbb{C}^N$ zijn dus inproductruimten, en $V = \mathbb{C}^N$ is zelfs een complexe inproductruimte.

1.4.1 De ruimte van golf functies

Een belangrijk voorbeeld van een vectorruimte met inproduct is de quantummechanische ruimte van golf functies. We bekijken de ruimte $V = \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ van functies $\psi: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ die *kwadratisch integreerbaar* zijn,

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2(x) dx < \infty.$$

Willen we dergelijke functies ψ als *vectoren* zien, dan moeten we specificeren hoe we ze optellen en met een complex getal λ vermenigvuldigen.

De som $\psi + \psi'$ van twee functies ψ en ψ' is de functie die in x de waarde $\psi(x) + \psi'(x)$ heeft, $(\psi + \psi')(x) := \psi(x) + \psi'(x)$. Het product $\lambda\psi$ van de scalar λ en de functie ψ is de functie die in x de waarde $\lambda\psi(x)$ aanneemt, $(\lambda\psi)(x) = \lambda\psi(x)$. Ten slotte is de nulvector $\vec{0}$ de functie $\psi(x) = 0$.

Propositie 1.15. *De ruimte V van functies, met bovenstaande optelling, scalaire vermenigvuldiging en nulvector, voldoet aan de rekenregels V1, V2 en V3. Zij is dus een complexe vectorruimte.*

Bewijs. Opgave. □

We definiëren het inproduct $\langle \psi, \psi' \rangle$ tussen twee functies ψ en ψ' als het getal

$$\langle \psi, \psi' \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\psi(x)} \psi'(x) dx. \quad (28)$$

Propositie 1.16. *Dit voldoet aan de rekenregels I1, I2, en bovendien geldt $\langle \psi, \psi \rangle \geq 0$ voor alle ψ in $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$.*

Bewijs. Dat het inproduct optelling en scalaire vermenigvuldiging respecteert, komt doordat integratie dat ook doet. Voor I1 berekenen we

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\psi(x)} (\lambda \psi')(x) dx &= \lambda \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\psi(x)} \psi'(x) dx \quad \text{en} \\ \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\psi(x)} (\psi' + \psi'')(x) dx &= \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\psi(x)} \psi'(x) dx + \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\psi(x)} \psi''(x) dx. \end{aligned}$$

We zien dus dat I1 geldt: $\langle \psi, \lambda \psi' \rangle = \lambda \langle \psi, \psi' \rangle$ en $\langle \psi, \psi' + \psi'' \rangle = \langle \psi, \psi' \rangle + \langle \psi, \psi'' \rangle$. De eigenschap I2 volgt omdat integratie complexe conjugatie respecteert,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \overline{\psi'(x)} \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\psi'(x) \overline{\psi(x)}} dx = \overline{\int_{-\infty}^{\infty} \psi'(x) \overline{\psi(x)} dx}.$$

Er geldt dus $\langle \psi', \psi \rangle = \overline{\langle \psi, \psi' \rangle}$, en dit is I2. Ten slotte is $\langle \psi, \psi \rangle \geq 0$. Omdat $\overline{\psi(x)} \psi(x) = |\psi(x)|^2$ groter of gelijk aan nul is, geldt $\langle \psi, \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx \geq 0$. □

Opmerking 2. Strikt genomen is er in de vectorruimte $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ niet geheel aan de rekenregel I3 voldaan. Weliswaar geldt $\langle \psi, \psi \rangle \geq 0$, maar op de regel dat $\langle \psi, \psi \rangle = 0$ alleen mogelijk is als $\psi(x) = 0$ zijn flauwe uitzonderingen te bedenken. Een voorbeeld is de functie ψ_0 met $\psi_0(x) = 0$ voor $x \neq 0$ en $\psi_0(x) = 1$ voor $x = 0$. Dit kleine probleem heeft geen ernstige gevolgen, en wordt meestal opgelost door fysisch equivalente golffuncties (zoals ψ_0 en de nulvector $\psi(x) = 0$) met elkaar te identificeren.

Hiermee komt de ruimte $V = \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ van golffuncties op gelijke voet te staan met $V = \mathbb{R}^N$ en $V = \mathbb{C}^N$; het zijn alledrie inproductruimten. Eigenschappen die we kunnen bewijzen uit alleen V1–V3 en I1–I3 gelden dus net zo goed voor de driedimensionale ruimte $\mathbb{R}^3$ als voor de ruimte van golffuncties. We bespreken een paar belangrijke varianten op dit thema.

Golffuncties in drie dimensies Een quantummechanisch deeltje dat in drie dimensies beweegt, wordt beschreven door een kwadratisch integreerbare functie $\psi(x, y, z)$ van drie variabelen. Deze vormen de vectorruimte $V = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$, met inproduct

$$\langle \psi, \psi' \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \bar{\psi}(x, y, z) \psi'(x, y, z) dx dy dz.$$

Interval Op dezelfde manier definiëren we de ruimte $\mathcal{L}^2([a, b])$ van kwadratisch integreerbare functies op het interval $[a, b]$. Het inproduct is gegeven door $\langle \psi, \psi' \rangle = \int_a^b \bar{\psi}(x) \psi'(x) dx$. De definitie van kwadratisch integreerbare functies op rechthoeken, blokken etc. laat zich raden.

Kwadratisch integreerbare functies op de cirkel In Fouriertheorie is de ruimte $\mathcal{L}^2(S^1)$ van kwadratisch integreerbare functies op de cirkel $S^1 = \{(x, y); x^2 + y^2 = 1\}$ van belang. We schrijven een functie $f: S^1 \rightarrow \mathbb{C}$ vaak in poolcoördinaten, $f(\phi)$ met $-\pi \leq \phi \leq \pi$. Het is dan wel van belang om te onthouden dat f alleen continu *op de cirkel* is als $f(\pi) = f(-\pi)$.

Kwadratisch integreerbaar ten opzichte van een dichtheid Een laatste variant is de vectorruimte $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}, \mu)$, waar $\mu: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^{\geq 0}$ een positieve functie is. Dit is de vectorruimte van functies $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ waarvoor $\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 \mu(x) dx < \infty$, met inproduct

$$\langle f, g \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \bar{f}(x) g(x) \mu(x) dx.$$

We zullen de versie tegenkomen waar $\mu(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2}$ de gaussische kansdichtheid is. De varianten voor $\mathbb{R}^2$ en $\mathbb{R}^3$ spreken voor zich.

1.4.2 Eigenschappen en begrippen voor vectorruimten

Met de definitie van vectorruimte en inproduct hebben we een drietal bewerkingen (optellen, scalaire vermenigvuldiging en inproduct) en een zestal eigenschappen (V1–V3 en I1–I3) uitverkozen tot ‘fundamenteel’. De andere eigenschappen van deze drie bewerkingen zijn hier eenvoudig uit af te leiden.

Eigenschappen Zo hebben we bijvoorbeeld in I1 voorgeschreven dat de *rechterkant* van het inproduct optelling en scalaire vermenigvuldiging respecteert. Omdat we in I2 voorgeschreven hebben wat er gebeurt als je rechts en links verwisselt, kunnen we nagaan hoe de *linkerkant* van het inproduct zich gedraagt.

Propositie 1.17. *Voor het inproduct op een complexe vectorruimte V geldt*

$$\langle \vec{v} + \vec{v}', \vec{v}'' \rangle = \langle \vec{v}, \vec{v}'' \rangle + \langle \vec{v}', \vec{v}'' \rangle, \quad (29)$$

$$\langle \lambda \vec{v}, \vec{v}' \rangle = \bar{\lambda} \langle \vec{v}, \vec{v}' \rangle. \quad (30)$$

Bewijs. We draaien links en rechts om met I2, halen met I1 de optelling buiten de haakjes, en draaien vervolgens links en rechts weer terug,

$$\langle \vec{v} + \vec{v}', \vec{v}'' \rangle \stackrel{I2}{=} \overline{\langle \vec{v}'', \vec{v} + \vec{v}' \rangle} \stackrel{I1}{=} \overline{\langle \vec{v}'', \vec{v} \rangle} + \overline{\langle \vec{v}'', \vec{v}' \rangle} \stackrel{I2}{=} \langle \vec{v}, \vec{v}'' \rangle + \langle \vec{v}', \vec{v}'' \rangle.$$

Doen we hetzelfde met scalaire vermenigvuldiging, dan wordt λ complex geconjugueerd,

$$\langle \lambda \vec{v}, \vec{v}' \rangle \stackrel{I2}{=} \overline{\langle \vec{v}', \lambda \vec{v} \rangle} \stackrel{I1}{=} \overline{\lambda \langle \vec{v}', \vec{v} \rangle} = \bar{\lambda} \overline{\langle \vec{v}', \vec{v} \rangle} \stackrel{I2}{=} \bar{\lambda} \langle \vec{v}, \vec{v}' \rangle.$$

□

Opmerking 3. In dit dictaat eisen we dat scalaire vermenigvuldiging *rechts* gerespecteerd wordt, en verschijnt dus automatisch *links* een $\bar{\lambda}$. Hiermee volgen we de conventies in de fysica-literatuur. In de wiskundeliteratuur neemt men veelal aan dat de scalaire vermenigvuldiging *links* gerespecteerd wordt, en verschijnt $\bar{\lambda}$ dus *rechts*.

Opgave 1.28. Controleer vergelijking (29) en (30) voor $\mathbb{C}^N$ aan de hand van de expliciete uitdrukking (20) voor het inproduct. Doe hetzelfde voor de ruimte van golffuncties, aan de hand van de uitdrukking (28).

Begrippen Allerlei andere bewerkingen op vectorruimten *definiëren* we nu in termen van optelling, scalaire vermenigvuldiging en inproduct. De eigenschappen van deze bewerkingen volgen dan uit de fundamentele eigenschappen V1–V3 en I1–I3.

De *tegengestelde* $-\vec{v}$ en het *verschil* $\vec{v} - \vec{v}'$ definiëren we bijvoorbeeld in termen van optelling en scalaire vermenigvuldiging, als

$$-\vec{v} := (-1)\vec{v}, \quad \text{en} \quad \vec{v} - \vec{v}' = \vec{v} + (-\vec{v}'). \quad (31)$$

De voor de hand liggende rekenregels voor tegengestelde en verschil, zoals $-(\lambda v) = \lambda(-v)$, $\vec{v} + (\vec{v}' - \vec{v}'') = (\vec{v} + \vec{v}') - \vec{v}''$ en $\lambda(\vec{v} - \vec{v}') = \lambda\vec{v} - \lambda\vec{v}'$ volgen dan ook direct uit de rekenregels voor optelling en scalaire vermenigvuldiging.

Vaak kunnen nuttige begrippen uit de driedimensionale ruimte $\mathbb{R}^3$ worden overgeheveld naar algemene inproductruimten V door ze te formuleren in termen van optelling, scalarvermenigvuldiging en inproduct. In §1.1 zagen we bijvoorbeeld dat de lengte $\|\vec{v}\|$ van een vector $\vec{v}$ in $\mathbb{R}^3$ gelijk is aan $\sqrt{\langle \vec{v}, \vec{v} \rangle}$. Voor een vector $\vec{v}$ in een algemene inproductruimte V *definiëren* we nu de *lengte* of *norm* als

$$\|\vec{v}\| := \sqrt{\langle \vec{v}, \vec{v} \rangle}. \quad (32)$$

Het begrip ‘lengte’ of ‘norm’ is nu ook beschikbaar in, bijvoorbeeld, de ruimte van quantummechanische golffuncties. Daar blijkt het een nuttig begrip; de fysisch relevante golffuncties zijn bijvoorbeeld precies de vectoren ψ van norm $\|\psi\| = 1$.

In §1.1 zagen we dat twee vectoren $\vec{v}$ en $\vec{v}'$ in $\mathbb{R}^3$ loodrecht op elkaar staan als $(\vec{v}, \vec{v}') = 0$. In een algemene inproductruimte V *definiëren* we nu orthogonaliteit van $\vec{v}$ en $\vec{v}'$ als

$$\langle \vec{v}, \vec{v}' \rangle = 0. \quad (33)$$

Ook dit begrip bewijst zijn waarde buiten de vertrouwde context van $\mathbb{R}^3$; de *overgangswaarschijnlijkheid* tussen twee golffuncties ψ en ψ' is nul precies dan als ze orthogonaal zijn.

We willen ook het begrip *hoek* overhevelen van $\mathbb{R}^3$ naar de algemene inproductruimte V . Geïnspireerd door formule (7) voor $\mathbb{R}^3$, en formule (23) voor $\mathbb{C}^N$,

willen we de hoek θ tussen de lijnen door twee vectoren $\vec{v}$ en $\vec{v}'$ in een (complexe) inproductruimte V definiëren aan de hand van de formule

$$\cos(\theta) = \frac{|\langle \vec{v}, \vec{v}' \rangle|}{\|\vec{v}\| \|\vec{v}'\|}. \quad (34)$$

Hiervoor moet wel een klein probleem worden opgelost: is het wel waar dat het quotiënt $|\langle \vec{v}, \vec{v}' \rangle|/\|\vec{v}\| \|\vec{v}'\|$ kleiner is dan 1? Anders kan het bezwaarlijk worden opgevat als de cosinus van een hoek. We bewijzen dat dit inderdaad het geval is, uiteraard met behulp van de rekenregels V1–V3 en I1–I3.

Propositie 1.18 (Cauchy-Schwarz). *In een inproductruimte V geldt voor ieder tweetal vectoren $\vec{v}$ en $\vec{v}'$:*

$$|\langle \vec{v}, \vec{v}' \rangle| \leq \|\vec{v}\| \|\vec{v}'\|$$

Bewijs. Voor elk complex getal λ geldt dat $\langle \vec{v} - \lambda \vec{v}', \vec{v} - \lambda \vec{v}' \rangle = \|\vec{v} - \lambda \vec{v}'\|^2 \geq 0$. Werken we de haakjes uit, dan vinden we

$$\langle \vec{v}, \vec{v} \rangle - \bar{\lambda} \langle \vec{v}', \vec{v} \rangle - \lambda \langle \vec{v}, \vec{v}' \rangle + |\lambda|^2 \langle \vec{v}', \vec{v}' \rangle \geq 0. \quad (35)$$

We vullen hier het complexe getal $\lambda = \langle \vec{v}', \vec{v} \rangle / \langle \vec{v}', \vec{v}' \rangle$ in, verkregen door de afgeleide van (35) naar $\lambda = x + iy$ gelijk aan nul te stellen. We vinden dan

$$\langle \vec{v}, \vec{v} \rangle - \frac{\langle \vec{v}, \vec{v}' \rangle \langle \vec{v}', \vec{v} \rangle}{\langle \vec{v}', \vec{v}' \rangle} - \frac{\langle \vec{v}', \vec{v} \rangle \langle \vec{v}, \vec{v}' \rangle}{\langle \vec{v}', \vec{v}' \rangle} + \frac{|\langle \vec{v}, \vec{v}' \rangle|^2}{\langle \vec{v}', \vec{v}' \rangle} = \langle \vec{v}, \vec{v} \rangle - \frac{|\langle \vec{v}, \vec{v}' \rangle|^2}{\langle \vec{v}', \vec{v}' \rangle} \geq 0,$$

en dus $|\langle \vec{v}, \vec{v}' \rangle|^2 \leq \langle \vec{v}, \vec{v} \rangle \langle \vec{v}', \vec{v}' \rangle = \|\vec{v}\|^2 \|\vec{v}'\|^2$. □

In de context van de ruimte $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ van quantummechanische golf functies wordt de grootheid

$$\cos^2(\theta) = \frac{|\langle \psi, \psi' \rangle|^2}{\|\psi\|^2 \|\psi'\|^2}$$

opgevat als de *overgangswaarschijnlijkheid* tussen ψ en ψ' . Dit is de kans dat een meting van ψ' een positief antwoord oplevert als het deeltje zich in de toestand ψ bevindt. Om deze interpretatie überhaupt mogelijk te maken, moet de kans natuurlijk wel tussen 0 en 1 liggen. Dit wordt gegarandeerd door de Cauchy-Schwarzongelijkheid.

Opgave 1.29 (Collapse of the wavefunction). Stel een electron heeft spintoeestand $\psi = (\alpha, \beta)$ in $\mathbb{C}^2$. Dit wordt ook wel geschreven als $\psi = \alpha|\uparrow\rangle + \beta|\downarrow\rangle$, met $|\uparrow\rangle$ en $|\downarrow\rangle$ de σ_z -eigentoestanden $|\uparrow\rangle = (1, 0)$ en $|\downarrow\rangle = (0, 1)$. We nemen aan dat ψ genormaliseerd is, $\|\psi\| = 1$.

- a) Wat is de projectie $\vec{p}_1$ van ψ op de (complexe) lijn opgespannen door $|\uparrow\rangle$, dus op $\mathbb{C} \cdot |\uparrow\rangle = \{(\lambda, 0); \lambda \in \mathbb{C}\}$? Wat is zijn projectie op $\mathbb{C} \cdot |\downarrow\rangle = \{(0, \lambda); \lambda \in \mathbb{C}\}$? Bereken $\|\vec{p}_1\|^2$ en $\|\vec{p}_2\|^2$. (Dit is de kans op $\sigma_z = 1$ of -1 bij een electron in toestand ψ .)
- b) Wat is de projectie $\vec{p}_1'$ van $\vec{p}_1$ op ψ ? Wat is de projectie $\vec{p}_2'$ van $\vec{p}_2$ op ψ ? Bereken $\|\vec{p}_1'\|^2 + \|\vec{p}_2'\|^2$. (Dit is de kans dat het electron na een meting van σ_z nog steeds in de toestand ψ verkeert.) Maak een schets; neem hierbij aan dat α en β reëel zijn, en teken in $\mathbb{R}^2$ in plaats van $\mathbb{C}^2$.

1.4.3 Deelvectorruimten, bases, projecties

De begrippen *deelvectorruimte*, *basis* en *projectie* blijven hetzelfde als voorheen.

Een *deelvectorruimte* W van V is een verzameling vectoren $\vec{v}$ die de nulvector bevat, en gesloten is onder optelling en scalaire vermenigvuldiging. Met andere woorden:

D1) De nulvector $\vec{0}$ zit in W .

D2) Als $\vec{v}$ en $\vec{v}'$ vectoren zijn in W , dan is ook $\vec{v} + \vec{v}'$ een vector in W .

D3) Als $\vec{v}$ een vector is in W , dan voor ieder getal λ ook $\lambda\vec{v}$ een vector in W .
Voor complexe vectorruimten mag het getal λ ook complex zijn.

Een *basis* $\vec{b}_i$ van een vectorruimte V is een (eindige) verzameling vectoren zo dat iedere vector $\vec{v}$ op precies één manier geschreven kan worden als

$$\vec{v} = \sum_{i=0}^{N-1} \lambda_i \vec{b}_i.$$

De *basiscoëfficiënten* λ_i mogen complex zijn als V een complexe vectorruimte is. Een basis heet *orthogonaal* als $\langle \vec{b}_i, \vec{b}_j \rangle = 0$ voor $i \neq j$, en *orthonormaal* als $\langle \vec{b}_i, \vec{b}_j \rangle = \delta_{ij}$.

De *projectie* $P(\vec{v})$ van een vector $\vec{v}$ in V op een deelruimte W is de vector in W waarvoor $\|\vec{v} - P(\vec{v})\|$ minimaal is. In $\mathbb{R}^3$ zagen we in een plaatje dat dit precies dan het geval is, als $\vec{v} - P(\vec{v}) \perp W$.

Voor algemene vectorruimten is dit (mij, in ieder geval) niet direct duidelijk. We hebben hier een extra argument nodig, dat alleen V1, V2, V3 en I1, I2, I3 gebruikt. Hiervoor hebben we de stelling van Pythagoras nodig. We laten zien dat deze geldt in iedere inproductruimte:

Stelling 1.19 (Pythagoras). *Als twee vectoren $\vec{v}$ en $\vec{v}'$ in een inproductruimte V loodrecht op elkaar staan, $\vec{v} \perp \vec{v}'$, dan geldt $\|\vec{v} + \vec{v}'\|^2 = \|\vec{v}\|^2 + \|\vec{v}'\|^2$.*

Bewijs. Als we het inproduct $\|\vec{v} + \vec{v}'\|^2 = \langle \vec{v} + \vec{v}', \vec{v} + \vec{v}' \rangle$ uitwerken, dan zijn de kruistermen $\langle \vec{v}, \vec{v}' \rangle$ en $\langle \vec{v}', \vec{v} \rangle$ nul vanwege $\vec{v} \perp \vec{v}'$. Er geldt

$$\langle \vec{v} + \vec{v}', \vec{v} + \vec{v}' \rangle = \langle \vec{v}, \vec{v} \rangle + \langle \vec{v}, \vec{v}' \rangle + \langle \vec{v}', \vec{v} \rangle + \langle \vec{v}', \vec{v}' \rangle = \langle \vec{v}, \vec{v} \rangle + \langle \vec{v}', \vec{v}' \rangle,$$

en dus $\|\vec{v} + \vec{v}'\|^2 = \|\vec{v}\|^2 + \|\vec{v}'\|^2$. $\square$

Een handig gevolg van de Stelling van Pythagoras is dat we de lengte van een vector $\vec{v}$ uit kunnen rekenen, zodra we zijn basiscoëfficiënten ten opzichte van een orthogonale basis weten.

Propositie 1.20. *Als $\vec{b}_i$ een orthogonale basis is en $\vec{v} = \sum_{i=0}^{N-1} \lambda_i \vec{b}_i$, dan geldt*

$$\|\vec{v}\|^2 = |\lambda_0|^2 \|\vec{b}_0\|^2 + \dots + |\lambda_{N-1}|^2 \|\vec{b}_{N-1}\|^2.$$

Bewijs. De Stelling van Pythagoras zegt dat $\|\vec{v}\|^2 = \|\lambda_0 \vec{b}_0\|^2 + \dots + \|\lambda_{N-1} \vec{b}_{N-1}\|^2$, omdat de termen orthogonaal zijn. Haal nu de λ_i 's buiten haakjes. $\square$

Maar het was ons natuurlijk begonnen het resultaat dat een projectie $P(\vec{v})$ op een deelruimte W de eigenschap heeft dat $\vec{v} - P(\vec{v})$ loodrecht staat op W .

Propositie 1.21. *Stel dat $\vec{p}$ een vector in W is, met $\vec{v} - \vec{p} \perp \vec{w}$ voor elke $\vec{w}$ in W . Dan is $\vec{p} = P(\vec{v})$ de projectie van $\vec{v}$ op W .*

Bewijs. We laten zien dat de afstand $\|\vec{v} - \vec{w}\|$ van $\vec{v}$ tot een willekeurige vector $\vec{w}$ in W minstens zo groot is als zijn afstand $\|\vec{v} - \vec{p}\|$ tot $\vec{p}$. Schrijf $\|\vec{v} - \vec{w}\| = \|(\vec{v} - \vec{p}) + (\vec{p} - \vec{w})\|$. Omdat $\vec{p} - \vec{w}$ in de deelruimte W zit, geldt $\vec{v} - \vec{p} \perp \vec{p} - \vec{w}$. Met de stelling van Pythagoras zien we dus dat

$$\|\vec{v} - \vec{w}\|^2 = \|(\vec{v} - \vec{p}) + (\vec{p} - \vec{w})\|^2 = \|(\vec{v} - \vec{p})\|^2 + \|(\vec{p} - \vec{w})\|^2$$

Nu is $\|(\vec{p} - \vec{w})\|^2 \geq 0$, dus er geldt $\|\vec{v} - \vec{w}\|^2 \geq \|(\vec{v} - \vec{p})\|^2$. □

Als $\vec{b}_0, \dots, \vec{b}_{N-1}$ een (eindige) basis van een deelvectorruimte W van V is, dan kunnen we de projectie op W uitrekenen met de gebruikelijke truc.

Propositie 1.22. *Stel $\vec{b}_i$ is een orthogonale basis van W . Dan is de projectie $P(\vec{v})$ van $\vec{v}$ op W gegeven door*

$$P(\vec{v}) = \sum_{i=0}^{N-1} \lambda_i \vec{b}_i, \quad \text{met} \quad \lambda_i = \langle \vec{b}_i, \vec{v} \rangle / \langle \vec{b}_i, \vec{b}_i \rangle. \quad (36)$$

Bewijs. Schrijf de vector $P(\vec{v})$ in W als $P(\vec{v}) = \sum_{i=0}^{N-1} \lambda_i \vec{b}_i$. Als $\vec{v} - P(\vec{v})$ loodrecht op elke vector in W staat, dan staat hij in het bijzonder loodrecht op iedere basisvector $\vec{b}_i$. Omdat $\langle \vec{b}_i, \vec{b}_j \rangle = 0$ als $i \neq j$ levert dit

$$0 = \langle \vec{b}_i, \vec{v} - P(\vec{v}) \rangle = \langle \vec{b}_i, \vec{v} \rangle - \sum_{j=0}^{N-1} \lambda_j \langle \vec{b}_i, \vec{b}_j \rangle = \langle \vec{b}_i, \vec{v} \rangle - \lambda_i \langle \vec{b}_i, \vec{b}_i \rangle.$$

We vinden dus $\lambda_i = \langle \vec{b}_i, \vec{v} \rangle / \langle \vec{b}_i, \vec{b}_i \rangle$ zoals gewenst. □

Opmerking 4. Als de vectorruimten V en W complex zijn, is $\langle \vec{b}_i, \vec{v} \rangle$ niet hetzelfde als $\langle \vec{v}, \vec{b}_i \rangle$. Let hierop in Formule (36).

Het orthogonaliseren van een stelsel $\vec{b}_0, \vec{b}_1, \dots$ gaat hetzelfde als in $\mathbb{R}^3$. Je trekt steeds van iedere vector $\vec{b}_n$ zijn projectie $P(\vec{b}_n)$ op de ruimte W_{n-1} opgespannen door alle vorige vectoren $\vec{b}_0, \dots, \vec{b}_{n-1}$ af. Dit procédé heet *Gram-Schmidt orthogonalisatie*.

- 0) De eerste basisvector $\vec{b}'_0 = \vec{b}_0$ spant de eendimensionale deelruimte W_0 op.
- 1) De tweede basisvector wordt $\vec{b}'_1 = \vec{b}_1 - P(\vec{b}_1)$, waar $P(\vec{b}_1)$ de projectie op W_0 is. Deze staat loodrecht op $\vec{b}'_0$ (Propositie 1.21) en is gegeven door (Propositie (36))

$$\vec{b}'_1 = \vec{b}_1 - \frac{\langle \vec{b}'_0, \vec{b}_1 \rangle}{\langle \vec{b}'_0, \vec{b}'_0 \rangle} \vec{b}'_0.$$

Je hebt dan een orthogonale basis $\vec{b}'_0, \vec{b}'_1$ van de ruimte $W_1 = \{\lambda_0 \vec{b}'_0 + \lambda_1 \vec{b}'_1\}$ opgespannen door $\vec{b}'_1$ en $\vec{b}'_0$.

- n) Stel je hebt een orthogonale basis $\vec{b}'_0, \dots, \vec{b}'_{n-1}$ van de ruimte W_{n-1} van vectoren van de vorm $\lambda_0 \vec{b}'_0 + \dots + \lambda_{n-1} \vec{b}'_{n-1}$. Dan vind je de volgende

vector $\vec{b}'_n$ door van $\vec{b}_n$ zijn projectie op W_{n-1} af te trekken, $\vec{b}'_n = \vec{b}_n - P(\vec{b}_n)$. Vanwege het feit dat $\vec{b}'_0, \dots, \vec{b}'_{n-1}$ al orthogonaal is, levert dit

$$\vec{b}'_1 = \vec{b}_1 - \left(\frac{\langle \vec{b}'_0, \vec{v} \rangle}{\langle \vec{b}'_0, \vec{b}'_0 \rangle} \vec{b}'_0 + \dots + \frac{\langle \vec{b}'_{n-1}, \vec{v} \rangle}{\langle \vec{b}'_{n-1}, \vec{b}'_{n-1} \rangle} \vec{b}'_{n-1} \right).$$

Let er bij complexe vectorruimten op $\langle \vec{b}'_i, \vec{v} \rangle$ en $\langle \vec{v}, \vec{b}'_i \rangle$ niet hetzelfde zijn!.

1.4.4 Projecties in functieruimten

We passen de theorie van inproductruimten toe op het volgende probleem.

Probleem 1. Gegeven een functie $f: [-1, 1] \rightarrow \mathbb{C}$. We zoeken het tweedegraads polynoom $p_2(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2$ dat de functie f het best benadert, in de zin dat de kwadratische fout

$$\Delta^2 = \int_{-1}^1 |f(x) - p_2(x)|^2 dx \quad (37)$$

minimaal is.

Het probleem speelt zich af in de vectorruimte $V = \mathcal{L}^2([-1, 1])$ van functies $f: [-1, 1] \rightarrow \mathbb{C}$ met $\int_{-1}^1 |f(x)|^2 dx < \infty$. Dit is een complexe vectorruimte, met inproduct

$$\langle f, g \rangle = \int_{-1}^1 \bar{f}(x)g(x)dx.$$

We vatten de functie f op als een vector in $V = \mathcal{L}^2([-1, 1])$.

We bekijken de driedimensionale deelvectorruimte W van polynomen $p(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2$ van graad hoogstens 2, waarbij a_0, a_1 en a_2 complexe getallen mogen zijn. De ruimte W heeft een basis b_0, b_1 en b_2 met $b_0(x) = 1$, $b_1(x) = x$ en $b_2(x) = x^2$.

De kwadratische fout (37) is natuurlijk niets anders dan de *afstand* $\Delta = \|f - p_2\|$ van f tot p_2 . We zoeken dus de vector p_2 in W waarvoor de afstand $\Delta = \|f - p_2\|$ tot f minimaal is. Dit is de *projectie* $p_2 = P(f)$ van f op W .

Om de projectie te vinden, hebben we een orthogonale basis van W nodig. De basis b_0, b_1, b_2 is niet orthogonaal, want

$$\langle b_0, b_2 \rangle = \int_{-1}^1 1 \cdot x^2 dx = [\frac{1}{3}x^3]_{-1}^1 = 2/3.$$

Net zo berekenen we

$$\begin{aligned} \langle b_0, b_0 \rangle &= 2, & \langle b_1, b_1 \rangle &= 2/3, & \langle b_2, b_2 \rangle &= 2/5 & \text{ en} \\ \langle b_0, b_1 \rangle &= 0, & \langle b_0, b_2 \rangle &= 2/3, & \langle b_1, b_2 \rangle &= 0. \end{aligned} \quad (38)$$

We hebben dus de Gram-Schmidt orthogonalisatiemethode nodig. In Stap 0 merken we op dat $b'_0 = b_0 = 1$ een orthogonale basis is van de ruimte $W_0 = \{a_0 \cdot 1\}$ van constante functies.

In Stap 1 trekken we van b_1 zijn projectie op W_0 af, $b'_1 = b_1 - P(b_1)$. We vinden

$$b'_1 = b_1 - \frac{\langle b'_0, b_1 \rangle}{\langle b'_0, b'_0 \rangle} b'_0 = b_1,$$

omdat $\langle b'_0, b_1 \rangle = \langle b_0, b_1 \rangle = 0$. We hebben dus een orthogonale basis $b'_0(x) = 1$, $b'_1(x) = x$ van de ruimte $W_1 = \{a_0 + a_1x\}$ van polynomen van graad hoogstens 1.

In Stap 2 trekken we van b_2 zijn projectie op W_1 af, $b'_2 = b_2 - P(b_2)$. We vinden

$$b'_2 = b_2 - \left(\frac{\langle b'_0, b_2 \rangle}{\langle b'_0, b'_0 \rangle} b'_0 + \frac{\langle b'_1, b_2 \rangle}{\langle b'_1, b'_1 \rangle} b'_1 \right) = b_2 - \frac{1}{3} b'_0,$$

waarbij we in de laatste stap gebruik maken van (38) en het toevallige feit dat $b'_0 = b_0$ en $b'_1 = b_1$. Al met al hebben we nu de volgende orthogonale basis van de ruimte $W = \{a_0 + a_1x + a_2x^2\}$ gevonden: $b'_0(x) = 1$, $b'_1(x) = x$, en $b'_2(x) = x^2 - \frac{1}{3}$.

Met behulp van deze orthogonale basis kunnen we de projectie van f op W vinden. Er geldt $P(f) = \lambda_0 b'_0 + \lambda_1 b'_1 + \lambda_2 b'_2$ met $\lambda_i = \langle \vec{b}_i, f \rangle / \langle \vec{b}_i, \vec{b}_i \rangle$. We drukken ons antwoord uit in de *momenten*

$$M_k = \int_{-1}^1 x^k f(x) dx$$

van f . Merk op dat $M_k = \langle b_k, f \rangle$. We vinden $\lambda_0 = \frac{1}{2} M_0$, $\lambda_1 = \frac{3}{2} M_1$. Om $\lambda_2 = \langle b'_2, f \rangle / \langle b'_2, b'_2 \rangle$ te vinden, berekenen we eerst de noemer, $\langle b'_2, b'_2 \rangle = \int_{-1}^1 (x^2 - 1/3)^2 dx = 8/45$. Vanwege $b'_2 = b_2 - \frac{1}{3} b_0$, geldt $\langle b'_2, f \rangle = M_2 - \frac{1}{3} M_0$, en we vinden

$$\lambda_2 = \frac{45}{8} M_2 - \frac{15}{8} M_0.$$

In de uitdrukking $P(f) = \lambda_0 b'_0 + \lambda_1 b'_1 + \lambda_2 b'_2$ vullen we nu deze waarden van λ_i in, en we substitueren $b'_0 = 1$, $b'_1 = x$ en $b'_2 = x^2 - \frac{1}{3}$. Dit levert

$$P(f) = \left[\frac{9}{8} M_0 - \frac{15}{8} M_2 \right] + \left[\frac{3}{2} M_1 \right] x + \left[\frac{45}{8} M_2 - \frac{15}{8} M_0 \right] x^2.$$

De gezochte coëfficiënten zijn dus

$$a_0 = \frac{9}{8} M_0 - \frac{15}{8} M_2, \quad a_1 = \frac{3}{2} M_1, \quad a_2 = \frac{45}{8} M_2 - \frac{15}{8} M_0.$$

Opgave 1.30. Voor de functie $f(x) = \sqrt{|x|}$ op het interval $[-1, 1]$.

- Vind het tweedegraads polynoom $p_2(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2$ dat de functie f het best benadert op het interval $[-1, 1]$, in de zin dat de afstand $\Delta = \|f - p_2\|$ tot f minimaal is.
- Bereken $\|p_2\|^2$ en $\|f\|^2$.
- Het verschil $f - p_2$ staat loodrecht op de projectie p_2 . Gebruik de Stelling van Pythagoras (Stelling 1.19) om $\Delta = \|f - p_2\|$ te berekenen.

Opgave 1.31. Als $f: [0, 1] \rightarrow \mathbb{C}$ gegeven is door $f(x) = e^x$, en $g: [0, 1] \rightarrow \mathbb{C}$ door $g(x) = e^{-x}$, voor welk getal a is dan de afstand $\|f - ag\|$ minimaal? (De lengte is met betrekking tot het inproduct $\langle \psi, \psi' \rangle = \int_0^1 \overline{\psi(x)} \psi'(x) dx$ op de vectorruimte $\mathcal{L}^2([0, 1])$.)

Opgave 1.32 (Legendrepolynomen). Voor een gegeven functie $f: [-1, 1] \rightarrow \mathbb{C}$, vind het derdegraads polynoom $p_3(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3$ dat de functie f het best benadert, in de zin dat de kwadratische fout

$$\|f - p_3\|^2 = \int_{-1}^1 |f(x) - p_3(x)|^2 dx$$

minimaal is. Druk je antwoord uit in de *momenten* $M_k = \int_{-1}^1 x^k f(x) dx$ van f .

- We werken in $\mathcal{L}^2([-1, 1])$. Bereken de inproducten tussen $b_0 = 1$, $b_1 = x$, $b_2 = x^2$ en $b_3 = x^3$. Orthogonaliseer dit stelsel, en geef een orthogonale basis $b'_0, \dots, b'_3$ van de deelruimte $W = \{a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3; a_i \in \mathbb{R}\}$.
- Geef de basiscoëfficiënten ten opzichte van $b'_0, \dots, b'_3$ voor de projectie $P(f) = \lambda_0 b'_0 + \dots + \lambda_3 b'_3$ van f op W . (Druk uit in de momenten M_k .)
- Druk $b'_0, \dots, b'_3$ uit in $b_0, \dots, b_3$, en vind de basiscoëfficiënten $a_0, \dots, a_3$ van $P(f)$ ten opzichte van de (niet-orthogonale) basis $b_0, \dots, b_3$. Druk $a_0, \dots, a_3$ uit in M_0, M_1, M_2 en M_3 .
- Stel $f(x) = 3 + 15x^2$, wat zou dan $a_0, \dots, a_3$ moeten zijn? Bereken de momenten $M_0, \dots, M_3$ van f , en controleer je uitdrukking voor $a_0, \dots, a_3$.

Op deze manier kunnen we voor willekeurig grote N de projectie $P_N(f) = a_0 + \dots + a_N x^N$ berekenen die f het best benadert op het interval $[-1, 1]$. Het is duidelijk dat de benadering $P_{N+1}(f)$ van f door een polynoom van graad $N+1$ minstens zo goed is als de benadering $P_N(f)$ door een polynoom van graad N ,

$$\|P_{N+1}(f) - f\| \leq \|P_N(f) - f\|.$$

Je hebt immers meer polynomen tot je beschikking om f mee te benaderen, of, anders gezegd, je bekijkt de afstand van f tot een grotere deelruimte. Een voor de hand liggend vraag is of

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|P_N(f) - f\| = 0 \tag{39}$$

geldt. Met andere woorden: kun je een functie f *willekeurig goed* benaderen door polynomen van afdoende hoge graad N te kiezen?

Dat het antwoord ja is, volgt uit de volgende stelling. Ze geldt zowel voor rijen functies $b_0, b_1, b_2, b_3, \dots$ als voor tweezijdige rijen $\dots, b_{-2}, b_{-1}, b_0, b_1, b_2, \dots$.

Stelling 1.23. *Stel dat $b_0 = 1$, en dat $b_n: [-1, 1] \rightarrow \mathbb{C}$ continue functies zijn met de volgende eigenschappen:*

- *Het product $f(x) = b_n(x)b_m(x)$ van twee functies is uit te drukken als een eindige lineaire combinatie $f(x) = \sum_{n=-N}^N \lambda_n b_n(x)$.*
- *Voor ieder tweetal verschillende punten x, y in $[-1, 1]$ is er een eindige lineaire combinatie $f(x) = \sum_{n=-N}^N \lambda_n b_n(x)$ met $f(x) \neq f(y)$.*
- *De complex geconjugeerde $\overline{b_n(x)}$ is gelijk aan b_n of b_{-n} .*

Dan geldt

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|P_N(f) - f\| = 0, \tag{40}$$

waar $P_N(f)$ de projectie is van f op de ruimte W_N van functies van de vorm $p(x) = \lambda_{-N} b_{-N}(x) + \dots + \lambda_N b_N(x)$.

Bewijs. Het voert helaas iets te ver om het bewijs hier te geven. Het is een direct gevolg van de *Stelling van Stone-Weierstrass*, zie bijvoorbeeld [1]. $\square$

Deze voorwaarden zijn eenvoudig te controleren voor de functies $b_n(x) = x^n$. Hun product $b_n(x)b_m(x) = x^n x^m$ is gelijk aan $b_{n+m}(x) = x^{n+m}$. Als $x \neq y$, dan is ook $b_1(x) \neq b_1(y)$. En ten slotte geldt $\overline{b_n(x)} = b_n(x)$ omdat $b_n(x) = x^n$ reëel is. We concluderen dat (39) inderdaad geldt.

Opmerking 5. Deze stelling geldt niet alleen voor functies op het interval $[-1, 1]$, maar ook voor kwadratisch integreerbare functies op een gesloten interval $[a, b]$, op een gesloten rechthoek $[a, b]^2$ of blok $[a, b]^3$, en zelfs voor kwadratisch integreerbare functies op de cirkel $\{(x, y); x^2 + y^2 = 1\}$. De verzameling moet wel *gesloten* en *begrensd* zijn; ze geldt bijvoorbeeld *niet* zonder meer voor $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$.

1.4.5 Legendrepolynomen en Hermitepolynomen

In Sectie 1.4.4 hadden we een orthogonale basis nodig van de deelvectorruimte $W_N \subseteq \mathcal{L}^2([-1, 1])$ van polynomen van graad hoogstens N . Die maakten we uit de niet-orthogonale basis $b_k(x) = x^k$ met behulp van de Gram-Schmidt procedure. De orthogonale polynomen b'_n die je zo verkrijgt heten de *Legendrepolynomen*. Men kan laten zien dat ze gegeven worden door de formule van Rodrigues:

$$b'_n(x) = \frac{n!}{(2n)!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n.$$

De projectie $P_N(f)$ van f op de ruimte van polynomen van graad hoogstens N is dus het polynoom

$$P_N(f)(x) = \sum_{n=0}^N \lambda_n b'_n(x), \quad \text{waar} \quad \lambda_n = \frac{\int_{-1}^1 \bar{b}'_n(x) f(x) dx}{\int_{-1}^1 |b'_n(x)|^2 dx}.$$

Vanwege Stelling 1.23 geldt nu

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \|f - \sum_{n=0}^N \lambda_n b'_n\| = 0. \quad (41)$$

Men schrijft hiervoor ook wel $f = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda_n b'_n$, maar we zullen deze notatie hier niet gebruiken.

In de volgende opgave spelen we hetzelfde spelletje voor de vectorruimte $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}, \mu)$, met de gaussische kansdichtheid $\mu(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2}$.

Opgave 1.33 (Hermitepolynomen I). Zij $V = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}, \mu)$ de complexe inproductruimte van functies $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ met $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 e^{-x^2/2} dx < \infty$. Het inproduct op V is gedefiniëerd als

$$\langle f, g \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \bar{f}(x) g(x) e^{-x^2/2} dx.$$

We orthogonaliseren de basispolynomen $b_k(x) = x^k$, dus $b_0 = 1$, $b_1 = x$, $b_2 = x^2$, enzovoorts. De resulterende orthogonale polynomen $h_0 = b'_0$, $h_1 = b'_1$, $h_2 = b'_2 \dots$ heten *Hermitepolynomen*.

- Ga na dat dit inproduct aan I1 en I2 voldoet, en dat $\langle f, f \rangle \geq 0$.
- Bereken de integraal $C_k = \int_{-\infty}^{\infty} x^{2k} e^{-x^2/2} dx$ voor elk natuurlijk getal k . (Hint: laat met partiële integratie zien dat $C_{k+1} = (2k+1)C_k$. Uit $C_0 = \sqrt{2\pi}$ kun je dus C_1 berekenen, dan C_2 , enzovoorts.)
- Laat zien dat $\langle b_m, b_n \rangle = 0$ als $m+n$ oneven is, en $\langle b_m, b_n \rangle = \frac{2^k k!}{(2k)!}$ als $m+n = 2k$ even is. De polynomen b_n zijn dus niet orthogonaal.

- d) Orthogonaliseer de eerste 4 basisvectoren b_0, b_1, b_2 en b_3 , en vind h_0, h_1, h_2 en h_3 .

In de volgende opgave vinden we een expliciete uitdrukking voor de Hermitepolynomen.

Opgave 1.34 (Hermitepolynomen II). Stel we hebben de Hermitepolynomen h_0 t/m h_n berekend. Deze zijn orthogonaal, en $h_k(x) = x^k +$ termen van orde $\leq k-1$. Definieer $H(x) = xh_n(x) - \frac{d}{dx}h_n(x)$. We laten zien dat $H = h_{n+1}$.

- a) Laat zien dat $H(x) = x^{n+1} +$ termen van orde $\leq n$.
- b) Laat zien dat H loodrecht staat op $h_0, \dots, h_n$. Hint: bekijk het inproduct $\langle H, h_m \rangle$ met $m \leq n$, en gebruik partiële integratie in de formule $\langle H, h \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} (xh_n(x) - \frac{d}{dx}h_n(x))h_m(x)e^{-x^2/2}$. Merk op dat $\frac{d}{dx}h_m(x)$ een polynoom van graad $m-1 \leq n-1$ is, en dus loodrecht staat op h_n .
- c) Concludeer dat $H = h_{n+1}$. We hebben dus de recursierelatie

$$h_{n+1}(x) = xh_n(x) - \frac{d}{dx}h_n(x).$$

Definiëer de genererende functie

$$G(s, x) = \sum_{n=0}^{\infty} h_n(x) s^n / n!, \quad (42)$$

en laat zien dat $G(0, x) = 1$ en $\frac{\partial}{\partial s}G(s, x) = (x - \frac{\partial}{\partial x})G(s, x)$.

- d) Controleer dat $G(s, x) = e^{sx - s^2/2}$ een oplossing is.
- e) Bereken $\frac{\partial^n}{\partial s^n}|_{s=0}s^m$ voor $n \neq m$ en voor $n = m$. Kijk nog eens naar (42), en laat zien: $\frac{\partial^n}{\partial s^n}|_{s=0}G(s, x) = h_n(x)$. De functie G heet ‘genererende functie’ omdat haar afgeleiden de Hermitepolynomen genereren.
- f) Laat zien: $h_n(x) = e^{x^2/2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2/2}$.
- g) Laat zien dat $\psi_n(x) = h_n(x)e^{-x^2/4}$ een orthogonaal stelsel is in de vectorruimte $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ met inproduct $\langle \psi, \psi' \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \bar{\psi}(x)\psi'(x)dx$.

2 Fouriertheorie voor periodieke functies

In de Fouriertheorie bekijken we functies $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ die T -periodiek zijn. Dat wil zeggen dat ze invariant zijn onder een verschuiving met T , dus $f(x - T) = f(x)$ voor alle x in $\mathbb{R}$.

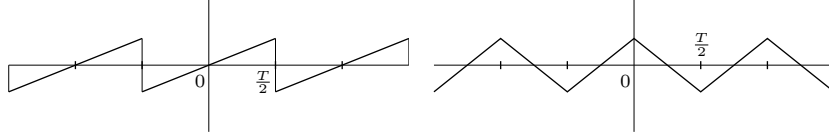


FIG. 9: Voorbeelden van T -periodieke functies. De functie aan de rechterkant is continu, de functie aan de linkerkant is dat niet.

Een T -periodieke functie $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ wordt uniek vastgelegd door haar waarden voor $-T/2 \leq x < T/2$. We kunnen dus aan T -periodieke functies $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ denken als functies $f: [-T/2, T/2) \rightarrow \mathbb{C}$, waarbij de waarden voor $|x| > T/2$ verkregen worden door van x een geschikt veelvoud van T af te trekken.

Als we de variabele $\phi = 2\pi x/T$ opvatten als een *hoek*, dan kunnen we f zien als een functie op de cirkel $S^1 = \{(\cos(\phi), \sin(\phi)); \phi \in \mathbb{R}\}$.

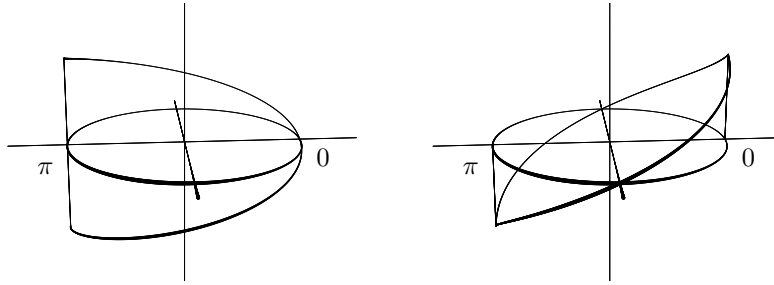


FIG. 10: Dezelfde functies als in figuur 9, maar nu op de cirkel, met $f(\phi)$ uitgezet tegen $\phi = 2\pi x/T$. De functie rechts is continu, de functie links is dat niet.

We werken in de ruimte $\mathcal{L}_T^2(\mathbb{R})$ van T -periodieke functies die kwadratisch integreerbaar zijn op $[-T/2, T/2]$. Daar definiëren we het inproduct

$$\langle f, g \rangle = \int_{-T/2}^{T/2} \overline{f(x)} g(x) dx. \quad (43)$$

Opmerking 6. Omdat f en g allebei T -periodiek zijn, kunnen we dit ook schrijven als $\langle f, g \rangle = \int_0^T \overline{f(x)} g(x) dx$. Ieder ander interval $[x_0, x_0 + T]$ van lengte T is net zo goed.

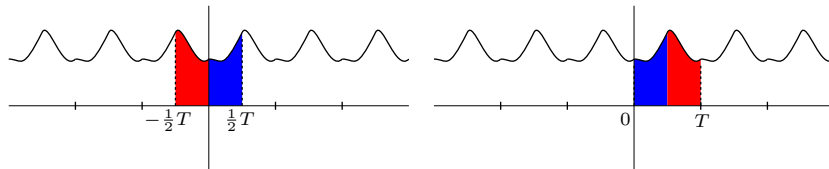


FIG. 11: De integraal van $-T/2$ tot $T/2$ van een periodieke functie is hetzelfde als die van 0 tot T . (Vergelijk de rode en de blauwe vlakken.)

In Fouriertheorie worden T -periodieke functies $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ uitgedrukt in termen van de *Fourierbasis*

$$b_k(x) = e^{2\pi i k x / T}.$$

Dit zijn golven met frequentie k/T . Het getal k doorloopt hierbij de gehele getallen, $k = \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots$. We proberen f zo goed mogelijk te benaderen met lineaire combinaties van de golven $b_k(x) = e^{2\pi i k x / T}$ met $-N \leq k \leq N$. Dit zijn de N -de graads *Fourierpolynomen*

$$p_N(x) = \sum_{k=-N}^N \lambda_k e^{2\pi i k x / T}. \quad (44)$$

We zoeken dus het Fourierpolynoom p_N waarvoor de afstand $\|f - p_N\|$ tot f met betrekking tot het inproduct (43) minimaal is. Met andere woorden, we zoeken de projectie p_N van f op de ruimte $W_N = \{\sum_{k=-N}^N \lambda_k e^{2\pi i k x / T}; \lambda_k \in \mathbb{C}\}$ van Fourierpolynomen van graad hoogstens N .

2.1 De Fouriercoëfficiënten

Als we het inproduct (43) tussen de vectoren b_k en $b_{k'}$ in $\mathcal{L}_T^2(\mathbb{R})$ berekenen, hebben we meer geluk dan bij de polynomen in de vorige sectie; de functies b_k blijken orthogonaal te zijn.

Propositie 2.1. *De functies b_k vormen een orthogonaal stelsel, met*

$$\langle b_k, b_{k'} \rangle = T \delta_{kk'}.$$

Bewijs. Omdat $\bar{b}_k(x) b_{k'}(x) = e^{-2\pi i k x / T} e^{2\pi i k' x / T} = e^{2\pi i (k' - k)x / T}$, vinden we

$$\langle b_k, b_{k'} \rangle = \int_{-T/2}^{T/2} e^{2\pi i (k' - k)x / T} dx.$$

Deze integraal is nul als $k \neq k'$. Er geldt

$$\begin{aligned} \int_{-T/2}^{T/2} e^{2\pi i (k' - k)x / T} dx &= \frac{T}{2\pi i (k' - k)} \left[e^{2\pi i (k' - k)x / T} \right]_{-T/2}^{T/2} \\ &= \frac{T}{2\pi i (k' - k)} \left(e^{i(k' - k)\pi} - e^{-i(k' - k)\pi} \right) = 0, \end{aligned}$$

omdat $e^{i(k' - k)\pi} = e^{-i(k' - k)\pi} = (-1)^{(k' - k)}$. Het geval $k = k'$ is niet moeilijk, we vinden $\langle b_k, b_k \rangle = \int_{-T/2}^{T/2} 1 dx = T$. $\square$

Omdat b_k voor $k = -N, \dots, N$ een orthogonale basis van de ruimte W_N van Fourierpolynomen van graad hoogstens N is, kunnen we Propositie 1.22 gebruiken om de projectie p_N van f op W_N uit te rekenen. We vinden dan

$$p_N = \sum_{k=-N}^N c_k b_k \quad \text{met} \quad c_k = \frac{\langle b_k, f \rangle}{\langle b_k, b_k \rangle}. \quad (45)$$

De basiscoëfficiënten c_k van de projectie p_N voor de Fourierbasis $b_k(x) = e^{2\pi i k x / T}$ heten de *Fouriercoëfficiënten* van f . We schrijven hier c_k in plaats van λ_k voor deze basiscoëfficiënten. Dit is de gebruikelijke notatie, hoewel ook $\hat{f}_k$ vaak voorkomt. We zagen reeds dat $\langle b_k, b_k \rangle = T$, en met $b_k(x) = e^{2\pi i k x / T}$ vinden we $\langle b_k, f \rangle = \int_{-T/2}^{T/2} f(x) e^{-2\pi i k x / T} dx$. Vullen we dit in in (45), dan vinden we de volgende uitdrukking voor de projectie p_N van f op W_N .

Stelling 2.2 (Fouriercoëfficiënten). *Het Fourierpolynoom van graad N dat f het best benadert, in de zin dat de afstand $\|f - p_N\|$ van p_N tot f minimaal is, wordt gegeven door*

$$p_N(x) = \sum_{k=-N}^N c_k e^{2\pi i k x / T} \quad \text{met} \quad c_k = \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} f(x) e^{-2\pi i k x / T} dx. \quad (46)$$

Het blijkt dat we de functie f zelfs *willekeurig goed* kunnen benaderen door Fourierpolynomen p_N van afdoende hoge graad N . De volgende stelling zegt dat de gemiddelde kwadratische fout

$$\Delta^2 = \|f - p_N\|^2 = \int_{-T/2}^{T/2} |f(x) - p_N(x)|^2 dx$$

willekeurig klein gemaakt kan worden, door N maar afdoende groot te kiezen.

Stelling 2.3. *Stel $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ is een T -periodieke functie die kwadratisch integreerbaar is op $[-T/2, T/2]$. Dan geldt*

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \|f - p_N\| = 0.$$

Bewijs. Dit volgt uit Stelling 1.23. We hoeven slechts te controleren dat de producten $b_k(x)b_{k'}(x) = e^{2\pi i k x / T} e^{2\pi i k' x / T}$ en geconjugeerden $\bar{b}_k(x)$ weer Fourierpolynomen zijn. Dit klopt; we hebben $b_k(x)b_{k'}(x) = e^{2\pi i (k+k')x / T} = b_{k+k'}(x)$ en $\bar{b}_k(x) = e^{-2\pi i k x / T} = b_{-k}(x)$. Ten slotte is $b_1(x) = e^{2\pi i x / T}$ ongelijk aan $b_1(y) = e^{2\pi i y / T}$ als $x \neq y$. Het resultaat volgt dus uit Stelling 1.23, waar we het interval $[-1, 1]$ vervangen door de cirkel S^1 (cf. Opmerking 5). $\square$

We berekenen de Fouriercoëfficiënten c_k van de linker functie in figuur 9. Deze functie wordt gegeven door de formule

$$f(x) = 2x/T \quad \text{voor} \quad x \text{ in } [-T/2, T/2]. \quad (47)$$

Met formule (46) hebben we dus $c_0 = \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} (2/T)x dx = 0$. Met partiële integratie zien we vervolgens dat

$$\begin{aligned} c_k &= \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} (2/T)x e^{-2\pi i k x / T} dx = \frac{2}{T^2} \int_{-T/2}^{T/2} x \frac{d}{dx} \left(\frac{-T}{2\pi i k} e^{-2\pi i k x / T} \right) dx \\ &= \frac{2}{T^2} \left[\frac{-Tx}{2\pi i k} e^{-2\pi i k x / T} \right]_{-T/2}^{T/2} - \frac{2}{T^2} \int_{-T/2}^{T/2} \frac{-T}{2\pi i k} e^{-2\pi i k x / T} dx \\ &= \frac{2}{T^2} \left[\frac{-Tx}{2\pi i k} e^{-2\pi i k x / T} \right]_{-T/2}^{T/2} - \frac{2}{T^2} \left[\left(\frac{-T}{2\pi i k} \right)^2 e^{-2\pi i k x / T} \right]_{-T/2}^{T/2}. \end{aligned}$$

De rechterterm is nul omdat $e^{-2\pi i k x / T}$ een T -periodieke functie is. Om de linkerterm te berekenen, gebruiken we dat $e^{-\pi i k} = e^{\pi i k} = (-1)^k$. We vinden dan

$$c_k = \frac{2}{T^2} \left(\frac{-T^2/2}{2\pi i k} (-1)^k - \frac{T^2/2}{2\pi i k} (-1)^k \right),$$

en dus

$$c_k = \frac{(-1)^{k+1}}{\pi i k}. \quad (48)$$

Omdat $c_0 = 0$ wordt het Fourierpolynoom p_N met de kleinste afstand tot de functie $f(x) = 2x/T$ van formule (47) dus

$$\begin{aligned} p_N(x) &= \sum_{k=1}^N \frac{(-1)^{k+1}}{\pi i k} e^{2\pi i k x/T} + \sum_{k=-1}^{-N} \frac{(-1)^{k+1}}{\pi i k} e^{2\pi i k x/T} \\ &= \sum_{k=1}^N \frac{(-1)^{k+1}}{\pi i k} (e^{2\pi i k x/T} - e^{-2\pi i k x/T}) \\ &= \sum_{k=1}^N \frac{2(-1)^{k+1}}{\pi k} \sin(2\pi k x/T). \end{aligned} \quad (49)$$

Merk op dat p_N net als f een oneven functie is met reële waarden. Dit is algemeen zo: als f even, oneven of reëel is, dan erft p_N die eigenschap.

Opgave 2.1. Teken de grafiek van de volgende 2π -periodieke functies (teken minstens twee perioden) en bereken hun Fouriercoëfficiënten.

a)

$$f(x) = \begin{cases} 0 & \text{als } -\pi \leq x \leq 0 \\ x & \text{als } 0 \leq x < \pi \end{cases}$$

b)

$$f(x) = \begin{cases} 2 & \text{als } -\pi \leq x < 0 \\ 3 & \text{als } 0 < x < \pi \end{cases}$$

2.2 Stelling van Parseval

De Stelling van Pythagoras geeft nu de volgende vergelijking voor de kwadratische *integraal* van f en de kwadratische *som* van haar Fouriercoëfficiënten.

Stelling 2.4 (Parseval). *Voor T -periodieke functies $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ die kwadratisch integreerbaar zijn op $[-T/2, T/2]$, geldt*

$$\frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} |f(x)|^2 dx = \sum_{k=-\infty}^{\infty} |c_k|^2. \quad (50)$$

Bewijs. Omdat p_N de functie f willekeurig goed benadert, is de kwadratische lengte $\|p_N\|^2$ een goede benadering van $\|f\|^2$. We berekenen dus $\|p_N\|^2$ voor de projectie $p_N = \sum_{k=-N}^N c_k b_k$. Omdat de b_k orthogonaal zijn met $\|b_k\|^2 = T$, volgt uit de Stelling van Pythagoras (Stelling 1.19) dat

$$\|p_N\|^2 = \sum_{k=-N}^N \|c_k b_k\|^2 = T \sum_{k=-N}^N \|c_k\|^2. \quad (51)$$

Omdat $f = p_N + (f - p_N)$ met $(f - p_N) \perp p_N$, geldt, wederom met Pythagoras,

$$\|f\|^2 = \|p_N\|^2 + \|f - p_N\|^2.$$

Ten slotte merken we op dat $\lim_{N \rightarrow \infty} \|f - p_N\| = 0$ (Stelling 2.3), zodat $\|f\|^2 = \lim_{N \rightarrow \infty} \|p_N\|^2$. Met (51) vinden we dus $\|f\|^2 = T \sum_{k=-\infty}^{\infty} |c_k|^2$. Dit is equivalent met Formule (50). $\square$

Passen we dit toe op de T -periodieke functie $f(x) = 2x/T$ van formule (47), dan vinden we voor de linkerkant van (50) dat

$$\frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} |f(x)|^2 dx = \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} (2/T)^2 x^2 dx = \frac{4}{T^3} \left[\frac{1}{3} x^3 \right]_{-T/2}^{T/2} = \frac{1}{3}.$$

Voor de rechterkant van (50) merken we op dat vanwege formule (48) $c_0 = 0$, en $|c_k|^2 = \frac{1}{\pi^2 k^2}$ voor $k = 1, 2, \dots$ en voor $k = -1, -2, \dots$. We vinden dus

$$\sum_{k=-N}^N |c_k|^2 = 2 \sum_{k=1}^N |c_k|^2 = \frac{2}{\pi^2} \sum_{k=1}^N \frac{1}{k^2}.$$

Formule (47) geeft dus $\frac{1}{3} = \frac{2}{\pi^2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^2}$. Kennelijk is de som $\sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^2}$ dus gelijk aan $\frac{\pi^2}{6}$,

$$1 + \frac{1}{4} + \frac{1}{9} + \frac{1}{16} + \frac{1}{25} + \dots = \frac{\pi^2}{6}.$$

Deze pittoreske formule is ontdekt door Leonhard Euler in 1735. Hij deed dit zonder gebruik te maken van Fouriertheorie, om de eenvoudige reden dat die op dat moment nog niet bestond.

Opgave 2.2. Zij a een reëel getal ongelijk aan nul.

- Bepaal de Fouriercoëfficiënten c_k van de 2π -periodieke functie f gegeven door $f(x) = e^{ax}$ als $-\pi \leq x < \pi$.
- Pas de Stelling van Parseval toe op deze functie, en bereken zo de oneindige som

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{a^2 + k^2}.$$

2.3 Eigenschappen van de Fouriercoëfficiënten

De eigenschappen van de Fouriercoëfficiënten c_k reflecteren het gedrag van de functie f . Een functie $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ heet *even* als $f(-x) = f(x)$ voor alle x , en *oneven* als $f(-x) = -f(x)$. Even functies zijn reflectiesymmetrisch in de y -as, en oneven functies zijn puntsymmetrisch in de oorsprong.

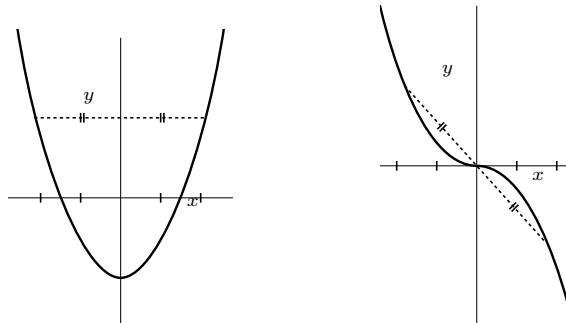


FIG. 12: Grafiek van een even (links) en oneven (rechts) functie.

Propositie 2.5. Voor de Fouriercoëfficiënten c_k van een T -periodieke functie f geldt:

- Als $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ even is, dan is $c_{-k} = c_k$.
- Als $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ oneven is, dan is $c_{-k} = -c_k$.
- Als $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ reëel is, dan is $c_{-k} = \overline{c_k}$.

Bewijs. Met de substitutie $u = -x$ zien we, dat

$$c_{-k} = \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} f(x) e^{2\pi i k x / T} dx = \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} f(-u) e^{-2\pi i k u / T} du.$$

Als f even is, dan is $f(-u) = f(u)$, en

$$c_{-k} = \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} f(u) e^{-2\pi i k u / T} du = c_k.$$

Is echter f oneven, dan geldt $f(-u) = -f(u)$, en dus

$$c_{-k} = \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} -f(u) e^{-2\pi i k u / T} du = -c_k.$$

Als $f(x)$ reëel is voor elke x , dan is $\overline{f(x)} = f(x)$, en dus

$$\overline{c_k} = \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} \overline{f(x) e^{-2\pi i k x / T}} dx = \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} f(x) e^{2\pi i k x / T} dx = c_{-k}.$$

Voor reële functies geldt dus $c_{-k} = \overline{c_k}$. □

Opgave 2.3. Welke van de drie eigenschappen uit Propositie 2.5 heeft de T -periodieke functie met $f(x) = 2x/T$ voor $|x| < T/2$ en $f(T/2) = f(-T/2) = 0$? Wat betekent dit voor haar Fouriercoëfficiënten $c_k = \frac{(-1)^{k+1}}{\pi i k}$? Controleer dit.

Opgave 2.4. Laat zien dat de projectie $p_N = \sum_{k=-N}^N c_k e^{2\pi i k x / T}$ van f op W_N even, oneven, of reëel is als f deze eigenschap heeft.

Opgave 2.5. Stel $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ is een reële, T -periodieke functie. Laat zien dat de coëfficiënten c_k reëel zijn als f even is, en zuiver imaginair als f oneven is.

Opgave 2.6. Wat zijn de Fouriercoëfficiënten c_k van de 2π -periodieke functie $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ gegeven door $f(x) = \sin(x)$?

Opgave 2.7. De functie $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ met periode 2 is gegeven door $f(x) = -1$ voor $-1 < x < 0$, $f(x) = 1$ voor $0 < x < 1$ en $f(0) = f(1) = 0$.

- a) Schets de functie f (teken minstens twee perioden). Is f even, oneven en/of reëel? Wat betekent dit voor de Fouriercoëfficiënten c_k ?
- b) Bereken de Fouriercoëfficiënten c_k van f .

Opgave 2.8. Schets de functie $h: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ met periode 2, die gegeven wordt door $h(x) = 0$ voor $-1 < x < 0$, $h(x) = 2$ voor $0 < x < 1$ en $h(0) = h(1) = 1$.

- a) Stel je weet voor twee functies f en g de Fouriercoëfficiënten c_k en c'_k . Wat zijn dan de Fouriercoëfficiënten c''_k van de functie $h = f + g$?
- b) Wat zijn de Fouriercoëfficiënten van de functie h hierboven? (Hint: gebruik de functie f van Opgave 2.7.)

Propositie 2.6. *Stel dat $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ een T -periodieke functie is die overal op $\mathbb{R}$ differentieerbaar is, met continue afgeleide f' . Als c_k de Fouriercoëfficiënten van f zijn, dan zijn de Fouriercoëfficiënten van f' gelijk aan*

$$c'_k = \frac{2\pi i k}{T} c_k$$

Bewijs. Met partiële integratie zien we dat

$$\begin{aligned} c'_k &= \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} \left(\frac{d}{dx} f(x) \right) e^{-2\pi i k x / T} dx \\ &= \frac{1}{T} [f e^{-i k x}]_{-T/2}^{T/2} - \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} f(x) \frac{d}{dx} e^{-2\pi i k x / T} dx. \end{aligned}$$

Omdat $f(x)e^{-2\pi i k x / T}$ een T -periodieke functie is, is $[f(x)e^{-2\pi i k x / T}]_{-T/2}^{T/2} = 0$. Verder is $\frac{d}{dx} e^{-2\pi i k x / T} = -\frac{2\pi i k}{T} e^{-2\pi i k x / T}$, dus

$$c'_k = \frac{2\pi i k}{T^2} \int_{-T/2}^{T/2} f(x) e^{-2\pi i k x / T} dx = \frac{2\pi i k}{T} c_k.$$

□

Representeren we een functie f door haar Fouriercoëfficiënten c_k , dan is het nemen van de afgeleide dus een relatief eenvoudige operatie: je vermenigvuldigt elke c_k het getal $\frac{2\pi i k}{T}$.

2.4 Benadering met goniometrische functies

We kunnen T -periodieke functies $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ ook benaderen met goniometrische functies. We kiezen dan als basis voor de ruimte W_N van Fourierpolynomen van graad N niet de $2N + 1$ functies $b_k(x) = e^{2\pi i k x / T}$, maar de *goniometrische basis*, die bestaat uit de $2N + 1$ functies

$$C_0 = \frac{1}{2}, \quad C_k(x) = \cos(2\pi k x / T), \quad S_k(x) = \sin(2\pi k x / T) \quad \text{voor } k = 1, \dots, N.$$

We drukken de Fourierbasis b_k uit in C_k en S_k met behulp van de formule

$$e^{\pm 2\pi i k x / T} = \cos(2\pi k x / T) \pm i \sin(2\pi k x / T).$$

We vinden dan $b_0 = 2C_0$, $b_k = C_k + iS_k$ en $b_{-k} = C_k - iS_k$ voor $k = 1, \dots, N$. Het Fourierpolynoom $p_N(x) = \sum_{k=-N}^N c_k b_k(x)$ kunnen we dus ook schrijven als

$$\begin{aligned} p_N &= c_0 b_0 + \sum_{k=1}^N c_k b_k + c_{-k} b_{-k} \\ &= 2c_0 C_0 + \sum_{k=1}^N c_k (C_k + iS_k) + c_{-k} (C_k - iS_k) \\ &= 2c_0 C_0 + \sum_{k=1}^N (c_k + c_{-k}) C_k + \sum_{k=1}^N i(c_k - c_{-k}) S_k. \end{aligned}$$

Definiëren we $a_0 = 2c_0$, $a_k = c_k + c_{-k}$ en $b_k = i(c_k - c_{-k})$, dan vinden we

$$p_N(x) = \frac{1}{2} a_0 + \sum_{k=1}^N a_k \cos(2\pi kx/T) + \sum_{k=1}^N b_k \sin(2\pi kx/T), \quad (52)$$

met de constanten

$$\begin{aligned} a_k &= \frac{2}{T} \int_{-T/2}^{T/2} f(x) \cos(2\pi kx/T) dx, \\ b_k &= \frac{2}{T} \int_{-T/2}^{T/2} f(x) \sin(2\pi kx/T) dx. \end{aligned} \quad (53)$$

Opgave 2.9. Leid de formule (53) voor a_k en b_k af uit $a_0 = 2c_0$, $a_k = c_k + c_{-k}$ en $b_k = i(c_k - c_{-k})$. Een alternatieve afleiding is als volgt.

- Laat zien dat de functies C_0 en C_k en S_k voor $k = 1, \dots, N$ een orthogonale basis van W_N vormen. Bereken de kwadratische lengtes $\|C_k\|^2$ en $\|S_k\|^2$.
- Gebruik Propositie 1.22 om de coëfficiënten a_k en b_k van de projectie p_N van f op W_N te vinden.

Opgave 2.10. De 2π -periodieke functie $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ is gegeven door de formule $f(x) = \frac{1}{2}(e^x - e^{-x})$ voor $-\pi < x < \pi$, en $f(x) = 0$ voor $x = \pi$.

- Schets de grafiek van deze functie (teken minstens twee perioden). Is f even, oneven en/of reëel? Wat kun je hieruit afleiden over de Fouriercoëfficiënten c_k ?
- Bereken deze coëfficiënten c_k . Schrijf de Fourierreeks $p_N(x)$ in termen van $S_k(x) = \sin(kx)$, $C_k(x) = \cos(kx)$ en de constante functie $\frac{1}{2}$.

Opgave 2.11. De 2π -periodieke functie $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ is gegeven door de formule $f(x) = \frac{1}{2}(e^x + e^{-x})$ voor $-\pi \leq x \leq \pi$.

- Schets de grafiek van deze functie (teken minstens twee perioden). Is f even, oneven en/of reëel? Wat kun je hieruit afleiden over de Fouriercoëfficiënten c_k ?
- Bereken deze coëfficiënten c_k . Schrijf de Fourierreeks $p_N(x)$ in termen van $S_k(x) = \sin(kx)$, $C_k(x) = \cos(kx)$ en de constante functie $\frac{1}{2}$.

Opgave 2.12. We bekijken de 2π -periodieke functie die gegeven is door $f(x) = |\sin x|$ voor x in $\mathbb{R}$.

- Teken de grafiek van f (minstens twee perioden). Is f even, oneven en/of reëel? Wat betekent dit voor de coëfficiënten a_k en b_k van p_N ten opzichte van de goniometrische basis die bestaat uit $C_k(x) = \cos(kx)$, $S_k(x) = \sin(kx)$ en de constante functie $\frac{1}{2}$?
- Bereken de coëfficiënten a_k en b_k in de reeks $f(x) = \frac{1}{2}a_0 + \sum_{k=1}^{\infty} a_k \cos(kx) + \sum_{k=1}^{\infty} b_k \sin(kx)$.
Hint: laat zien dat $\sin(x) \cos(kx) = \frac{1}{2}(\sin((k+1)x) - \sin((k-1)x))$.

2.5 Convergentie van de Fourierreeks

Stelling 2.3 zegt dat we de *gemiddelde* kwadratische fout $\int_{-\pi}^{\pi} |f(x) - p_N(x)|^2 dx$ willekeurig klein kunnen maken door N maar groot genoeg te nemen. Je kunt je afvragen of de fout $|f(x) - p_N(x)|$ ook klein wordt *voor ieder punt* x . Dit blijkt inderdaad het geval te zijn voor de waarden van x waar f continu en differentieerbaar is.

Stelling 2.7. *Stel dat een T -periodieke functie $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ integreerbaar is op $[-T/2, T/2]$, en continu en differentieerbaar in x . Dan geldt*

$$f(x) = \lim_{N \rightarrow \infty} p_N(x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{k=-N}^N c_k e^{2\pi i k x / T}.$$

Bewijs. We geven het bewijs hier niet; de geïnteresseerde lezer kan ik het uiterst leesbare boekje [2] aanraden. $\square$

Er bestaat zelfs een versie van deze stelling voor functies die niet continu zijn in x . We schrijven $f(x_-) = \lim_{t \uparrow x} f(t)$ voor de limiet van $f(t)$ als t van links nadert tot x , en $f(x_+) = \lim_{t \downarrow x} f(t)$ voor de limiet als t van rechts nadert tot x . Het gemiddelde van deze twee limieten is $\frac{1}{2}(f(x_-) + f(x_+))$.

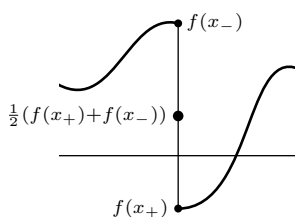


FIG. 13: Als een functie niet continu is, convergeert de Fourierreeks niet naar $f(x_-)$ of $f(x_+)$, maar naar $\frac{1}{2}(f(x_+) + f(x_-))$.

Als f niet continu is in x , maar wel een linkerlimiet $f(x_-)$ en een rechterlimiet $f(x_+)$ heeft, dan kiest de Fourierreeks de gulden middenweg. Hij convergeert dan naar het gemiddelde $\frac{1}{2}(f(x_-) + f(x_+))$.

Hiervoor is wel nodig dat niet alleen de limieten $f(x_-) = \lim_{t \uparrow x} f(t)$ en $f(x_+) = \lim_{t \downarrow x} f(t)$ bestaan, maar ook de *linksafgeleide* $f'(x_-) = \lim_{t \uparrow x} \frac{f(t) - f(x)}{t - x}$ en de *rechtsafgeleide* $f'(x_+) = \lim_{t \downarrow x} \frac{f(t) - f(x)}{t - x}$. Dit betekent dat je zowel naar links als naar rechts een halve raaklijn kunt trekken.

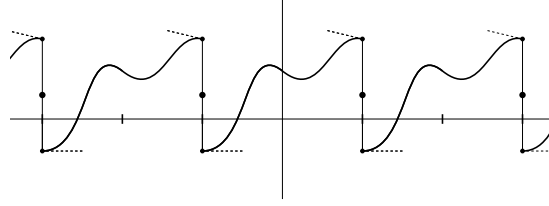


FIG. 14: Deze functie is niet continu, en dus zeker niet differentieerbaar. Wel heeft zij links- en rechtsafgeleiden.

Stelling 2.8. *Stel dat $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ een T -periodieke functie is, integreerbaar op $[-T/2, T/2]$. Stel dat de linker- en de rechterlimiet $f(x_-)$ en $f(x_+)$ bestaan, en dat f zowel links- als rechtsdifferentieerbaar is. Dan geldt*

$$\frac{1}{2}(f(x_-) + f(x_+)) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{k=-N}^N c_k e^{2\pi i k x / T}.$$

Bewijs. Het bewijs van deze stelling is te vinden in [2]. □

Kijk nog eens naar de linker functie f in figuur (9). Als het getal x in het interval $(-T/2, T/2)$ ligt, wordt $f(x)$ gegeven door de alleszins respectabele formule $f(x) = 2x/T$. Voor x met $|x| < T/2$ is f dus continu en differentieerbaar, zodat $\lim_{N \rightarrow \infty} p_N(x) = f(x)$ zoals verwacht. Met formule (49) vinden we

$$\frac{2}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}}{k} \sin(2\pi k x / T) = 2x/T \quad (54)$$

voor alle x met $|x| < T/2$.

Opgave 2.13. Wat geeft de bovenstaande formule voor $x = T/4$? Bereken de oneindige som $1 - \frac{1}{3} + \frac{1}{5} - \frac{1}{7} + \frac{1}{9} - \frac{1}{11} + \dots$

Voor $x = T/2$ is f niet continu, en er geldt dan ook *niet*

$$\frac{2}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}}{k} \sin(\pi k) = 1 \quad (\text{fout}),$$

zoals je zou krijgen door $x = T/2$ in te vullen in (54). We gaan te rade bij Stelling 2.8, die ons vertelt dat de juiste uitkomst 0 is. De functie f is immers links- en rechtsdifferentieerbaar, met $\lim_{t \uparrow T/2} f(x) = 1$ en $\lim_{t \downarrow T/2} f(x) = -1$. De Fourierreeks convergeert dus naar $\lim_{N \rightarrow \infty} p_N(T/2) = \frac{1}{2}(1 - 1) = 0$. Inderdaad is $\sin(\pi k)$ gelijk aan nul voor alle N , zodat

$$\frac{2}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}}{k} \sin(\pi k) = 0.$$

3 Lineaire differentiaalvergelijkingen

De moeder aller differentiaalvergelijkingen is de *lineaire, homogene* differentiaalvergelijking in één variabele,

$$\frac{d}{dt}x(t) = ax(t) \quad (55)$$

met beginvoorwaarde $x(0) = x_0$. De oplossing is snel gevonden:

$$x(t) = x_0 e^{at}$$

voldoet aan $x(0) = x_0$ en $\frac{d}{dt}x(t) = ax_0 e^{at} = ax(t)$.

3.1 Lineaire differentiaalvergelijkingen in meer variabelen

Een *lineaire, homogene* differentiaalvergelijking in de n variabelen¹ $x_1, \dots, x_n$ is een stelsel vergelijkingen van de vorm

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}x_1(t) &= a_{11}x_1(t) + a_{12}x_2(t) + \dots + a_{1n}x_n(t) \\ \frac{d}{dt}x_2(t) &= a_{21}x_1(t) + a_{22}x_2(t) + \dots + a_{2n}x_n(t) \\ &\vdots \\ \frac{d}{dt}x_n(t) &= a_{n1}x_1(t) + a_{n2}x_2(t) + \dots + a_{nn}x_n(t). \end{aligned}$$

De oplossing wordt eenduidig vastgelegd door de *beginvoorwaarden* $x_1(0) = x_1^0$, $x_2(0) = x_2^0$, $\dots$, $x_n(0) = x_n^0$. Met behulp van vectoren en matrices schrijven we dit als

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \\ \vdots \\ x_n(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \\ a_{n1} & & & a_{nn} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \\ \vdots \\ x_n(t) \end{pmatrix} \text{ met } \begin{pmatrix} x_1(0) \\ x_2(0) \\ \vdots \\ x_n(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1^0 \\ x_2^0 \\ \vdots \\ x_n^0 \end{pmatrix}.$$

Met andere woorden, we zoeken de oplossingen van de differentiaalvergelijking

$$\frac{d}{dt}\vec{v}(t) = A \cdot \vec{v}(t), \quad \vec{v}(0) = \vec{v}_0, \quad (56)$$

waar $\vec{v}(t)$ de tijdsafhankelijke vector $\vec{v}(t) = (x_1(t), \dots, x_n(t))$ in $\mathbb{C}^n$ is, $\vec{v}_0 = (x_1^0, \dots, x_n^0)$ de vector van beginvoorwaarden, en A de $n \times n$ -matrix met coëfficiënten a_{ij} .

Deze vergelijking heet *lineair* omdat zij de optelling en scalaire vermenigvuldiging op $\mathbb{C}^n$ respecteert. Lineaire combinaties van oplossingen zijn weer oplossingen: als $\vec{u}(t)$ en $\vec{v}(t)$ voldoen aan (56), dan voldoet ook hun som $\vec{w}(t) = \vec{u}(t) + \vec{v}(t)$ en de veelvoud $\vec{w}(t) = \lambda \vec{v}(t)$ voor alle λ in $\mathbb{C}$.

Propositie 3.1. *Stel dat $\vec{u}(t)$ en $\vec{v}(t)$ oplossingen zijn van (56), met beginvoorwaarden $\vec{u}_0$ en $\vec{v}_0$. Dan zijn ook $\vec{w}(t) = \vec{u}(t) + \vec{v}(t)$ en $\vec{w}(t) = \lambda \vec{v}(t)$ oplossingen, met beginvoorwaarden respectievelijk $\vec{w}_0 = \vec{u}_0 + \vec{v}_0$ en $\vec{w}_0 = \lambda \vec{v}_0$.*

¹Deze kunnen natuurlijk niet zo goed genummerd worden als $x_0, \dots, x_{n-1}$, zoals we voorheen gedaan hebben. We wisselen hier van nummering om bij de matrixnotatie aan te sluiten.

Bewijs. Voor de som $\vec{w}(t) = \vec{u}(t) + \vec{v}(t)$ hebben we

$$\frac{d}{dt}\vec{w}(t) = \frac{d}{dt}\vec{u}(t) + \frac{d}{dt}\vec{v}(t) = A \cdot \vec{u}(t) + A \cdot \vec{v}(t) = A(\vec{u}(t) + \vec{v}(t)) = A\vec{w}(t),$$

en voor het veelvoud $\vec{w}(t) = \lambda\vec{v}(t)$ geldt

$$\frac{d}{dt}\vec{w}(t) = \frac{d}{dt}\lambda\vec{v}(t) = \lambda\frac{d}{dt}\vec{v}(t) = \lambda A \cdot \vec{v}(t) = A \cdot (\lambda\vec{v}(t)) = A \cdot \vec{w}(t).$$

Beide zijn dus oplossingen. De beginvoorwaarden vind je door $t = 0$ in te vullen. $\square$

3.2 Lineaire afbeeldingen en differentiaalvergelijkingen

Merk op dat deze berekening goed gaat omdat de afbeelding $L: \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}^n$ die $\vec{v}$ naar $L(\vec{v}) = A \cdot \vec{v}$ stuurt *lineair* is,

$$\begin{aligned} A(\vec{u} + \vec{v}) &= A \cdot \vec{u} + A \cdot \vec{v} \\ A(\lambda\vec{v}) &= \lambda A \cdot \vec{v}. \end{aligned}$$

Algemener noemen we een afbeelding $L: V \rightarrow W$ van een vectorruimte V naar een vectorruimte W *lineair* als zij optelling en scalaire vermenigvuldiging respecteert,

$$\begin{aligned} L(\vec{u} + \vec{v}) &= L(\vec{u}) + L(\vec{v}) \\ L(\lambda\vec{v}) &= \lambda L(\vec{v}) \end{aligned}$$

voor alle $\vec{u}, \vec{v}$ in V . Het getal λ mag complex zijn als V en W complexe vectorruimten zijn.

Een lineaire afbeelding $L: V \rightarrow V$ van een inproductruimte naar zichzelf heet ook wel een *lineaire operator*. Als $L: V \rightarrow V$ een lineaire operator is, dan is

$$\frac{d}{dt}\vec{v}(t) = L(\vec{v}(t)), \quad \vec{v}(0) = \vec{v}_0 \quad (57)$$

een lineaire differentiaalvergelijking, met als variabele de tijdsafhankelijke vector $\vec{v}(t)$ in V . Omdat L *lineair* is, geldt dit ook voor deze differentiaalvergelijking; als $\vec{u}(t)$ en $\vec{v}(t)$ oplossingen zijn met $\vec{u}(0) = \vec{u}_0$ en $\vec{v}_0 = \vec{v}_0$, dan zijn $\vec{w}(t) = \vec{u}(t) + \vec{v}(t)$ en $\vec{w}(t) = \lambda\vec{v}(t)$ wederom oplossingen, met beginvoorwaarden $\vec{w}_0 = \vec{u}_0 + \vec{v}_0$ en $\vec{w}_0 = \lambda\vec{v}_0$.

Voor de vectorruimte $V = \mathbb{C}^n$ vinden we zo de differentiaalvergelijking (56) terug: een $n \times n$ -matrix A geeft een lineaire operator $L: \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}^n$ door middel van $L(\vec{v}) = A \cdot \vec{v}$, zodat $\frac{d}{dt}\vec{v}(t) = L(\vec{v}(t))$ reduceert tot $\frac{d}{dt}\vec{v}(t) = A \cdot \vec{v}(t)$.

3.2.1 De tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking

Er zijn echter veel meer differentiaalvergelijkingen die in het schema (57) passen. Een voorbeeld is de *tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking*

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_t(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \psi_t(x), \quad \psi(x)|_{t=0} = \psi_0(x). \quad (58)$$

Deze PDE (Partial Differential Equation) beschrijft de ontwikkeling van de golf-functie $\psi_t(x)$ in de tijd, als de golf-functie op $t = 0$ gegeven wordt door de beginvoorwaarde $\psi_0(x)$.

Merk op dat de rechterkant van de vergelijking geen tijdsafgeleiden bevat. We vatten $\psi_t(x)$ daarom op als een tijdsafhankelijke *vector* ψ_t in de vectorruimte V van gladde, kwadratisch integreerbare functies $\psi: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ van één variabele x . De tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking wordt dan

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi_t = H(\psi_t), \quad (59)$$

waar de operator $H: V \rightarrow V$ de *Hamiltonoperator* is,

$$H(\psi) := \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \psi.$$

Kort samengevat beschouwen we de functie $\psi_t(x)$ dus als een tijdsafhankelijke vector ψ_t in de ruimte V van functies van één variabele x , en alle bewerkingen die alleen van x afhangen, vatten we op als een lineaire operator $H: V \rightarrow V$.

Opmerking 7. We hebben tot nog toe vooral gewerkt met de vectorruimte $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ van kwadratisch integreerbare functies $\psi: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$. De vectorruimte V van functies $\psi: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ waar H op werkt, is iets kleiner. Dit heeft twee redenen. Ten eerste moet ψ minstens tweemaal differentieerbaar zijn, omdat $\frac{d^2}{dx^2} \psi(x)$ anders niet bestaat. We zullen van functies ψ in V zelfs eisen dat ze *glad* zijn, d.w.z. oneindig vaak differentieerbaar. We kunnen dan ook uitdrukkingen als $H^2(\psi)$ en $H^3(\psi)$ opschrijven, waarvoor hogere orde afgeleiden nodig zijn. De tweede reden is dat zelfs als ψ kwadratisch integreerbaar is, $V(x)\psi(x)$ dat nog niet hoeft te zijn. Neem bijvoorbeeld $\psi(x) = (1+x^2)^{-1}$ en $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$. Voor V nemen we daarom de ruimte van functies $\psi: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ die *glad* zijn, en waarvoor niet alleen ψ zelf, maar ook al zijn afgeleiden $\frac{d^k}{dx^k} \psi(x)$ sneller naar nul gaan dan ieder polynoom, $\lim_{x \rightarrow \infty} x^n \frac{d^k}{dx^k} \psi(x) = 0$. De vectorruimte V van functies $\psi: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ met deze eigenschappen heet ook wel de *Schwartzruimte*. Zowel $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ als de Schwartzruimte worden wel losjes aangeduid als ‘de ruimte van golf functies’, waarbij dan maar uit de context moet blijken welk van de twee bedoeld wordt. We zullen ons bij dit gebruik aansluiten.

Brengen we nu de factor $i\hbar$ in (59) naar de rechterkant, dan vinden we de lineaire differentiaalvergelijking

$$\frac{d}{dt} \psi_t = L(\psi_t), \quad (60)$$

met $L: V \rightarrow V$ de lineaire operator $L(\psi) = -\frac{i}{\hbar} H(\psi)$. Op deze manier kunnen we de tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking dus opvatten als een lineaire differentiaalvergelijking in de volgende zin van het woord.

Definitie 3.2. Stel dat V een inproductruimte is, en $L: V \rightarrow V$ een lineaire operator op V . Dan is de bijbehorende lineaire differentiaalvergelijking gegeven door

$$\frac{d}{dt} \vec{v}(t) = L(\vec{v}(t)), \quad (61)$$

met beginvoorwaarde $\vec{v}|_{t=0} = \vec{v}_0$. Zij heeft de eigenschap dat lineaire combinaties $\vec{w}(t) = \vec{u}(t) + \vec{v}(t)$ en $\vec{w}(t) = \lambda \vec{v}(t)$ van de oplossingen $\vec{u}(t)$ en $\vec{v}(t)$ met beginvoorwaarden $\vec{u}_0$ en $\vec{v}_0$ wederom oplossingen zijn, met beginvoorwaarden $\vec{w}_0 = \vec{u}_0 + \vec{v}_0$ en $\vec{w}_0 = \lambda \vec{v}_0$.

Op de vectorruimte $V = \mathbb{C}^n$ met $L(\vec{v}) = A \cdot \vec{v}$ geeft dit de lineaire, homogene differentiaalvergelijking (56) in n variabelen. Op de vectorruimte V van gladde, kwadratisch integreerbare functies $\psi: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ met $L(\psi) = -\frac{i}{\hbar} H(\psi)$ geeft dit de tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking.

De oplossingsstrategie is in beide gevallen hetzelfde. We zullen ons eerst verdiepen in differentiaalvergelijkingen van het eerste soort, waar de lineaire afbeelding $L: \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}^n$ gegeven wordt door een matrix A . Daarna zullen we in meer detail terugkomen op differentiaalvergelijkingen van het tweede soort, zoals de tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking.

3.3 Oplossingen van lineaire differentiaalvergelijkingen

We bekijken de homogene lineaire differentiaalvergelijking in $\mathbb{C}^n$,

$$\frac{d}{dt}\vec{v}(t) = A \cdot \vec{v}(t), \quad \vec{v}(0) = \vec{v}_0. \quad (62)$$

De vector $\vec{v}(t)$ bevat de n tijdsafhankelijke variabelen $x_1(t), \dots, x_n(t)$, en A is een $n \times n$ matrix met coëfficiënten a_{ij} voor $1 \leq i, j \leq n$. Een manier om oplossingen te vinden, is door eigenwaarden en eigenvectoren van A te zoeken.

Definitie 3.3. Een *eigenvector* $\vec{v}_\lambda$ van A bij *eigenwaarde* λ is een vector $\vec{v}_\lambda \neq 0$ met

$$A\vec{v}_\lambda = \lambda\vec{v}_\lambda.$$

Dit geeft ons een oplossing van (56) van de vorm $\vec{v}(t) = c_\lambda(t)\vec{v}_\lambda$. Immers, de vergelijking $\frac{d}{dt}v(t) = A \cdot \vec{v}(t)$ met $\vec{v}(t) = c_\lambda(t)\vec{v}_\lambda$ geeft

$$\frac{d}{dt}c_\lambda(t)\vec{v}_\lambda = \lambda c_\lambda(t)\vec{v}_\lambda,$$

en dus, omdat $\vec{v}_\lambda \neq 0$,

$$\frac{d}{dt}c_\lambda(t) = \lambda c_\lambda(t).$$

De oplossing hiervan is $c_\lambda(t) = c_\lambda e^{\lambda t}$. We zien dus dat $\vec{v}(t) = c_\lambda e^{\lambda t}\vec{v}_\lambda$ een oplossing van (62) is, met beginvoorwaarde $c_\lambda\vec{v}_\lambda$.

Definitie 3.4. Als $\vec{v}_\lambda$ een eigenvector van A is bij eigenwaarde λ , dan heet $\vec{v}(t) = e^{\lambda t}\vec{v}_\lambda$ een *fundamentele oplossing* van (62).

Stel dat we een *basis* $\vec{b}_i$ van $\mathbb{C}^n$ kunnen vinden, die bestaat uit eigenvectoren bij eigenwaarde λ_i . Dan kunnen we op deze manier de oplossingen van (62) met *algemene* beginvoorwaarde $\vec{v}_0$ vinden. Omdat $\vec{b}_i$ een basis is, kan de beginvoorwaarde geschreven worden als een som van eigenvectoren,

$$\vec{v}_0 = \sum_{i=1}^n c_{\lambda_i} \vec{b}_i.$$

Vervolgens merken we op dat (62) een *lineaire* differentiaalvergelijking is. Omdat $\vec{b}_i(t) = e^{\lambda_i t}\vec{b}_i$ een fundamentele oplossing met beginvoorwaarde $\vec{b}_i$ is, is de lineaire combinatie

$$\vec{v}(t) = \sum_{i=1}^n c_\lambda e^{\lambda_i t} \vec{b}_i$$

dus een oplossing met beginvoorwaarde $\vec{v}_0 = \sum_{i=1}^n c_{\lambda_i} \vec{b}_i$.

De eigenwaarden van A zijn de (mogelijk complexe!) oplossingen λ_i van de n^e graads vergelijking

$$\det(\lambda \text{Id} - A) = 0.$$

Hier is Id de *identiteitsmatrix* met $\text{Id}_{ij} = \delta_{ij}$, dus

$$\lambda \text{Id} - A = \begin{pmatrix} (\lambda - a_{11}) & -a_{12} & \dots & -a_{1n} \\ -a_{21} & (\lambda - a_{21}) & \dots & -a_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \\ -a_{n1} & & & (\lambda - a_{nn}) \end{pmatrix}$$

Het symbool $\det$ staat voor de determinant van de matrix. Je vindt de eigenvectoren $\vec{v}_i$ door eerst de oplossingen λ_i van bovenstaande vergelijking te zoeken, en dan voor iedere λ_i de lineaire vergelijking

$$A\vec{b}_i = \lambda_i \vec{b}_i$$

op te lossen.

3.3.1 De oplossingsstrategie voor lineaire differentiaalvergelijkingen

Kort samengevat is de strategie om oplossingen van een lineaire differentiaalvergelijking te vinden dus de volgende:

- 1) Zoek de eigenwaarden λ_i en eigenvectoren $\vec{v}_i$ van A . De bijbehorende fundamentele oplossingen zijn dan $e^{\lambda_i t} \vec{v}_i$.
- 2) Schrijf de beginvoorwaarde $\vec{v}_0$ als een lineaire combinatie van eigenvectoren,

$$\vec{v}_0 = \sum_{i=1}^n c_{\lambda_i} \vec{v}_i.$$

- 3) Omdat de differentiaalvergelijking lineair is, is de lineaire combinatie

$$\vec{v}(t) = \sum_{i=1}^n c_{\lambda_i} e^{\lambda_i t} \vec{v}_i$$

van fundamentele oplossingen weer een oplossing. Voor $t = 0$ heeft deze de correcte beginvoorwaarde $\vec{v}_0 = \sum_{i=1}^n c_{\lambda_i} \vec{v}_i$.

We illustreren deze methode aan de hand van twee voorbeelden. Een vervalproces in twee stappen, dat een lineaire differentiaalvergelijking in $V = \mathbb{C}^3$ geeft, en de tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking, die een lineaire differentiaalvergelijking in de vectorruimte V van (voldoende gladde) kwadratisch integreerbare functies geeft.

3.3.2 Voorbeeld: een vervalproces in twee stappen

Stel een verbinding A vervalt in B , die op haar beurt weer in C vervalt.

$$A \xrightarrow{k_{ab}} B \xrightarrow{k_{bc}} C.$$

De vervalsnelheid van A en B zijn evenredig met hun concentratie. De evenredigheidsconstanten noemen we k_{ab} en k_{bc} . Voor de afname van A hebben we dan de vergelijking

$$\frac{d}{dt}[A]_t = -k_{ab}[A]_t. \quad (63)$$

Het verval van A in B leidt tot een toename $k_{ab}[A]_t$ van B , terwijl het verval van B in C leidt tot een afname van B evenredig met de concentratie van B . Tellen we deze twee effecten bij elkaar op, dan resulteert de vergelijking

$$\frac{d}{dt}[B]_t = k_{ab}[A]_t - k_{bc}[B]_t. \quad (64)$$

Ten slotte is de toename van C evenredig met de concentratie van B ,

$$\frac{d}{dt}[C]_t = k_{bc}[B]_t. \quad (65)$$

Beginnen we met alleen de stof A , dan hebben we de beginvoorwaarden $[A]_0 = a$, en $[B]_0 = [C]_0 = 0$. De vergelijkingen (63), (64) en (65) geven dan

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} [A]_t \\ [B]_t \\ [C]_t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -k_{ab} & 0 & 0 \\ k_{ab} & -k_{bc} & 0 \\ 0 & k_{bc} & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} [A]_t \\ [B]_t \\ [C]_t \end{pmatrix}, \quad \text{met} \quad \begin{pmatrix} [A]_0 \\ [B]_0 \\ [C]_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (66)$$

ofwel

$$\frac{d}{dt}\vec{v}(t) = A \cdot \vec{v}(t), \quad \vec{v}(0) = \vec{v}_0$$

met de tijdsafhankelijke vector $\vec{v}(t) = ([A]_t, [B]_t, [C]_t)$, de beginvoorwaarde $\vec{v}_0 = (a, 0, 0)$, en de 3×3 -matrix

$$A = \begin{pmatrix} -k_{ab} & 0 & 0 \\ k_{ab} & -k_{bc} & 0 \\ 0 & k_{bc} & 0 \end{pmatrix}.$$

Om de oplossingen van deze differentiaalvergelijking te vinden, zoeken we de eigenwaarden en eigenvectoren van A . De eigenwaarden van A zijn de nulpunten van het karakteristieke polynoom

$$\det(\lambda \text{Id} - A) = \left| \begin{pmatrix} \lambda + k_{ab} & 0 & 0 \\ -k_{ab} & \lambda + k_{bc} & 0 \\ 0 & -k_{bc} & \lambda \end{pmatrix} \right| = \lambda(\lambda + k_{ab})(\lambda + k_{bc}).$$

De derdegraadsvergelijking

$$\lambda(\lambda + k_{ab})(\lambda + k_{bc}) = 0$$

heeft de oplossingen $\lambda_1 = 0$, $\lambda_2 = -k_{ab}$ en $\lambda_3 = -k_{bc}$. Dit zijn dus de drie eigenwaarden. De bijbehorende eigenvectoren $\vec{b}_1$, $\vec{b}_2$ en $\vec{b}_3$ zijn te vinden door de drie vergelijkingen $A\vec{b}_1 = 0$, $A\vec{b}_2 = -k_{ab}\vec{b}_2$ en $A\vec{b}_3 = -k_{bc}\vec{b}_3$ op te lossen. We vinden dan

$$\vec{b}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \vec{b}_2 = \begin{pmatrix} k_{bc} - k_{ab} \\ k_{ab} \\ -k_{bc} \end{pmatrix}, \quad \text{en} \quad \vec{b}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Merk op dat dit alleen een basis van $\mathbb{C}^3$ is als $k_{bc} \neq k_{ab}$! In dat geval krijgen we drie fundamentele oplossingen van de differentiaalvergelijking. Dit zijn de constante oplossing $\vec{v}_1(t) = c_1 \vec{b}_1$, en verder de twee oplossingen $\vec{v}_2(t) = c_2 e^{-k_{ab}t} \vec{b}_2$ en $\vec{v}_3(t) = c_3 e^{-k_{bc}t} \vec{b}_3$.

Om de oplossing met beginvoorwaarde $\vec{v}_0 = (a, 0, 0)$ te vinden, zoeken we constanten c_1, c_2 en c_3 met $\vec{v}_0 = c_1 \vec{b}_1 + c_2 \vec{b}_2 + c_3 \vec{b}_3$. Als $k_{ab} \neq k_{bc}$ is, vinden we de oplossing

$$c_1 = a, \quad c_2 = \frac{a}{k_{bc} - k_{ab}}, \quad c_3 = \frac{-ak_{ab}}{k_{bc} - k_{ab}}.$$

De oplossing met beginvoorwaarde $\vec{v}_0 = (a, 0, 0)$ is dus

$$\vec{v}(t) = a \vec{b}_1 + \frac{a}{k_{bc} - k_{ab}} e^{-k_{ab}t} \vec{b}_2 + \frac{-ak_{ab}}{k_{bc} - k_{ab}} e^{-k_{bc}t} \vec{b}_3,$$

ofwel

$$\begin{aligned} [A]_t &= a \exp(-k_{ab}t) \\ [B]_t &= a \frac{k_{ab}(\exp(-k_{ab}t) - \exp(-k_{bc}t))}{k_{bc} - k_{ab}} \\ [C]_t &= a \left(1 + \frac{k_{ab} \exp(-k_{bc}t) - k_{bc} \exp(-k_{ab}t)}{k_{bc} - k_{ab}} \right). \end{aligned}$$

We zien dat de concentratie van A exponentieel afneemt tot nul, en dat de concentratie van C logistisch groeit tot a . Voor $k_{ab} < k_{bc}$ blijft de concentratie van B relatief laag; B vervalt immers sneller tot C dan A tot B vervalt. Als $k_{ab} > k_{bc}$, dan neemt de concentratie van B eerst toe, om pas weer af te nemen als de concentratie van A sterk gedaald is.

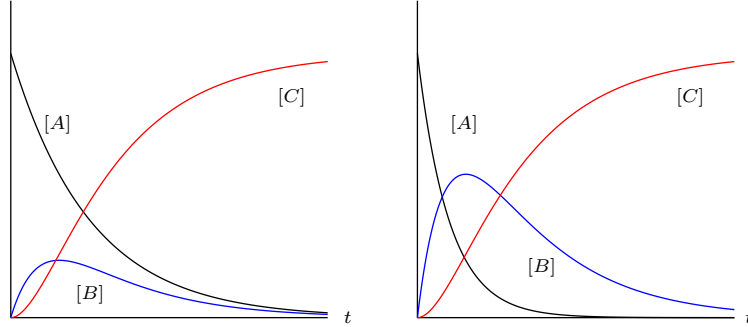
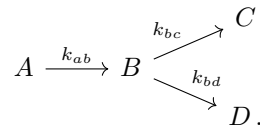


FIG. 15: Verloop van de concentraties, links voor $k_{ab} = 1, k_{bc} = 2.5$ en rechts voor $k_{ab} = 2.5, k_{bc} = 1$. In dit laatste geval bereikt $[B]$ een grotere waarde.

Opgave 3.1. Stel dat een stof A vervalt in B , en dat de stof B vervalt in zowel C als D ,



De vervalsconstanten zijn $k_{ab} = k_{bc} = k_{bd} = 1$. De concentraties $[A]_t$, $[B]_t$, $[C]_t$ en $[D]_t$ voldoen dan aan het stelsel differentiaalvergelijkingen

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}[A]_t &= -[A]_t \\ \frac{d}{dt}[B]_t &= [A]_t - 2[B]_t \\ \frac{d}{dt}[C]_t &= [B]_t \\ \frac{d}{dt}[D]_t &= [B]_t.\end{aligned}$$

We berekenen het verloop van deze concentraties als functie van de tijd, met als beginvoorwaarde dat op $t = 0$ alleen de stof A aanwezig is met concentratie a_0 . Dus $[A]_{t=0} = a_0$, $[B]_{t=0} = 0$, $[C]_{t=0} = 0$, en $[D]_{t=0} = 0$.

- Schrijf het stelsel vergelijkingen in matrixvorm, $\frac{d}{dt}\vec{v}_t = A\vec{v}_t$. Wat is de beginvoorwaarde $\vec{v}_{t=0}$ voor de tijdsafhankelijke vector $\vec{v}_t$? Wat is de matrix A ?
- Bereken de eigenwaarden van A , en geef de bijbehorende eigenvectoren. (Let op, er is een eigenwaarde die twee eigenvectoren heeft.)
- Kies een basis $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3, \vec{b}_4$ van eigenvectoren van A .
- Wat zijn de fundamentele oplossingen van de differentiaalvergelijking $\frac{d}{dt}\vec{v}_t = A\vec{v}_t$?
- Schrijf de beginvoorwaarde $\vec{v}_{t=0}$ als een lineaire combinatie van eigenvectoren, $\vec{v}_0 = c_1\vec{b}_1 + c_2\vec{b}_2 + c_3\vec{b}_3 + c_4\vec{b}_4$.
- Geef de oplossing $\vec{v}_t$ met beginvoorwaarde $\vec{v}_0$. Wat zijn $[A]_t$, $[B]_t$, $[C]_t$ en $[D]_t$?

Als $L: \mathbb{C}^m \rightarrow \mathbb{C}^n$ linksvermenigvuldiging met een $n \times m$ -matrix A is, $L(\vec{v}) = A \cdot \vec{v}$, dan is de i de coëfficiënt van $L(\vec{v})$ dus gelijk aan $L(\vec{v})_i = \sum_{j=1}^m a_{ij}x_j$. Het blijkt dat *alle* lineaire afbeeldingen van $\mathbb{C}^m$ naar $\mathbb{C}^n$ van deze vorm zijn.

Propositie 3.5. *Voor elke lineaire afbeelding $L: \mathbb{C}^m \rightarrow \mathbb{C}^n$ is er een $m \times n$ -matrix A zo dat $L(\vec{v}) = A \cdot \vec{v}$.*

Bewijs. We schrijven $\vec{v}$ ten opzichte van de standaardbasis $\vec{e}_j$ van $\mathbb{C}^m$ als $\vec{v} = \sum_{j=1}^m x_j \vec{e}_j$. Omdat L lineair is mogen we de som buiten haakjes halen,

$$L(\vec{v}) = L\left(\sum_{j=1}^m x_j \vec{e}_j\right) = \sum_{j=1}^m x_j L(\vec{e}_j). \quad (67)$$

Om $L(\vec{v})$ te berekenen, volstaat het dus om te weten wat $L(\vec{e}_j)$ is. We schrijven a_{ij} voor de basiscoëfficiënten van $L(\vec{e}_j)$ ten opzichte van de standaardbasis $\vec{e}_i$, $i = 1, \dots, n$. Vullen we $L(\vec{e}_j) = \sum_{i=1}^n a_{ij}\vec{e}_i$ in in (67), dan vinden we

$$L(\vec{v}) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m a_{ij}x_j \vec{e}_i,$$

en dus $L(\vec{v})_i = \sum_{j=1}^m a_{ij}x_j$. Dit is precies $A \cdot \vec{v}$ voor de matrix A met coëfficiënten a_{ij} . $\square$

Alle lineaire differentiaalvergelijkingen op $\mathbb{C}^n$ komen dus van een $n \times n$ -matrix A . Helaas zijn echter lang niet alle differentiaalvergelijkingen lineair. De volgende opgave geeft een voorbeeld van een niet-lineaire differentiaalvergelijking, waar de oplossingsstrategie uit §3.3.1 dus ook niet werkt.

Opgave 3.2. Laat zien dat de differentiaalvergelijking

$$\frac{d}{dt}x(t) = x^2(t) \quad (68)$$

niet lineair is.

- a) Ga na dat de functie $x(t) = \frac{1}{c-t}$ een oplossing is van (68) voor elk getal c . Is het veelvoud $x(t) = \frac{\lambda}{c-t}$ ook een oplossing is van (68)?
- b) De functies $x_1(t) = \frac{1}{c_1-t}$ en $x_2(t) = \frac{1}{c_2-t}$ zijn dus oplossingen van (68). Is hun som $x(t) = x_1(t) + x_2(t)$ weer een oplossing van (68)?
- c) Is de functie $L: \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$, gegeven door $L(x) = x^2$, een lineaire afbeelding?

3.3.3 Lineaire differentiaalvergelijkingen in een inproductruimte V

We keren terug naar de lineaire differentiaalvergelijking

$$\frac{d}{dt}\vec{v}(t) = L(\vec{v}(t)) \quad (69)$$

voor een tijdsafhankelijke vector $\vec{v}(t)$, nu niet in $\mathbb{C}^n$ maar in een algemene inproductruimte V . Om deze op te lossen moet de oplossingsstrategie van §3.3.1 enigszins aangepast worden.

In stap 1 zoeken we nu niet de eigenwaarden en eigenvectoren van een $n \times n$ -matrix A , maar van de *lineaire operator* $L: V \rightarrow V$.

Definitie 3.6. Een *eigenvector* van een lineaire operator $L: V \rightarrow V$ met eigenwaarde λ is een vector $\vec{v} \neq 0$ in V met

$$L(\vec{v}) = \lambda\vec{v}.$$

Dit heet de *eigenwaardenvergelijking* van L .

Hebben we een eigenvector $\vec{v}_\lambda$ bij eigenwaarde λ gevonden, dan is

$$\vec{v}(t) = e^{\lambda t}\vec{v}_\lambda$$

de bijbehorende *fundamentele oplossing* van (69). We hebben immers $\frac{d}{dt}\vec{v}(t) = \lambda e^{\lambda t}\vec{v}_\lambda$, en omdat $L(e^{\lambda t}\vec{v}_\lambda) = e^{\lambda t}L(\vec{v}_\lambda)$ is, vinden we $L(\vec{v}(t)) = \lambda e^{\lambda t}\vec{v}_\lambda$. Er geldt dus $\frac{d}{dt}\vec{v}(t) = L(\vec{v}(t))$, zodat $\vec{v}(t) = e^{\lambda t}\vec{v}_\lambda$ een oplossing is van (69) met beginvoorwaarde $\vec{v}(t=0) = \vec{v}_\lambda$.

Over het algemeen is de beginvoorwaarde $\vec{v}_0$ geen eigenvector van L . In stap 2 proberen we $\vec{v}_0$ daarom te schrijven als een lineaire combinatie van eigenvectoren,

$$\vec{v}_0 = \sum_{n=1}^N c_n \vec{v}_n. \quad (70)$$

(We schrijven $\vec{v}_n$ voor de eigenvector bij eigenwaarde λ_n .) Slagen we hierin, dan is

$$\vec{v}(t) = \sum_{n=1}^N c_n e^{\lambda_n t} \vec{v}_n \quad (71)$$

een oplossing van (69) met beginvoorwaarde $\vec{v}(0) = \vec{v}_0$. Op $t = 0$ voldoet dit immers aan $\vec{v}(0) = \sum_{n=1}^N c_n e^{\lambda_n \cdot 0} \vec{v}_n = \vec{v}_0$, en omdat (69) een *lineaire* differentiaalvergelijking is, is de lineaire combinatie (71) van oplossingen zelf ook weer een oplossing.

Als V een ruimte van functies is, dan zal $\vec{v}_0$ vaak niet *precies* te schrijven zijn als een eindige lineaire combinatie van eigenvectoren $\vec{v}_i$. Het is dan zinnig om $\vec{v}_0$ hiermee te *benaderen*. Beperken we ons tot het gebruik van de eerste N eigenvectoren, dan is de beste benadering van $\vec{v}_0$ zijn *projectie* $\vec{p}_N = \sum_{i=1}^N c_n \vec{v}_n$ op de deelvectorruimte $W_N = \{\sum_{n=1}^N c_n \vec{v}_n; c_n \in \mathbb{C}\}$ opgespannen door de eerste N eigenvectoren. De oplossing met beginvoorwaarde p_N is

$$\vec{v}_N(t) = \sum_{n=1}^N c_n e^{\lambda_n t} \vec{v}_n.$$

Stel dat $\vec{v}_0$ willekeurig goed benaderd kan worden door zijn projecties, in de zin dat de limiet $\lim_{N \rightarrow \infty} \|\vec{v}_0 - \vec{p}_N\|$ gelijk is aan 0. Het valt dan te verwachten dat de oplossing $\vec{v}(t)$ met beginvoorwaarde $\vec{v}_0$ ook willekeurig goed benaderd kan worden door de oplossingen $\vec{v}_N(t)$ met beginvoorwaarde $\vec{p}_N$, in de zin dat de limiet $\lim_{N \rightarrow \infty} \|\vec{v}(t) - \vec{v}_N(t)\|$ gelijk is aan nul.

Opmerking 8. Als $\vec{v}_N$ een reeks vectoren in V is met $\lim_{N \rightarrow \infty} \|\vec{v} - \vec{v}_N\| = 0$, dan schrijven we ook wel

$$\lim_{N \rightarrow \infty}^{L^2} \vec{v}_N = \vec{v}.$$

Kort samengevat is onze oplossingsstrategie voor de lineaire differentiaalvergelijking $\frac{d}{dt} \vec{v}(t) = L(\vec{v}(t))$ met beginvoorwaarde $\vec{v}_0$ dus de volgende.

- 1) Zoek de eigenwaarden λ_n en eigenvectoren $\vec{v}_n$ van de lineaire operator L . De bijbehorende fundamentele oplossingen zijn $\vec{v}_n(t) = e^{\lambda_n t} \vec{v}_n$.
- 2) Benader de beginvoorwaarde $\vec{v}_0$ door de projecties $\vec{p}_N = \sum_{n=1}^N c_n \vec{v}_n$ op de deelvectorruimte W_N opgespannen door de eerste N eigenvectoren.
- 3) Als $\vec{v}_0 = \lim_{N \rightarrow \infty}^{L^2} \sum_{n=1}^N c_n \vec{v}_n$, dan verwachten we dat de oplossing met beginvoorwaarde $\vec{v}_0$ gegeven wordt door

$$\vec{v}(t) = \lim_{N \rightarrow \infty}^{L^2} \sum_{n=1}^N c_n e^{\lambda_n t} \vec{v}_n.$$

In het speciale geval dat $V = \mathbb{C}^N$ is, en de lineaire afbeelding $L: \mathbb{C}^N \rightarrow \mathbb{C}^N$ gegeven wordt door $L(\vec{v}) = A \cdot \vec{v}$, vinden we uiteraard onze oude oplossingsstrategie terug. De eigenwaarden en eigenvectoren van de lineaire afbeelding $L(\vec{v}) = A \cdot \vec{v}$ zijn precies de eigenwaarden en eigenvectoren van de matrix A . En als we een basis $\vec{v}_1, \dots, \vec{v}_N$ van eigenvectoren vinden, dan is $\vec{v}_0$ *gelijk* aan p_N , zodat de limietprocedure overbodig wordt. We zullen nu een aantal interessantere voorbeelden bekijken waar V een ruimte van functies is, en we de limietprocedure dus echt nodig hebben.

Opmerking 9. De bovenstaande strategie blijkt in de praktijk nuttig, zoals we dadelijk zullen zien. Een kleine disclaimer is hier echter op zijn plaats, want succes is in het algemeen niet gegarandeerd. Zo is het oplossen van de eigenwaardevergelijking vaak niet eenvoudig, en zijn er soms niet genoeg eigenvectoren beschikbaar om de beginvoorwaarde mee te benaderen. Het bovenstaande is een vruchtbare benadering, geen onfeilbaar oplossingsalgoritme.

3.3.4 Voorbeeld: de tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking

In Sectie 3.2.1 hebben we in de tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_t(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \psi_t(x)$$

het rechterlid opgevat als $H(\psi_t)$, met $H(\psi) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \psi$ de lineaire *Hamiltonoperator*. De tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking is dus equivalent met

$$\frac{d}{dt} \psi_t = L(\psi_t),$$

waar $L: V \rightarrow V$ de lineaire operator $L(\psi) = -\frac{i}{\hbar} H(\psi)$ is.

De eerste stap in de oplossingsstrategie is het oplossen van de *eigenwaardevergelijking*. We zoeken een eigenvector $\psi \neq 0$ en een getal λ zo dat

$$L(\psi) = \lambda \psi. \quad (72)$$

Omdat $L(\psi) = -\frac{i}{\hbar} H(\psi)$, kunnen we dit ook schrijven als

$$H(\psi) = i\hbar \lambda \psi.$$

De eigenwaardevergelijking bij de *tijdsafhankelijke* Schrödingervergelijking is dus de *tijdsonafhankelijke* Schrödingervergelijking

$$H(\psi) = E\psi, \quad (73)$$

waarbij de relatie tussen de energie E en de *eigenwaarde* λ gegeven is door

$$E = i\hbar \lambda. \quad (74)$$

De *eigenvectoren* van L zijn dezelfde als die van H . Het zijn de oplossingen ψ_E van de tijdsonafhankelijke Schrödingervergelijking (73) bij energie E . De bijbehorende fundamentele oplossing is

$$\psi(t, x) = e^{-\frac{i}{\hbar} Et} \psi_E(x).$$

Merk op dat de kansdichtheid $|\psi(t, x)|^2 = |\psi_E(x)|^2$ van de fundamentele oplossingen niet van de tijd afhangt. De oplossingen van de *tijdsonafhankelijke* Schrödingervergelijkingen $H\psi = E\psi$ worden daarom geïnterpreteerd als de *stationaire toestanden* van het systeem.

Als een systeem op tijdstip $t = 0$ in de toestand $\psi_0 = \sum_{n=1}^N c_n \psi_{E_n}$ is, dan is hij op tijdstip t in de toestand

$$\psi_t = \sum_{n=1}^N c_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \psi_{E_n}.$$

Stel bijvoorbeeld dat E_1 de grondtoestand is, en $E_2 > E_1$ de eerste aangeslagen toestand. De bijbehorende eigenvectoren zijn dan de oplossingen ψ_{E_1} en ψ_{E_2} van de tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking $H\psi = E\psi$. De overgang van de grondtoestand E_1 naar de aangeslagen toestand E_2 is eigenlijk nooit instantaan. In de tussentijd zit het atoom in een overgangstoestand $\alpha\psi_{E_1} + \beta\psi_{E_2}$ tussen E_1 en E_2 . Het vertoont dan *Rabi-oscillaties*. Dit is het onderwerp van de volgende opgave.

Opgave 3.3 (Rabi-oscillaties). Stel dat ψ_{E_1} en ψ_{E_2} twee oplossingen zijn van de tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking $H\psi = E\psi$, met energie $E_1 < E_2$.

- a) Wat zijn de (fundamentele) oplossingen van de tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_t = H(\psi_t) \quad (75)$$

die horen bij de eigenvectoren ψ_{E_1} en ψ_{E_2} van H ?

- b) Geef de oplossing ψ_t van (75) met op $t = 0$ de beginvoorwaarde

$$\psi_0 = \frac{1}{2}\sqrt{2}\psi_{E_1} + \frac{1}{2}\sqrt{2}\psi_{E_2}. \quad (76)$$

Dit is *geen* oplossing van de tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking, en ze is dus niet stabiel; deze toestanden komen voor in de overgang van ψ_{E_1} naar ψ_{E_2} .

- c) Als $\langle \psi_{E_1}, x\psi_{E_2} \rangle = \gamma$, laat dan zien dat $\langle \psi_{E_2}, x\psi_{E_1} \rangle = \bar{\gamma}$.
- d) Laat zien dat $L(\psi) = x\psi$ een lineaire afbeelding is. (De variabele x is het argument van de functie ψ .)
- e) Stel dat de verwachtingswaarde van x in de orbitals ψ_{E_1} en ψ_{E_2} verdwijnt, $\langle \psi_{E_1}, x\psi_{E_1} \rangle = 0$ en $\langle \psi_{E_2}, x\psi_{E_2} \rangle = 0$. Bereken dan de verwachtingswaarde $\langle \psi_0, x\psi_0 \rangle$ van x in de toestand ψ_0 uit vergelijking (76). Druk je antwoord uit in γ .
- f) Bereken de tijdsafhankelijke verwachtingswaarde $\langle \psi_t, x\psi_t \rangle$ van de positie x in de fundamentele oplossingen ψ_t bij energie E_1 en E_2 die je gevonden hebt in a). Doe hetzelfde voor de oplossing ψ_t die je gevonden hebt in b), en druk je antwoord uit in γ .
- g) Stel dat γ een reëel getal is. Schrijf dan de tijdsafhankelijke verwachtingswaarde van de positie x als een oscillatie $\langle \psi_t, x\psi_t \rangle = a \cos(\Omega t)$. De frequentie Ω heet de *Rabi-frequentie*. Druk deze uit in E_1 en E_2 .
- h) De energieniveaus van het waterstofatoom zijn $E_n = -R/n^2$, met $n = 1, 2, 3, \dots$ en $R = \frac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} = 2,175 \times 10^{-18} \text{ J}$ de Rydbergconstante. Wat is de Rabifrequentie Ω voor oscillaties tussen de grondtoestand E_1 en de eerste aangeslagen toestand E_2 ?

In het algemeen zal de beginvoorwaarde ψ_0 niet te schrijven zijn als een eindige lineaire combinatie van eigenvectoren. We zullen dan ψ_0 benaderen met zijn projecties $p_N = \sum_{n=1}^N c_n \psi_n$ op de ruimte $W_N = \{\sum_{n=1}^N c_n \psi_n; c_n \in \mathbb{C}\}$ opgespannen door de eerst N eigenvectoren ψ_n van H .

De oplossingen ψ_n van de tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking hebben de mooie eigenschap dat ze *orthogonaal* zijn. De coëfficiënten c_n zijn dus eenvoudig te vinden als

$$c_n = \frac{\langle \psi_n, \psi_0 \rangle}{\langle \psi_n, \psi_n \rangle}.$$

Normaliseren we de vectoren ψ_n zo dat $\|\psi_n\| = 1$, dan reduceert dit tot $c_n = \langle \psi_n, \psi_0 \rangle$. De projectie van ψ_0 op de ruimte W_N is dan

$$p_N = \sum_{n=1}^N \langle \psi_n, \psi_0 \rangle \psi_n,$$

en de oplossing van de tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking met beginvoorwaarde p_N is

$$p_N(t, x) = \sum_{n=1}^N \langle \psi_n, \psi_0 \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \psi_n(x).$$

Als de beginvoorwaarde goed benaderd wordt door zijn projecties, in de zin dat $\psi_0 = \lim_{N \rightarrow \infty}^{L^2} \sum_{n=1}^N c_n \psi_n$, dan is

$$\psi_t = \lim_{N \rightarrow \infty}^{L^2} \sum_{n=1}^N c_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \psi_n,$$

met $c_n = \langle \psi_n, \psi_0 \rangle$.

3.3.5 De Harmonische Oscillator

Om deze uitdrukking expliciet te evalueren, moeten we eerst de oplossingen ψ_n van de tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking berekenen. Dat is in het algemeen niet eenvoudig. Een voorbeeld waar dit lukt is de *Harmonische Oscillator*, met potentiaal $V(x) = \frac{1}{2} k x^2$. De Hamiltonoperator wordt dan

$$H(\psi) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} k x^2 \right) \psi.$$

De oplossingen van de tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking $H\psi = E\psi$ zijn

$$\psi_n(x) = \frac{\alpha^{1/2}}{(2\pi)^{1/4} (n!)^{1/2}} h_n(\alpha x) e^{-\frac{1}{4}(\alpha x)^2}, \quad (77)$$

met $\alpha = (\frac{2}{\hbar})^{1/2} (km)^{1/4}$, en $h_n(x)$ de *Hermitepolynomen* uit Sectie 1.4.5. De bijbehorende eigenwaarden van H zijn

$$E_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega,$$

met $\omega = \sqrt{k/m}$. De eigenwaarden van $L = -\frac{i}{\hbar} H$ zijn dus $\lambda_n = -i(n + \frac{1}{2})\omega$.

Men kan bewijzen dat *elke* kwadratisch integreerbare beginvoorwaarde ψ^0 willekeurig goed benaderd kan worden door eigenvectoren,

$$\psi^0 = \lim_{N \rightarrow \infty}^{L^2} \sum_{n=0}^N c_n \psi_n.$$

Bovendien hebben we in paragraaf 1.4.5 gezien dat de eigenvectoren ψ_n *orthogonaal* zijn. De coëfficiënten c_n zijn dus $c_n = \frac{\langle \psi^0, \psi_n \rangle}{\langle \psi_n, \psi_n \rangle}$. De noemer is gelijk

aan 1, omdat we de voorfactor in (77) zo gekozen hebben dat de ψ_n *orthonormal* zijn. De oplossing van de tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking met beginvoorwaarde ψ^0 is dus

$$\psi_t = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^N c_n e^{-i(n+\frac{1}{2})\omega t} \psi_n(x),$$

met

$$c_n = \langle \psi_n, \psi^0 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \bar{\psi}_n(x) \psi^0(x) dx.$$

Opgave 3.4 (Rabi-oscillaties voor de harmonische oscillator). In geschaalde coördinaten $\tilde{x} = \alpha x$ zijn de ongenormaliseerde oplossingen van de harmonische oscillator dus gegeven door $\psi_n(x) = h_n(x) e^{-\frac{1}{4}x^2}$. De Hermitepolynomen h_n voldoen aan de recursierelatie

$$h_{n+1}(x) = x h_n(x) - \frac{d}{dx} h_n(x),$$

met $h_0(x) = 1$.

- Bereken $h_1(x)$, $h_2(x)$, $h_3(x)$ en $h_4(x)$.
- Laat zien dat h_n alleen termen x^k van even graad k bevat als n even is, en alleen termen van oneven graad k als n oneven is.
- Laat zien dat $\gamma = \langle \psi_n, x \psi_m \rangle$ gelijk aan nul is voor $n - m$ even.
- Wat betekent dit voor de Rabi-oscillaties tussen de energietoestanden $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ en $E_m = (m + \frac{1}{2})\hbar\omega$ van de harmonische oscillator?

3.3.6 Schrödingervergelijking voor een vrij deeltje op de cirkel

Stel dat een deeltje met massa m vrij beweegt op een cirkel met straal R . De potentiaal is dan $V(x) = 0$, en de tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking luidt

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t). \quad (78)$$

Hier is x een coördinaat die de booglengte van de cirkel meet. De golf functie $\Psi(x)$ is hier dus periodiek in x , met periode $2\pi R$.

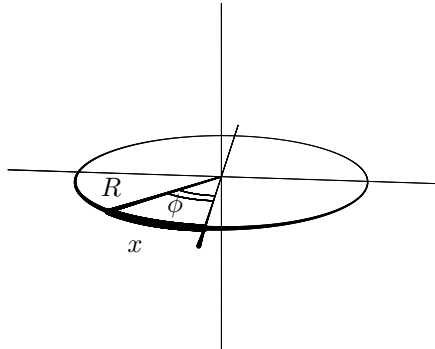


FIG. 16: Op een cirkel met straal R is de booglengte x gelijk aan $R\phi$.

Het is handig om de hoek ϕ in plaats van de booglengte x als coördinaat te nemen. We substitueren $\phi = x/R$, en schakelen over op de golffunctie $\psi(\phi) = \Psi(R\phi)$. De tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking wordt dan

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\phi, t) = -\frac{\hbar^2}{2mR^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \psi(\phi, t). \quad (79)$$

De Hamiltonoperator is dus $H = -\frac{\hbar^2}{2mR^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$, werkend op 2π -periodieke functies $\psi(\phi)$ van de hoekvariabele ϕ .

Stap 1 Om de eigenwaarden en eigenvectoren te vinden, lossen we de tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking $H\psi = E\psi$ op voor 2π -periodieke functies ψ . Deze luidt $-\frac{\hbar^2}{2mR^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \psi_E(\phi) = E\psi_E(\phi)$, ofwel

$$\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \psi_E(\phi) = -\frac{2mER^2}{\hbar^2} \psi_E(\phi).$$

Proberen we de oplossing $\psi_k(x) = e^{ikx}$, dan vinden we $\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \psi_k(\phi) = -k^2 \psi_k(\phi)$. Dit is dus een oplossing als $k^2 = \frac{2mER^2}{\hbar^2}$. Omdat ψ_k een 2π -periodieke functie van ϕ is, moet k een geheel getal zijn.

We vinden dus de oplossingen $\psi_k(x) = e^{ikx}$ bij $k = \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots$, met bijbehorende energieën

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2mR^2}.$$

Merk op dat ψ_k en ψ_{-k} dezelfde energie E_k hebben. Men zegt dat het systeem *degeneratie* vertoont: er zijn meerdere onafhankelijke oplossingen bij dezelfde eigenwaarde.

Iedere lineaire combinatie van eigenvectoren bij dezelfde energie E is ofwel 0, ofwel wederom een eigenvector bij dezelfde energie E . Dit geldt niet alleen in ons voorbeeld, maar zelfs voor elke lineaire operator $H: V \rightarrow V$. Als $H\psi_1 = E\psi_1$ en $H\psi_2 = E\psi_2$ voor dezelfde waarde van E , dan geldt voor de som $\psi_1 + \psi_2$ immers

$$H(\psi_1 + \psi_2) = H(\psi_1) + H(\psi_2) = E\psi_1 + E\psi_2 = E(\psi_1 + \psi_2),$$

en voor het veelvoud $c\psi_1$ geldt

$$H(c\psi_1) = cH(\psi_1) = cE\psi_1 = E(c\psi_1).$$

Iedere lineaire combinatie $c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ is dus ofwel nul, ofwel wederom een eigenvector van H bij eigenwaarde E . De ruimte

$$W_E = \{\psi \text{ in } V; H\psi = E\psi\}$$

die bestaat uit 0 en alle eigenvectoren bij de vaste eigenwaarde E is dus een *deelvectorruimte*. Zij heet de *eigenruimte* bij E .

In het speciale geval van een vrij deeltje op de cirkel, met Hamiltonoperator $H = -\frac{\hbar^2}{2mR^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$, heeft de eigenruimte W_{E_k} bij energie $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2mR^2}$ dimensie 1 voor $k = 0$, en dimensie 2 voor $k \neq 0$. Voor $k = 0$ hebben we $W_{E_0} = \{c1; c \text{ in } \mathbb{C}\}$, en voor $k \neq 0$ hebben we

$$W_{E_k} = \{c_+ e^{ik\phi} + c_- e^{-ik\phi}; c_+, c_- \text{ in } \mathbb{C}\}.$$

In het bijzonder zijn dus niet alleen $\psi_k(\phi) = e^{ik\phi}$ en $\psi_k(\phi) = e^{-ik\phi}$ eigenvectoren van H bij eigenwaarde E_k , maar ook bijvoorbeeld de golf functies $\cos(k\phi) = \frac{1}{2}e^{ik\phi} + \frac{1}{2}e^{-ik\phi}$ en $\sin(k\phi) = \frac{-i}{2}e^{ik\phi} + \frac{i}{2}e^{-ik\phi}$.

Stap 2 De eigenvector $\psi_E(\phi)$ met $H\psi_E = E\psi_E$ geeft de stationaire toestand

$$\psi_t(\phi) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\psi_E(\phi)$$

met beginvoorwaarde $\psi_{t=0}(\phi) = \psi_E(\phi)$. Met $\psi_{E_k}(\phi) = e^{ik\phi}$ en $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2mR^2}$ vinden we dus de fundamentele oplossingen

$$\psi_t(\phi) = e^{-i\frac{E_k}{\hbar}t}e^{ik\phi} = e^{i(k\phi - \omega_k t)},$$

waar ω_k gelijk is aan

$$\omega_k = \frac{E_k}{\hbar} = \frac{\hbar}{2mR^2}k^2.$$

Dit heet de *dispersierelatie*. De functie $\psi_k(\phi, t)$ is constant als $k\phi - \omega_k t$ constant is, zeg voor $k\phi - \omega_k t = k\phi_0$. Lossen we ϕ op voor t , dan vinden we dat ψ_k constant is op de lijnen $\phi = \phi_0 + v_k t$, waar de *golfsnelheid* v_k gegeven wordt door

$$v_k = \omega_k/k = \frac{\hbar}{2mR^2}k.$$

We kunnen de stationaire oplossing $\psi_t(\phi) = e^{i(k\phi - \omega_k t)}$ dus opvatten als een golven die met snelheid v_k rond de cirkel lopen. Omdat $v_{-k} = -v_k$, loopt de oplossing $\psi_k = e^{i(k\phi - \omega_k t)}$ tegen de klok in voor $k > 0$, en met de klok mee voor $k < 0$.

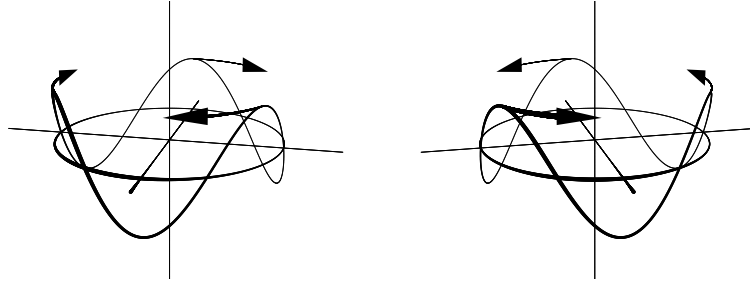


FIG. 17: Het reële deel van de golf functie $\psi_t(\phi)$ met begintoestand ψ_k , getekend voor de gevallen $k = -3$ (links) en $k = 3$ (rechts). De golfsnelheid v_k is evenredig met k .

De absolute waarde van $\psi_k(\phi)$ hangt niet van ϕ af, zodat de kans om het deeltje aan te treffen uniform over de cirkel verdeeld is. Dit is anders bij de fundamentele oplossing $\psi(\phi, t) = e^{-i\omega_k t} \sin(k(\phi - \phi_0))$, die verkregen wordt als een lineaire combinatie van ψ_k en ψ_{-k} . Ook dit is een oplossing bij energie E_k , maar zij heeft tijdsafhankelijke minima en maxima op regelmatige afstanden op de cirkel.

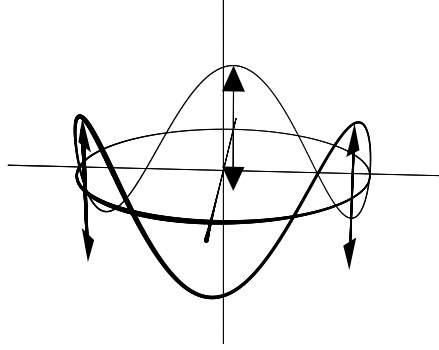


FIG. 18: Het reële deel van de golffunctie $\psi(\phi, t)$ met $\psi_{t=0}(\phi) = \cos(k\phi)$.

Stap 3 Omdat de tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking lineair is, geeft de beginvoorwaarde

$$\psi_0(\phi) = \sum_{k=-N}^N c_k \psi_k(\phi)$$

met $\psi_k(\phi) = e^{ik\phi}$ de oplossing

$$\psi_0(\phi) = \sum_{k=-N}^N c_k e^{-i\omega_k t} \psi_k(\phi),$$

waar de frequentie ω_k als functie van het golfgetal k gegeven wordt door de dispersierelatie $\omega_k = \frac{\hbar}{2mR^2} k^2$.

Het is dus van belang om $\psi_0(\phi)$ zo goed mogelijk te benaderen met lineaire combinaties van de eigenvectoren $\psi_{-N}, \dots, \psi_N$. Dit zijn precies de Fourierpolynomen $p_N(\phi) = \sum_{k=-N}^N c_k e^{ik\phi}$ van graad hoogstens N . Het Fourierpolynoom p_N waarvoor $\|\psi_0 - p_N\|$ minimaal is, is de *projectie* van ψ_0 op de ruimte van Fourierpolynomen van graad hoogstens N . In hoofdstuk 2 hebben we gezien dat de coëfficiënten c_k van de projectie p_N dan gegeven worden door

$$c_k = \frac{\langle \psi_k, \psi_0 \rangle}{\langle \psi_k, \psi_k \rangle} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \psi_0(\phi) e^{-ik\phi} d\phi. \quad (80)$$

Iedere beginvoorwaarde $\psi_0(\phi)$ kan dus willekeurig dicht benaderd worden met lineaire combinaties van eigenvectoren,

$$\psi_0(\phi) = \lim_{N \rightarrow \infty}^{L^2} \sum_{k=-N}^N c_k e^{ik\phi},$$

met c_k de Fouriercoëfficiënten (80). De bijbehorende oplossing van de tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking voor een vrij deeltje op de cirkel wordt dan

$$\psi_t(\phi) = \lim_{N \rightarrow \infty}^{L^2} \sum_{k=-N}^N c_k e^{i(k\phi - \omega_k t)}, \quad (81)$$

met frequentie $\omega_k = \frac{\hbar}{2mR^2} k^2$ evenredig aan het kwadraat van het golfgetal k .

Opmerking 10. Op tijdstip $T_r = 4\pi m R^2 / \hbar$ is $\omega_k T_r = 2\pi k^2$ een geheel getal, zodat $e^{-i\omega_k T_r} = 1$ voor elke waarde van k . In vergelijking (81) zien we dus dat op $t = T_r$ de golffunctie $\psi_{t=T_r}$ weer teruggekeerd is in de begintoestand, ψ_0 . Het tijdstip T_r heet daarom de *recurrentietijd* van het systeem.

3.4 Hermitische operatoren

De Hamiltonoperator $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$ heeft een drietal uitermate nuttige eigenschappen. Zijn eigenwaarden E zijn altijd reëel, zijn eigenvectoren ψ_E bij verschillende eigenwaarden zijn altijd orthogonaal, en de norm $\|\psi_t\|$ van iedere oplossing van de tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking $i\hbar \frac{d}{dt} \psi_t = H\psi_t$ hangt niet af van de tijd t .

Deze eigenschappen zijn van fundamenteel belang in de quantummechanica. We kunnen de eigenwaarde E alleen interpreteren als een energie omdat zij reëel is, we kunnen een begintoestand $\psi_0(x)$ makkelijk ontbinden in eigenvectoren ψ_E omdat deze orthogonaal zijn, en ten slotte kunnen we $|\psi_t(x)|^2$ alleen interpreteren als een kansdichtheid omdat $\|\psi_t\|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_t(x)|^2 dx$ niet afhangt van de tijd, en dus op 1 kan worden genormaliseerd.

Deze drie eigenschappen gelden onafhankelijk van de keuze van potentiaal $V(x)$. Dit komt doordat $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V$ een *hermitische* operator is. Hermitische operatoren $H: V \rightarrow V$ kunnen gedefinieerd worden op elke inproductruimte V , niet alleen op de ruimte van golffuncties.

Definitie 3.7. Een operator $H: V \rightarrow V$ heet *hermitisch* of *zelfgeadjungeerd* als voor alle $\vec{v}_1, \vec{v}_2$ in V geldt dat

$$\langle H(\vec{v}_1), \vec{v}_2 \rangle = \langle \vec{v}_1, H(\vec{v}_2) \rangle.$$

3.4.1 Voorbeelden van hermitische operatoren

Om te laten zien dat operatoren hermitisch zijn, is de volgende propositie erg handig.

Propositie 3.8. *Sommen, machten, en reële veelvouden van hermitische operatoren zijn weer hermitisch.*

Bewijs. Als H_1 en H_2 hermitisch zijn, dan is $\tilde{H} = H_1 + H_2$ weer hermitisch. Er geldt immers

$$\langle \tilde{H}\vec{v}_1, \vec{v}_2 \rangle = \langle H_1\vec{v}_1, \vec{v}_2 \rangle + \langle H_2\vec{v}_1, \vec{v}_2 \rangle = \langle \vec{v}_1, H_1\vec{v}_2 \rangle + \langle \vec{v}_1, H_2\vec{v}_2 \rangle = \langle \vec{v}_1, \tilde{H}\vec{v}_2 \rangle.$$

Als H hermitisch is, dan is ook $\tilde{H} = H^n$ hermitisch. We hebben immers

$$\langle H^n\vec{v}_1, \vec{v}_2 \rangle = \langle H^{n-1}\vec{v}_1, H\vec{v}_2 \rangle = \dots = \langle H\vec{v}_1, H^{n-1}\vec{v}_2 \rangle = \langle \vec{v}_1, H^n\vec{v}_2 \rangle.$$

Ten slotte is ieder reëel veelvoud $\tilde{H} = \lambda H$ van een hermitische operator H weer hermitisch. Er geldt immers

$$\langle \tilde{H}\vec{v}_1, \vec{v}_2 \rangle = \langle \lambda H\vec{v}_1, \vec{v}_2 \rangle = \bar{\lambda} \langle H\vec{v}_1, \vec{v}_2 \rangle = \bar{\lambda} \langle \vec{v}_1, H\vec{v}_2 \rangle = \langle \vec{v}_1, \bar{\lambda} H\vec{v}_2 \rangle = \langle \vec{v}_1, \tilde{H}\vec{v}_2 \rangle.$$

In de laatste stap gebruiken we $\bar{\lambda} = \lambda$, dit werkt dus alleen als λ reëel is. $\square$

Om te laten zien dat de Hamiltonoperator hermitisch is, schrijven we hem als $H = \frac{1}{2m}p^2 + V$ met p de momentumoperator $p = -i\hbar \frac{d}{dx}$. We laten zien dat zowel p als V hermitisch zijn. Uit de vorige propositie volgt dan dat p^2 en zijn reële veelvoud $\frac{1}{2m}p^2$ hermitisch zijn, en dus ook de som $H = \frac{1}{2m}p^2 + V$.

Propositie 3.9. *De momentumoperator $p = -i\hbar \frac{d}{dx}$ en de Hamiltonoperator $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V$ zijn hermitische operatoren.*

Bewijs. Dat de operator $p = -i\hbar \frac{d}{dx}$ hermitisch is, blijkt uit partiële integratie. We hebben $\langle p\psi_1, \psi_2 \rangle = \langle \psi_1, p\psi_2 \rangle$ omdat

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \overline{(-i\hbar \frac{d}{dx} \psi_1)}(x) \psi_2(x) dx &= i\hbar [\overline{\psi_1}(x) \psi_2(x)]_{-\infty}^{\infty} - i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\psi_1}(x) (\frac{d}{dx} \psi_2)(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\psi_1}(x) (-i\hbar \frac{d}{dx} \psi_2)(x) dx. \end{aligned}$$

We hebben hier gebruikt dat $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \psi_1(x) \psi_2(x)$ gelijk is aan nul, omdat onze golffuncties in oneindig verdwijnen. Vanwege Propositie 3.8 is dus ook de kinetische energie $\frac{1}{2m} p^2$ hermitisch. Om te laten zien dat $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V$ hermitisch is, volstaat het dus om te tonen dat V hermitisch is. Dit is het geval als $V(x)$ reëel is:

$$\langle V\psi_1, \psi_2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \overline{V(x)\psi_1(x)} \psi_2(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\psi_1(x)} V(x) \psi_2(x) dx = \langle \psi_1, V\psi_2 \rangle.$$

Omdat $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$ en V hermitisch zijn, is dus ook hun som $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V$ een hermitische operator. $\square$

Opmerking 11. De Hamiltonoperator werkt op een vectorruimte V van voldoende gladde, kwadratisch integreerbare golffuncties. Als de golffuncties $\psi(x)$ op de reële as leven, dan verdwijnen ze voor $x \rightarrow \pm\infty$. Ook de randtermen $[\overline{\psi_1}(x) \psi_2(x)]_{-\infty}^{\infty}$ in de partiële integratie verdwijnen dus. Voor een deeltje op een cirkel geldt er iets gelijkaardigs: de randtermen in de partiële integratie geven een bijdrage $[\overline{\psi_1}(\phi) \psi_2(\phi)]_{-\pi}^{\pi}$, die verdwijnt omdat de golffuncties periodiek zijn. Ook Hamiltonoperatoren op de cirkel zijn dus automatisch hermitisch, ongeacht de keuze van de potentiaal $V(\phi)$.

Hermitische operatoren komen niet alleen voor op vectorruimten van kwadratisch integreerbare functies. Ook de vectorruimte $V = \mathbb{C}^n$ heeft hermitische operatoren.

Propositie 3.10. *Als A een $n \times n$ -matrix met coëfficiënten a_{ij} is, dan is de lineaire afbeelding $H: \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}^n$ met $H(\vec{v}) = A \cdot \vec{v}$ precies dan hermitisch als $a_{ji} = \overline{a_{ij}}$ voor alle indices i en j .*

Bewijs. De operator $H(\vec{v}) = A \cdot \vec{v}$ is hermitisch als $\langle A \cdot \vec{v}, \vec{w} \rangle = \langle \vec{v}, A \cdot \vec{w} \rangle$ voor alle $\vec{v}, \vec{w}$ in $\mathbb{C}$. Omdat $(A\vec{w})_i = \sum_{j=1}^n a_{ij} w_j$, zien we dat

$$\langle \vec{v}, A \cdot \vec{w} \rangle = \sum_{i=1}^n v_i (A\vec{w})_i = \sum_{i,j=1}^n a_{ij} v_i w_j.$$

Met $(A\vec{v})_i = \sum_{j=1}^n a_{ij} v_j$ vinden we echter

$$\langle A \cdot \vec{v}, \vec{w} \rangle = \sum_{i=1}^n (A\vec{v})_i \overline{w_i} = \sum_{i,j=1}^n \overline{a_{ij}} v_j \overline{w_i} = \sum_{i,j=1}^n \overline{a_{ji}} v_i \overline{w_j}.$$

Deze twee uitdrukkingen zijn gelijk voor alle $\vec{v}$ en $\vec{w}$ als $a_{ij} = \overline{a_{ji}}$. $\square$

De getransponeerde matrix van A is de matrix A^T met coëfficiënten $a_{ij}^T = a_{ji}$. De *geadjungeerde* matrix $A^\dagger$ is per definitie de complex geconjugeerde van A^T . Zij heeft coëfficiënten $a_{ij}^\dagger = \bar{a}_{ji}$. De operator $H(\vec{v}) = A \cdot \vec{v}$ is dus precies dan hermitisch, als $A = A^\dagger$.

Opgave 3.5. Is de operator $H: \mathbb{C}^3 \rightarrow \mathbb{C}^3$ hermitisch als $H(\vec{v}) = A \cdot \vec{v}$ met

$$\text{a) } A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}, \quad \text{b) } A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3i \end{pmatrix}, \quad \text{c) } A = \begin{pmatrix} 3 & 5i & 0 \\ -5i & 0 & 2 \\ 0 & 2 & 3 \end{pmatrix}?$$

Opgave 3.6. De vectorruimte V van gladde, kwadratisch integreerbare functies $\psi: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$ van drie variabelen x, y, z heeft inproduct

$$\langle \psi_1, \psi_2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\psi_1}(x, y, z) \psi_2(x, y, z) dx dy dz.$$

De Hamiltonoperator $H: V \rightarrow V$ is gegeven door

$$(H\psi)(x, y, z) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(x, y, z) + V(x, y, z) \psi(x, y, z).$$

Laat zien dat H hermitisch is. (Tip: laat zien dat de momenta $p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$, $p_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}$ en $p_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$ hermitisch zijn, en gebruik Propositie 3.8.)

3.4.2 Eigenschappen van hermitische operatoren

Hermitische operatoren hebben een aantal mooie eigenschappen. Zo zijn bijvoorbeeld al hun eigenwaarden reëel, en staan eigenvectoren bij verschillende eigenwaarden loodrecht op elkaar.

Propositie 3.11. *Als $H: V \rightarrow V$ hermitisch is, dan zijn alle eigenwaarden λ van H reëel. Als $\vec{v}_\lambda$ en $\vec{v}_{\lambda'}$ eigenvectoren bij verschillende eigenwaarden λ en λ' zijn, dan geldt $\vec{v}_\lambda \perp \vec{v}_{\lambda'}$.*

Bewijs. Omdat H zelfgeadjungeerd is, hebben we $\langle H(\vec{v}_\lambda), \vec{v}_{\lambda'} \rangle = \langle \vec{v}_\lambda, H(\vec{v}_{\lambda'}) \rangle$, en dus $\langle H(\vec{v}_\lambda), \vec{v}_{\lambda'} \rangle - \langle \vec{v}_\lambda, H(\vec{v}_{\lambda'}) \rangle = 0$. Met $H(\vec{v}_\lambda) = \lambda \vec{v}_\lambda$ en $H(\vec{v}_{\lambda'}) = \lambda' \vec{v}_{\lambda'}$ vinden we $\langle \lambda \vec{v}_\lambda, \vec{v}_{\lambda'} \rangle - \langle \vec{v}_\lambda, \lambda' \vec{v}_{\lambda'} \rangle = 0$, en dus

$$(\bar{\lambda} - \lambda') \langle \vec{v}_\lambda, \vec{v}_{\lambda'} \rangle = 0. \quad (82)$$

Beide uitspraken volgen nu uit deze vergelijking. Om te zien dat elke eigenwaarde λ reëel is, gebruiken we (82) met $\lambda = \lambda'$ en $\vec{v}_\lambda = \vec{v}_{\lambda'}$. Er staat dan $(\lambda - \bar{\lambda}) \langle \vec{v}_\lambda, \vec{v}_\lambda \rangle = 0$. Omdat $\langle \vec{v}_\lambda, \vec{v}_\lambda \rangle = \|\vec{v}_\lambda\|^2$ niet nul is, moet wel gelden dat $\bar{\lambda} - \lambda = 0$, en dus $\lambda = \bar{\lambda}$. Elke eigenwaarde λ is dus reëel.

Om te zien dat $\vec{v}_\lambda \perp \vec{v}_{\lambda'}$ als $\lambda \neq \lambda'$ gebruiken we wederom vergelijking (82). Ondertussen weten dat λ en λ' beide reëel zijn, dus we vinden de vergelijking $(\lambda - \lambda') \langle \vec{v}_\lambda, \vec{v}_{\lambda'} \rangle = 0$. Als $\lambda - \lambda'$ niet nul is, moet dus wel gelden dat $\langle \vec{v}_\lambda, \vec{v}_{\lambda'} \rangle$ gelijk is aan nul, en dus dat $\vec{v}_\lambda \perp \vec{v}_{\lambda'}$. $\square$

Dit geldt in het bijzonder voor de Hamiltonoperator $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V$. Omdat de eigenvectoren van H precies de oplossingen ψ_E van de tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking $H\psi = E\psi$ zijn, en de bijbehorende eigenwaarde E de energie van deze oplossing is, vinden we de volgende conclusie.

Corollarium 3.12. Als ψ_E een oplossing van de tijdsafhankelijke Schrödinger-vergelijking $H\psi_E = E\psi_E$ is, dan is de bijbehorende energie E altijd reëel. Bovendien zijn oplossingen ψ_E en $\psi_{E'}$ bij verschillende energieën $E \neq E'$ automatisch orthogonaal.

Als $\vec{v}_\lambda$ en $\vec{v}'_\lambda$ eigenvectoren bij dezelfde eigenwaarde λ zijn, dan is er geen enkele garantie dat ze loodrecht op elkaar staan. We kunnen ze dan echter orthogonaliseren, waarbij het resultaat wederom voldoet aan $H\vec{v} = \lambda\vec{v}$ bij eigenwaarde λ , omdat lineaire combinaties van eigenvectoren bij dezelfde eigenwaarde of nul zijn, of weer een eigenvector bij dezelfde eigenwaarde.

In het speciale geval dat de vectorruimte V eindigdimensionaal is, bijvoorbeeld $V = \mathbb{C}^n$, kunnen we op een dergelijke manier de volgende stelling bewijzen.

Stelling 3.13. Iedere hermitische operator $H: \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}^n$ heeft een orthogonale basis van eigenvectoren, met reële eigenwaarden.

Met deze stelling zien we bijvoorbeeld zonder enig rekenwerk dat de eigenwaarden van de matrix

$$A = \begin{pmatrix} 1.22 & 0.42 & 1.32 & 7.62 \\ 0.42 & 0.33 & 4.21 & 4.22 \\ 1.32 & 4.21 & 3.10 & 3.17 \\ 7.62 & 4.22 & 3.17 & 9.41 \end{pmatrix}$$

reëel zijn, en dat de eigenvectoren orthogonaal gekozen kunnen worden.

Opgave 3.7. De operator $H: \mathbb{C}^3 \rightarrow \mathbb{C}^3$ is van de vorm $H(\vec{v}) = A \cdot \vec{v}$.

a) Bepaal of H hermitisch is voor A gelijk aan:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & i \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ -1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}, \text{ en } \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}.$$

b) Wat zijn de eigenwaarden en eigenvectoren van deze vijf matrices? Als H hermitisch is, controleer dan dat de eigenwaarden inderdaad reëel zijn, en de eigenvectoren bij verschillende eigenwaarden orthogonaal.

c) Elke hermitische operator heeft een orthogonale basis van eigenvectoren. Dat wil niet zeggen dat *elke* basis van eigenvectoren orthogonaal is. Geef voor de eerste en de laatste matrix zowel een basis van eigenvectoren die orthogonaal is, als een die dat niet is.

Propositie 3.14. Stel dat $H: V \rightarrow V$ een hermitische operator is, en dat $\vec{v}_t$ een oplossing is van de lineaire differentiaalvergelijking

$$\frac{d}{dt}\vec{v}_t = -iH(\vec{v}_t).$$

Dan is de norm $\|\vec{v}_t\|$ van $\vec{v}_t$ constant in de tijd, $\|\vec{v}_t\| = \|\vec{v}_0\|$. We zeggen dan ook wel dat de tijdsevolutie unitair is.

Bewijs. We laten zien dat $\frac{d}{dt}\|\vec{v}_t\|^2 = 0$. Met de kettingregel zien we dat $\frac{d}{dt}\langle\vec{v}_t, \vec{v}_t\rangle = \langle\frac{d}{dt}\vec{v}_t, \vec{v}_t\rangle + \langle\vec{v}_t, \frac{d}{dt}\vec{v}_t\rangle$. Vullen we nu $\frac{d}{dt}\vec{v}_t = -iH\vec{v}_t$ in en werken we het inproduct uit, dan zien we dat

$$\frac{d}{dt}\|\vec{v}_t\|^2 = \langle -iH\vec{v}_t, \vec{v}_t \rangle + \langle \vec{v}_t, -iH\vec{v}_t \rangle = i(\langle H\vec{v}_t, \vec{v}_t \rangle - \langle \vec{v}_t, H\vec{v}_t \rangle).$$

Dit is gelijk aan nul omdat H hermitisch is, $\langle H\vec{v}_t, \vec{v}_t \rangle = \langle \vec{v}_t, H\vec{v}_t \rangle$. $\square$

Opgave 3.8. We bekijken de differentiaalvergelijking

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}x_t &= y_t \\ \frac{d}{dt}y_t &= -x_t.\end{aligned}$$

- Schrijf dit in de vorm $\frac{d}{dt}\vec{v}_t = -iA \cdot \vec{v}_t$ voor een 2×2 -matrix A . Is de operator $H(\vec{v}) = A \cdot \vec{v}$ hermitisch?
- Los de differentiaalvergelijking op met reële beginvoorwaarden x_0 en y_0 .
- Als $x_0^2 + y_0^2 = R^2$, bereken dan $x_t^2 + y_t^2$. Wat valt je op?

Opgave 3.9. We bekijken de differentiaalvergelijking

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}x_1(t) &= -0.42x_2(t) - 1.32x_3(t) - 7.62x_4(t) \\ \frac{d}{dt}x_2(t) &= 0.42x_1(t) - 4.21x_3(t) - 4.22x_4(t) \\ \frac{d}{dt}x_3(t) &= 1.32x_1(t) + 4.21x_2(t) - 3.17x_4(t) \\ \frac{d}{dt}x_4(t) &= 7.62x_1(t) + 4.22x_2(t) + 3.17x_3(t).\end{aligned}$$

Stel dat de beginvoorwaarden $x_1(0), \dots, x_4(0)$ reële getallen zijn, met $x_1^2(0) + \dots + x_4^2(0) = R^2$. Wat is dan $x_1^2(t) + \dots + x_4^2(t)$ op tijdstip t ? (Hint: dit kan zonder te rekenen.)

Opgave 3.10. Voor een vast, reëel getal c_g bekijken we de differentiaalvergelijking

$$\frac{d}{dt}f_t(\phi) = -c_g \frac{d}{d\phi}f_t(\phi),$$

met beginvoorwaarde $f_{t=0}(\phi) = f_0(\phi)$. Hier is $f_t(\phi)$ voor ieder tijdstip t een functie op de cirkel, en dus 2π -periodiek in de variabele ϕ .

- Schrijf deze vergelijking in de vorm $\frac{d}{dt}f_t = Lf_t$. De eigenvectoren van L zijn $f_k(\phi) = e^{-ik\phi}$ met k een geheel getal. Wat zijn de bijbehorende eigenwaarden λ_k van L ? Geef de dispersierelatie, dat wil zeggen de frequentie $\omega_k = i\lambda_k$ als functie van het golfgetal k .
- Laat zien dat de golfsnelheid $v_k = \omega_k/k$ niet afhangt van het golfgetal k .
- Wat is de oplossing $f_k(\phi, t)$ bij beginvoorwaarde $f_k(\phi)$?
- Stel dat de beginvoorwaarde $f_0(\phi)$ Fouriercoëfficiënten c_k heeft. Wat zijn dan de coëfficiënten $c_k(t)$ in de Fourierexpansie

$$f_t(\phi) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{k=-N}^N c_k(t) e^{ik\phi}$$

van de oplossing $f_t(\phi)$?

- e) Schrijf $f_t(\phi)$ als functie van de variabele $(\phi - c_g t)$. Geef de oplossing $f_t(\phi)$ met beginvoorwaarde $f_0(\phi)$.
- f) Bovenstaande differentiaalvergelijking kan geschreven worden als $\frac{d}{dt} f_t = -iH(f_t)$ met $H = iL$ hermitisch. Waarom? Is $\|f_t\|^2$ inderdaad onafhankelijk van t ?

We passen Propositie 3.14 toe op de hermitische operator $\frac{1}{\hbar}H$, met H de Hamiltonoperator $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V$. De differentiaalvergelijking $\frac{d}{dt} \psi_t = -\frac{i}{\hbar} H \psi_t$ is equivalent met de tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking $i\hbar \frac{d}{dt} \psi_t = H \psi_t$. In dit geval zegt Propositie 3.14 het volgende.

Corollarium 3.15. *Voor iedere oplossing ψ_t van de tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking geldt dat $\|\psi_t\| = \|\psi_0\|$.*

Er geldt dus behoud van waarschijnlijkheid: als de kansdichtheid $|\psi_0(x)|^2$ op tijdstip $t = 0$ integreert tot 1, dan is dit nog steeds het geval op tijdstip t . De ‘totale kans’ $\|\psi_t\|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_t(x)|^2 dx$ is immers onafhankelijk van de tijd.

Maar behalve behoud van waarschijnlijkheid heeft Corollarium 3.15 nog een belangrijk gevolg. Stel we benaderen een beginvoorwaarde ψ_0 met een eindige lineaire combinatie

$$p_N = \sum_{n=1}^N c_n \psi_n$$

van eigenvectoren van H , en maken hierbij een kleine fout $\Delta = \|\psi_0 - p_N\|$. De tijdsevolutie ψ_t weten we dan niet precies, maar we benaderen deze met de bekende tijdsevolutie

$$p_N(x, t) = \sum_{n=1}^N c_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \psi_n(x)$$

van de projectie p_N . Omdat $\psi_t(x) - p_N(x, t)$ een oplossing van de Schrödingervergelijking met beginvoorwaarde $\psi_0 - p_N$ is, zegt Corollarium 3.15 ons dat $\|\psi_t - p_{N,t}\| = \|\psi_0 - p_N\|$, en dat de fout $\Delta_t = \|\psi_t - p_{N,t}\|$ op tijdstip t dus even groot is als de fout op tijdstip $t = 0$.

In het bijzonder volgt uit $\lim_{N \rightarrow \infty} \|p_N - \psi_0\| = 0$ dus ook dat de limiet $\lim_{N \rightarrow \infty} \|\psi_t - p_{N,t}\|$ gelijk is aan nul. Als we de begintoestand ψ_0 een limiet is van functies p_N waarvan we de tijdsontwikkeling $p_{N,t}$ kennen, dan is ψ_t de limiet van deze functies.

Stelling 3.16. *Als $p_{N,t}$ oplossingen zijn van de tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking $i\hbar \frac{d}{dt} \psi_t = H \psi_t$, en*

$$\lim_{N \rightarrow \infty}^{L^2} p_N = \psi_0,$$

dan is

$$\lim_{N \rightarrow \infty}^{L^2} p_{N,t} = \psi_t.$$

Opgave 3.11. We bekijken de differentiaalvergelijking

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi_t(\phi) = \frac{\partial^5}{\partial \phi^5} \psi_t(\phi),$$

met beginvoorwaarde $\psi_0(\phi)$. Hier is $\psi_t(\phi)$ een functie op de cirkel, en dus 2π -periodiek in de variabele ϕ .

- a) Schrijf deze vergelijking in de vorm $\frac{d}{dt}\psi_t = L\psi_t$. De eigenvectoren van L zijn $\psi_k(\phi) = e^{-ik\phi}$ met k een geheel getal. Wat zijn de bijbehorende eigenwaarden λ_k van L ?
- b) Wat is de oplossing $\psi_k(\phi, t)$ bij beginvoorwaarde $\psi_k(\phi)$?
- c) Geef de dispersierelatie, dat wil zeggen de frequentie $\omega_k = i\lambda_k$ als functie van het golfgetal k . Voor de Hamiltonoperator was deze kwadratisch in k . Waarom is dat nu niet meer zo?
- d) Stel dat $\psi_0(\phi)$ Fouriercoëfficiënten c_k heeft. Wat zijn dan de coëfficiënten $c_k(t)$ in de Fourierexpansie

$$\psi_t(\phi) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{k=-N}^N c_k(t) e^{ik\phi}$$

van de oplossing $\psi_t(\phi)$?

- e) Schrijf de differentiaalvergelijking als $\frac{d}{dt}\psi_t = -iH\psi_t$. Is H hermitisch? Wat weet je nu dus over $\|\psi_t\|$?
- f) Gebruik de Stelling van Parseval om $\|\psi_t\|$ uit te drukken in $\|\psi_0\|$.

3.5 Differentiaaloperatoren met constante coëfficiënten

We zijn al een aantal differentiaalvergelijkingen tegengekomen van de vorm

$$\frac{\partial}{\partial t} f_t(x) = \left(a_n \frac{\partial^n}{\partial x^n} + \dots + a_1 \frac{\partial}{\partial x} + a_0 \right) f_t(x), \quad (83)$$

waar $f_t: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ een T -periodieke functie van x is die op $t = 0$ aan de beginvoorwaarde $f_t(x) = f_0(x)$ voldoet. We schrijven dit als

$$\frac{d}{dt} f_t = L(f_t), \quad f_{t=0} = f_0,$$

waar

$$L(f)(x) = \left(a_n \frac{\partial^n}{\partial x^n} + \dots + a_1 \frac{\partial}{\partial x} + a_0 \right) f(x).$$

een *lineaire differentiaaloperator met constante coëfficiënten* is.

Opgave 3.12. Ga na dat de Schrödingervergelijking (78) voor een vrij deeltje op de cirkel van deze vorm is. Wat zijn de coëfficiënten $a_0, \dots, a_n$ in dit geval? Doe hetzelfde voor de differentiaalvergelijkingen van opgave 3.10 en opgave 3.11. Waarom is de Schrödingervergelijking (58) in het algemeen *niet* van deze vorm?

De eigenvectoren van L zijn de T -periodieke functies $b_k(x) = e^{i\omega_k x}$, waar de periodiciteit afdwingt dat $\omega_k = \frac{2\pi}{T}k$ een geheel veelvoud van $\frac{2\pi}{T}$ is. Zij voldoen aan de eigenwaardevergelijking

$$L(b_k) = \lambda_k b_k \quad (84)$$

met eigenwaarde

$$\lambda_k = a_n (i\omega_k)^n + \dots + a_1 (i\omega_k) + a_0. \quad (85)$$

Met behulp van de eigenvectoren b_k en de eigenwaarden λ_k vinden we de fundamentele oplossingen $b_k(t, x) = e^{\lambda_k t} b_k(x)$ van (83), die op $t = 0$ aan de beginvoorwaarde $b_k(0, x) = b_k(x)$ voldoen.

Omdat de differentiaalvergelijking (83) lineair is, is de oplossing met beginvoorwaarde $p_N(x) = \sum_{k=-N}^N c_k e^{i\omega_k x}$ gelijk aan

$$p_N(t, x) = \sum_{k=-N}^N c_k e^{\lambda_k t} e^{i\omega_k x},$$

met ω_k en λ_k als hierboven. Schrijven we dit als

$$p_N(t, x) = \sum_{k=-N}^N c_k(t) e^{i\omega_k x},$$

dan zien we dat de Fouriercoëfficiënten $c_k(t)$ van $p_N(t, x)$ gelijk zijn aan

$$c_k(t) = e^{\lambda_k t} c_k. \quad (86)$$

Zoeken we een oplossing met beginvoorwaarde $f_t(x) = f_0(x)$ op tijdstip $t = 0$, dan ligt het voor de hand om

$$f_0(x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{k=-N}^N c_k e^{i\omega_k x}$$

te ontbinden in golven met frequentie $\omega_k = \frac{2\pi}{T}k$, waarbij de Fouriercoëfficiënten c_k uitgerekend worden met $c_k = \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} f(x) e^{-i\omega_k x} dx$. We verwachten dan dat $f_t(x)$ Fouriercoëfficiënten $c_k(t) = c_k e^{\lambda_k t}$ heeft, en dus ontbonden kan worden in golven met frequentie $\omega_k = \frac{2\pi}{T}k$ als

$$f_t(x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{k=-N}^N c_k e^{\lambda_k t} e^{i\omega_k x}, \quad (87)$$

met

$$\lambda_k = a_n (i\omega_k)^n + \dots + a_1 (i\omega_k) + a_0. \quad (88)$$

Dit blijkt inderdaad het geval te zijn als de oneindige som in (87) absoluut convergeert. Dit is bijvoorbeeld het geval als $f_0(x)$ een gladde functie is, en alle eigenwaarden λ_k een reëel deel $\operatorname{Re}(\lambda_k) \leq 0$ hebben.

Opgave 3.13. We bekijken de convergentie van de reeks (87) onder aanname dat $\sum_{k=-\infty}^{\infty} |c_k|$ eindig is. (Dit laatste is altijd het geval voor gladde functies.)

- Ga na dat (87) inderdaad convergeert als $\operatorname{Re}(\lambda_k) \leq 0$ voor alle k .
- Laat zien dat $\operatorname{Re}(\lambda_k) \leq 0$ is als de coëfficiënten a_i van de differentiaaloperator L voldoen aan $\operatorname{Re}(a_0) \leq 0$, $\operatorname{Re}(a_1) = 0$, $\operatorname{Re}(a_2) > 0$, $\operatorname{Re}(a_3) = 0$, enzovoorts.
- Voor welke waarden van $a_0, \dots, a_n$ is $H = iL$ een Hermitische operator?
- Vergelijk je resultaten voor b) en c) met Stelling 3.16.

4 Fouriertheorie voor integreerbare functies

In Hoofdstuk 2 hebben we gezien dat T -periodieke functies $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ ontbonden kunnen worden in golven $e^{i\omega_k x}$ met frequentie $\omega_k = \frac{2\pi}{T}k$,

$$f(x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{k=-N}^N c_k e^{i\omega_k x}. \quad (89)$$

De amplitude c_k van de golf $e^{i\omega_k x}$ wordt hierbij gegeven door de Fouriercoëfficiënt

$$c_k = \frac{1}{T} \int_{-T}^T f(x) e^{-i\omega_k x} dx. \quad (90)$$

We willen een dergelijke decompositie in golven ook graag voor functies $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ die niet periodiek zijn. Dit blijkt te kunnen als f *absoluut integreerbaar* is, dat wil zeggen, als $\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)| dx < \infty$. De ruimte van absoluut integreerbare functies $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ geven we aan met $\mathcal{L}^1(\mathbb{R})$,

$$\mathcal{L}^1(\mathbb{R}) = \left\{ f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}; \int_{-\infty}^{\infty} |f(x)| dx < \infty \right\}.$$

Voor een T -periodieke functie f worden de toegestane frequenties $\omega_k = \frac{2\pi}{T}k$ bepaald door de periode T ; hoe groter de periode, hoe dichter de frequenties ω_k op elkaar liggen. De strategie om een niet-periodieke functie f te ontbinden in golven ligt voor de hand. Op het interval $[-T/2, T/2]$ is $f(x)$ immers gelijk aan $f^T(x)$, waar $f^T(x)$ de T -periodieke functie is met $f^T(x) = f(x)$ voor $-T/2 \leq x < T/2$.

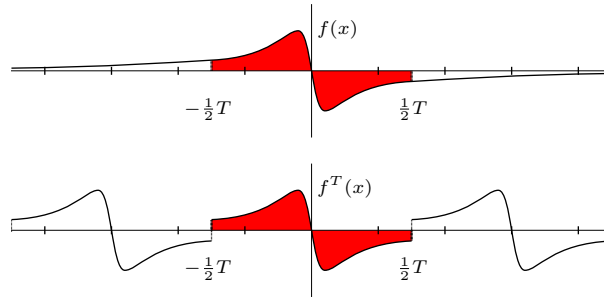


FIG. 19: Uit de functie $f(x)$ maken we de T -periodieke functie $f^T(x)$ die overeenkomt met $f(x)$ voor $-\frac{1}{2}T \leq x < \frac{1}{2}T$.

We passen dus Fouriertheorie toe op de T -periodieke functie $f^T(x)$, en laten vervolgens T naar oneindig gaan. Omdat de afstand $\Delta\omega = \omega_{k+1} - \omega_k$ daarbij naar nul gaat, deze is immers gelijk aan $\Delta\omega = \frac{2\pi}{T}$, gaat de som (89) hierbij over in een integraal.

We bekijken de Fouriercoëfficiënten c_k^T bij een vaste frequentie $\omega = \frac{2\pi}{T}k$, als functie van de periode T . Als T naar oneindig gaat, dan gaan de Fouriercoëfficiënten c_k^T naar nul. Herschalen we echter met een factor $\frac{\Delta\omega}{\sqrt{2\pi}} = \frac{\sqrt{2\pi}}{T}$, dan zien we met vergelijking (90) en $\lim_{T \rightarrow \infty} f^T(x) = f(x)$ dat

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{\sqrt{2\pi}}{\Delta\omega} c_k^T = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-i\omega x} dx.$$

Voor een absoluut integreerbare functie f definiëren we daarom de *Fourier-getransformeerde* $\mathcal{F}f(\omega)$ bij de frequentie ω als

$$\mathcal{F}f(\omega) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-i\omega x} dx. \quad (91)$$

Voeren we dezelfde herschaling met $\frac{\Delta\omega}{\sqrt{2\pi}}$ uit in vergelijking (89), dan vinden we

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{k=-N}^N \left(\frac{T}{\sqrt{2\pi}} c_k^T \right) e^{i\omega_k x} \Delta\omega. \quad (92)$$

Voor $T \rightarrow \infty$ zagen we dat $\frac{T}{\sqrt{2\pi}} c_k^T$ nadert tot $\mathcal{F}f(\omega)$. Substitueren we dit in (92), dan wordt het rechterlid

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{k=-N}^N \mathcal{F}f(\omega) e^{i\omega_k x} \Delta\omega.$$

Omdat de stapgrootte $\Delta\omega$ steeds kleiner wordt, nadert de bovenstaande som tot de integraal

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{F}f(\omega) e^{i\omega x} d\omega.$$

We verwachten dus dat $f(x)$ gelijk is aan $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{F}f(\omega) e^{i\omega x} d\omega$. Dit blijkt inderdaad het geval te zijn, ten minste als $\mathcal{F}f$ zelf weer een absoluut integreerbare functie van de frequentie ω is.

4.1 De inversiestelling van Fourier

Als $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ een absoluut integreerbare functie is, dan definiëren we de *Fouriergetransformeerde* $\mathcal{F}f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ als

$$\mathcal{F}f(\omega) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-i\omega x} dx. \quad (93)$$

Stelling 4.1. *Stel dat $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ absoluut integreerbaar is, dat ook $\mathcal{F}f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ absoluut integreerbaar is, en dat f continu en differentieerbaar is in x . Dan geldt*

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{F}f(\omega) e^{i\omega x} d\omega. \quad (94)$$

Bewijs. Zie [2] voor een sluitend² bewijs van deze stelling. $\square$

De functie f is dus wederom te schrijven als een combinatie van golven $e^{i\omega x}$. In dit geval is de combinatie echter geen som maar een integraal, waarbij $\mathcal{F}f(\omega)$ de ‘frequentiedichtheid’ bij de frequentie ω aangeeft.

²De redenering die ons tot tot formule (94) leidde, is niet geheel waterdicht. Het punt is dat we de benadering $\frac{T}{\sqrt{2\pi}} c_k^T \rightarrow \mathcal{F}f(\omega)$ en de benadering

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{k=-N}^N \mathcal{F}f(\omega) e^{i\omega_k x} \Delta\omega \rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{F}f(\omega) e^{i\omega x} d\omega$$

apart hebben uitgevoerd, terwijl beide limietprocessen eigenlijk gelijktijdig plaatsvinden.

4.1.1 Een voorbeeld: $f(x) = e^{-a|x|}$

De functie $f(x) = e^{-a|x|}$ met $a > 0$ is absoluut integreerbaar, en continu differentieerbaar in alle punten x behalve $x = 0$.

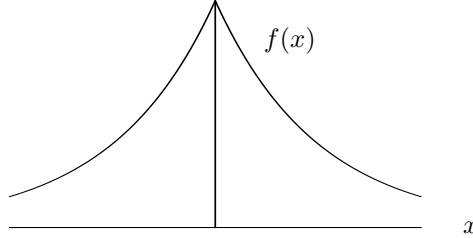


FIG. 20: Grafiek van de functie $f(x) = e^{-a|x|}$.

We berekenen de Fouriergetransformeerde $\mathcal{F}f(\omega)$ van $f(x)$. De definitie (93) van $\mathcal{F}f(\omega)$ levert

$$\mathcal{F}f(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-i\omega x} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-a|x|} e^{-i\omega x} dx.$$

Omdat $|x| = x$ voor $x \geq 0$ en $|x| = -x$ voor $x \leq 0$, is het handig om deze integraal te splitsen in twee stukken. Gebruik makend van $e^{ax} e^{-i\omega x} = e^{(a-i\omega)x}$ en $e^{-ax} e^{-i\omega x} = e^{-(a+i\omega)x}$ vinden we dan

$$\begin{aligned} \mathcal{F}f(\omega) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^0 e^{(a-i\omega)x} dx + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\infty} e^{-(a+i\omega)x} dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left[\frac{1}{a-i\omega} e^{(a-i\omega)x} \right]_{-\infty}^0 + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left[\frac{-1}{a+i\omega} e^{-(a+i\omega)x} \right]_0^{\infty} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{2a}{a^2 + \omega^2}. \end{aligned}$$

Omdat $\mathcal{F}f$ continu en differentieerbaar is in alle punten x behalve $x = 0$, zegt Stelling 4.1 dat $f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{F}f(\omega) e^{i\omega x} d\omega$. Voor $x \neq 0$ hebben we dus

$$e^{-a|x|} = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{a}{a^2 + \omega^2} e^{i\omega x} d\omega. \quad (95)$$

We zullen dadelijk zien dat dit ook geldt voor $x = 0$. De functie $f(x) = e^{-a|x|}$ wordt zo ontbonden in golven $e^{i\omega x}$, waar de frequentie ω voorkomt met ‘frequentiedichtheid’ $\frac{1}{\pi} \frac{a}{a^2 + \omega^2}$.

4.1.2 Discontinuïteiten

Als de functie f niet continu is in x , hebben we een verfijning nodig van Stelling 4.1. Voor *periodieke* functies f zagen we in hoofdstuk 2.5 dat de Fourierreeks $\frac{1}{T} \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{k=-N}^N c_k e^{i\omega_k x}$ in zulke gevallen niet convergeert naar $f(x)$, maar naar het gemiddelde $\frac{1}{2}(f(x_-) + f(x_+))$ van de linkerlimiet $f(x_-) = \lim_{t \uparrow x} f(x)$ en de rechterlimiet $f(x_+) = \lim_{t \downarrow x} f(x)$. Het blijkt dat de Fouriertransformatie voor integreerbare functies $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ zich precies zo gedraagt.

Stelling 4.2. *Stel dat $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ absoluut integreerbaar is, dat de linker- en rechterlimiet $f(x_-) = \lim_{t \uparrow x} f(x)$ en $f(x_+) = \lim_{t \downarrow x} f(x)$ bestaan, en dat f zowel links- als rechtsdifferentieerbaar is. Dan geldt*

$$\frac{1}{2}(f(x_-) + f(x_+)) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \lim_{\Omega \rightarrow \infty} \int_{-\Omega}^{\Omega} \mathcal{F}f(\omega) e^{i\omega x} d\omega. \quad (96)$$

Bewijs. Voor een bewijs verwijzen we wederom naar [2]. □

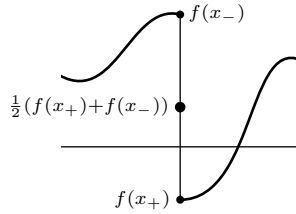


FIG. 21: Als de functie f niet continu is, dan is $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \lim_{\Omega \rightarrow \infty} \int_{-\Omega}^{\Omega} \mathcal{F}f(\omega) e^{i\omega x} d\omega$ niet gelijk aan $f(x_-)$ of $f(x_+)$, maar aan $\frac{1}{2}(f(x_+) + f(x_-))$.

Passen we deze stelling toe op de functie $f(x) = e^{-a|x|}$ uit § 4.1.1, dan zien we dat formule (95) niet alleen geldt voor $x \neq 0$, maar ook voor $x = 0$. Er geldt immers $f(0_-) = f(0_+) = 1$, zodat het gemiddelde $\frac{1}{2}(f(0_-) + f(0_+))$ ook gelijk is aan 1. Hoewel f niet differentieerbaar is in $x = 0$, is ze daar wel links- en rechtsdifferentieerbaar, met afgeleiden $f'(0_-) = a$ en $f'(0_+) = -a$. Stelling 4.2 zegt dus dat

$$1 = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{a}{a^2 + \omega^2} d\omega.$$

Opgave 4.1. Kun je deze formule ook zonder Stelling 4.2 afleiden?

In de volgende opgave berekenen we de Fouriergetransformeerde van een functie die niet continu is.

Opgave 4.2. De functie $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ is gegeven door $f(x) = 1/2$ voor $-1 \leq x \leq 1$ en $f(x) = 0$ voor $|x| > 1$.

- Schets de functie $f(x)$.
- Bereken de Fouriergetransformeerde $\mathcal{F}f(\omega)$.
- Wat is de ontbinding van $f(x)$ in golffuncties $e^{i\omega x}$ voor $x \neq \pm 1$?
- En wat gebeurt er als $x = \pm 1$?

De volgende stelling zegt dat de Fouriergetransformeerde $\mathcal{F}f(\omega)$ van een absoluut integreerbare functie $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ altijd continu is, zelfs als f dat niet is. Bovendien nadert $\mathcal{F}f(\omega)$ tot 0 voor $\omega \rightarrow \pm\infty$.

Stelling 4.3 (Riemann-Lebesque). *De Fouriergetransformeerde $\mathcal{F}f(\omega)$ van een absoluut integreerbare functie f is overal continu. Bovendien geldt*

$$\lim_{\omega \rightarrow \pm\infty} \mathcal{F}f(\omega) = 0.$$

Bewijs. Zie [2], Stelling 13.2. □

Het resultaat dat $\mathcal{F}f(\omega)$ tot nul nadert voor $\omega \rightarrow \pm\infty$ staat bekend als het *Lemma van Riemann-Lebesgue*.

Opgave 4.3. Controleer Stelling 4.3 voor de Fouriergetransformeerde die je gevonden hebt in Opgave 4.2.

Opgave 4.4. De functie $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ is gegeven door $f(x) = 1 - x^2$ voor de waarden $-1 \leq x \leq 1$ en $f(x) = 0$ voor $|x| > 1$.

- Schets de functie $f(x)$.
- Bereken de Fouriergetransformeerde $\mathcal{F}f(\omega)$.
- Wat is de ontbinding van $f(x)$ in golf functies $e^{i\omega x}$?

Opgave 4.5. Controleer Stelling 4.3 voor de Fouriergetransformeerde $\mathcal{F}f$ die je gevonden hebt in Opgave 4.4. (Hint: de Taylorexpanaties van $\sin$ en $\cos$ zijn $\cos(\omega) = 1 - \frac{1}{2}\omega^2 + \frac{1}{24}\omega^4 + \dots$, en $\sin(\omega) = \omega - \frac{1}{6}\omega^3 + \frac{1}{120}\omega^5 + \dots$)

Opmerking 12. In vergelijking (94) staat

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{F}f(\omega) e^{i\omega x} d\omega,$$

terwijl in vergelijking (96) sprake is van

$$\lim_{\Omega \rightarrow \infty} \int_{-\Omega}^{\Omega} \mathcal{F}f(\omega) e^{i\omega x} d\omega.$$

Dit is hetzelfde als $\mathcal{F}f$ absoluut integreerbaar is, maar in het algemeen is er een subtiel verschil. De vergelijking $\int_{-\infty}^{\infty} F(\omega) d\omega = C$ impliceert dat $\int_{\Omega'}^{\Omega} F(\omega) d\omega$ tot C nadert voor $\Omega \rightarrow -\infty$ en $\Omega' \rightarrow \infty$, ongeacht de manier waarop het limietproces zich voltrekt. In $\lim_{\Omega \rightarrow \infty} \int_{-\Omega}^{\Omega} F(\omega) d\omega = C$ hebben we echter een koppeling $\Omega = -\Omega'$ tussen de boven- en de ondergrens.

4.2 De Stelling van Plancherel

Voor T -periodieke functies geeft de Stelling van Parseval (Stelling 2.4) een relatie tussen de integraal $\int_{-T/2}^{T/2} |f(x)|^2 dx$ en de som $\sum_{k=-\infty}^{\infty} |c_k|^2$. We onderzoeken de implicaties hiervan voor absoluut integreerbare functies $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$. Omdat de frequentie ω in dit geval continue waarden aan kan nemen, verwachten we een verband tussen $\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx$ en $\int_{-\infty}^{\infty} |\mathcal{F}f(\omega)|^2 d\omega$.

Wederom benaderen we $f(x)$ met de T -periodieke functie $f^T(x)$ die voor $-T/2 \leq x < T/2$ dezelfde waarden heeft als $f(x)$. De Stelling van Plancherel geeft dan

$$\int_{-T/2}^{T/2} |f(x)|^2 dx = T \sum_{k=-\infty}^{\infty} |c_k^T|^2. \quad (97)$$

Voor $T \rightarrow \infty$ nadert $\frac{T}{\sqrt{2\pi}} c_k^T$ tot $\mathcal{F}f(\omega_k)$, waar de frequentie ω_k gelijk is aan $\omega_k = 2\pi k/T$. Het ligt dus voor de hand om $\frac{2\pi}{T^2} |\mathcal{F}f(\omega_k)|^2$ te substitueren voor $|c_k|^2$. Het rechterlid van (97) wordt daarmee

$$\sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{2\pi}{T} |\mathcal{F}f(\omega_k)|^2.$$

In $\frac{2\pi}{T}$ herkennen we nu het verschil $\Delta\omega = \omega_{k+1} - \omega_k$ tussen twee opeenvolgende frequenties. In de limiet $T \rightarrow \infty$ hebben we dus $\Delta\omega \rightarrow 0$, en

$$\sum_{k=-\infty}^{\infty} |\mathcal{F}f(\omega_k)|^2 \Delta\omega \rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} |\mathcal{F}f(\omega)|^2 d\omega.$$

Al met al verwachten we dus dat $\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx$ gelijk is aan $\int_{-\infty}^{\infty} |\mathcal{F}f(\omega)|^2 d\omega$. Dat dit inderdaad het geval is, staat bekend als de *Stelling van Plancherel*.

Stelling 4.4 (Plancherel). *Voor elke absoluut integreerbare functie $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ geldt*

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\mathcal{F}f(\omega)|^2 d\omega. \quad (98)$$

Bewijs. Voor een sluitend bewijs, zie Corollarium 19.8 in [2]. $\square$

Opgave 4.6. Voor de functie $f(x) = e^{-|x|}$ hadden we in §4.1.1 de Fouriergetransformeerde berekend, $\mathcal{F}f(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{2}{1+\omega^2}$.

a) Bereken $\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx$.

b) Wat is $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{(1+x^2)^2} dx$? (Hint: gebruik de stelling van Plancherel.)

Opgave 4.7. Pas de Stelling van Plancherel toe op de functie $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ van Opgave 4.2. Bereken $\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx$. Wat is $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2(\omega)}{\omega^2} d\omega$?

Opmerking 13. Voor de Fouriergetransformeerde zijn verschillende conventies in omloop. In de formule $\mathcal{F}f(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-i\omega x} dx$ laat men bijvoorbeeld wel de factor $\sqrt{2\pi}$ weg, of vervangt die door een factor 2π . De Fouriergetransformeerde wordt in dat geval vaak niet met $\mathcal{F}f(\omega)$, maar met $\hat{f}(\omega)$ aangeduid. Hierbij veranderen uiteraard ook allerlei formules, zoals vergelijking (98). In de regel blijft het verschil beperkt tot een factor 2π .

4.3 Eigenschappen van de Fouriertransformatie

Vatten we zowel $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ als $\mathcal{F}: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ op als vectoren in de inproductruimte $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, dan zegt de Stelling van Plancherel dat

$$\|f\|^2 = \|\mathcal{F}f\|^2.$$

De Fouriergetransformeerde is een *lineaire* operator, in de zin dat $\mathcal{F}(f+g) = \mathcal{F}f + \mathcal{F}g$ en $\mathcal{F}(\lambda f) = \lambda \mathcal{F}f$ voor elk complex getal λ . Volgens de Stelling van Plancherel behoudt de Fouriertransformatie dus niet alleen optelling en scalaire vermenigvuldiging, maar ook de *norm*. Zulke operatoren heten wel *unitair* of *isometrisch*.

Opgave 4.8. Controleer dat de Fouriertransformatie inderdaad optelling en scalaire vermenigvuldiging respecteert.

Als een functie f absoluut integreerbaar is, en haar Fouriergetransformeerde $\mathcal{F}f$ is dit ook, dan kunnen we van $\mathcal{F}f$ weer de Fouriergetransformeerde $\mathcal{F}(\mathcal{F}f) = \mathcal{F}^2 f$ berekenen. Het is niet moeilijk te zien dat dit de gespiegelde van de oorspronkelijke functie f is.

Propositie 4.5. *Stel dat f en $\mathcal{F}f$ beide absoluut integreerbaar zijn, en dat f continu en differentieerbaar is in x . Dan is $\mathcal{F}^2 f(x) = f(-x)$.*

Bewijs. Als we in de inversieformule

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{F}f(\omega) e^{i\omega x} d\omega$$

van Stelling 4.1 de variabele x vervangen door $-\omega$, en de integratievariabele ω door x , dan staat er

$$f(-\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{F}f(x) e^{-i\omega x} dx.$$

De rechterkant van deze vergelijking is per definitie de Fouriergetransformeerde $\mathcal{F}(\mathcal{F}f)(\omega)$ van de functie $\mathcal{F}f$. We vinden dus $f(-\omega) = \mathcal{F}^2 f(\omega)$. $\square$

Tweemaal Fouriertransformeren is dus hetzelfde als spiegelen, en als je een functie f viermaal Fouriertransformeert, krijg je weer de oude functie terug: $\mathcal{F}^4 f(x) = f(x)$.

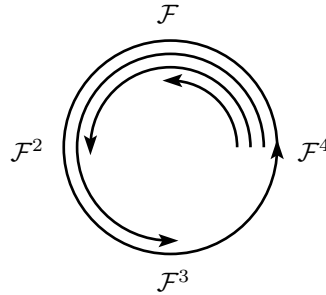


FIG. 22: Het kwadraat van de operator $\mathcal{F}$ is de spiegeling $\mathcal{F}^2 f(x) = f(-x)$, en zijn vierde macht is de identiteitstransformatie $\mathcal{F}^4 f(x) = f(x)$.

4.3.1 Even, oneven en reële functies

Net als bij periodieke functies, heeft de Fouriergetransformeerde $\mathcal{F}f(\omega)$ speciale eigenschappen als f even, oneven of reëel is.

Propositie 4.6. *Voor de Fouriergetransformeerde $\mathcal{F}f(\omega)$ van een absoluut integreerbare functie $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ geldt:*

- Als f even is, dan is $\mathcal{F}f$ dat ook, $\mathcal{F}f(-\omega) = \mathcal{F}f(\omega)$.
- Als f oneven is, dan is $\mathcal{F}f$ dat ook, $\mathcal{F}f(-\omega) = -\mathcal{F}f(\omega)$.
- Als f reëel is, dan is $\mathcal{F}f(-\omega) = \overline{\mathcal{F}f(\omega)}$.

Bewijs. Met de substitutie $\tilde{x} = -x$ zien we dat

$$\begin{aligned} \mathcal{F}f(-\omega) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{i\omega x} dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(-\tilde{x}) e^{-i\omega \tilde{x}} d\tilde{x}. \end{aligned}$$

Als f even is, dan is $f(-\tilde{x}) = f(\tilde{x})$. De bovenstaande vergelijking wordt dan

$$\mathcal{F}f(-\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(\tilde{x}) e^{-i\omega\tilde{x}} d\tilde{x} = \mathcal{F}f(\omega).$$

Is f oneven, dan is $f(-\tilde{x}) = -f(\tilde{x})$, en verkrijgen we

$$\mathcal{F}f(-\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} -f(\tilde{x}) e^{-i\omega\tilde{x}} d\tilde{x} = -\mathcal{F}f(\omega).$$

De Fouriergetransformeerde $\mathcal{F}f$ is dus even of oneven al naar gelang f even of oneven is. Als f reëel is, dan is $\overline{\mathcal{F}f}(\omega) = \mathcal{F}f(\omega)$. We hebben dan

$$\overline{\mathcal{F}f}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \overline{f(x)} e^{-i\omega x} dx = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{i\omega x} dx = \mathcal{F}f(-\omega).$$

Enigszins verrassend is de Fouriergetransformeerde $\mathcal{F}f(\omega)$ dus *niet* noodzakelijkerwijze reëel als de functie f reëel is. $\square$

4.3.2 Fouriertransformatie en goniometrische functies

Net als bij periodieke functies kan de Fouriertransformatie beschreven worden in termen van de golven $C_\omega(x) = \cos(\omega x)$ en $S_\omega(x) = \sin(\omega x)$, waar de frequentie ω loopt van 0 tot ∞ . Hiervoor schrijven we de Fourier inversieformule als

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{F}f(\omega) e^{i\omega x} d\omega \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{F}f(\omega) \cos(\omega x) d\omega + \frac{i}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{F}f(\omega) \sin(\omega x) d\omega. \end{aligned}$$

We splitsen de integraal van $-\infty$ tot ∞ in een integraal van $-\infty$ tot 0 en een integraal van 0 tot ∞ . De integraal van $-\infty$ tot 0 zetten we om in een integraal van 0 tot ∞ met behulp van de substitutie $\tilde{x} = -x$. Omdat $\cos(-\omega\tilde{x}) = \cos(\omega\tilde{x})$ en $\sin(-\omega\tilde{x}) = -\sin(\omega\tilde{x})$, verkrijgen we dan

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\infty} (\mathcal{F}f(\omega) + \mathcal{F}f(-\omega)) \cos(\omega x) d\omega \\ &\quad + \frac{i}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\infty} (\mathcal{F}f(\omega) - \mathcal{F}f(-\omega)) \sin(\omega x) d\omega. \end{aligned}$$

In termen van

$$a(\omega) := \frac{1}{2} (\mathcal{F}f(\omega) + \mathcal{F}f(-\omega)) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \cos(\omega x) dx$$

en

$$b(\omega) := \frac{i}{2} (\mathcal{F}f(\omega) - \mathcal{F}f(-\omega)) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \sin(\omega x) dx$$

hebben we dus

$$f(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{\infty} a(\omega) \cos(\omega x) d\omega + \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{\infty} b(\omega) \sin(\omega x) d\omega.$$

We hebben dus het volgende resultaat gevonden, waarmee een functie $f(x)$ uitgedrukt kan worden in termen van de golven $\cos(\omega x)$ en $\sin(\omega x)$.

Stelling 4.7. *Stel dat $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ absoluut integreerbaar is, en continu en differentieerbaar in x . Dan is*

$$f(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty a(\omega) \cos(\omega x) d\omega + \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty b(\omega) \sin(\omega x) d\omega, \quad (99)$$

waar $a(\omega)$ en $b(\omega)$ gegeven zijn door

$$a(\omega) := \frac{1}{2} (\mathcal{F}f(\omega) + \mathcal{F}f(-\omega)) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^\infty f(x) \cos(\omega x) dx, \quad (100)$$

$$b(\omega) := \frac{i}{2} (\mathcal{F}f(\omega) - \mathcal{F}f(-\omega)) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^\infty f(x) \sin(\omega x) dx. \quad (101)$$

Opgave 4.9. De functie $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ is gegeven door $f(x) = 0$ voor $x < 0$, en $f(x) = e^{-ax}$ voor $x \geq 0$.

- Schets de grafiek van f .
- Bereken de Fouriergetransformeerde $\mathcal{F}f(\omega)$.
- Laat zien dat

$$\int_0^\infty \frac{\cos(c\omega)}{a^2 + \omega^2} d\omega = \frac{\pi}{2a} e^{-ac} \quad \text{en} \quad \int_0^\infty \frac{\omega \sin(c\omega)}{a^2 + \omega^2} d\omega = \frac{\pi}{2} e^{-ac}.$$

(Hint: bekijk (99) voor $f(c)$ en $f(-c)$.) Dit zijn de *integralen van Laplace*.

4.3.3 Translatie en schaling

De *translatie* $f_a: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ van een functie $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ wordt gegeven door $f_a(x) = f(x - a)$. De grafiek van f_a is met een hoeveelheid a naar rechts verschoven ten opzichte van de grafiek van f .

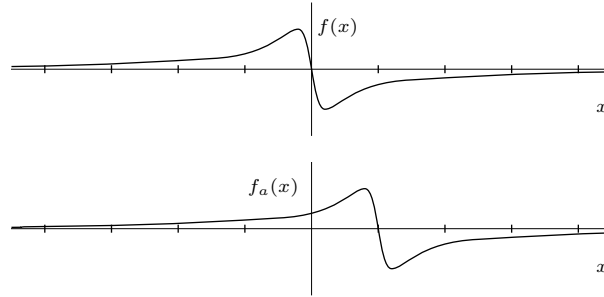


FIG. 23: Grafiek van de functie $f(x)$ en haar translatie $f_a(x) = f(x - a)$.

Propositie 4.8 (Translatie). *De Fouriergetransformeerde van de functie $f_a(x) = f(x - a)$ is*

$$\mathcal{F}f_a(\omega) = e^{-i\omega a} \mathcal{F}f(\omega). \quad (102)$$

Bewijs. Omdat $f_a(x) = x - a$, levert de substitutie $\tilde{x} = x - a$ het resultaat

$$\begin{aligned}\mathcal{F}f_a(\omega) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x-a) e^{-i\omega x} dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(\tilde{x}) e^{-i\omega \tilde{x} - i\omega a} d\tilde{x} \\ &= e^{-i\omega a} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(\tilde{x}) e^{-i\omega \tilde{x}} d\tilde{x}.\end{aligned}$$

Dit laatste is gelijk aan $e^{-i\omega a} \mathcal{F}f(\omega)$. $\square$

Opgave 4.10. Bij deze opgave kun je gebruiken dat $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2} dx = \sqrt{2\pi}$.

- Bereken de Fouriergetransformeerde $\mathcal{F}f(\omega)$ van de functie $f(x) = e^{-x^2/2}$. (Hint: substitueer $\tilde{x} = x + i\omega$.)
- Bereken de Fouriergetransformeerde $\mathcal{F}f_\mu(\omega)$ van $f_\mu(x) = e^{-(x-\mu)^2/2}$. (Hint: substitueer $\tilde{x} = x - \mu$.)
- Bereken de Fouriergetransformeerde $\mathcal{F}f_{\mu,\sigma}(\omega)$ van $f_{\mu,\sigma}(x) = e^{-(x-\mu)^2/(2\sigma^2)}$. (Hint: substitueer $\tilde{x} = (x - \mu)/\sigma$.)
- Wat is dus de Fouriergetransformeerde van de gaussische kansdichtheid

$$p_{\mu,\sigma}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{1}{2\sigma^2}(x-\mu)^2}$$

met gemiddelde μ en standaarddeviatie σ ?

De *geschaalde* functie $f_\sigma(x) = f(x/\sigma)$ van $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ is σ maal zo breed als f .

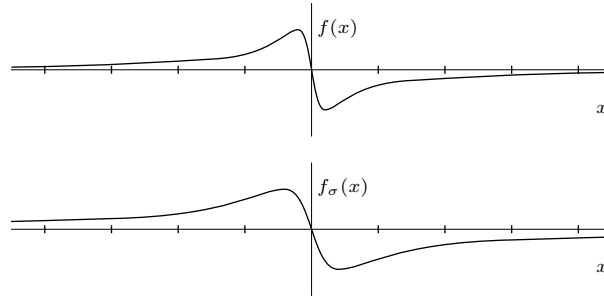


FIG. 24: Grafiek van de functie $f(x)$ en haar schaling $f_\sigma(x) = f(x/\sigma)$ met $\sigma = 2$.

Propositie 4.9 (Schaling). *De Fouriergetransformeerde van de geschaalde functie $f_\sigma(x) = f(x/\sigma)$ is gelijk aan $\mathcal{F}f_\sigma(\omega) = \sigma \mathcal{F}f(\sigma\omega)$.*

Opgave 4.11. Bewijs de bovenstaande propositie. (Hint: gebruik de substitutie $\tilde{x} = x/\sigma$.)

4.3.4 Differentiatie

Differentiëren we de uitdrukking $f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{F}f(\omega) e^{i\omega x} d\omega$ links en rechts naar x , dan vinden we de ontbinding van $f(x)$ in golven $e^{i\omega x}$,

$$\frac{d}{dx} f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} i\omega \mathcal{F}f(\omega) e^{i\omega x} d\omega.$$

Vergelijken we dit met de inversieformule

$$\frac{d}{dx} f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{F}\left(\frac{d}{dx} f\right)(\omega) e^{i\omega x} d\omega$$

voor de afgeleide van f , dan zien we dat

$$\mathcal{F}\left(\frac{d}{dx} f\right)(\omega) = i\omega \mathcal{F}f(\omega). \quad (103)$$

Met behulp van partiële integratie kunnen we deze formule ook afleiden in het (iets algemenere) geval dat de functie f een primitieve is van f' .

Stelling 4.10. *Stel dat de functies $f(x)$ en $f'(x)$ beide absoluut integreerbaar zijn, en dat $f(x)$ een primitieve is van $f'(x)$. Dan is*

$$\mathcal{F}f'(\omega) = i\omega \mathcal{F}f(\omega). \quad (104)$$

Bewijs. Met partiële integratie zien we dat

$$\begin{aligned} \mathcal{F}f'(\omega) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f'(x) e^{-i\omega x} dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} [f(x) e^{-i\omega x}]_{-\infty}^{\infty} + i\omega \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-i\omega x} dx = i\omega \mathcal{F}f(\omega). \end{aligned}$$

Bij de laatste stap hebben we gebruikt dat $\mathcal{F}f(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-i\omega x} dx$, en dat³ $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} f(x) = 0$. $\square$

Opgave 4.12. Geef een derde bewijs door (102) naar a te differentiëren in $a = 0$.

Differentiëren we de uitdrukking $\mathcal{F}f(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-i\omega x} dx$ links en rechts naar ω , dan vinden we

$$\frac{d}{d\omega} \mathcal{F}f(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} -ix f(x) e^{-i\omega x} dx.$$

Voor de Fouriergetransformeerde $\mathcal{F}(xf)(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} xf(x) e^{-i\omega x} dx$ vinden we dus

$$\mathcal{F}(xf)(\omega) = i \frac{d}{d\omega} \mathcal{F}f(\omega).$$

Met iets meer moeite kan men de volgende stelling bewijzen.

³De limiet $\lim_{x \rightarrow \infty} f(x)$ bestaat omdat f' integreerbaar is, en $\lim_{x \rightarrow \infty} f(x) = f(0) + \int_0^{\infty} f'(x) dx$. Hij moet dan wel nul zijn, anders was f niet absoluut integreerbaar.

Stelling 4.11. Als de functies $f(x)$ en $xf(x)$ absoluut integreerbaar zijn, dan is $\mathcal{F}f(\omega)$ differentieerbaar, en

$$\mathcal{F}(xf)(\omega) = i \frac{d}{d\omega} \mathcal{F}f(\omega). \quad (105)$$

Bewijs. Zie Stelling 13.5 in [2]. $\square$

Samenvattend hebben we de volgende relaties gevonden tussen Fouriertransformatie en differentiatie:

$$\mathcal{F}\left(\frac{d}{dx}f\right)(\omega) = i\omega \mathcal{F}f(\omega), \quad (106)$$

$$\mathcal{F}(xf)(\omega) = i \frac{d}{d\omega} \mathcal{F}f(\omega). \quad (107)$$

Door deze herhaald toe te passen verkrijgen we

$$\mathcal{F}\left(\frac{d^n}{dx^n}f\right)(\omega) = (i\omega)^n \mathcal{F}f(\omega), \quad (108)$$

$$\mathcal{F}(x^n f)(\omega) = \left(i \frac{d}{d\omega}\right)^n \mathcal{F}f(\omega), \quad (109)$$

onder aanname dat alle relevante functies absoluut integreerbaar zijn.

Opgave 4.13. We hebben reeds gezien dat de Fouriergetransformeerde van $f(x) = e^{-x^2/2}$ gelijk is aan $\mathcal{F}f(\omega) = e^{-\omega^2/2}$.

- Wat is de Fouriergetransformeerde van $f(x) = xe^{-x^2/2}$? En van $f(x) = x^2e^{-x^2/2}$? En van $f(x) = x^3e^{-x^2/2}$?
- Wat is de Fouriergetransformeerde van $f(x) = -xe^{-x^2/2}$? En van $f(x) = (x^2 - 1)e^{-x^2/2}$? En van $f(x) = (-x^3 + 3x)e^{-x^2/2}$? (Dit zijn de eerste, tweede en derde afgeleide van $f(x) = e^{-x^2/2}$.)

4.4 Differentiaaloperatoren met constante coëfficiënten

We bekijken de differentiaalvergelijking

$$\frac{\partial}{\partial t} f_t(x) = \left(a_n \frac{\partial^n}{\partial x^n} + \dots + a_1 \frac{\partial}{\partial x} + a_0 \right) f_t(x) \quad (110)$$

voor een functie $f_t: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ met beginvoorwaarde $f_t(x) = f_0(x)$ op $t = 0$. In tegenstelling tot de situatie in § 3.5 bekijken we nu functies die niet T -periodiek in x zijn.

We schrijven (110) als

$$\frac{d}{dt} f_t = L(f_t), \quad f_{t=0} = f_0$$

voor de lineaire differentiaaloperator

$$L(f)(x) = \left(a_n \frac{\partial^n}{\partial x^n} + \dots + a_1 \frac{\partial}{\partial x} + a_0 \right) f(x).$$

De eigenvectoren van L zijn de golven $e^{i\omega x}$. We hebben immers

$$L(e^{i\omega x}) = (a_n (i\omega)^n + \dots + a_1 (i\omega) + a_0) e^{i\omega x},$$

dus $L(e^{i\omega x}) = \lambda(\omega)e^{i\omega x}$ met eigenwaarde

$$\lambda(\omega) = (a_n(i\omega)^n + \dots + a_1(i\omega) + a_0). \quad (111)$$

De oplossing van (110) met beginvoorwaarde $f_0(x) = e^{i\omega x}$ wordt dus gegeven door $f_t(x) = e^{\lambda(\omega)t}e^{i\omega x}$.

Met behulp van de inversiestelling van Fourier kunnen we nu de functie $f_0(x)$ schrijven als een combinatie van golven $e^{i\omega x}$,

$$f_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{F}f_0(\omega)e^{i\omega x}d\omega. \quad (112)$$

Omdat de differentiaalvergelijking lineair is, en de beginvoorwaarde $e^{i\omega x}$ oplossing $e^{\lambda(\omega)t}e^{i\omega x}$ geeft, verwachten we dat de oplossing $f_t(x)$ met beginvoorwaarde (112) gegeven wordt door

$$f_t(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{F}f_0(\omega)e^{\lambda(\omega)t}e^{i\omega x}d\omega, \quad (113)$$

met $\lambda(\omega)$ als in (111). Vergelijken we dit met

$$f_t(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{F}f_t(\omega)e^{i\omega x}d\omega,$$

dan zien we dat de Fouriergetransformeerde $\mathcal{F}f_t(\omega)$ van de oplossing $f_t(x)$ gelijk is aan $e^{\lambda(\omega)t}\mathcal{F}f_0(\omega)$.

Hierbij is enige voorzichtigheid geboden. In (112) staat immers geen som over de golven met verschillende frequenties, maar een integraal, en dan nog wel een integraal die van $-\infty$ tot ∞ loopt. Redeneren alsof dit een eindige lineaire combinatie van golven is, is dus zonder meer riskant. Niettemin blijkt (113) inderdaad de oplossing met beginvoorwaarde $f_0(x)$ te zijn, mits $|e^{\lambda(\omega)t}| \leq 1$ voor alle $t \geq 0$. (Zonder deze voorwaarde kan het zelfs zijn dat de integraal (113) überhaupt niet convergeert.) Omdat $|e^{\lambda(\omega)t}| = e^{-\operatorname{Re}(\lambda\omega)t}$, hebben we dus nodig dat $\operatorname{Re}(\lambda(\omega)) \leq 0$ voor alle frequenties ω .

5 Inhomogene lineaire differentiaalvergelijkingen

De lineaire, *inhomogene* differentiaalvergelijking in één variabele is

$$\frac{d}{dt}x(t) = \lambda x(t) + f(t), \quad (114)$$

waar λ een vaste constante is, en $f(t)$ een voorgeschreven functie van t .

Om de oplossing $x(t)$ met beginvoorwaarde $x(0) = x_0$ te vinden, merken we op dat de *homogene* differentiaalvergelijking

$$\frac{d}{dt}\tilde{x}(t) = \lambda\tilde{x}(t)$$

die ontstaat door $f(t)$ weg te laten, de oplossing $\tilde{x}(t) = \tilde{x}_0 e^{\lambda t}$ heeft. Als oplossing voor (114) proberen we daarom de *ansatz*

$$x(t) = y(t)e^{\lambda t}, \quad (115)$$

waar $y(t)$ een nog nader te bepalen functie van t is. Merk op dat $x(t)$ en $y(t)$ dezelfde beginvoorwaarden hebben, $x(0) = y(0)$. Als $x(t)$ aan de inhomogene vergelijking (114) voldoet, dan zien we met de kettingregel dat $y(t) = x(t)e^{-\lambda t}$ voldoet aan

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}y(t) &= \left(\frac{d}{dt}x(t)\right)e^{-\lambda t} + x(t)\frac{d}{dt}e^{-\lambda t} \\ &= (\lambda x(t) + f(t))e^{-\lambda t} - \lambda x(t)e^{-\lambda t} \\ &= f(t)e^{-\lambda t}. \end{aligned}$$

Dit gaat de goede kant op, de factor $y(t)$ komt niet meer voor aan de rechterkant. Met $y(0) = x(0) = x_0$ krijgen we dus

$$y(t) = x_0 + \int_0^t f(\tau)e^{-\lambda\tau} d\tau.$$

Vullen we dit in in onze ansatz (115), dan vinden we

$$x(t) = x_0 e^{\lambda t} + e^{\lambda t} \int_0^t f(\tau)e^{-\lambda\tau} d\tau = x_0 e^{\lambda t} + \int_0^t f(\tau)e^{\lambda(t-\tau)} d\tau.$$

Samenvattend hebben we dus de volgende oplossing van ons probleem.

Propositie 5.1. *De oplossing $x(t)$ van de inhomogene lineaire differentiaalvergelijking (114) met beginvoorwaarde x_0 is*

$$x(t) = x_0 e^{\lambda t} + \int_0^t f(\tau)e^{\lambda(t-\tau)} d\tau. \quad (116)$$

Opmerking 14. In de praktijk is de ansatz (115) vaak makkelijker toe te passen dan het kant-en-klare resultaat (116).

5.1 Inhomogene vergelijkingen in een vectorruimte V

Als V een inproductruimte is, met een lineaire operator $L: V \rightarrow V$ en een voorgeschreven vectorwaardige functie $\vec{f}(t)$, dan luidt de bijbehorende *inhomogene* lineaire differentiaalvergelijking

$$\frac{d}{dt}\vec{v}(t) = L(\vec{v}(t)) + \vec{f}(t). \quad (117)$$

We willen deze oplossen met beginvoorwaarde $\vec{v}(t=0) = \vec{v}_0$.

Net als bij de homogene lineaire differentiaalvergelijking gebruiken we de eigenwaarden en eigenvectoren van L om dit probleem terug te voeren tot de lineaire, inhomogene differentiaalvergelijking in één variabele, die we zojuist opgelost hebben.

Stel dat $\vec{b}_n$ een basis van eigenvectoren voor L is, bij eigenwaarde λ_n . We ontbinden dan zowel $\vec{v}(t)$ als $\vec{f}(t)$ in de eigenvectoren $\vec{b}_n$. Dit levert

$$\vec{v}(t) = \sum_{n=1}^N c_n(t) \vec{b}_n \quad (118)$$

$$\vec{f}(t) = \sum_{n=1}^N f_n(t) \vec{b}_n, \quad (119)$$

met basiscoëfficiënten $c_n(t)$ voor $\vec{v}(t)$ en $f_n(t)$ voor $\vec{f}(t)$.

Vullen we deze basisontbinding in in vergelijking (117), dan vinden we

$$\frac{d}{dt} \sum_{n=1}^N c_n(t) \vec{b}_n = L \left(\sum_{n=1}^N c_n(t) \vec{b}_n \right) + \sum_{n=1}^N f_n(t) \vec{b}_n.$$

Gebruiken we de lineariteit van L en de eigenwaardevergelijking $L(\vec{b}_n) = \lambda_n \vec{b}_n$, dan wordt dit

$$\sum_{n=1}^N \left(\frac{d}{dt} c_n(t) \right) \vec{b}_n = \sum_{n=1}^N \lambda_n c_n(t) \vec{b}_n + \sum_{n=1}^N f_n(t) \vec{b}_n,$$

ofwel

$$\sum_{n=1}^N \left(\frac{d}{dt} c_n(t) - \lambda_n c_n(t) - f_n(t) \right) \vec{b}_n = 0.$$

We vinden dus voor ieder van de basiscoëfficiënten $c_n(t)$ de lineaire inhomogene differentiaalvergelijking

$$\frac{d}{dt} c_n(t) = \lambda_n c_n(t) + f_n(t), \quad (120)$$

waar de beginvoorwaarden $c_n^0 = c_n(0)$ gegeven worden door de ontbinding

$$\vec{v}_0 = \sum_{n=1}^N c_n^0 \vec{b}_n$$

van de beginvoorwaarde $\vec{v}_0$ in eigenvectoren $\vec{b}_n$. De basiscoëfficiënten $c_n(t)$ van $\vec{v}(t)$ worden dus gegeven door de oplossing van (120) met beginvoorwaarde c_n^0 .

Propositie 5.2. *Stel dat L een basis $\vec{b}_n$ van eigenvectoren heeft, met eigenwaarde λ_n . Als de beginvoorwaarde $\vec{v}_0$ basiscoëfficiënten c_n^0 heeft, en $\vec{f}(t)$ heeft basiscoëfficiënten $f_n(t)$, dan kan de oplossing $\vec{v}(t)$ van de inhomogene lineaire vergelijking*

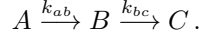
$$\frac{d}{dt} \vec{v}(t) = L(\vec{v}(t)) + \vec{f}(t) \quad (121)$$

geschreven worden als $\vec{v}(t) = \sum_{n=1}^N c_n(t) \vec{b}_n$, met basiscoëfficiënten

$$c_n(t) = c_n^0 e^{\lambda_n t} + \int_0^t f_n(\tau) e^{\lambda_n(t-\tau)} d\tau. \quad (122)$$

5.2 Een vervalproces met bron

We keren terug naar de situatie in §3.3.2, waar een verbinding A in B vervalst, die op haar beurt weer in C vervalst,



We nemen nu echter aan dat er een *bron* is, die elke seconde J mol/l van stof A produceert, ongeacht de concentraties van A , B en C . Dit verandert de vergelijking voor de concentraties van de drie stoffen $[A]_t$, $[B]_t$ en $[C]_t$ van een *homogene* in een *inhomogene* differentiaalvergelijking. In plaats van (66) vinden we nu

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} [A]_t \\ [B]_t \\ [C]_t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -k_{ab} & 0 & 0 \\ k_{ab} & -k_{bc} & 0 \\ 0 & k_{bc} & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} [A]_t \\ [B]_t \\ [C]_t \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} J \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

We schrijven dit wat compacter als

$$\frac{d}{dt} \vec{v}(t) = A \cdot \vec{v}(t) + \vec{f}, \quad (123)$$

waar de matrix A en de vectoren $\vec{v}(t)$ en $\vec{f}$ gegeven worden door

$$A = \begin{pmatrix} -k_{ab} & 0 & 0 \\ k_{ab} & -k_{bc} & 0 \\ 0 & k_{bc} & 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{v}(t) = \begin{pmatrix} [A]_t \\ [B]_t \\ [C]_t \end{pmatrix}, \quad \vec{f} = \begin{pmatrix} J \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Beginnen we met $[A]_0 = a$ en $[B]_0 = [C]_0 = 0$, dan is de beginvoorwaarde

$$\vec{v}_0 = \begin{pmatrix} [A]_0 \\ [B]_0 \\ [C]_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Vanwege de extra term $\vec{f}$ is (123) een *inhomogene* lineaire differentiaalvergelijking. Om haar op te lossen passen we de methode van § 5.1 toe. Als eerste stap zoeken we een basis van eigenvectoren van A . Deze hadden we in §3.3.2 reeds gevonden. Onder aanname dat $k_{bc} \neq k_{ab}$ zijn de eigenwaarden

$$\lambda_1 = 0, \quad \lambda_2 = -k_{ab}, \quad \text{en} \quad \lambda_3 = -k_{bc},$$

met bijbehorende eigenvectoren

$$\vec{b}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \vec{b}_2 = \begin{pmatrix} k_{bc} - k_{ab} \\ k_{ab} \\ -k_{bc} \end{pmatrix}, \quad \text{en} \quad \vec{b}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (124)$$

In ons geval hangt de vectorwaardige functie $\vec{f}(t)$ niet van de tijd af, hetgeen de berekeningen enigszins vergemakkelijkt. De ontbinding van $\vec{f}$ in eigenvectoren is $\vec{f} = f_1 \vec{b}_1 + f_2 \vec{b}_2 + f_3 \vec{b}_3$, met

$$f_1 = J, \quad f_2 = \frac{J}{k_{bc} - k_{ab}}, \quad f_3 = \frac{-Jk_{ab}}{k_{bc} - k_{ab}}.$$

Ontbinden we $\vec{v}(t) = c_1(t)\vec{b}_1 + c_2(t)\vec{b}_2 + c_3(t)\vec{b}_3$ in eigenvectoren, dan vinden we voor de basiscoëfficiënten $c_1(t)$, $c_2(t)$ en $c_3(t)$ de differentiaalvergelijking

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}c_1(t) &= J \\ \frac{d}{dt}c_2(t) &= -k_{ab}c_2(t) + \frac{J}{k_{bc} - k_{ab}} \\ \frac{d}{dt}c_3(t) &= -k_{bc}c_3(t) - \frac{Jk_{ab}}{k_{bc} - k_{ab}}.\end{aligned}$$

De beginvoorwaarden vinden we door $\vec{v}_0$ te ontbinden in eigenvectoren, $\vec{v}_0 = c_1^0\vec{b}_1 + c_2^0\vec{b}_2 + c_3^0\vec{b}_3$ met

$$c_1^0 = a, \quad c_2^0 = \frac{a}{k_{bc} - k_{ab}}, \quad c_3^0 = \frac{-ak_{ab}}{k_{bc} - k_{ab}}.$$

Dit zijn drie ongekoppelde inhomogene differentiaalvergelijkingen. Met Propositie 5.2 vinden we de oplossing

$$\begin{aligned}c_1(t) &= c_1^0 + \int_0^t f_1 d\tau \\ c_2(t) &= c_2^0 e^{-k_{ab}t} + \int_0^t f_2 e^{-k_{ab}(t-\tau)} d\tau \\ c_3(t) &= c_3^0 e^{-k_{bc}t} + \int_0^t f_3 e^{-k_{bc}(t-\tau)} d\tau.\end{aligned}\tag{125}$$

Omdat f_1 , f_2 en f_3 in dit geval niet van de tijd afhangen, kunnen we de integralen relatief eenvoudig oplossen. We vinden

$$\begin{aligned}c_1(t) &= a + Jt, \\ c_2(t) &= \frac{a}{k_{bc} - k_{ab}} e^{-k_{ab}t} + \frac{J}{k_{ab}(k_{bc} - k_{ab})} (1 - e^{-k_{ab}t}), \\ c_3(t) &= \frac{-ak_{ab}}{k_{bc} - k_{ab}} e^{-k_{bc}t} - \frac{Jk_{ab}}{k_{bc}(k_{bc} - k_{ab})} (1 - e^{-k_{bc}t}).\end{aligned}$$

Ten slotte gebruiken we $\vec{v}(t) = c_1(t)\vec{b}_1 + c_2(t)\vec{b}_2 + c_3(t)\vec{b}_3$ met de eigenvectoren $\vec{b}_1$, $\vec{b}_2$ en $\vec{b}_3$ van vergelijking (124) om de oplossing $\vec{v}(t) = ([A]_t, [B]_t, [C]_t)$ te vinden. Uitgeschreven in coördinaten levert dit

$$\begin{aligned}[A]_t &= (k_{bc} - k_{ab})c_2(t), \\ [B]_t &= k_{ab}c_2(t) + c_3(t), \\ [C]_t &= c_1(t) - k_{bc}c_2(t) - c_3(t),\end{aligned}$$

en dus

$$\begin{aligned}[A]_t &= \frac{J}{k_{ab}} + \left(a - \frac{J}{k_{ab}}\right) e^{-k_{ab}t} \\ [B]_t &= \frac{J}{k_{bc}} + \frac{ak_{ab} - J}{k_{bc} - k_{ab}} e^{-k_{ab}t} + \frac{Jk_{ab} - ak_{ab}k_{bc}}{k_{bc}(k_{bc} - k_{ab})} e^{-k_{bc}t} \\ [C]_t &= a - \frac{J}{k_{bc}} - \frac{J}{k_{ab}} + Jt + \frac{Jk_{bc} - ak_{ab}k_{bc}}{k_{ab}(k_{bc} - k_{ab})} e^{-k_{ab}t} + \frac{ak_{ab}k_{bc} - Jk_{ab}}{k_{bc}(k_{bc} - k_{ab})} e^{-k_{bc}t}.\end{aligned}$$

De totale hoeveelheid neemt dus toe als $[A]_t + [B]_t + [C]_t = a + Jt$, zoals verwacht.

Opmerking 15. Als de bron een tijdsafhankelijke hoeveelheid $J(t)$ van stof A afgeeft werkt deze strategie nog steeds. Het enige verschil is dat

$$f_1(\tau) = J(\tau), \quad f_2(\tau) = \frac{J(\tau)}{k_{bc} - k_{ab}}, \quad f_3(\tau) = \frac{-Jk_{ab}}{k_{bc} - k_{ab}}$$

nu tijdsafhankelijk zijn, zodat ze in (125) niet buiten de integraal gehaald kunnen worden.

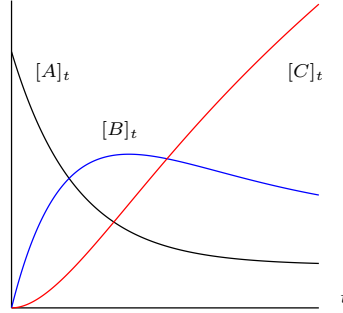


FIG. 25: De concentraties $[A]_t$, $[B]_t$ en $[C]_t$ als functie van de tijd.

5.3 De warmtevergelijking

Een van de eerste toepassingen van de Fouriertheorie, en wellicht de belangrijke reden voor Joseph Fourier om deze überhaupt te ontwikkelen, is het oplossen van de *warmtevergelijking*

Dit is een differentiaalvergelijking die uitdrukt hoe de temperatuur $T(t, x)$ van een materiaal verandert als functie van de tijd t en positie x . We leiden deze af voor een object waarvan de temperatuur alleen in de x -richting varieert. We onderzoeken hiertoe de warmtehuishouding van een plak materiaal met dikte Δx en doorsnede A .

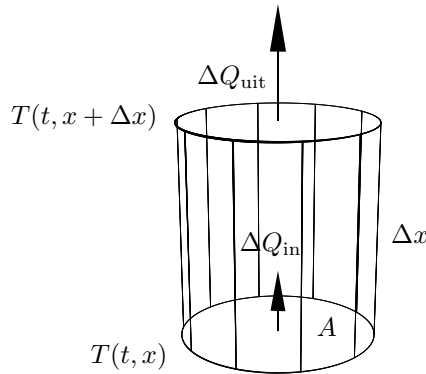


FIG. 26: Warmtestromen in een plak materiaal met dikte Δx en doorsnede met oppervlakte A . De coördinaat x is in de verticale richting aangegeven.

De warmte ΔQ_{in} die gedurende het tijdsinterval Δt bij x dit plakje binnenstroomt, is evenredig met de oppervlakte A en tijdsduur Δt . Omdat warmte van warm naar koud stroomt, is ΔQ_{in} ook evenredig met de tegengestelde van

de temperatuurgradiënt $\frac{\partial}{\partial x}T(t, x)$. Noemen we de evenredigheidsconstante κ (de *geleidingscoëfficiënt*), dan vinden we

$$\Delta Q_{\text{in}} = -\kappa \Delta t A \frac{\partial}{\partial x}T(t, x).$$

Op dezelfde wijze zien we dat de warmte die bij $x + \Delta x$ het plakje uitstroomt, gelijk is aan

$$\Delta Q_{\text{uit}} = -\kappa \Delta t A \frac{\partial}{\partial x}T(t, x + \Delta x).$$

Voor kleine waarden van Δx gebruiken we de benadering $f(x + \Delta x) \simeq f(x) + \Delta x \cdot \frac{\partial}{\partial x}f(x)$. Met $f(x) = \frac{\partial}{\partial x}T(t, x)$ levert dit

$$\Delta Q_{\text{uit}} \simeq -\kappa \Delta t A \left(\frac{\partial}{\partial x}T(t, x) + \Delta x \frac{\partial^2}{\partial x^2}T(t, x) \right).$$

Als er geen warmte van buiten het materiaal in of uitstroomt, is de totale warmte ΔQ die gedurende het interval Δt het plakje binnenstroomt, gelijk aan

$$\Delta Q = \Delta Q_{\text{in}} - \Delta Q_{\text{uit}} \simeq \kappa \Delta x \Delta t A \frac{\partial^2}{\partial x^2}T(t, x). \quad (126)$$

De hoeveelheid energie die nodig is om een temperatuurverandering ΔT te bewerkstelligen, is evenredig met ΔT , maar ook met de massa m van het plakje. De evenredigheidsconstante c heet de *soortelijke warmte* van het materiaal,

$$\Delta Q = cm \Delta T. \quad (127)$$

De massa is $m = \rho A \Delta x$, waar ρ de soortelijke dichtheid is. Combineren we dit met (127), dan vinden we

$$\Delta Q = c \rho \Delta x A \Delta T \quad (128)$$

voor de temperatuurverandering ΔT veroorzaakt door de toegestroomde warmte ΔQ . Vergelijken we nu de toegestroomde warmte (126) met de warmte (128) die nodig is om een temperatuurverandering ΔT te veroorzaken, dan vinden we

$$\frac{\Delta T}{\Delta t} \simeq \frac{\kappa}{c \rho} \frac{\partial^2}{\partial x^2}T(x, t).$$

In de limiet voor kleine Δt en Δx levert dit de *warmtevergelijking*

$$\frac{\partial}{\partial t}T(t, x) = \frac{\kappa}{c \rho} \frac{\partial^2}{\partial x^2}T(t, x). \quad (129)$$

We concluderen dat de temperatuur $T(t, x)$ van een geïsoleerd materiaal met geleidingscoëfficiënt κ , warmtecapaciteit c en soortelijke dichtheid ρ voldoet aan de *homogene, lineaire* warmtevergelijking (129).

Opmerking 16. De balans verandert als een externe warmtebron $J(t, x)$ Watt per kubieke meter warmte toevoegt op plaats x . De warmtetoevoer ΔQ die gedurende Δt in de plak materiaal met volume $A \Delta x$ plaats vindt, neemt dan toe met $J(t, x) A \Delta x \Delta t$. Vergelijking (126) voor de warmtetoevoer wordt dan

$$\Delta Q \simeq \left(\kappa \frac{\partial^2}{\partial x^2}T(t, x) + J(t, x) \right) A \Delta x \Delta t.$$

Passen we nu de balansvergelijking (128) toe, dan vinden we de *inhomogene lineaire* warmtevergelijking

$$\frac{\partial}{\partial t}T(t, x) = \frac{\kappa}{c \rho} \frac{\partial^2}{\partial x^2}T(t, x) + \frac{1}{c \rho} J(t, x). \quad (130)$$

5.3.1 Oplossingen voor een cirkelvormige draad

We bekijken de warmtevergelijking voor een cirkelvormige draad met straal R en omtrek $L = 2\pi R$. De temperatuur $T(t, x)$ is dan L -periodiek in x .

Geïsoleerd systeem Om te beginnen bekijken we de warmtevergelijking (129) voor een geïsoleerd systeem. Omdat (129) een lineaire differentiaalvergelijking met constante coëfficiënten is, gebruiken we de oplossingsmethode van § 3.5. Om te beginnen ontbinden we $T(t, x)$ in golven met frequentie $\omega_k = \frac{2\pi}{L}k = k/R$,

$$T(t, x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{k=-N}^N c_k(t) e^{i\omega_k x}.$$

De Fouriercoëfficiënten $c_k(t)$ van $T(t, x)$ veronderstellen we bekend op $t = 0$. Zij worden immers gegeven door

$$c_k^0 = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} T_0(x) e^{-i\omega_k x} dx, \quad (131)$$

waar $T_0(x)$ de temperatuurverdeling van de draad op tijdstip $t = 0$ is. Als we ons geen zorgen maken⁴ over het verwisselen van limieten en afgeleiden, vinden we

$$\frac{\partial}{\partial t} T(t, x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{k=-N}^N \left(\frac{d}{dt} c_k(t) \right) e^{i\omega_k x} \quad (132)$$

$$\frac{\kappa}{c\rho} \frac{\partial^2}{\partial x^2} T(t, x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{k=-N}^N \left(-\frac{\kappa}{c\rho} \omega_k^2 c_k(t) \right) e^{i\omega_k x}. \quad (133)$$

Uit de warmtevergelijking $\frac{\partial}{\partial t} T(t, x) = \frac{\kappa}{c\rho} \frac{\partial^2}{\partial x^2} T(t, x)$ volgt dus dat

$$\frac{d}{dt} c_k(t) = -\frac{\kappa}{c\rho} \omega_k^2 c_k(t), \quad (134)$$

waar de beginvoorwaarde $c_k(0) = c_k^0$ met vergelijking (131) volgt uit de warmteverdeling $T(0, x)$ op $t = 0$. De oplossing is

$$c_k(t) = e^{-\frac{\kappa}{c\rho} \omega_k^2 t} c_k^0,$$

zodat de warmteverdeling $T(t, x)$ op tijdstip t gegeven wordt door

$$T(t, x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{k=-N}^N c_k^0 e^{-\frac{\kappa}{c\rho} \omega_k^2 t} e^{i\omega_k x} \quad (135)$$

met $\omega_k = \frac{2\pi}{L}k = k/R$.

Opgave 5.1. Los de warmtevergelijking op voor een geïsoleerde, cirkelvormige draad van lengte $L = 2\pi R$, die op tijdstip $t = 0$ de temperatuurverdeling $T_0(x) = \cos(x/R)$ heeft.

⁴Deze aan roekeloosheid grenzende zorgeloosheid wordt gerechtvaardigd door het feit dat de eigenwaarden $\lambda_k = -\frac{\kappa}{c\rho} \omega_k^2$ van de relevante differentiaaloperator alle niet-positief zijn. Hierdoor ontstaan er geen convergentieproblemen in (135), cf. § 3.5.

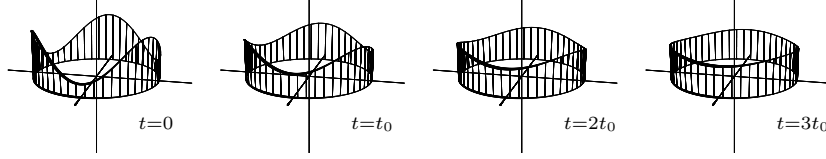


FIG. 27: Temperatuurprofiel (verticaal) in de loop van de tijd: de warmte verdeelt zich gelijkmatig over de cirkelvormige draad.

Systeem met warmtetoevoer Als een externe warmtebron een vermogen $J(t, x)$ per kubieke meter aan het systeem toevoegt, is de de *inhomogene* lineaire warmtevergelijking (135) van toepassing. Om deze op te lossen, ontbinden we het vermogen $J(t, x)$ in golven $e^{i\omega_k x}$ met amplitude $J_k(t)$ met behulp van de Fouriertransformatie,

$$J(t, x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{k=-N}^N J_k(t) e^{i\omega_k x} \quad (136)$$

met

$$J_k(t) = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} J(t, x) e^{-i\omega_k x} dx. \quad (137)$$

De differentiaalvergelijking $\frac{\partial}{\partial t} T(t, x) = \frac{\kappa}{c\rho} \frac{\partial^2}{\partial x^2} T(t, x) + \frac{1}{c\rho} J(t, x)$ met (132), (133) en (136) geeft nu in plaats van (134) de vergelijking

$$\frac{d}{dt} c_k(t) = -\frac{\kappa}{c\rho} \omega_k^2 c_k(t) + \frac{1}{c\rho} J_k(t). \quad (138)$$

Passen we Propositie 5.1 toe met $\lambda = -\frac{\kappa}{c\rho}$ en $f(t) = \frac{1}{c\rho} J_k(t)$, dan vinden we

$$c_k(t) = c_k^0 e^{-\frac{\kappa}{c\rho} \omega_k^2 t} + \frac{1}{c\rho} \int_0^t J_k(\tau) e^{\frac{\kappa}{c\rho} \omega_k^2 (\tau-t)} d\tau. \quad (139)$$

We vinden het temperatuurprofiel op tijdstip t dan met de inversiestelling van Fourier, $T(t, x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{k=-N}^N c_k(t) e^{i\omega_k x}$.

Opgave 5.2. Vergelijking (138) vereenvoudigt aanmerkelijk als het toegevoerde vermogen $J(x)$ *tijdsonafhankelijk* is. Als c_k^0 de Fouriercoëfficiënten van $T(0, x)$ zijn, en J_k de Fouriercoëfficiënten van $J(x)$, laat dan zien dat $T(t, x)$ gegeven wordt door

$$T(t, x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{k=-N}^N c_k(t) e^{i\omega_k x}$$

met

$$c_0(t) = c_0^0 + \frac{J_0}{c\rho} t$$

voor $k = 0$, en

$$c_k(t) = c_k^0 e^{-\frac{\kappa}{c\rho} \omega_k^2 t} + \frac{J_k}{\kappa \omega_k^2} \left(1 - e^{-\frac{\kappa}{c\rho} \omega_k^2 t} \right)$$

voor $k \neq 0$.

Opgave 5.3. Los de warmtevergelijking op voor een cirkelvormige draad van lengte $L = 2\pi R$, die op tijdstip $t = 0$ een constante temperatuurverdeling $T_0(x) = T_0$ heeft, en waaraan een (tijdsafhankelijk) vermogen $J(x) = \cos(x/R)$ per kubieke meter wordt toegevoerd. (Hint: gebruik opgave 5.2).

5.4 Oplossingen voor een oneindig lange draad

We bekijken de warmtevergelijking voor een oneindig lange draad, die voor $x \rightarrow \pm\infty$ de temperatuur nul aanneemt.

Geïsoleerd systeem Om te beginnen bekijken we de situatie zonder warmte-toevoer. De warmtevergelijking (129) is dan een lineaire differentiaalvergelijking met constante coëfficiënten, zodat we de oplossingsmethode van § 4.4 kunnen gebruiken.

We ontbinden dus het temperatuurprofiel $T(t, x)$ in golven $e^{i\omega x}$ met frequentie ω en amplitude $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathcal{F}T_t(\omega)$,

$$T(t, x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{F}T_t(\omega) e^{i\omega x} d\omega. \quad (140)$$

Halen we zorgeloos⁵ de afgeleiden door het integraalteken, dan vinden we

$$\frac{\partial}{\partial t} T(t, x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{F}T_t(\omega) e^{i\omega x} d\omega, \quad (141)$$

$$\frac{\kappa}{c\rho} \frac{\partial^2}{\partial x^2} T(t, x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left(-\frac{\kappa}{c\rho} \omega^2 \mathcal{F}T_t(\omega) \right) e^{i\omega x} d\omega. \quad (142)$$

De warmtevergelijking $\frac{\partial}{\partial t} T(t, x) = \frac{\kappa}{c\rho} \frac{\partial^2}{\partial x^2} T(t, x)$ geeft voor de Fouriergetransformeerde $\mathcal{F}T_t(\omega)$ dus de differentiaalvergelijking

$$\frac{d}{dt} \mathcal{F}T_t(\omega) = -\frac{\kappa}{c\rho} \omega^2 \mathcal{F}T_t(\omega).$$

De beginvoorwaarde $\mathcal{F}T_0(\omega)$ is gegeven door de Fouriergetransformeerde van het temperatuurprofiel $T_0(x)$ op tijdstip 0,

$$\mathcal{F}T_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} T_0(x) e^{-i\omega x} dx.$$

De oplossing is snel gevonden:

$$\mathcal{F}T_t(\omega) = e^{-\frac{\kappa}{c\rho} \omega^2 t} \mathcal{F}T_0(\omega). \quad (143)$$

Als het temperatuurprofiel $T_0(x)$ op tijdstip $t = 0$ Fouriergetransformeerde $\mathcal{F}T_0(\omega)$ heeft, dan wordt het temperatuurprofiel $T(t, x)$ op tijdstip t dus gegeven door

$$T(t, x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\kappa}{c\rho} \omega^2 t} \mathcal{F}T_0(\omega) e^{i\omega x} d\omega. \quad (144)$$

Als we deze integraal kunnen uitvoeren, hebben we dus de warmtevergelijking opgelost.

⁵De eigenwaarden $\lambda(\omega) = -\frac{\kappa}{c\rho} \omega^2$ zijn negatief, zodat in (144) geen convergentieproblemen ontstaan.

Opgave 5.4. Stel dat de temperatuur $T_0(x)$ op $t = 0$ een gaussische verdeling heeft met een maximum op $x = 0$ en breedte σ , dus

$$T_0(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}(x/\sigma)^2}.$$

- Laat zien dat de Fouriergetransformeerde $\mathcal{F}T_0(\omega)$ van de beginverdeling gelijk is aan $\mathcal{F}T_0(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\sigma^2\omega^2}$. (Hint: zie opgave 4.10.)
- Wat is $\mathcal{F}T_t(\omega)$? Laat zien dat dit te schrijven valt als $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\sigma_t^2\omega^2}$, en geef de variantie σ_t^2 als functie van t .
- Wat is het temperatuurprofiel $T(t, x)$ op tijdstip t ? Laat zien dat dit inderdaad een oplossing van de warmtevergelijking is.

Het resultaat van deze opgave is de moeite om te onthouden:

Propositie 5.3. *Stel dat het temperatuurprofiel $T(t, x)$ op tijdstip $t = 0$ een gaussische verdeling is met variantie σ^2 ,*

$$T_0(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}(x/\sigma)^2}.$$

Dan is de oplossing $T(t, x)$ van de warmtevergelijking $\frac{\partial}{\partial t}T(t, x) = \frac{\kappa}{c\rho} \frac{\partial^2}{\partial x^2}T(t, x)$ op tijdstip $t \geq 0$ nog immer gaussisch verdeeld, en de variantie

$$\sigma_t^2 = \sigma^2 + \frac{2\kappa}{c\rho}t$$

groeit lineair met de tijd.

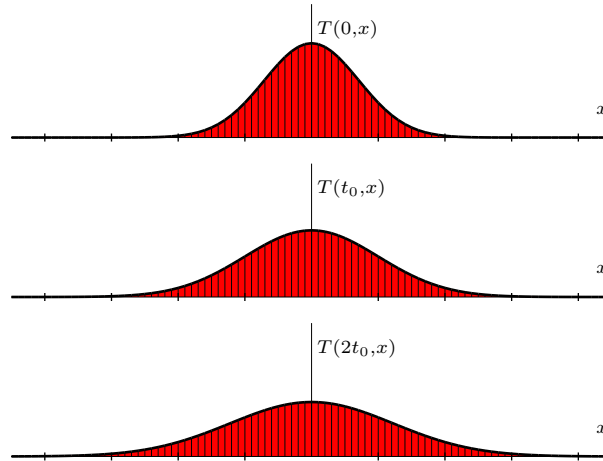


FIG. 28: Grafiek van $T(t, x)$ voor $t = 0$, $t = t_0$ en $t = 2t_0$.

Systeem met warmtetoevoer Als een externe warmtebron een vermogen $J(t, x)$ per kubieke meter aan het systeem toevoegt, dan is het temperatuurprofiel $T(t, x)$ een oplossing van de *inhomogene* lineaire warmtevergelijking

$$\frac{\partial}{\partial t}T(t, x) = \frac{\kappa}{c\rho} \frac{\partial^2}{\partial x^2}T(t, x) + \frac{1}{c\rho}J(t, x). \quad (145)$$

Om deze op te lossen, ontbinden we het vermogen $J(t, x)$ in golven $e^{i\omega x}$ met amplitude $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathcal{F}J_t(\omega)$,

$$J(t, x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{F}J_t(\omega) e^{i\omega x} d\omega. \quad (146)$$

Combineren we (141), (142) en (146) met de inhomogene warmtevergelijking (145), dan vinden we

$$\frac{d}{dt}\mathcal{F}T_t(\omega) = -\frac{\kappa}{c\rho}\omega^2\mathcal{F}T_t(\omega) + \frac{1}{c\rho}\mathcal{F}J_t(\omega).$$

Deze vergelijking hebben we opgelost in Propositie 5.1. Met $\lambda = -\frac{\kappa}{c\rho}\omega^2$ en $f(t) = \frac{1}{c\rho}\mathcal{F}J_t(\omega)$ vinden we de Fouriergetransformeerde

$$\mathcal{F}T_t(\omega) = e^{-\frac{\kappa}{c\rho}\omega^2 t}\mathcal{F}T_0(\omega) + \frac{1}{c\rho} \int_0^t \mathcal{F}J_\tau(\omega) e^{\frac{\kappa}{c\rho}\omega^2(\tau-t)} d\tau \quad (147)$$

van $T(t, x)$ in termen van de Fouriergetransformeerden van $T_0(x)$ en $J(t, x)$, die we beide bekend veronderstellen.

Opgave 5.5. Stel dat het toegevoegde vermogen $J(x)$ tijdsafhankelijk is. Laat zien dat $\mathcal{F}T_t(\omega)$ voldoet aan

$$\mathcal{F}T_t(\omega) = e^{-\frac{\kappa}{c\rho}\omega^2 t}\mathcal{F}T_0(\omega) + \frac{\mathcal{F}J(\omega)}{\kappa\omega^2} \left(1 - e^{-\frac{\kappa}{c\rho}\omega^2 t}\right) \quad (148)$$

voor $\omega \neq 0$, en aan

$$\mathcal{F}T_t(0) = \mathcal{F}T_0(0) + \frac{\mathcal{F}J(0)}{c\rho}t \quad (149)$$

voor $\omega = 0$.

Weten we eenmaal de Fouriergetransformeerde $\mathcal{F}T_t(\omega)$ uit vergelijking (147) of (148), dan vinden we het temperatuurprofiel $T(t, x)$ door de integraal $T(t, x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{F}T_t(\omega) e^{i\omega x} d\omega$ uit te voeren.

Opgave 5.6. Stel dat de draad op $t = 0$ temperatuur nul heeft, $T_0(x) = 0$. Het toegevoegde vermogen $J(x)$ is tijdsafhankelijk, en gaussisch verdeeld rond 0 met variantie σ^2 ,

$$J(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}(x/\sigma)^2}.$$

a) Laat zien dat $\mathcal{F}J(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\sigma^2\omega^2}$. (Hint: zie opgave 4.10.)

b) Laat zien dat

$$\mathcal{F}T_t(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{-\frac{1}{2}\sigma^2\omega^2} - e^{-\frac{1}{2}\sigma_t^2\omega^2}}{\kappa\omega^2}$$

met $\sigma_t^2 = \sigma^2 + \frac{2\kappa}{c\rho}t$.

c) Laat zien dat de functie

$$g_t(x) = \frac{1}{\sigma_t\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}(x/\sigma_t)^2} - \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}(x/\sigma)^2}$$

voldoet aan $\mathcal{F}g_t(\omega) = -\kappa\omega^2\mathcal{F}T_t(\omega)$.

d) Laat zien dat $T(t, x)$ voldoet aan $\kappa \frac{\partial^2}{\partial x^2} T(t, x) = g_t(x)$.

e) Laat zien dat het temperatuurprofiel op tijdstip t gegeven wordt door

$$T(t, x) = \kappa \int_{-\infty}^x \int_{-\infty}^y \frac{1}{\sigma_t \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}(z/\sigma_t)^2} - \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}(z/\sigma)^2} dz dy.$$

f) We definiëren de errorfunctie $E(x) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x e^{-\frac{1}{2}\xi^2} d\xi$, en schrijven haar integraal als $E_2(x) := \int_{-\infty}^x E(\xi) d\xi$. Laat zien dat

$$T(t, x) = \sigma_t E_2(x/\sigma_t) - \sigma E_2(x/\sigma),$$

$$\text{met } \sigma_t^2 = \sigma^2 + \frac{2\kappa}{c\rho} t.$$

5.5 convolutie en δ -functies

Stel dat de draad op tijdstip $t = 0$ temperatuur $T = 0$ heeft, behalve een klein stukje $y - \varepsilon \leq x \leq y + \varepsilon$ van de draad rond het punt y . Daar is de temperatuur T_0 . De totale hoeveelheid warmte-energie is dan $Q = cmT_0$, met m de massa $m = \rho V = 2\varepsilon\rho A$. We kunnen dus de temperatuur T_0 uitdrukken in de totale warmte-energie Q als

$$T_0 = \frac{Q}{c\rho A} \frac{1}{2\varepsilon} = \frac{B}{2\varepsilon},$$

waar B de constante $B = Q/c\rho A$ is. Het temperatuurprofiel op $t = 0$ is dus gegeven door $T_0(x) = \frac{B}{2\varepsilon}$ voor $|x - y| \leq \varepsilon$, en $T_0(x) = 0$ voor $|x - y| > \varepsilon$.

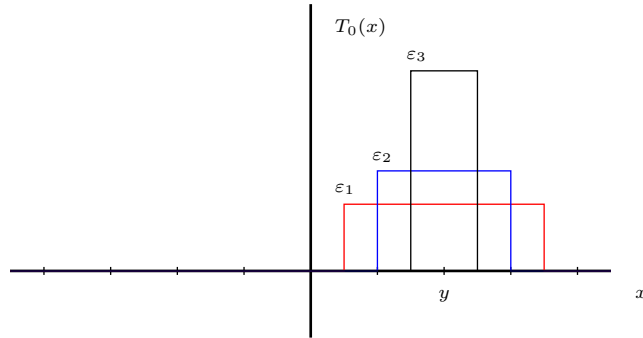


FIG. 29: Temperatuurprofiel $T_0(x)$ op tijdstip $t = 0$, voor drie verschillende waarden $\varepsilon_1 > \varepsilon_2 > \varepsilon_3$ van ε .

Om het temperatuurprofiel op tijdstip t te vinden, berekenen we eerst de Fouriergetransformeerde $\mathcal{F}T_0(\omega)$ van het temperatuurprofiel op tijdstip 0. Voor $\omega \neq 0$ vinden we

$$\mathcal{F}T_0(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{y-\varepsilon}^{y+\varepsilon} \frac{B}{2\varepsilon} e^{-i\omega x} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{B}{2\varepsilon} \left[\frac{e^{-i\omega x}}{-i\omega} \right]_{y-\varepsilon}^{y+\varepsilon} = \frac{B}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sin(\varepsilon\omega)}{\varepsilon\omega} e^{-iy\omega}.$$

Met (143) zien we dan dat

$$\mathcal{F}T_t(\omega) = \frac{B}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sin(\varepsilon\omega)}{\varepsilon\omega} e^{-\frac{\kappa t}{c\rho} \omega^2} e^{-iy\omega}.$$

We kunnen nu $T_t(x)$ bepalen met de Fourier inversieformule,

$$T_t(x) = \frac{B}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin(\varepsilon\omega)}{\varepsilon\omega} e^{-\frac{\kappa t}{c\rho}\omega^2} e^{i\omega(x-y)} d\omega. \quad (150)$$

Vanwege de factor $\frac{1}{\varepsilon\omega}$ is deze integraal niet eenvoudig expliciet uit te rekenen. We nemen daarom de limiet $\varepsilon \rightarrow 0$. Dit betekent fysisch dat we steeds kleinere stukjes draad een steeds hogere temperatuur geven, zodanig dat de totale hoeveelheid energie in de draad gelijk blijft (dit is de oppervlakte van de grafieken in Figuur 29).

We vinden dan $\lim_{\varepsilon \downarrow 0} \frac{\sin(\varepsilon\omega)}{\varepsilon\omega} = \lim_{u \downarrow 0} \frac{\sin(u)}{u} = \left. \frac{d}{du} \right|_0 \sin(u) = 1$, zodat

$$\lim_{\varepsilon \downarrow 0} \mathcal{F}T_t(\omega) = \frac{B}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\kappa t}{c\rho}\omega^2} e^{-iy\omega}, \quad (151)$$

en

$$\lim_{\varepsilon \downarrow 0} T_t(x) = \frac{B}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\kappa t}{c\rho}\omega^2} e^{i\omega(x-y)} d\omega. \quad (152)$$

Deze integraal is beter uit te rekenen. De substitutie $\tilde{\omega} = \sigma_t \omega - i(x-y)/\sigma_t$ met

$$\sigma_t^2 = \frac{2\kappa t}{c\rho}$$

(vergelijk opgave 4.10) levert

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\kappa t}{c\rho}\omega^2} e^{i\omega(x-y)} d\omega = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}\tilde{\omega}^2} e^{-\frac{1}{2}((x-y)/\sigma_t)^2} d(\tilde{\omega}/\sigma_t) = \frac{\sqrt{2\pi}}{\sigma_t} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-y}{\sigma_t}\right)^2}.$$

We vinden dus

$$\lim_{\varepsilon \downarrow 0} T_t(x) = \frac{B}{\sqrt{2\pi}\sigma_t} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-y}{\sigma_t}\right)^2}. \quad (153)$$

Beginnen we op $t = 0$ met een hoeveelheid energie Q geconcentreerd in het punt $x = y$, dan is het temperatuurprofiel $T_t(x)$ op tijdstip t dus gaussisch verdeeld met gemiddelde y en variantie $\sigma_t^2 = \frac{2\kappa t}{c\rho}$. De amplitude is $B = \frac{Q}{c\rho A}$.

5.5.1 De Dirac δ -functie

Een snellere manier om tot het resultaat (153) te komen, is door gebruik te maken van zogenaamde Dirac δ -functie. Stel dat $\delta_y(x)$ een functie is die bijna overal nul is, $\delta_y(x) = 0$ voor $x \neq y$, maar die wel integraal 1 heeft, $\int_{-\infty}^{\infty} \delta_y(x) = 1$.

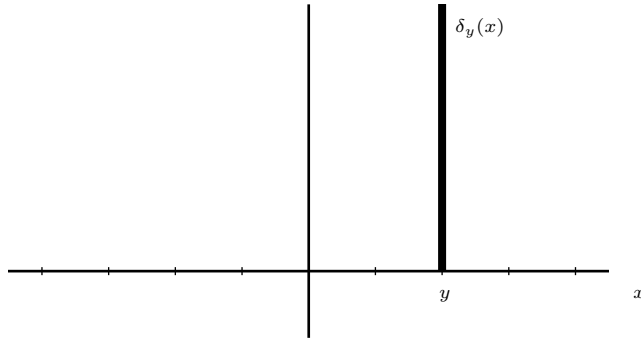


FIG. 30: De δ -functie $\delta_y(x)$, geconcentreerd in het punt $x = y$.

De temperatuurverdeling $T_0(x)$ van figuur 29 heeft voor iedere waarde van ε de integraal $B = \frac{Q}{c\rho A}$. De temperatuurverdeling op $t = 0$ in de limiet $\varepsilon \rightarrow 0$ wordt daarom beschreven met $T_0(x) = B\delta_y(x)$.

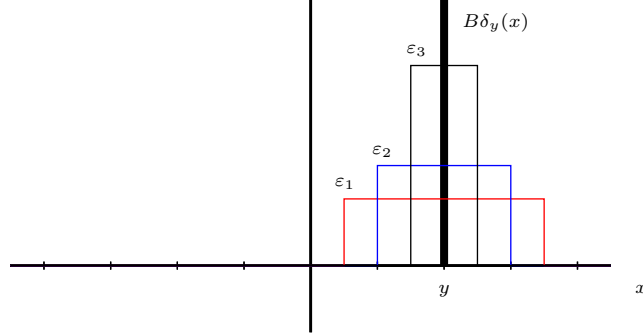


FIG. 31: De limiet voor $\varepsilon \rightarrow 0$ van de temperatuurverdeling is $T_0(x) = B\delta_y(x)$.

Om op een verantwoorde manier met δ -functies om te gaan, heeft men de theorie van *distributies* uitgevonden. We zullen hier een aantal eigenschappen van δ -functies bespreken die ons verder helpen met het oplossen van differentiaalvergelijkingen, en de achterliggende theorie van distributies verder laten voor wat zij is.

Omdat $\delta_y(x)$ geconcentreerd is in het punt $x = y$, geldt voor elke (gladde) functie f dat $f(x)\delta_y(x) = f(y)\delta_y(x)$. We vinden dus

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta_y(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} f(y)\delta_y(x)dx = f(y) \int_{-\infty}^{\infty} \delta_y(x)dx = f(y).$$

Met deze eigenschap is de Fouriergetransformeerde van de δ -functie eenvoudig te berekenen:

$$\mathcal{F}\delta_y(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \delta_y(x)e^{-i\omega x}dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-i\omega y}.$$

Nemen we als beginvoorwaarde $T_0(x) = B\delta_y(x)$ en passen we vergelijking (143) toe, dan zien we dat de Fouriergetransformeerde op tijdstip t gelijk is aan

$$\mathcal{F}T_t(\omega) = \frac{B}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{\kappa t}{c\rho}\omega^2 - i\omega y}.$$

We hebben dus op een alternatieve manier de vergelijking (151) voor $\mathcal{F}T_t(\omega)$ gevonden. Op dezelfde wijze als voorheen vinden we zo het temperatuurprofiel

$$T_t(x) = \frac{B}{\sqrt{2\pi\sigma_t}}e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-y}{\sigma_t}\right)^2}$$

op tijdstip t , dat veroorzaakt wordt door de beginvoorwaarde $T_0(x) = B\delta_y(x)$.

5.5.2 Convolutie

We hebben nu de oplossing $T_t(x)$ met beginvoorwaarde $T_0(x) = B\delta_y(x)$. Oplossingen met een willekeurige beginvoorwaarde $T_0(x)$ kunnen hieruit verkregen worden door T_0 te schrijven als een ‘continue lineaire combinatie’ van δ -functies,

$$T_0(x) = \int_{-\infty}^{\infty} T_0(y)\delta_y(x)dy, \quad (154)$$

waar de δ -functie $\delta_y(x)$ geconcentreerd in y de amplitude $T_0(y)$ heeft. Om te zien dat vergelijking (154) inderdaad geldt, gebruiken we de substitutie $u = x - y$. We vinden

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} T_0(y) \delta_y(x) dy &= \int_{-\infty}^{\infty} T_0(y) \delta_0(x - y) dy = \int_{-\infty}^{\infty} T_0(x - u) \delta_0(u) du \\ &= T_0(x - u)|_{u=0} = T_0(x).\end{aligned}$$

Omdat de warmtevergelijking $\frac{\partial}{\partial t} T_t(x) = \frac{\kappa}{c\rho} \frac{\partial^2}{\partial x^2} T_t(x)$ *lineair* is, kunnen we nu de oplossing $T_t(x)$ met beginvoorwaarde $T_0(x)$ verkrijgen door ‘continue lineaire combinaties’ van de oplossingen

$$G_t(x - y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_t}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-y}{\sigma_t}\right)^2}$$

bij beginvoorwaarde $T_0(x) = \delta_y(x)$ te nemen, de gaussische verdeling rond y met variantie $\sigma_t^2 = \frac{2\kappa t}{c\rho}$. In vergelijking (154) ontwikkelt $\delta_y(x)$ zich tot $G_t(x - y)$, zodat

$$T_t(x) = \int_{-\infty}^{\infty} T_0(y) G_t(x - y) dy.$$

Dit is het *convolutieproduct* van de functies $T_0(x)$ en $G_t(x)$. Dit wordt ook wel geschreven als $T_t(x) = T_0 * G_t(x)$.

Opgave 5.7. De *errorfunctie* is gedefiniëerd als $\text{Erf}(x) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^x e^{-\frac{1}{2}u^2} du$. Laat zien dat de warmtevergelijking met de beginvoorwaarde $T_0(x) = B$ voor $|x| \leq \varepsilon$, en $T_0(x) = 0$ voor $|x| > \varepsilon$, de oplossing

$$T_t(x) = \frac{B}{2\varepsilon} \left(\text{Erf}\left(\frac{x + \varepsilon}{\sigma_t}\right) - \text{Erf}\left(\frac{x - \varepsilon}{\sigma_t}\right) \right) \quad (155)$$

heeft, met $\sigma_t^2 = \frac{2\kappa t}{c\rho}$. We vinden op deze manier dus via een omweg alsnog de integraal (150).

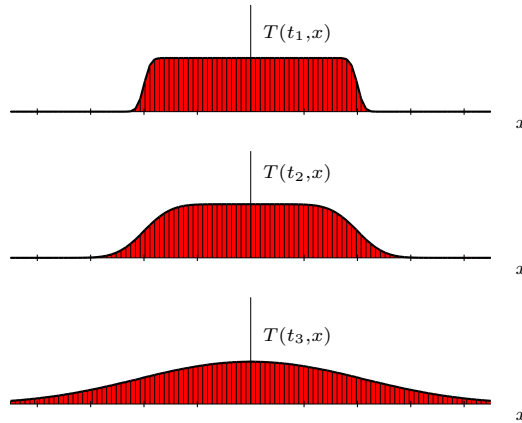


FIG. 32: Het warmteprofiel $T(t, x)$ van vergelijking (155) voor drie opeenvolgende tijdstippen $t_1 < t_2 < t_3$. Op $t = 0$ is de warmte uniform verdeeld over $-\varepsilon < x < \varepsilon$, in de loop van de tijd verdeelt de warmte zich over de draad.

Referenties

- [1] John B. Conway, 'A Course in Functional Analysis', 2e editie. Springer New York, Heidelberg, Berlijn, 1990.
- [2] A. van Rooij, 'Fouriertheorie, van reeks tot integraal', Epsilon uitgaven Utrecht, 1988.