

# Mathematische Modellierung SS20

## Lösungen der Beispiele auf Blatt 11

Beispiele und Skriptum

### Inhaltsverzeichnis

• <b>Beispiel 1: Boltzmann Verteilung</b>	<b>1</b>
◦ Aufgabe . . . . .	1
◦ Lösung . . . . .	2
* Teil (a) Simulation . . . . .	2
* Teil (b) Konvergenz . . . . .	5
* Teil (c) Unabhängigkeit . . . . .	6
• <b>Beispiel 2: Brownsche Bewegung - Zufallsspaziergang</b>	<b>7</b>
◦ Aufgabe . . . . .	7
◦ Lösung . . . . .	7
* Teil (a) Wahrscheinlichkeitsdichte . . . . .	7
* Teil (b) Simulation, Vergleich mit der Dichte . . . . .	9
• <b>Beispiel 3: Brownsche Bewegung - Diffusion</b>	<b>11</b>
◦ Aufgabe . . . . .	11
◦ Lösung . . . . .	12
* Teil (a) Implementierung . . . . .	15
* Teil (b) Untersuchung . . . . .	16
• <b>Beispiel 4: Quantenmechanik</b>	<b>16</b>
◦ Aufgabe . . . . .	16
◦ Lösung . . . . .	17
* Teil (a) Implementierung . . . . .	17
* Teil (b) Untersuchung . . . . .	23

### • Beispiel 1: Boltzmann Verteilung

#### ◦ Aufgabe

Seien  $n$  Teilchen in einem Behälter gegeben, wobei ein Teilchen nur eine der möglichen Energien  $E_k > E_{k-1} > \dots > E_2 > E_1 \geq 0$  annehmen kann. Die Anzahl der Teilchen mit Energie  $E_i$  ist  $m_i$ , und die gesamte Energie ist  $E$ , d.h. es gibt die Einschränkungen,

$$\mathbf{1}^\top \mathbf{m} = n, \quad \mathbf{m}^\top \mathbf{E} = E$$

wobei  $\mathbf{1} = \{1, \dots, 1\}$ ,  $\mathbf{m} = \{m_1, \dots, m_k\}$  und  $\mathbf{E} = \{E_1, \dots, E_k\}$ . Sei  $\hat{E} = E/n$  die durchschnittliche Energie mit

$$E_1 < \hat{E} < \mathbf{1}^\top \mathbf{E}/k.$$

Innerhalb dieser Einschränkungen seien alle energetischen Zuteilungen von Teilchen 1 bis  $n$  gleich wahrscheinlich. Sei  $\mathbf{X} = \{X_i\}_{i=1}^k$  ein Zufallsvektor, wobei  $X_i = 1$  gilt wenn ein zufälliges Teilchen Energie  $E_i$  hat und sonst gilt  $X_i = 0$ . Angenommen sind  $\{\mathbf{X}_j\}_{j=1}^n$  alle gleich verteilt wie  $\mathbf{X}$ , und für

$\hat{E}$  fixiert und  $E, n$  ausreichend groß sind sie unabhängig. Der Zufallsvektor  $\mathbf{Y}^{(n)} = \mathbf{X}_1 + \dots + \mathbf{X}_n$  ist verteilt wie

$$P(\mathbf{Y}^{(n)} = \mathbf{m}) = \begin{cases} \frac{1}{N} \binom{n!}{\mathbf{m}!} & \mathbf{1}^\top \mathbf{m} = n \\ 0, & \mathbf{m}^\top \mathbf{E} = E, \\ & \text{sonst,} \end{cases} \quad N = \sum_{\mathbf{1}^\top \mathbf{m} = n, \mathbf{m}^\top \mathbf{E} = E} \binom{n!}{\mathbf{m}!}.$$

- (a) Schreiben Sie einen Matlab Code, um die folgende Tabelle mit  $\mathbf{E} = \{(i-1)\Delta E\}_{i=1}^k$ ,  $\Delta E = \frac{n}{k-1}$  und  $E = n$  zu erstellen,

Makrozustände	$\mathbf{E} = \{E_j\}_{j=1}^k$	# Mikrozustände
$\{M = i\}_{i=1}^N$ :	$\{\mathbf{m}_i\}_{i=1}^N = \{m_{i,j}\}_{i=1,j=1}^{N,k}$	$\{K_i\}_{i=1}^N, K_i = \binom{n!}{\mathbf{m}_i!}$
Erwartungen:	$\bar{\mathbf{m}} = \sum_{i=1}^N \mathbf{m}_i K_i / N$	$N$

wie z.B. für  $n, k = 5$ ,

Makrozustände	$E_1$	$E_2$	$E_3$	$E_4$	$E_5$	# Mikrozustände
$M = 1$ :	1	4	0	0	0	5
2:	4	0	0	0	1	5
3:	3	0	2	0	0	10
4:	3	1	0	1	0	20
$M = 5$ :	2	2	1	0	0	30
Erwartungen:	2.50	1.43	0.71	0.29	0.07	Gesamt: 70

- (b) Mit diesem Code stellen Sie die Erwartungsverteilung, die wahrscheinlichste Verteilung und die Boltzmann Verteilung grafisch dar, um ihre Ähnlichkeit für großes  $n$  zu zeigen.
- (c) Verwenden Sie den Code, um die Unabhängigkeitsbedingungen  $P(X_{i,j} = \alpha \& X_{i',j'} = \omega) = P(X_{i,j} = \alpha) \cdot P(X_{i',j'} = \omega)$ ,  $\alpha, \omega \in \{0, 1\}$ , zu kontrollieren.

## o Lösung

### \* Teil (a) Simulation

Die Tabelle wird für gegebene  $n, k$  mit dem folgenden Matlab Code erstellt,

```
function B11Bsp1
```

```
global n k M K E Etot
```

```
h1 = figure(1); close(h1); h1 = figure(1);
set(h1,'Position',[40 40 500 500]);
```

```
k = 5; % number of energies
n = 5; % number of particles
n = 10;
n = 20;
n = 40;
```

```

dE = n/(k-1); % energy increment between
E = (0:k-1)*dE; % energy states
Etot = (k-1)*dE; % total energy
Ehat = Etot/n; % average energy

imax = 1000; % max iterations
tol = 1.0e-6; % termination criterion

% determine Boltzmann
% bisection method, 2 endpoints
mu1 = 0; mu2 = 1;
pmu1 = sum((Ehat-E).*exp(mu1*(Ehat-E)));
pmu2 = sum((Ehat-E).*exp(mu2*(Ehat-E)));
for i=1:imax
    mu = (mu1+mu2)/2; % midpoint evaluation
    pmu = sum((Ehat-E).*exp(mu*(Ehat-E)));
    if (pmu*pmu1 > 0) % update endpoints
        mu1 = mu;
    else
        mu2 = mu;
    end
    if (abs(mu2-mu1)<tol*abs(mu))
        break;
    end
end
if (i == imax)
    error('no conv for Boltzmann!')
end
Mb = n*exp(-mu*E)/sum(exp(-mu*E)); % Boltzmann distribution

% make the table [M | K]
M = []; % initialize the table
K = []; % initialize coefficients

Mi = zeros(1,k); % initial row of table
new_column(1,Mi); % new column for Mi,
% called recursively

N = sum(K); % total number of microstates
p = K/N; % probabilities of macrostates
Ma = p'*M; % average distribution
i = find(p == max(p)); % most probable macrostate
Mp = mean(M(i,:),1); % most probable distribution

[p_sort,i_sort] = sort(p); % sorted in order of
M_sort = M(i_sort,:); % probability
K_sort = K(i_sort);

```

```

for i=1:size(M,1)
    disp(sprintf('%0.0f ',[M_sort(i,:),K_sort(i)]))
end
disp(sprintf('%0.2f ',[Ma,N]))

plot(E,Ma,'b', ... % plot all distributions
     E,Mp,'r', ...
     E,Mb,'g','LineWidth',3)
axis([0 Etot 0 ceil(max([Ma(:);Mp(:);Mb(:)]))])
legend('Erwartung','Wahrscheinlichst','Boltzmann')
xlabel('Energienstufen')
ylabel('Anzahl der Teilchen')
title(sprintf('n=%0.0f Teilchen, k=%0.0f Energienstufen',n,k))
set(gca,'XTick',E,'FontSize',16,'FontWeight','bold','FontName','Times')

% check independence
for j=2:k
    disp(sprintf('j=%0.0f, P(X(1)) * P(X(j)) = %0.2f, P(X(1) | X(2)) = %0.2f', ...
        j,Ma(1)*Ma(j)/n^2,dot(M(:,1).*M(:,j))/(n*(n-1)),p));
end

end

function new_column(j,Mi)
    global n k M K E Etot

    if ((sum(Mi) > n) || (dot(Mi,E) > Etot))
        return;
    end

    for i=0:n
        Mi(j) = i;

        if ((sum(Mi) > n) || (dot(Mi,E) > Etot))
            return;
        end

        if (j <= k-1)
            new_column(j+1,Mi);
        else
            if ((sum(Mi) == n) && (dot(Mi,E) == Etot))
                M = [M,Mi];
                K = [K;multcoef(Mi)];
            end
        end
    end
end
end
end

```

```

function c = multcoef(k)
    c = 1;
    for i=1:length(k),
        c = c*nchoosek(sum(k(1:i)),k(i));
    end;
end

```

Die Tabelle für  $k = 5$ ,  $n = 5$  ist gegeben durch

1	4	0	0	0	5
4	0	0	0	1	5
3	0	2	0	0	10
3	1	0	1	0	20
2	2	1	0	0	30
2.50	1.43	0.71	0.29	0.07	70

Die Tabelle für  $k = 5$ ,  $n = 10$  ist gegeben durch

9	0	0	0	1	10
8	0	2	0	0	45
8	1	0	1	0	90
6	4	0	0	0	210
7	2	1	0	0	360
6.92	2.31	0.63	0.13	0.01	715

Die Tabelle für  $k = 5$ ,  $n = 20$  ist gegeben durch

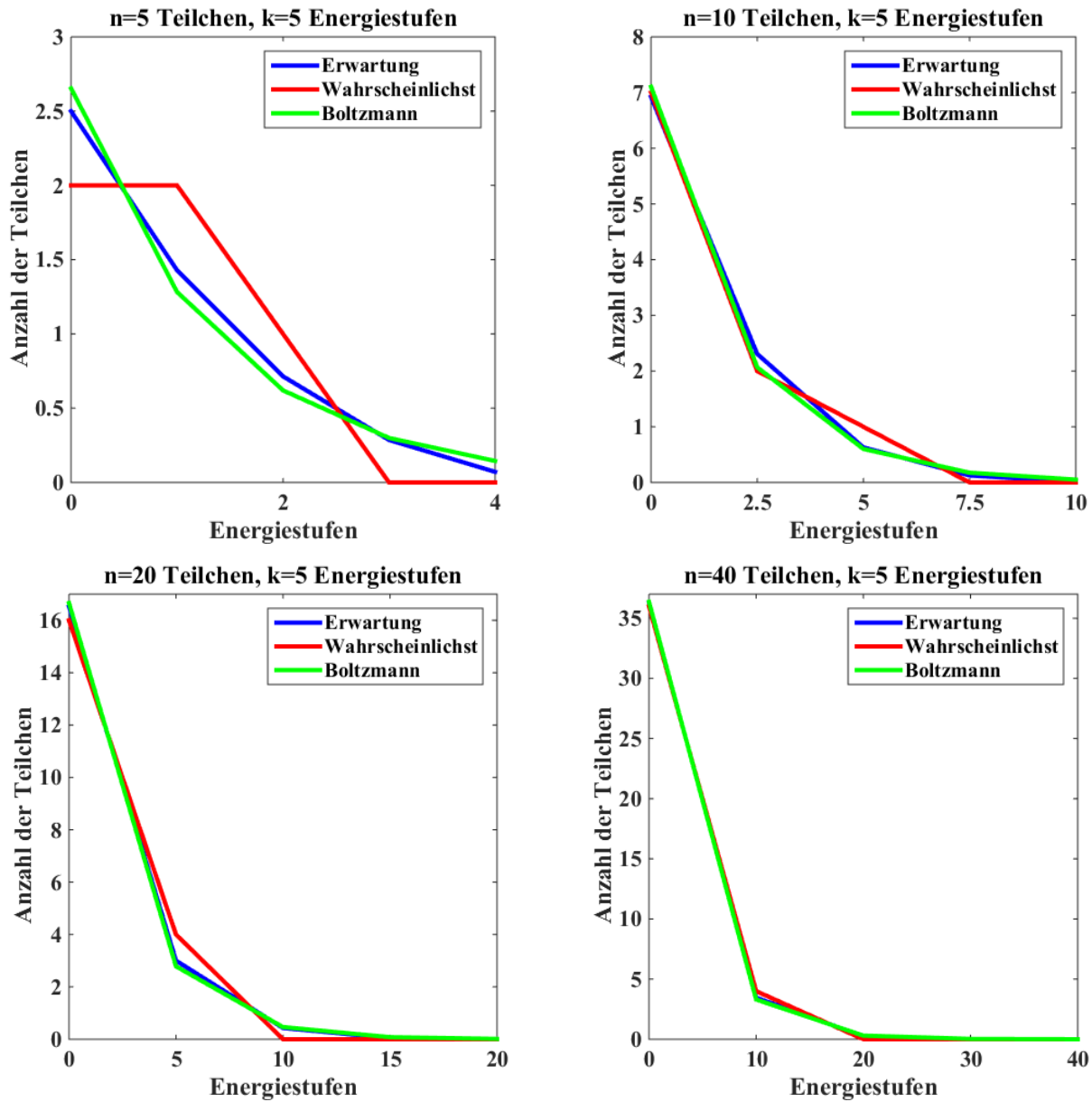
19	0	0	0	1	20
18	0	2	0	0	190
18	1	0	1	0	380
17	2	1	0	0	3420
16	4	0	0	0	4845
16.52	3.00	0.43	0.04	0.00	8855

Die Tabelle für  $k = 5$ ,  $n = 40$  ist gegeben durch

39	0	0	0	1	40
38	0	2	0	0	780
38	1	0	1	0	1560
37	2	1	0	0	29640
36	4	0	0	0	91390
36.28	3.46	0.25	0.01	0.00	123410

#### \* Teil (b) Konvergenz

Die Verteilungen für  $k = 5$  und  $n = 5, 10, 20, 40$  werden folgendermaßen grafisch verglichen.



Die Konvergenz der Differenzen zu Null für  $n$  immer größer ist augenscheinlich.

#### \* Teil (c) Unabhängigkeit

Um die folgende Bedingung der Unabhängigkeit zu kontrollieren

$$P(X_{i,j} = \alpha) \cdot P(X_{i',j'} = \omega) = P(X_{i,j} = \alpha \mid X_{i',j'} = \omega), \quad \alpha, \omega \in \{0, 1\}, \quad i = 1, \quad i' = 2, \dots, k$$

sind die folgenden Daten vom Code für die grafisch dargestellten Fälle,  $k = 5$ ,  $n = 5, 10, 20, 40$ , ausgegeben worden. Die Ergebnisse weisen stark auf Unabhängigkeit hin.

k=5, n=5

i=2,  $P(X(1)) \cdot P(X(i)) = 0.14$ ,  $P(X(1) \mid X(2)) = 0.14$

i=3,  $P(X(1)) \cdot P(X(i)) = 0.07$ ,  $P(X(1) \mid X(2)) = 0.09$

i=4,  $P(X(1)) * P(X(i)) = 0.03$ ,  $P(X(1) \mid X(2)) = 0.04$   
i=5,  $P(X(1)) * P(X(i)) = 0.01$ ,  $P(X(1) \mid X(2)) = 0.01$

k=5, n=10

j=2,  $P(X(1)) * P(X(j)) = 0.16$ ,  $P(X(1) \mid X(2)) = 0.17$   
j=3,  $P(X(1)) * P(X(j)) = 0.04$ ,  $P(X(1) \mid X(2)) = 0.05$   
j=4,  $P(X(1)) * P(X(j)) = 0.01$ ,  $P(X(1) \mid X(2)) = 0.01$   
j=5,  $P(X(1)) * P(X(j)) = 0.00$ ,  $P(X(1) \mid X(2)) = 0.00$

k=5, n=20

j=2,  $P(X(1)) * P(X(j)) = 0.12$ ,  $P(X(1) \mid X(2)) = 0.13$   
j=3,  $P(X(1)) * P(X(j)) = 0.02$ ,  $P(X(1) \mid X(2)) = 0.02$   
j=4,  $P(X(1)) * P(X(j)) = 0.00$ ,  $P(X(1) \mid X(2)) = 0.00$   
j=5,  $P(X(1)) * P(X(j)) = 0.00$ ,  $P(X(1) \mid X(2)) = 0.00$

k=5, n=40

j=2,  $P(X(1)) * P(X(j)) = 0.08$ ,  $P(X(1) \mid X(2)) = 0.08$   
j=3,  $P(X(1)) * P(X(j)) = 0.01$ ,  $P(X(1) \mid X(2)) = 0.01$   
j=4,  $P(X(1)) * P(X(j)) = 0.00$ ,  $P(X(1) \mid X(2)) = 0.00$   
j=5,  $P(X(1)) * P(X(j)) = 0.00$ ,  $P(X(1) \mid X(2)) = 0.00$

## • Beispiel 2: Brownsche Bewegung - Zufallsspaziergang

### ◦ Aufgabe

Brownsche Bewegung wird simuliert. Ein gegebenes Teilchen kann sich in einem dünnen Rohr innerhalb eines Zeitintervalls der Länge  $\Delta t$  nach links oder nach rechts bewegen oder stehenbleiben. Für einen solchen Schritt sei  $\delta$  eine Zufallsvariable mit

$$P(\delta = -1) = \alpha, \quad P(\delta = 0) = 1 - 2\alpha, \quad P(\delta = +1) = \alpha,$$

wobei  $\alpha \in (0, \frac{1}{2}]$ . Seien  $\{X_1(t; \Delta t), X_2(t; \Delta t), \dots\}$  unabhängige und gleich verteilte Zufallsvariablen, wobei  $X_i(t; \Delta t)$  die Position eines  $i$ ten Brownschen Teilchens zur Zeit  $t$  darstellt. Seien  $\{\delta_{i,k}\}$  unabhängig und gleich verteilt wie  $\delta$ . Beim  $k$ ten Schritt des  $i$ ten Teilchens gilt

$$X_i(k \cdot \Delta t; \Delta t) = X_i((k-1) \cdot \Delta t; \Delta t) + \sqrt{D\Delta t/\alpha} \cdot \delta_{i,k}, \quad i, k \in \mathbb{N}, \quad X_i(0; \Delta t) = 0.$$

- (a) Schätzen Sie die Wahrscheinlichkeitsdichte für die Position eines dieser Teilchen ab.
- (b) Führen Sie eine Monte-Carlo Simulation von solchen Teilchen durch, und vergleichen Sie die sich ergebende Teilchenverteilung mit der Dichte aus Teil (a).

### ◦ Lösung

#### \* Teil (a) Wahrscheinlichkeitsdichte

Es gelten

$$\mu_\delta = \mathbb{E}[\delta] = 0, \quad \sigma_\delta^2 = \mathbb{E}[\delta^2] = 2\alpha$$

und mit  $X(t; \Delta t) = X_1(t; \Delta t)$  und  $\delta_k = \delta_{1,k}$ ,

$$\mu_{X(t; \Delta t)} = \mathbb{E}[X(t; \Delta t)] = \sqrt{D\Delta t/\alpha} \sum_{k=1}^{\lfloor t/\Delta t \rfloor} \mu_{\delta_k} = 0$$

$$\sigma_{X(t; \Delta t)}^2 = \mathbb{E}[X(t; \Delta t)^2] = D\Delta t/\alpha \sum_{k=1}^{\lfloor t/\Delta t \rfloor} \sigma_{\delta_k}^2 = \frac{\lfloor t/\Delta t \rfloor}{t/\Delta t} 2Dt.$$

Laut dem Zentralen Grenzwertsatz,

$$P(a \leq X(t; \Delta t) \leq b) =$$

$$P\left(\sqrt{\frac{t/\Delta t}{\lfloor t/\Delta t \rfloor}} \frac{a}{\sqrt{2Dt}} \leq \frac{X(t; \Delta t) - \mu_{X(t; \Delta t)}}{\sigma_{X(t; \Delta t)}} \leq \sqrt{\frac{t/\Delta t}{\lfloor t/\Delta t \rfloor}} \frac{b}{\sqrt{2Dt}}\right)$$

$$\xrightarrow{\Delta t \rightarrow 0} P\left(\frac{a}{\sqrt{2Dt}} \leq Z \leq \frac{b}{\sqrt{2Dt}}\right), \quad Z \sim N(0, 1), \quad a < b, \quad a, b \in \mathbb{R}.$$

Daher gilt

$$P(a \leq X(t; \Delta t) \leq b) \xrightarrow{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{a/\sqrt{2Dt}}^{b/\sqrt{2Dt}} e^{-x^2/2} dx = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_a^b e^{-x^2/(4Dt)} dx.$$

Zur Darstellung, ob das Teilchen sich im räumlichen Intervall  $[a, b]$  befindet, sei  $Y(t; \Delta t, a, b)$  die Zufallsvariable

$$Y(t; \Delta t, a, b) = \begin{cases} 1, & X(t; \Delta t) \in [a, b] \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

mit einer Verteilung, die mit der Bernoulli Verteilung sich approximieren lässt,

$$P(Y(t; \Delta t, a, b) = 1) = P(X(t; \Delta t) \in [a, b]) \xrightarrow{\Delta t \rightarrow 0} q(t; a, b)$$

$$P(Y(t; \Delta t, a, b) = 0) \xrightarrow{\Delta t \rightarrow 0} 1 - q(t; a, b)$$

wobei

$$q(t; a, b) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_a^b e^{-x^2/(4Dt)} dx.$$

Daher gelten annäherungsweise

$$\mu_{Y(t; \Delta t, a, b)} = \mathbb{E}[Y(t; \Delta t, a, b)] \xrightarrow{\Delta t \rightarrow 0} q(t; a, b)$$

und

$$\sigma_{Y(t; \Delta t, a, b)}^2 = \mathbb{V}[Y(t; \Delta t, a, b)] \xrightarrow{\Delta t \rightarrow 0} q(t; a, b)(1 - q(t; a, b)).$$

Zur Darstellung, ob das  $i$ te Teilchen,  $i \in \mathbb{N}$ , sich im räumlichen Intervall  $[a, b]$  befindet, seien die Zufallsvariablen

$$Y_i(t; \Delta t, a, b) = \begin{cases} 1, & X_i(t) \in [a, b] \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

gegeben, die von einander unabhängig und gleich verteilt wie  $Y(t; \Delta t, a, b)$  sind. Sei

$$R_n(t; \Delta t, a, b) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Y_i(t; \Delta t, a, b)$$



die zufällige relative Anzahl der Teilchen, die sich im räumlichen Intervall  $[a, b]$  zur Zeit  $t$  befinden. Es gelten annäherungsweise

$$\mu_{R_n(t; \Delta t, a, b)} = \mathbb{E}[R_n(t; \Delta t, a, b)] = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mu_{Y_i(t; \Delta t, a, b)} \xrightarrow{\Delta t \rightarrow 0} q(t; a, b)$$

und

$$\sigma_{R_n(t; \Delta t, a, b)}^2 = \mathbb{V}[R_n(t; \Delta t, a, b)] = \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^n \sigma_{Y_i(t; \Delta t, a, b)}^2 \xrightarrow{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{n} q(t; a, b)(1 - q(t; a, b)).$$

Laut dem Zentralen Grenzwertsatz gelten annäherungsweise,

$$P\left(\left|R_n(t; \Delta t, a, b) - \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_a^b e^{-x^2/(4Dt)} dx\right| < \epsilon\right) = P(|R_n(t; \Delta t, a, b) - q(t; a, b)| < \epsilon)$$

$$\xrightarrow{\Delta t \rightarrow 0} P\left(\frac{-\epsilon}{\sqrt{q(t; a, b)(1 - q(t; a, b))/n}} \leq \frac{R_n(t; \Delta t, a, b) - \mu_{R_n(t; \Delta t, a, b)}}{\sigma_{R_n(t; \Delta t, a, b)}} \leq \frac{\epsilon}{\sqrt{q(t; a, b)(1 - q(t; a, b))/n}}\right)$$

$$\xrightarrow{n \rightarrow \infty} P\left(\frac{-\epsilon\sqrt{n}}{\sqrt{q(t; a, b)(1 - q(t; a, b))}} \leq Z \leq \frac{\epsilon\sqrt{n}}{\sqrt{q(t; a, b)(1 - q(t; a, b))}}\right), \quad Z \sim N(0, 1)$$

oder

$$P\left(\left|R_n(t; \Delta t, a, b) - \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_a^b e^{-x^2/(4Dt)} dx\right| < \epsilon\right) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 1, \quad \forall \epsilon > 0.$$

#### \* Teil (b) Simulation, Vergleich mit der Dichte

Eine Simulation der Brownschen Bewegung von vielen Teilchen wird mit dem folgenden Matlab Code durchgeführt.

```
h1 = figure(1); close(h1); h1 = figure(1);
set(h1, 'Position', [20 20 1200 400]);           % setup figure

n      = 1000;                                     % number of particles
imax   = 100;                                     % number of time steps

X      = zeros(1, n);                             % particle positions

D      = 5;                                       % diffusivity
dt     = 0.01;                                  % time step
al     = 0.1;                                   % P(delta = 0) = 1-2*al

a      = -10;                                    % spatial interval is
b      = +10;                                    % [a,b]
m      = 29;                                    % number of cells

xi     = linspace(a, b, m+1);                   % cell interfaces
dx     = xi(2)-xi(1);                           %
xc     = xi(1:m)+dx/2;                          % cell centers
```

```

t = 0;
for i=1:imax
    Xa = X;                                % save for stopping
    t = t+dt;                              % current time
    z = rand(1,n);                         % random, uniform [0,1]
    de = -(z < al) + (z > 1-al);           % step direction
    X = X + sqrt(2*D*(dt/(2*al)))*de;      % new position

    [N,yi] = histcounts(X,xi);             % numbers of particles in cells
    R = N/n;                              % relative number
    r = (erf(xi(2:m+1)/(2*sqrt(D*t))) ... % theoretical predication of R
        - erf(xi(1:m)/(2*sqrt(D*t))))/2;

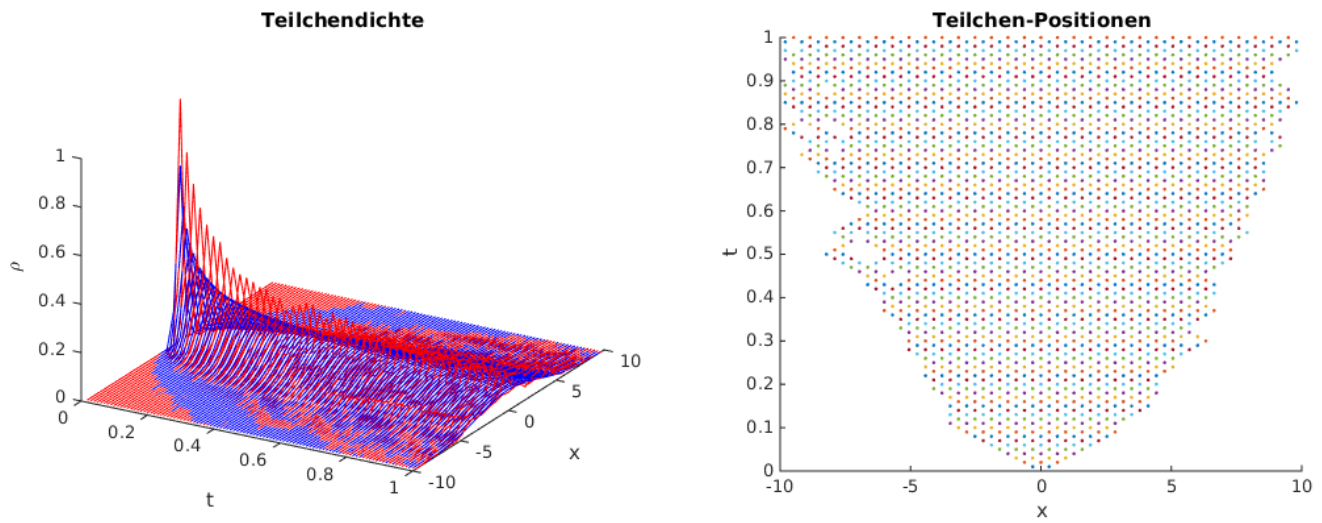
    subplot(1,2,1)                         % plot distributions
    hold on
    plot3(t*ones(size(xc)),xc,r,'b',t*ones(size(xc)),xc,R,'r')
    axis([0 imax*dt a b 0 1])
    view([30,30])
    title('Teilchendichte')
    xlabel('t')
    ylabel('x')
    zlabel('\rho')
    hold off;

    subplot(1,2,2)                         % plot positions
    hold on
    plot(X,t*ones(1,n),'.')
    axis([a b 0 1])
    title('Teilchen-Positionen')
    xlabel('x')
    ylabel('t')
    hold off

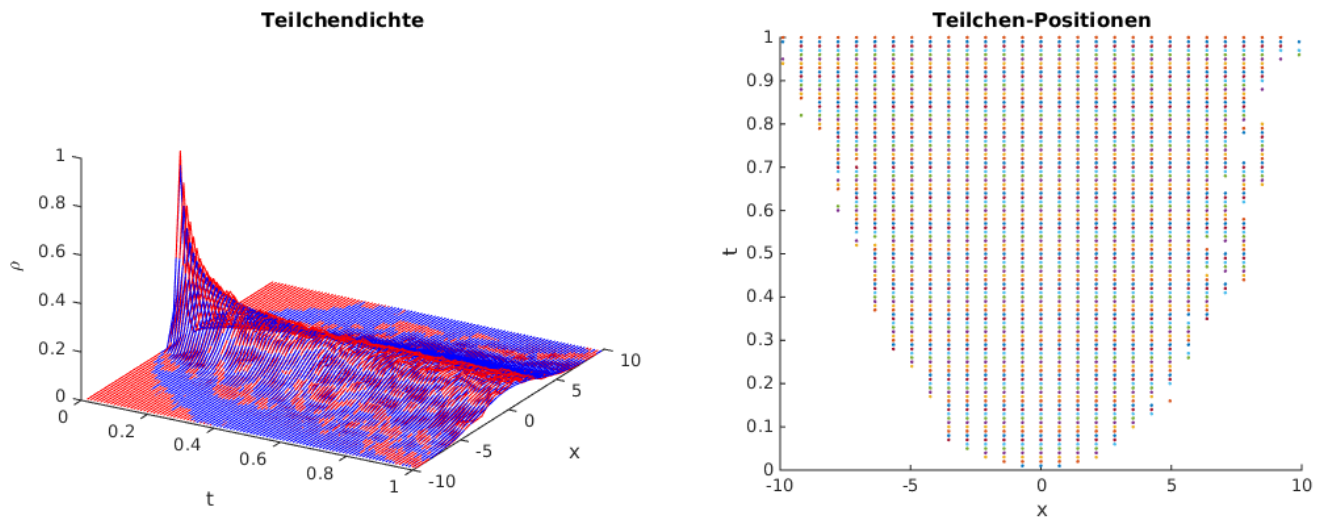
    drawnow;
end

```

Die Ergebnisse werden folgendermaßen grafisch dargestellt, zuerst für  $\alpha = 0.5$ ,



und dann für  $\alpha = 0.1$ ,



Man merkt, die simulierte Verteilung und die theoretische Verteilung stimmen besser für  $\alpha = 0.1$  als für  $\alpha = 0.5$  überein.

### • Beispiel 3: Brownsche Bewegung - Diffusion

#### ○ Aufgabe

Sei  $\rho(x, t)$  die Wahrscheinlichkeitsdichte, dass ein Teilchen in Brownscher Bewegung sich an der Stelle  $x$  in einem dünnen Rohr zur Zeit  $t$  befindet. Angenommen für ein  $D > 0$  erfüllt diese Dichte die

Diffusionsgleichung mit  $\Omega = (-1, +1)$  und  $T > 0$ ,

$$\begin{cases} \rho_t(x, t) = D\rho_{xx}(x, t), & (x, t) \in \Omega \times (0, T) \\ \rho_x(x, t) = 0, & (x, t) \in \partial\Omega \times [0, T] \\ \rho(x, 0) = \rho_0(x), & (x, t) \in \Omega \times \{0\} \end{cases} \quad \int_{\Omega} \rho(x, t) dx = 1$$

wobei  $\rho_0$  die anfängliche Dichte darstellt.

- (a) Schreiben Sie einen Matlab Code, um die Dichte  $\rho(x, t)$  für  $\rho_0(x) = (1 + \cos(\pi x))/2$  numerisch zu berechnen. Vergleichen Sie die numerische Lösung mit der exakten Lösung

$$\rho(x, t) = (1 + e^{-D\pi^2 t} \cos(\pi x))/2.$$

- (b) Verwenden Sie Ihren Code, um die numerische Lösung für

$$\rho_0(x) = \begin{cases} 1/(2\epsilon), & x \in [-\epsilon, +\epsilon] \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad \epsilon \in (0, 1)$$

zu berechnen. Vergleichen Sie die numerische Lösung mit der Funktion

$$\rho^\epsilon(x, t) = \frac{1}{4\epsilon} \left[ \operatorname{erf} \left( \frac{x + \epsilon}{\sqrt{4Dt}} \right) - \operatorname{erf} \left( \frac{x - \epsilon}{\sqrt{4Dt}} \right) \right].$$

Bestimmen Sie, ob  $\rho^\epsilon$  eine exakte Lösung ist.

## o Lösung

Vorab ist eine Einführung in diese Konzepte zielführend. Sei  $X(t)$  eine Zufallsvariable für die Position eines einzigen Teilchens zur Zeit  $t$ . Sei  $\rho(x, t)$  die Wahrscheinlichkeitsdichte für  $X(t)$ ,

$$\rho(a \leq X(t) \leq b) = \int_a^b \rho(\xi, t) d\xi.$$

Nun sei  $\delta(\tau)$  eine Zufallsvariable, die die Änderung der Position des Teilchens in einem Zeitintervall der Länge  $\tau$  darstellt. Sei  $f(\xi, \tau)$  die Wahrscheinlichkeitsdichte für  $\delta(\tau)$ ,

$$P(\delta(\tau) \in [a, b]) = \int_a^b f(\xi, \tau) d\xi$$

die keine Bewegungsrichtung bevorzugt, und daher ist  $f(\xi, \tau)$  eine gerade Funktion in  $\xi$ :  $f(\xi, \tau) = f(-\xi, \tau)$ . Wenn die Wahrscheinlichkeitsdichte  $\rho(x, t)$  für  $X(t)$  gegeben ist, dann folgt aus

$$\begin{aligned} P(a \leq X(t + \tau) \leq b) &= P(a \leq X(t) + \delta(\tau) \leq b) = \\ \int_{-\infty}^{+\infty} P(a \leq X(t) + \xi \leq b) f(\xi, \tau) d\xi &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[ \int_{a-\xi}^{b-\xi} \rho(\eta, t) d\eta \right] f(\xi, \tau) d\xi \\ &= \int_a^b \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x - \xi, t) f(\xi, \tau) d\xi \right] dx \end{aligned}$$

dass die Wahrscheinlichkeitsdichte  $\rho(x, t + \tau)$  für  $X(t + \tau)$  gegeben ist durch

$$\rho(x, t + \tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x - \xi, t) f(\xi, \tau) d\xi.$$

Durch Taylor-Entwicklungen gelten

$$\begin{aligned}\rho(x, t) + \tau \rho_t(x, t) + \dots &= \rho(x, t + \tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} [\rho(x, t) - \rho_x(x, t)\xi + \rho_{xx}(x, t)\xi^2/2 + \dots] f(\xi, \tau) d\xi \\ &= \rho(x, t) \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} f(\xi, \tau) d\xi}_{=1} - \rho_x(x, t) \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \xi f(\xi, \tau) d\xi}_{=0} + \rho_{xx}(x, t) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2} \xi^2 f(\xi, \tau) d\xi + \dots\end{aligned}$$

wobei die Integrale so vereinfacht werden können, da erstens  $f$  eine Wahrscheinlichkeitsdichte ist, die zweitens in  $\xi$  gerade ist. Es ergibt sich dann

$$\rho_t(x, t) = D \rho_{xx}(x, t) \quad \text{mit} \quad D = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\xi^2}{2\tau} f(\xi, \tau) d\xi.$$

Mit den Anfangsbedingungen

$$\rho^\epsilon(x, 0) = \begin{cases} 1/(2\epsilon), & x \in [-\epsilon, +\epsilon] \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

erfüllt

$$\rho^\epsilon(x, t) = \frac{1}{4\epsilon} \left[ \operatorname{erf}\left(\frac{x + \epsilon}{\sqrt{4Dt}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{x - \epsilon}{\sqrt{4Dt}}\right) \right], \quad \operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-z^2} dz$$

die partielle Differentialgleichung und die Anfangsbedingungen, wie eine explizite Rechnung bestätigt. Weiters gilt für  $t > 0$ ,

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \rho^\epsilon(x, t) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{4\epsilon} \left[ \operatorname{erf}\left(\frac{x + \epsilon}{\sqrt{2Dt}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{x - \epsilon}{\sqrt{2Dt}}\right) \right] = \frac{1}{2} \frac{d}{dx} \operatorname{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{2Dt}}\right) = \frac{e^{-x^2/(4Dt)}}{\sqrt{4\pi Dt}}$$

und daher wird  $f$  gegeben durch

$$\frac{e^{-x^2/(4D\tau)}}{\sqrt{4\pi D\tau}} \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} \rho^\epsilon(x, 0 + \tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho^\epsilon(x - \xi, 0) f(\xi, \tau) d\xi = \frac{1}{2\epsilon} \int_{x-\epsilon}^{x+\epsilon} f(\xi, \tau) d\xi \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} f(x, \tau).$$

Man bestätigt

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\xi^2}{2\tau} f(\xi, \tau) d\xi &= \frac{2D}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\xi^2}{4D\tau} e^{-\xi^2/(4D\tau)} \frac{d\xi}{\sqrt{4Dt}} \stackrel{z=\xi/\sqrt{4D\tau}}{=} \frac{2D}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} z^2 e^{-z^2} dz \\ &= \frac{2D}{\sqrt{\pi}} \left[ -\frac{1}{2} z e^{-z^2} \Big|_{-\infty}^{+\infty} + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-z^2} dz \right] = \frac{D}{2} [\operatorname{erf}(+\infty) - \operatorname{erf}(-\infty)] = D.\end{aligned}$$

Es folgt insbesondere

$$\rho(x, \tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x - \xi, 0) f(\xi, \tau) d\xi = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x - \xi, 0) \frac{e^{-\xi^2/(4D\tau)}}{\sqrt{4\pi D\tau}} d\xi.$$

Zur Bestimmung der Dichte  $\rho$  auf einem *endlichen* räumlichen Gebiet  $\Omega = (-1, +1)$  wird das Anfangs- und Randwertproblem der Diffusionsgleichung mit dem folgenden Matlab Code gelöst.

```

h1 = figure(1); close(h1); h1 = figure(1);
set(h1,'Position',[20 20 500 500]); % setup figure

Nx = 101; % number of cells
xmin = -1; % spatial interval
xmax = +1; % is (xmin,xmax)
xi = linspace(xmin,xmax,Nx+1); % cell interfaces
hx = xi(2)-xi(1);
xc = xi(1:Nx)' + hx/2; % cell centers

Nt = 101; % number of time intervals
T = 0.1; % final time
t = linspace(0,T,Nt+1); % time points
dt = t(2)-t(1);

D = 1; % diffusivity
dx = spdiags(ones(Nx,1),1,Nx-1,Nx) ... % d/dx
    - spdiags(ones(Nx,1),0,Nx-1,Nx);
dx = dx/hx;
A = speye(Nx) + dt*D*dx'*dx; % backward Euler discretization

example = 1;
switch example
    case 1
        r = (1 + cos(pi*xc))/2; % initial condition
        rs = (1 + kron(cos(pi*xc),exp(-D*pi^2*t)))/2; % exact solution
    case 2
        ep = 0.1; % initial condition
        r = double((xc > -ep) & (xc < +ep))/(2*ep);
        rs = zeros(Nx,Nt+1);
        rs(:,1) = r;
        for i=1:Nx % exact solution on D=R
            for k=2:(Nt+1)
                rs(i,k) = (erf((xc(i)+ep)/sqrt(4*D*t(k))) ...
                    - erf((xc(i)-ep)/sqrt(4*D*t(k))))/(4*ep);
            end
        end
    end
end
rmax = max([r(:);rs(:)]);
hold on % plot initial condition
plot3(t(1)*ones(size(xc)),xc,r,'b', ...
    t(1)*ones(size(xc)),xc,rs(:,1),'r.')
axis([0 T xmin xmax 0 rmax])
view([30,30])
title('Evolution der Dichte')
xlabel('t')
ylabel('x')
zlabel('\rho')

```

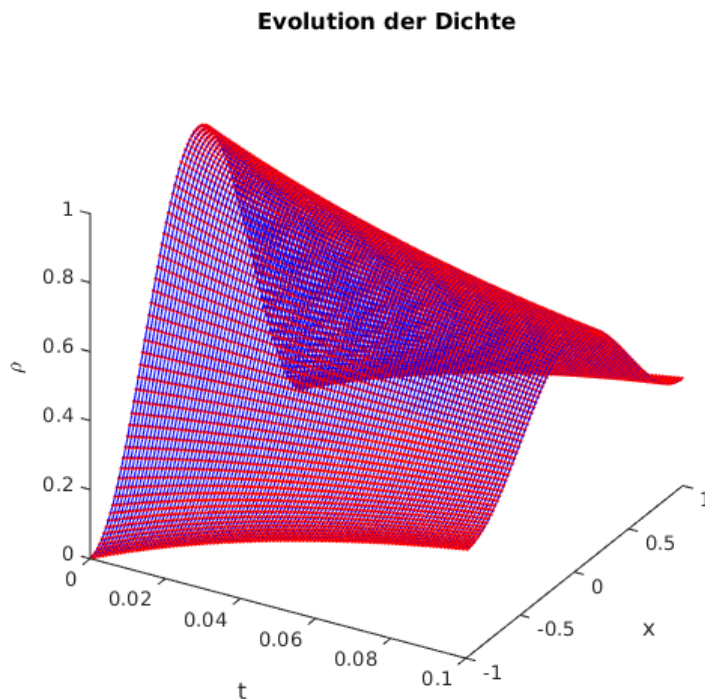
```

hold off;
drawnow;
for k=2:Nt+1
    r = A\r;                                     % backward Euler
    hold on                                     % plot current solution
    plot3(t(k)*ones(size(xc)),xc,r,'b', ...
          t(k)*ones(size(xc)),xc,rs(:,k),'r.')
    axis([0 T xmin xmax 0 rmax])
    view([30,30])
    title('Evolution der Dichte')
    xlabel('t')
    ylabel('x')
    zlabel('\rho')
    hold off;
    drawnow;
end

```

#### \* Teil (a) Implementierung

Mit  $\rho_0(x) = 1 + \cos(\pi x)$  ist die exakte Lösung gegeben durch  $\rho(x, t) = 1 + e^{-D\pi^2 t} \cos(\pi x)$ , die zusammen mit der sehr nah liegenden numerischen Lösung folgendmaßen grafisch dargestellt wird. Die exakte Lösung wird mit roten Punkten dargestellt und die numerische Lösung mit blau voll gezogenen Kurven.



### \* Teil (b) Untersuchung

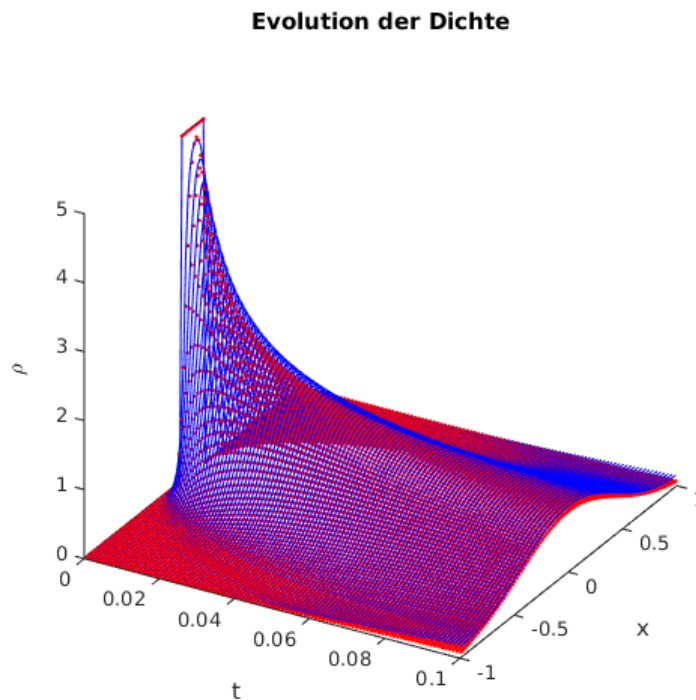
Mit der anfänglichen Dichte

$$\rho_x(x) = \begin{cases} 1/(2\epsilon), & x \in [-\epsilon, +\epsilon] \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad \epsilon \in (0, 1)$$

wird die numerische Lösung zusammen mit der Funktion

$$\rho^\epsilon(x, t) = \frac{1}{4\epsilon} \left[ \operatorname{erf} \left( \frac{x + \epsilon}{\sqrt{4Dt}} \right) - \operatorname{erf} \left( \frac{x - \epsilon}{\sqrt{4Dt}} \right) \right].$$

folgendermaßen grafisch dargestellt. Die Funktion  $\rho^\epsilon$  wird mit roten Punkten dargestellt und die numerische Lösung mit blau voll gezogenen Kurven.



Der Unterschied zwischen den Flächen ist besonders auffällig am Rand des Gebiets. Der Grund dafür liegt darin, dass die Funktion  $\rho^\epsilon$  die exakte Lösung der Diffusionsgleichung auf  $\Omega = \mathbb{R}$  ist, wie in der Einführung dieser Lösung angedeutet.

## • Beispiel 4: Quantenmechanik

### ◦ Aufgabe

Sei  $\psi(x, t)$  die komplexe Wellenfunktion, wobei  $|\psi|^2 = \rho(x, t)$  die Wahrscheinlichkeitsdichte darstellt, dass ein Teilchen mit Masse  $m$  unterwegs in einer räumlichen Dimension sich an der Stelle  $x$  zur Zeit  $t$  befindet. Angenommen erfüllt die Wellenfunktion die Schrödinger Gleichung mit  $\Omega = (-1, +1)$  und



$T > 0$ ,

$$\begin{cases} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}, & (x, t) \in \Omega \times (0, T) \\ \psi(x, t) = 0, & (x, t) \in \partial\Omega \times [0, T] \\ \psi(x, 0) = \psi_0(x), & (x, t) \in \Omega \times \{0\} \end{cases} \quad \int_{\Omega} |\psi(x, t)|^2 dx = 1$$

wobei  $|\psi_0|^2$  die anfängliche Dichte darstellt.

(a) Schreiben Sie einen Matlab Code, um die Wellenfunktion  $\psi(x, t)$  für Anfangswerte

$$\psi_0(x) = \omega \tilde{\psi}_0(x), \quad 1/\omega^2 = \int_{\Omega} |\tilde{\psi}(x)|^2 dx$$

$$\tilde{\psi}_0(x) = \exp\left(-\frac{\pi^2 \sigma^2}{\lambda^2} - \frac{(x - i\pi \sigma^2/\lambda)^2}{\sigma^2} + \frac{2\pi i x}{\lambda}\right) - \exp\left(-\frac{1}{\sigma^2}\right), \quad \sigma \in \mathbb{R}_+, 1/\lambda \in \mathbb{N}$$

numerisch zu berechnen. Vergleichen Sie die numerische Lösung mit der Funktion

$$\phi(x, t) = \sqrt{\frac{\sigma \sqrt{2/\pi}}{\sigma^2 + 2it\hbar/m}} \exp\left(\frac{2\pi i}{\lambda} \left(x - \frac{\pi t \hbar}{\lambda m}\right) - \frac{\pi^2 \sigma^2}{\lambda^2} - \frac{(x - 2\pi t \hbar/(\lambda m) - i\pi \sigma^2/\lambda)^2}{\sigma^2 + 2it\hbar/m}\right).$$

Bestimmen Sie, ob  $\phi(x, t)$  eine exakte Lösung ist.

(b) Zeigen Sie, mit  $\lambda = 4\pi\hbar/(mv)$  gilt

$$\rho(x, t) = |\phi(x, t)|^2 = \frac{\sigma \sqrt{2/\pi}}{\sqrt{\sigma^4 + 4\hbar^2 t^2/m^2}} \exp\left(-\frac{2\sigma^2(x - vt)^2}{\sigma^4 + 4\hbar^2 t^2/m^2}\right).$$

Zeigen Sie weiters, mit  $\hbar/m \rightarrow 0$  und  $\lambda \rightarrow 0$ , während  $v = 4\pi\hbar/(m\lambda)$  konstant bleibt, ergibt sich

$$\rho(x, t) = \sqrt{\frac{2}{\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x - vt)^2}{\sigma^2/2}\right)$$

die einer reisenden Welle mit Geschwindigkeit  $v$  entspricht.

## ○ Lösung

### \* Teil (a) Implementierung

Zuerst wird gezeigt, die Funktion  $\phi$  ist eine Lösung der Schrödinger-Gleichung auf  $\Omega = \mathbb{R}$  mit Anfangsbedingung

$$\phi(x, 0) = \phi_0(x) = \sqrt{\frac{\sqrt{2/\pi}}{\sigma}} \exp\left(-\frac{\pi^2 \sigma^2}{\lambda^2} - \frac{(x - i\pi \sigma^2/\lambda)^2}{\sigma^2} + \frac{2\pi i x}{\lambda}\right).$$

Wie in der Vorlesung erklärt ist die Lösung  $\phi$  durch die Faltung gegeben,

$$\phi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\phi_0(x - \xi)}{\sqrt{4\pi \left(\frac{i\hbar}{2m}\right) t}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{4 \left(\frac{i\hbar}{2m}\right) t}\right) d\xi.$$

Mit der vorgegebenen Funktion  $\phi_0(x) = \phi(x, 0)$  folgt

$$\begin{aligned}
\phi(x, t) &= \sqrt{\frac{\sqrt{2/\pi}}{\sigma}} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left( -\frac{\pi^2 \sigma^2}{\lambda^2} - \frac{(x - \xi - i\pi \sigma^2/\lambda)^2}{\sigma^2} + \frac{2\pi i (x - \xi)}{\lambda} - \frac{m \xi^2}{2i \hbar t} \right) d\xi \\
&= \sqrt{\frac{1}{\sigma}} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left[ -\left( \frac{\pi^2 \sigma^2}{\lambda^2} + \frac{(x - i\pi \sigma^2/\lambda)^2}{\sigma^2} - \frac{2\pi i x}{\lambda} \right) \right. \\
&\quad \left. + \left( \frac{2(x - i\pi \sigma^2/\lambda)}{\sigma^2} - \frac{2\pi i}{\lambda} \right) \xi - \left( \frac{1}{\sigma^2} + \frac{m}{2i \hbar t} \right) \xi^2 \right] d\xi \\
&= \alpha \int_{-\infty}^{+\infty} \exp [-\beta + \gamma \xi - \delta \xi^2] d\xi
\end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned}
\alpha &= \sqrt{\frac{1}{\sigma}} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}}, \quad \beta = \left( \frac{\pi^2 \sigma^2}{\lambda^2} + \frac{(x - i\pi \sigma^2/\lambda)^2}{\sigma^2} - \frac{2\pi i x}{\lambda} \right), \\
\gamma &= \left( \frac{2(x - i\pi \sigma^2/\lambda)}{\sigma^2} - \frac{2\pi i}{\lambda} \right), \quad \delta = \left( \frac{1}{\sigma^2} + \frac{m}{2i \hbar t} \right).
\end{aligned}$$

Weiters mit  $z = \sqrt{\delta}(\xi - \gamma/(2\delta))$  gilt

$$\begin{aligned}
\alpha \int_{-\infty}^{+\infty} \exp [-\beta + \gamma \xi - \delta \xi^2] d\xi &= \alpha \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left[ -\delta \left( \xi - \frac{\gamma}{2\delta} \right)^2 + \frac{\gamma^2}{4\delta} - \beta \right] d\xi \\
&= \alpha \exp \left( \frac{\gamma^2}{4\delta} - \beta \right) \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left[ -\delta \left( \xi - \frac{\gamma}{2\delta} \right)^2 \right] d\xi = \alpha \exp \left( \frac{\gamma^2}{4\delta} - \beta \right) \underbrace{\sqrt{\frac{\pi}{\delta}} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-z^2} dz}_{=1}
\end{aligned}$$

und daher

$$\begin{aligned}
\phi(x, t) &= \alpha \sqrt{\frac{\pi}{\delta}} \exp \left( \frac{\gamma^2}{4\delta} - \beta \right) = \sqrt{\sqrt{\frac{2}{\pi}} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \sigma \hbar t}} \sqrt{\frac{\pi}{(\frac{1}{\sigma^2} + \frac{m}{2i \hbar t})}}} \times \\
&\exp \left( \frac{\left( \frac{2(x - i\pi \sigma^2/\lambda)}{\sigma^2} - \frac{2\pi i}{\lambda} \right)^2}{4(\frac{1}{\sigma^2} + \frac{m}{2i \hbar t})} - \left( \frac{\pi^2 \sigma^2}{\lambda^2} + \frac{(x - i\pi \sigma^2/\lambda)^2}{\sigma^2} - \frac{2\pi i x}{\lambda} \right) \right) \\
&= \sqrt{\frac{\sigma \sqrt{2/\pi}}{\sigma^2 + 2i \hbar t/m}} \exp \left( \frac{(x - 2i\pi \sigma^2/\lambda)^2}{\sigma^4(\frac{1}{\sigma^2} + \frac{m}{2i \hbar t})} - \frac{\pi^2 \sigma^2}{\lambda^2} - \frac{(x - i\pi \sigma^2/\lambda)^2}{\sigma^2} + \frac{2\pi i x}{\lambda} \right)
\end{aligned}$$

oder nach Vereinfachungen,

$$\phi(x, t) = \sqrt{\frac{\sigma \sqrt{2/\pi}}{\sigma^2 + 2i \hbar t/m}} \exp \left( \frac{2\pi i}{\lambda} \left( x - \frac{\pi t \hbar}{\lambda m} \right) - \frac{\pi^2 \sigma^2}{\lambda^2} - \frac{(x - 2\pi t \hbar/(\lambda m) - i\pi \sigma^2/\lambda)^2}{\sigma^2 + 2i \hbar t/m} \right).$$

Da die numerisch zu approximierende Funktion  $\psi$  eine Lösung auf  $\Omega = (-1, +1)$  ist, unterscheiden sich die zwei Funktionen im Allgemeinen, und besonders wenn sie am Rand  $\partial\Omega$  nicht trivial sind. Die numerische Approximation von  $\psi$  und die Auswertung  $\phi$  erfolgen mit dem folgenden Matlab Code.

```

h1 = figure(1); close(h1); h1 = figure(1);
set(h1, 'Position', [10 50 1000 500]);

```

```

hbar = 0.1; % Planck's constant, goal <<1
sig = 0.1; % wave packet spread
lam = hbar; % wavelength, goal lam = hbar
m = 1; % mass
i1 = sqrt(-1);

Nt = 1000; % number of time steps
dt = 1.0e-4; % time step
T = Nt*dt; % final time

Nx = 1024; % number of spatial cells
n = 1/lam;
xmin = -1; % spatial interval is
xmax = +1; % (xmin,xmax)
xi = linspace(xmin,xmax,Nx+1)'; % cell interfaces
hx = xi(2)-xi(1);
xc = xi(1:Nx) + 0.5*hx; % cell centers

dx = spdiags(ones(Nx-1,1),1,Nx-1,Nx) ... % d/dx
    - spdiags(ones(Nx-1,1),0,Nx-1,Nx);
dx = dx/hx;
L = dx'*dx; % Lu ~ = -u_xx
L(1,:) = 0; L(Nx,:) = 0; % Dirichlet BCs
I = speye(Nx);
A = -i1*hbar*L/(2*m); % wave operator

th = 0.5; % time stepping scheme
B1 = (I - th*dt*A); % implicit scheme
B2 = (I + (1-th)*dt*A); % splitting

% initial conditions
phi = exp(-pi^2*sig^2/lam^2 - (xc - i1*pi*sig^2/lam).^2/sig^2 ...
    + 2*pi*i1*xc/lam);
phi = phi*sqrt(sqrt(2/pi)/sig); % exact solution on D=R

t=0;
psi = exp(-pi^2*sig^2/lam^2 - (xc - i1*pi*sig^2/lam).^2/sig^2 ...
    + 2*pi*i1*xc/lam) - exp(-1/sig^2);
psi = psi/sqrt(hx*sum(abs(psi).^2)); % numerical solution

pm = max([abs(phi).^2;abs(real(phi));abs(imag(phi)); ...
    abs(psi).^2;abs(real(psi));abs(imag(psi))]);
pm = 1.1*pm; % plot parameters
xm = max(abs(xmax),abs(xmin));

t = 0;
plot(xc,abs(psi).^2,'b', ... % plot initial condition

```

```

        xc,abs(phi).^2,'b:', ...
        xc,real(psi),'r', ...
        xc,real(phi),'r:', ...
        xc,imag(psi),'g', ...
        xc,imag(phi),'g:')
    legend('\|\psi|^2','\|\phi|^2')
    xlabel('x')
    ylabel('\|\cdot|^2, \Re\{\cdot\}, \Im\{\cdot\}')
    title(sprintf('Evolution der Wellenfunktionen\nt=%0.1e, h=%0.1e',t,hbar))
    axis([-xm xm -pm pm]);
    drawnow;

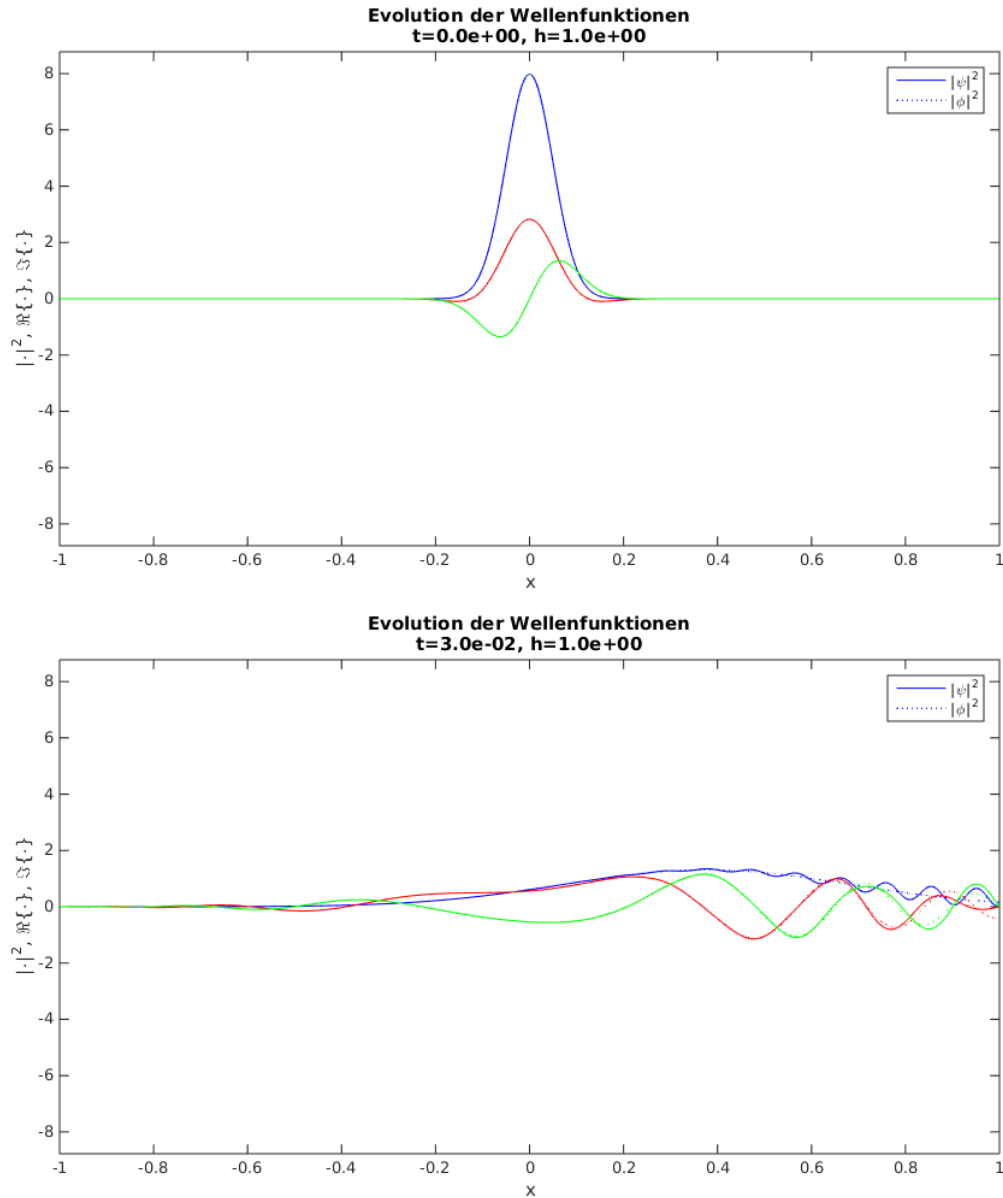
for k=1:Nt
    t = k*dt;

    % exact solution on D=R
    phi = exp((2*pi*i1/lam)*(xc - pi*t*hbar/(lam*m)) - pi^2*sig^2/lam^2 ...
        - (xc - 2*pi*t*hbar/(lam*m) ...
        - i1*pi*sig^2/lam).^2/(sig^2 + 2*i1*t*hbar/m));
    phi = phi*sqrt(sig*sqrt(2/pi)/(sig^2 + 2*i1*t*hbar/m));
    psi = B1\B2*psi; % time step

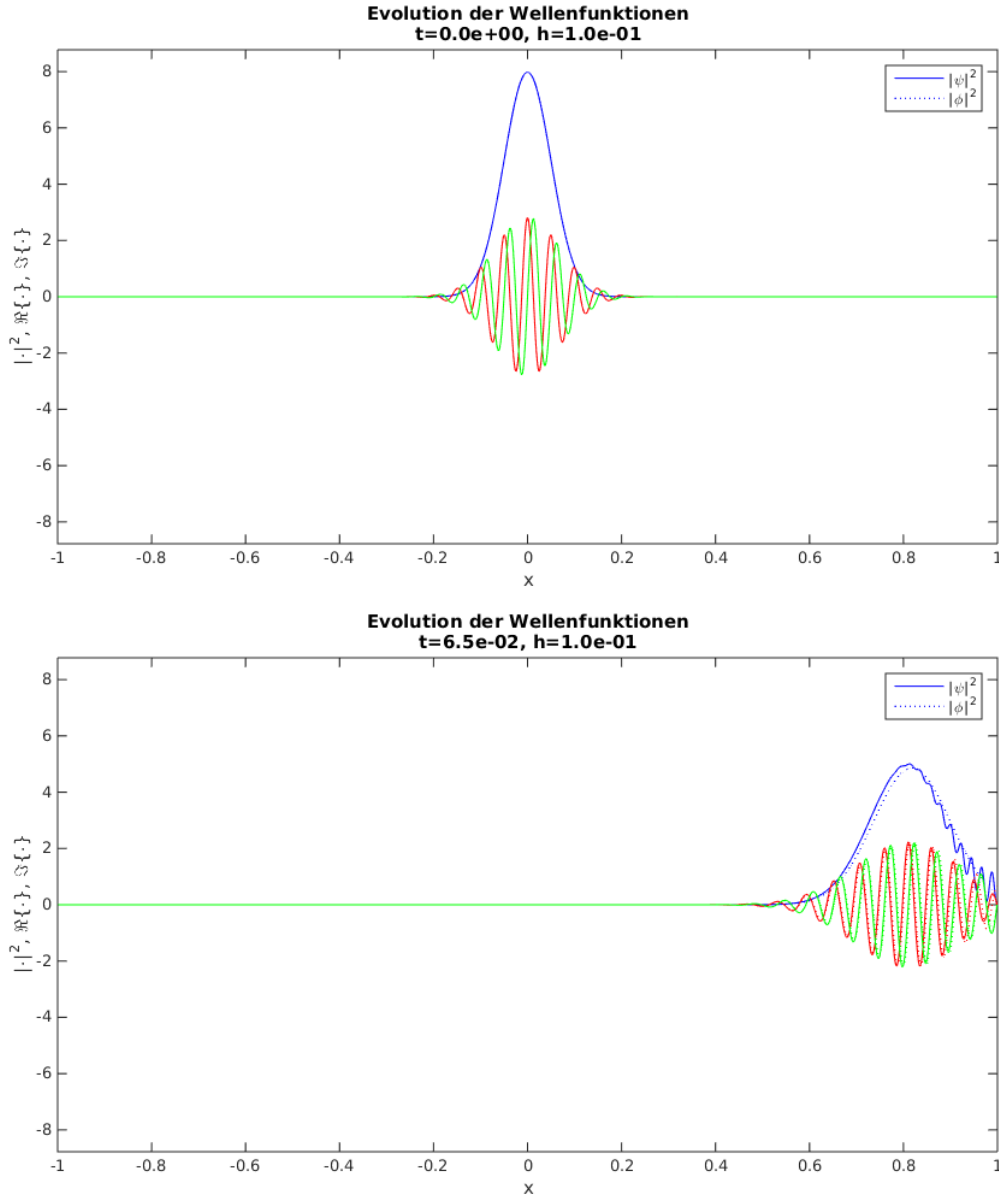
    plot(xc,abs(psi).^2,'b', ... % plot current condition
        xc,abs(phi).^2,'b:', ...
        xc,real(psi),'r', ...
        xc,real(phi),'r:', ...
        xc,imag(psi),'g', ...
        xc,imag(phi),'g:')
    legend('\|\psi|^2','\|\phi|^2')
    xlabel('x')
    ylabel('\|\cdot|^2, \Re\{\cdot\}, \Im\{\cdot\}')
    title(sprintf('Evolution der Wellenfunktionen\nt=%0.1e, h=%0.1e', ...
        t,hbar))
    axis([-xm xm -pm pm]);
    drawnow;
end

```

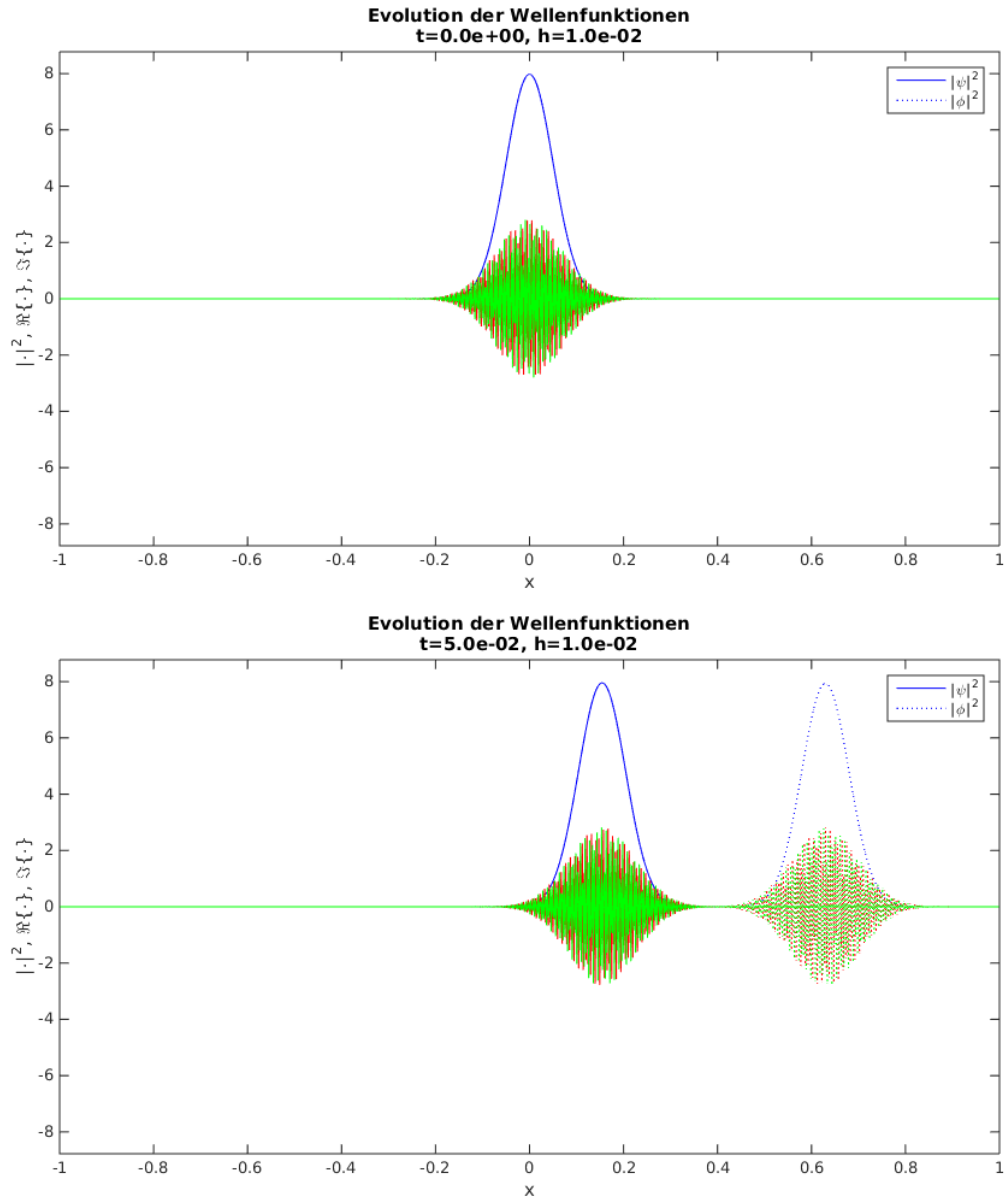
Die Ergebnisse lassen sich folgendermaßen grafisch darstellen. Für das erste Beispiel ist der Planckschen Konstante bei einem relativ großen Wert  $\hbar = 1$  eingestellt. Im ersten Bild gibt es die Anfangsverteilung, und im zweiten Bild die Verteilung zu dem Zeitpunkt in dem die Wellen den Rand  $\partial\Omega$  trifft. Die blauen Kurven sind  $|\psi|^2$  bzw.  $|\phi|^2$ , die roten  $\Re\{\psi\}$  bzw.  $\Re\{\phi\}$  und die grünen  $\Im\{\psi\}$  bzw.  $\Im\{\phi\}$ . Der Wert von  $\sigma$  bestimmt die anfängliche Breite des Wellenpakets. Die Geschwindigkeit der Wellen ist ungefähr  $v = 4\pi\hbar/(m\lambda)$  und wird daher durch die Wellenlänge  $\lambda$  beeinflusst. Hier gilt  $\lambda = \hbar$ . Da  $\hbar$  hier relativ groß ist, ist man im Quantenbereich, und das Teilchen wird schnell unschärfer im Lauf der Zeit, d.h. die Breite des Wellenpakets wird schnell größer. Da die Funktion  $\phi$  eine Lösung auf  $\Omega = \mathbb{R}$  ist, läuft ihre Welle unberührt durch den Rand bei  $x = 1$ . Die Funktion  $\psi$  ist eine numerische Approximation der Lösung auf  $\Omega = (-1, +1)$ , und ihre Welle reagiert auf den Rand bei  $x = 1$ . Daher unterscheiden sich die zwei Funktionen besonders stark zu dem Zeitpunkt, in dem die Wellen den Rand treffen.



Für das nächste Beispiel ist der Planckschen Konstante bei einem relativ kleinen Wert  $\hbar = 0.1$  eingestellt. Das Format der Bilder ist gleich wie bei den letzten zwei. Hier gilt wieder  $\lambda = \hbar$ , und daher ist die Geschwindigkeit der Wellen gleich wie im vorigen Beispiel. Da  $\hbar$  hier relativ klein ist, ist man eher im klassischen Bereich, und das Teilchen wird nicht schnell unscharf im Lauf der Zeit, d.h. die Breite des Wellenpakets bleibt länger erhalten. Wie im vorigen Beispiel gesehen, läuft die Welle von  $\psi$  durch den Rand, aber die Welle von  $\phi$  reagiert auf den Rand.



Für das letzte Beispiel ist der Planckschen Konstante bei einem sehr kleinen Wert  $\hbar = 0.01$  eingestellt. Das Format der Bilder ist gleich wie bei den letzten zwei. Hier gilt wieder  $\lambda = \hbar$ , und daher ist die Geschwindigkeit der Wellen gleich wie im vorigen Beispiel. Da  $\hbar$  hier so klein ist, ist man im klassischen Bereich, und das Teilchen wird nicht unscharf im Lauf der Zeit. Das neue Phänomen bei diesem Beispiel ist, dass  $\hbar$  so klein ist, dass die numerische Diskretisierung nicht ausreichend ist, um die sehr kurze Wellen aufzulösen. Daher läuft die Welle für  $\psi$  viel langsamer als die für  $\phi$ .



\* Teil (b) Untersuchung

Mit

$$\phi(x, t) = \sqrt{\frac{\sigma\sqrt{2/\pi}}{\sigma^2 + 2it\hbar/m}} \exp\left(\frac{2\pi i}{\lambda} \left(x - \frac{\pi t\hbar}{\lambda m}\right) - \frac{\pi^2 \sigma^2}{\lambda^2} - \frac{(x - 2\pi t\hbar/(\lambda m) - i\pi\sigma^2/\lambda)^2}{\sigma^2 + 2it\hbar/m}\right).$$

gilt

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &= \phi(x, t)\phi^*(x, t) = \sqrt{A}\exp(B - C - D) \times \sqrt{A^*}\exp(B^* - C - D^*) \\ &= \sqrt{AA^*}\exp((B + B^*) - 2C - (D + D^*)) \\ &= |A|\exp(2\Re\{B\} - 2C - 2\Re\{D\}) \\ &= |A|\exp(-2C - 2\Re\{D\}) \end{aligned}$$

wobei

$$A = \frac{\sigma\sqrt{2/\pi}}{\sigma^2 + 2i\hbar/m}, \quad B = \frac{2\pi i}{\lambda} \left( x - \frac{\pi t \hbar}{\lambda m} \right), \quad C = \frac{\pi^2 \sigma^2}{\lambda^2}, \quad D = \frac{(x - 2\pi t \hbar/(\lambda m) - i\pi \sigma^2/\lambda)^2}{\sigma^2 + 2i\hbar/m}.$$

Weiters mit

$$E = x - (\pi/\lambda)H, \quad F = \pi G/\lambda, \quad G = \sigma^2, \quad H = 2t\hbar/m$$

gilt

$$\begin{aligned} \Re\{D\} &= \Re \left\{ \frac{(E - iF)^2}{G + iH} \left( \frac{G - iH}{G - iH} \right) \right\} = \Re \left\{ \frac{(E^2 - F^2 - 2iEF)(G - iH)}{G^2 + H^2} \right\} \\ &= \Re \left\{ \frac{[(E^2 - F^2)G - 2EFH] - i[(E^2 - F^2)H + 2EFG]}{G^2 + H^2} \right\} \\ &= \frac{(E^2 - F^2)G - 2EFH}{G^2 + H^2} \\ &= \frac{[(x - (\pi/\lambda)H)^2 - \pi^2 G^2/\lambda^2]G - 2(x - (\pi/\lambda)H)(\pi G/\lambda)H}{G^2 + H^2} \\ &= \frac{x^2 G - 2x(\pi/\lambda)HG + (\pi/\lambda)^2 H^2 G - \pi^2 G^3/\lambda^2 - 2x(\pi/\lambda)GH + 2(\pi/\lambda)^2 GH^2}{G^2 + H^2} \\ &= G \frac{x^2 - 4x(\pi/\lambda)H + 3(\pi/\lambda)^2 H^2 - \pi^2 G^2/\lambda^2}{G^2 + H^2} \end{aligned}$$

Die Kombination von den  $C$ - und  $D$ -Termen ist

$$\begin{aligned} -2C - 2\Re\{D\} &= -2G(\pi/\lambda)^2 - 2G \frac{x^2 - 4x(\pi/\lambda)H + 3(\pi/\lambda)^2 H^2 - \pi^2 G^2/\lambda^2}{G^2 + H^2} \\ &= -2G \frac{(\pi/\lambda)^2 G^2 + (\pi/\lambda)^2 H^2 + x^2 - 4x(\pi/\lambda)H + 3(\pi/\lambda)^2 H^2 - (\pi/\lambda)^2 G^2}{G^2 + H^2} \\ &= -2G \frac{x^2 - 4x(\pi/\lambda)H + 4(\pi/\lambda)^2 H^2}{G^2 + H^2} = -2G \frac{(x - 2(\pi/\lambda)H)^2}{G^2 + H^2} \\ &= -2\sigma^2 \frac{(x - 2(\pi/\lambda)(2t\hbar/m))^2}{\sigma^4 + 4t^2 \hbar^2/m^2} \end{aligned}$$

und  $\rho(x, t)$  ist gegeben durch

$$\rho(x, t) = |A| \exp(-2C - 2\Re\{D\}) = \frac{\sigma\sqrt{2/\pi}}{\sqrt{\sigma^4 + 4t^2 \hbar^2/m^2}} \exp \left( -2\sigma^2 \frac{(x - 4\pi t \hbar/(\lambda m))^2}{\sigma^4 + 4t^2 \hbar^2/m^2} \right)$$

Mit  $v = 4\pi \hbar/(m\lambda)$  ergibt sich

$$\rho(x, t) = \frac{\sigma\sqrt{2/\pi}}{\sqrt{\sigma^4 + 4t^2 \hbar^2/m^2}} \exp \left( \frac{-2\sigma^2(x - vt)^2}{\sigma^4 + 4t^2 \hbar^2/m^2} \right).$$

Mit  $\hbar/m \rightarrow 0$  und  $\lambda \rightarrow 0$ , während  $v = 4\pi \hbar/(m\lambda)$  konstant bleibt, ergibt sich

$$\rho(x, t) = \lim_{\gamma \rightarrow 0} \left\{ \frac{\sigma\sqrt{2/\pi}}{\sqrt{\sigma^4 + 4t^2 \gamma^2}} \exp \left( \frac{-2\sigma^2(x - vt)^2}{\sigma^4 + 4t^2 \gamma^2} \right) \right\} = \sqrt{\frac{2}{\pi\sigma^2}} \exp \left( -\frac{(x - vt)^2}{\sigma^2/2} \right).$$