3. Wärmeleitungs- und freie Schrödingergleichung

Die Diffusions- oder Wärmeleitungsgleichung (WLG)

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x,t) = \Delta u(x,t) = \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial^2 u}{\partial x_k^2}(x,t), \quad x \in \Omega \subset \mathbb{R}^n, \quad t \in [0,\infty)$$

ist der Prototyp einer parabolischen Dgl. 2. Ordnung. Sie beschreibt u.a. die zeitliche Entwicklung von Temperaturverteilungen. Gegeben sei eine solche Verteilung zur Zeit $t_0 = 0$, etwa

$$u_0 : \mathbb{R}^n \supset \Omega \longrightarrow \mathbb{R}, \qquad x \longmapsto u_0(x),$$

so wird die Temperaturverteilung in Ω zu einem späteren Zeitpunkt $t_1 > 0$ beschrieben von $u(x,t_1)$, wobei

$$u : \Omega \times [0,\infty) \longrightarrow \mathbb{R}, \quad (x,t) \longmapsto u(x,t)$$

eine Lösung von (WLG) ist, die der Anfangsbedingung

$$u(x,0) = u_0(x), \qquad x \in \Omega,$$

genügt. Insofern scheint dieses Anfangswertproblem für (WLG) sinnvoll gestellt zu sein, ggf. kommen noch gewisse Randbedingungen hinzu, z.B. wenn der betrachtete Körper von außen auf einer bestimmten Temperatur gehalten wird. Für $\Omega = \mathbb{R}^n$ betrachtet man meist das reine Anfangswertproblem, was dann als Cauchy-Problem bezeichnet wird. Dabei geht man zumindest in einem schwachen Sinn von

$$\lim_{x\to\infty} u(x,t) = 0 \qquad \forall t \geq 0$$

aus und sucht die Lösungen in Klassen integrierbarer oder quadratintegrierbarer Funktionen.

Die Schrödinger-Gleichung (SG)

$$i\frac{\partial u}{\partial t}(x,t) + \Delta u(x,t) + V(x)u(x,t) = 0, \quad x\in\mathbb{R}^n, t\in\mathbb{R}$$

mit einem problemspezifisch vorgegebenen Potential $V: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ ist die Grundgleichung der nichtrelativistischen Quantenmechanik. Sie beschreibt die zeitliche Entwicklung eines quantalen Teilchens (Elementarteilchens) unter dem Einfluss des Potentials V. Im Fall $V=0$ ist dieses Teilchen keiner äußeren Kraft ausgesetzt und man spricht von der "freien Schrödingergleichung".

Eine Lösung u von (SG) enthält alle Informationen über den Zustand eines von ihr beschriebenen Systems, ist aber selbst nicht beobachtbar. Die Größe

$$\int_\Omega |u(x,t)|^2 dx$$

wird interpretiert als die Wahrscheinlichkeit, dass sich das durch u beschriebene Teilchen im Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ aufhält. Demnach sind die Lösungen zu suchen in Klassen <u>räumlich</u> quadratintegrierbarer Funktionen, etwa

$$u \in C_b(\mathbb{R}, L^2_x) \cap \dots \quad \text{mit} \quad \|u(\cdot,t)\|_{L^2_x} = 1 \quad (\text{oder } = \text{const})$$

Auch hier scheint das Cauchy-Problem $u(x,0)=u_0(x)$ das angemessene Problem zu sein.

Formal kann (SG) auch als parabolisch angesehen werden, ihre Lösungen haben jedoch viel mehr Wellencharakter als diejenigen der (WLG). Trotz erheblicher Unterschiede möchte ich wegen der formalen Ähnlichkeit das Cauchy-Problem für (WLG) und die freie (SG) zugleich betrachten und eine Integraldarstellung für deren Lösung herleiten. Untersuchen wir also das Cauchy-P.

$$u(x,0) = u_0(x)$$

für die Gleichung

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x,t) = \alpha \Delta u(x,t)$$

mit $\alpha \in \mathbb{C}$ und $\operatorname{Re} \alpha \geq 0$ ($\alpha = 1$: (WLG), $\alpha = i$: (SG))

Von u_0 setzen wir mindestens die Quadratintegrierbarkeit voraus, weitere Annahmen kommen bei Bedarf hinzu. Als analytisches Hilfsmittel verwenden wir die Fouriertransformation. ($\longrightarrow$ Def. + grundlegende Eigenschaften in 3.1)

3.1 Die Fouriertransformation auf dem $\mathbb{R}^n$

Def.: Für $f \in L^1(\mathbb{R}^n)$ heißt die Funktion $\hat{f}$, definiert durch

$$\hat{f}(\xi) := (2\pi)^{-\frac{n}{2}} \cdot \int_{\mathbb{R}^n} e^{-ix\xi} f(x)\,dx \qquad \left(\text{mit } x\xi := \sum_{j=1}^{n} x_j \xi_j\right)$$

die Fouriertransformierte von f und die Abbildung

$$\mathcal{F} : f \longmapsto \mathcal{F}f := \hat{f}$$

die Fouriertransformation.

Bem.: Dies ist nur eine Möglichkeit der Definition einer Fouriertransformation. Eine andere haben wir bereits kennengelernt und verwendet, nämlich die Abbildung einer 2π-periodischen Funktion auf die Folge $(\hat{f}(k))_{k\in\mathbb{Z}}$ ihrer Fourierkoeffizienten

$$\hat{f}(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-ikx} f(x)\,dx .$$

Die Definition abstrakt und allgemein zu fassen, ist ein grundlegender Gegenstand der Vorlesung "Harmonische Analysis" im nächsten Semester. Daher werde ich mir erlauben, für einige umfangreichere Beweise zu Eigenschaften der Fouriertransformation auf das nächste Semester zu verweisen.

Lemma 1 (Riemann-Lebesgue): Für die Fouriertransformierte $\hat{f}$ einer Funktion $f \in L^1(\mathbb{R}^n)$ gelten:

(1) $|\hat{f}(\xi)| \le (2\pi)^{-\frac{n}{2}} \cdot \|f\|_1$,

(2) $\hat{f}$ ist gleichmäßig stetig,

(3) $\lim\limits_{\xi\to\infty} \hat f(\xi) = 0$.

Anmerkungen zum Bew.: (1) folgt aus

$$|\hat f(\xi)| = (2\pi)^{-n/2} \left| \int_{\mathbb{R}^n} e^{-ix\xi} f(x)\,dx \right| \leq (2\pi)^{-n/2} \int_{\mathbb{R}^n} |f(x)|\,dx,$$

da $|e^{-ix\xi}| = 1$. Die Stetigkeit von $\hat f$ erhält man mit dem Lebesgueschen Konvergenzsatz. Mit (3) folgt hieraus die gleichmäßige Stetigkeit. Zum Beweis von (3) gibt es im $\mathbb{R}^n$ einen schönen Trick, den ich (aus einem Buch) von Walter Rudin gelernt habe: Man schreibt

$$\begin{aligned}
\hat f(\xi) &= -e^{i\pi}\cdot(2\pi)^{-n/2} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-ix\xi} f(x)\,dx \\
&= -(2\pi)^{-n/2} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-i\left(x-\frac{\pi\xi}{|\xi|^2}\right)\xi} f(x)\,dx \\
&= -(2\pi)^{-n/2} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-iy\xi} f\left(y+\frac{\pi\xi}{|\xi|^2}\right)dy
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow 2\hat f(\xi) = (2\pi)^{-n/2} \cdot \int_{\mathbb{R}^n} e^{-ix\xi}\left(f(x) - f\left(x+\frac{\pi\xi}{|\xi|^2}\right)\right)dx.$$

Ist nun $f \in C_0(\mathbb{R}^n)$, so ergibt sich hieraus die Behauptung mit dem Lebesgueschen Konvergenzsatz. Da $C_0(\mathbb{R}^n) \subset L^1(\mathbb{R}^n)$ dicht ist ($\rightarrow$ Ana III), kann man den allgemeinen Fall durch Approximation hierauf zurückführen. ∎

Bem.: Es sei

$$C_{(0)}(\mathbb{R}^n) := \{ f \in L^\infty(\mathbb{R}^n) \cap C(\mathbb{R}^n) : \lim_{x\to\infty} f(x) = 0 \}.$$

Dann kann man das Riemann-Lebesguesche Lemma etwas funktionalanalytischer formulieren: "Die Fouriertransformation $\mathcal{F} : L^1(\mathbb{R}^n) \to C_{(0)}(\mathbb{R}^n)$ ist eine stetige lineare Abbildung mit Operatornorm $\|\mathcal{F}\|_{L^1 \to C_{(0)}} \leq (2\pi)^{-n/2}$." Hierbei ist $\mathcal{F}$ injektiv aber nicht surjektiv (ohne Beweis).

Leicht nachzurechnen sind die folgenden Identitäten:

Lemma 2: Es seien $f \in L^1(\mathbb{R}^n)$, $a \in \mathbb{R}^n$ und $\lambda > 0$.

(1) Ist $g(x) = f(x-a)$, so gilt $\hat{g}(\xi) = e^{-i\xi a} \hat{f}(\xi)$,

(2) ist $g(x) = f(\frac{x}{\lambda})$, so gilt $\hat{g}(\xi) = \lambda^{+n} \hat{f}(\lambda\xi)$.

Die Fouriertransformation verwandelt das manchmal schwierig zu handhabende Faltungsprodukt in eine punktweise Multiplikation. Es gilt der

Faltungssatz: Für $f, g \in L^1(\mathbb{R}^n)$ ist

$$\widehat{f * g}(\xi) = (2\pi)^{n/2} \hat{f}(\xi)\hat{g}(\xi).$$

Bem.: (1) Kann im allgemeinen Rahmen gezeigt werden. – (2) Falls auch $f \cdot g \in L^1(\mathbb{R}^n)$ ist, gilt entsprechend $\widehat{f \cdot g}(\xi) = (2\pi)^{-n/2} \hat{f} * \hat{g}(\xi)$.

Grob gesprochen ist die Fouriertransformation bis auf einen Vorzeichenwechsel zu sich selbst invers:

Satz 1 (Fourierinversionsformel): Sind $f \in L^1(\mathbb{R}^n)$ und $\hat{f} \in L^1(\mathbb{R}^n)$, so gilt

$$f(x) = (2\pi)^{-n/2} \cdot \int_{\mathbb{R}^n} e^{ix\xi} \hat{f}(\xi)\, d\xi .$$

Bem.: (1) Auch das wird in "Harm Ana" in allgemeiner Form gezeigt. Beachten Sie den Faktor $e^{ix\xi}$ anstelle von $e^{-ix\xi}$ in der Definition.

(2) Die entsprechende Formel bei den Fourierreihen lautet

$$f(x) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} \hat{f}(k) \cdot e^{ikx} ,$$

wenn die Folge $(\hat{f}(k))_{k \in \mathbb{Z}}$ absolut summierbar ist.

(3) Ein einfaches Bsp. zeigt, dass die Voraussetzung der Inversionsformel nicht immer erfüllt ist:

Sei $f(x) = \chi_{(-1,1)}(x)$ für $x \in \mathbb{R}$. Dann ist

$$\hat{f}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-1}^{1} e^{-ix\xi} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \frac{1}{-i\xi} e^{-ix\xi} \Big|_{-1}^{1}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \frac{1}{-i\xi} (e^{-i\xi} - e^{i\xi}) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sin(\xi)}{\xi} .$$

(In Ana III haben wir gelernt, dass $\int_{\mathbb{R}} \frac{\sin(\xi)}{\xi} d\xi$ zwar konvergiert, aber nicht absolut und somit nicht als Lebesgue-Integral.)

Im Hinblick auf die Invertierbarkeit ist der natürliche Definitionsbereich $L^1(\mathbb{R}^n)$ nicht optimal. Eine Alternative eröffnet uns das folgende

<u>Lemma</u> 3 (Parsevalsche Identität): Sind $f, g \in L^1(\mathbb{R}^n) \cap L^2(\mathbb{R}^n)$,

so gilt
$$\int_{\mathbb{R}^n} f(x)\,\bar{g}(x)\,dx = \int_{\mathbb{R}^n} \hat{f}(\xi)\,\bar{\hat{g}}(\xi)\,d\xi.$$

(Auch dies an dieser Stelle ohne Beweis.)

Bei den Integralen in Lemma 3 handelt es sich um das Skalarprodukt auf $L^2(\mathbb{R}^n)$. Setzen wir $f = g$, erhalten wir $\|f\|_{L^2_x} = \|\hat{f}\|_{L^2_\xi}$, d.h.:

Die Einschränkung von $\mathcal{F}$ auf $L^1(\mathbb{R}^n) \cap L^2(\mathbb{R}^n)$ ist eine Isometrie
$$\mathcal{F}\big|_{L^1 \cap L^2} : L^1 \cap L^2 \to L^2.$$

Da $C_0(\mathbb{R}^n) \subset L^1 \cap L^2 \subset L^2$ dicht ist, lässt sich diese in eindeutiger Weise zu einem isometrischen Isomorphismus $\mathcal{F} : L^2(\mathbb{R}^n) \to L^2(\mathbb{R}^n)$ fortsetzen. Z.B. kann man definieren
$$\mathcal{F} f = \lim_{R \to \infty} \mathcal{F}\, \chi_{B_R(0)} \cdot f,$$
wobei $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$ und also nach Cauchy-Schwarz $\chi_{B_R(0)} f \in L^1(\mathbb{R}^n)$ ist und der Grenzwert in der L^2-Norm existiert. Damit folgt aus der Parsevalschen

Gleichung der

Satz von Plancherel: Die Fouriertransformation

$$\mathcal{F}\Big|_{L^1 \cap L^2} : L^1(\mathbb{R}^n) \cap L^2(\mathbb{R}^n) \longrightarrow L^2(\mathbb{R}^n)$$

besitzt eine eindeutig bestimmte Fortsetzung

$$\tilde{\mathcal{F}} : L^2(\mathbb{R}^n) \to L^2(\mathbb{R}^n).$$

Diese ist ein isometrischer Isomorphismus. Für $g \in L^1(\mathbb{R}^n) \cap L^2(\mathbb{R}^n)$ ist die Inverse gegeben durch

$$\tilde{\mathcal{F}}^{-1} g(x) = (2\pi)^{-n/2} \int_{\mathbb{R}^n} e^{ix\xi} g(\xi)\, d\xi.$$

(Üblicherweise unterscheidet man nicht zwischen $\mathcal{F}$, $\mathcal{F}\big|_{L^1 \cap L^2}$ und $\tilde{\mathcal{F}}$, sondern schreibt stets $\mathcal{F}$ oder $\wedge$ bzw. $\mathcal{F}^{-1}$ oder $\vee$ für die Inverse.)

Die Fouriertransformation verwandelt partielle Ableitungen in Multiplikationen mit der entsprechenden Variable auf Fourierseite. Diese Eigenschaft macht sie besonders nützlich zur Behandlung partieller Dglen..

Lemma 4: (1) Es sei $f \in L^1(\mathbb{R}^n) \cap C^1(\mathbb{R}^n)$ mit $\frac{\partial f}{\partial x_j} \in L^1(\mathbb{R}^n)$. Dann gilt $\mathcal{F}\frac{\partial f}{\partial x_j}(\xi) = i\xi_j \hat{f}(\xi)$.

(2) Ist darüber hinaus $f \in C^2(\mathbb{R}^n)$ und $\Delta f \in L^1(\mathbb{R}^n)$,

so gilt $\mathcal{F}\Delta f(\xi) = -|\xi|^2 \hat{f}(\xi)$.

(3) Sind $f \in L^1(\mathbb{R}^n)$ und $x_j f \in L^1(\mathbb{R}^n)$, so ist $\hat{f}$ partiell nach ξ_j differenzierbar und es gilt

$$i \cdot \frac{\partial \hat{f}}{\partial \xi_j}(\xi) = \mathcal{F}(x_j f)(\xi).$$

Bew.: O.E. können wir annehmen, dass f kompakten Träger hat.

Zu (1) $$\mathcal{F}\frac{\partial f}{\partial x_j}(\xi) = (2\pi)^{-n/2} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-ix\xi} \frac{\partial f}{\partial x_j}(x)\, dx$$

$$= -(2\pi)^{-n/2} \cdot \int_{\mathbb{R}^n} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} e^{-ix\xi}\right) \cdot f(x)\, dx$$ (part. Int., Randterme fallen weg)

$$= i\xi_j \cdot (2\pi)^{-n/2} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-ix\xi} f(x)\, dx = i\xi_j \hat{f}(\xi).$$

Zweimalige Anwendung und Summation über j ergibt (2).

Zu (3) $$i \frac{\partial \hat{f}}{\partial \xi_j}(\xi) = i \cdot (2\pi)^{-n/2} \frac{\partial}{\partial \xi_j} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-ix\xi} f(x)\, dx$$

$$= (2\pi)^{-n/2} \cdot \int_{\mathbb{R}^n} e^{-ix\xi} x_j \cdot f(x)\, dx = \mathcal{F}(x_j f)(\xi). \qquad \square$$