Аналитические приближённые методы.

Назар Симчук

Март 2022

1 Задание 1

Мы не можем сделать разложение данной функции на данном промежутке по синусам, так как на $[0;1]$ она имеет постоянный сдвиг равный 0.5, которой относится к разложению по косинусам, так что сделаем разложение по синусам продлив её до $[-1;1]$. Тогда приняв, что $L=2$ сделаем разложение по синусам. По формуле Эйлера:

$$e^{-2\pi inx/L} = \cos(2\pi nx/L) - i\sin(2\pi nx/L)$$

Где часть коэффициентов с синусами будет тогда находится[1]:

$$s_n = \frac{2}{L}\int_{-L/2}^{L/2} x\cdot\sin(2\pi nx/L)\,\mathrm{d}x$$

$$s_n = \int_{-1}^{1} x\cdot\sin(\pi nx)\,\mathrm{d}x = -\frac{x\cos(\pi nx)}{\pi n}\bigg|_{-1}^{1} + \int_{-1}^{1}\frac{\cos(\pi nx)}{\pi n}\mathrm{d}x = -\frac{\cos(\pi n)+\cos(\pi n)}{\pi n} + \cancelto{0}{\frac{\sin(\pi nx)}{\pi^2 n^2}}\bigg|_{-1}^{1} =$$

$$= \frac{(-1)^{n+1}2}{\pi n} \;:\; n\in\mathbb{N}$$

Для косинуса функцию надо продлить до $[-1;-1]$ чётным образом, так что будем находить коэффициенты разложения как

$$c_n = \frac{2}{L}\int_{-L/2}^{L/2}|x|\cos(2\pi nx/L)\,\mathrm{d}x = \int_{-1}^{1}|x|\cos(\pi nx)\,\mathrm{d}x$$

Из чётности функции под интегралом получаем:

$$c_t = 2\int_0^1 x\cos(\pi nx)\,\mathrm{d}x = \cancelto{0}{\frac{2x\sin(\pi nx)}{\pi n}}\bigg|_0^1 - \int_0^1\frac{2\sin(\pi nx)}{\pi n}\mathrm{d}x = \frac{2\cos(\pi nx)}{\pi^2 n^2}\bigg|_0^1 = 2\frac{(-1)^n-1}{\pi^2 n^2} =$$

$$\frac{2(-1)^n-2}{\pi^2 n^2} \;:\; n\in\mathbb{N}$$

Так же заметим, что есть ещё члены s_0 и c_0. Первый очевидно равен нулю, а для косинусов:

$$c_0 = \frac{1}{L}\int_{-L/2}^{L/2}|x|\,\mathrm{d}x = \int_0^1 x\,\mathrm{d}x = \frac{x^2}{2}\bigg|_0^1 = \frac{1}{2}$$

Тогда мы получаем:

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

$$\boxed{f(x) = \frac{1}{2} + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{2(-1)^n-2}{\pi^2 n^2}\cos(\pi nx)}$$

[1] Тригонометрическое преобразование Фурье

2 Задание 2

Запишем закон Ньютона для каждого из двух типов атомов в решётке:

$$\begin{cases} m_1 \dfrac{\mathrm{d}^2 z_n}{\mathrm{d}t^2} = K(y_{n+1} + y_n - 2z_n) \\ \\ m_2 \dfrac{\mathrm{d}^2 y_n}{\mathrm{d}t^2} = K(z_n + z_{n-1} - 2y_n) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}^2 z_n}{\mathrm{d}t^2} = \dfrac{K}{m_1}(y_{n+1} + y_n - 2z_n) \\ \\ \dfrac{\mathrm{d}^2 y_n}{\mathrm{d}t^2} = \dfrac{K}{m_2}(z_n + z_{n-1} - 2y_n) \end{cases}$$

Найдём решения в виде:

$$\begin{cases} z_n = \Phi e^{iqx_n - i\omega t} \\ y_n = \Psi e^{iqx_n - i\omega t} \end{cases}$$

Подставим их в наши уравнения (принимая, что $x_{n+1} = x_n + 2a$, так как расстояние между одинаковыми атомами равно $2a$):

$$\begin{cases} -\omega^2 \Phi = \dfrac{K}{m_1}\left(\Psi e^{2iqa} + \Psi - 2\Phi\right) \\ -\omega^2 \Psi = \dfrac{K}{m_2}\left(\Phi + \Phi e^{-2iqa} - 2\Psi\right) \end{cases}$$

Пусть $\dfrac{K}{m_1} = \Omega_1^2$ и $\dfrac{K}{m_2} = \Omega_2^2$.

$$\begin{cases} \Phi(2\Omega_1^2 - \omega^2) = \Omega_1^2\left(e^{2iqa} + 1\right)\Psi \\ \Psi(2\Omega_2^2 - \omega^2) = \Omega_2^2\left(1 + e^{-2iqa}\right)\Phi \end{cases}$$

Перемножим два уравнения и сократим Φ и Ψ:

$$(2\Omega_1^2 - \omega^2)(2\Omega_2^2 - \omega^2) = e^{2iqa} + e^{-2iqa} + 2$$

$$(2\Omega_1^2 - \omega^2)(2\Omega_2^2 - \omega^2) = 4\cos^2(qa) \cdot \Omega_1^2 \cdot \Omega_2^2$$

$$\omega^4 - 2(\Omega_1^2 + \Omega_2^2)\omega^2 + 4\Omega_1^2\Omega_2^2 - 4\Omega_1^2\Omega_2^2 \cos^2(qa) = 0$$

$$\omega^4 - 2(\Omega_1^2 + \Omega_2^2)\omega^2 + 4\sin^2 \Omega_1^2\Omega_2^2 \sin^2(qa) = 0$$

$$\omega^2 = \Omega_1^2 + \Omega_2^2 \pm \sqrt{\left(\Omega_1^2 + \Omega_2^2\right)^2 - 4\Omega_1^2\Omega_2^2 \sin^2(qa)}$$

$$\omega^2 = (\Omega_1^2 + \Omega_2^2)\left[1 \pm \sqrt{1 - \frac{4\Omega_1^2\Omega_2^2}{\left(\Omega_1^2 + \Omega_2^2\right)^2}\sin^2(qa)}\right]$$

Под корнем всегда неотрицательное число меньше единицы (по теореме о средних), так что частоты будут действительными. Искомый закон дисперсии после подстановки Ω_1 и Ω_2:

$$\boxed{\omega^2 = \left(\frac{K}{m_1} + \frac{K}{m_2}\right)\left[1 \pm \sqrt{1 - \frac{4m_1m_2}{(m_1 + m_2)^2}\sin^2(qa)}\right]}$$

3 Задание 3

$$p_n(t) = N\int_{-\pi}^{\pi} \exp\left[ikn - 2\lambda t(1 - \cos k)\right]\frac{dk}{2\pi} = N\int_{-\pi}^{\pi} e^{ikn} \cdot e^{-2\lambda t(1-\cos k)}\,\frac{\mathrm{d}k}{2\pi}$$

3.1 Пункт (а)

При $\lambda t \ll 1$ сделаем приближение для малых значений в экспоненте:

$$e^{2\lambda t(1-\cos k)} = 1 - 2\lambda t(1-\cos k)$$

Тогда интеграл принимает вид:

$$p_n(t) = N\int_{-\pi}^{\pi} e^{ikn}(1 - 2\lambda t + 2\lambda t\cos k)\frac{\mathrm{d}k}{2\pi} =$$

$$= N\int_{-\pi}^{\pi} e^{ikn}(1-2\lambda t)\frac{\mathrm{d}k}{2\pi} + 2\lambda t N\int_{-\pi}^{\pi}(\cos(kn) + i\sin(kn))\cos k\frac{\mathrm{d}k}{2\pi}$$

$$N\int_{-\pi}^{\pi} e^{ikn}(1-2\lambda t)\frac{\mathrm{d}k}{2\pi} = \frac{Ne^{ikn}(1-2\lambda t)}{2i\pi n}\bigg|_{-\pi}^{\pi} = \frac{N(1-2\lambda t)}{\pi n}\cdot\frac{e^{i\pi n} - e^{-i\pi n}}{2i} = \frac{N(1-2\lambda t)\sin(\pi n)}{\pi n}$$

Для нечётной функции:

$$N\int_{-\pi}^{\pi} i\sin(kn)\cos k\frac{\mathrm{d}k}{2\pi} = 0$$

$$N\int_{-\pi}^{\pi}\cos(kn)\cos k\frac{\mathrm{d}k}{2\pi} = N\int_{-\pi}^{\pi}\cos(kn)\cos k\frac{\mathrm{d}k}{2\pi} = \frac{N}{4\pi}\int_{-\pi}^{\pi}(\cos((n-1)k) + \cos((n+1)k))\,\mathrm{d}k =$$

$$= \frac{N}{4\pi}\left(\frac{\sin((n-1)k)}{n-1} + \frac{\sin((n+1)k)}{n+1}\right)\bigg|_{-\pi}^{\pi} =$$

$$= \frac{N}{2\pi}\left(\frac{\sin((n+1)\pi)}{n+1} + \frac{\sin((n-1)\pi)}{n-1}\right) =$$

$$= \frac{N}{2\pi}\left(-\frac{\sin(\pi n)}{n+1} - \frac{\sin(\pi n)}{n-1}\right) = -\frac{Nn\sin(\pi n)}{\pi(n^2-1)}$$

Так что исходный интеграл:

$$\boxed{p_n(t) \approx \frac{N(1-2\lambda t)\sin(\pi n)}{\pi n} + \frac{2\lambda t N n\sin(\pi n)}{\pi(1-n^2)}}$$

3.2 Пункт (б)

Для больших значений $\lambda t \gg 1$ член

$$e^{-2\lambda t(1-\cos k)} \ll 1 \;:\; k \in [-\pi;\pi] \;\wedge k \not\ll 1$$

Так что мы можем рассматривать данный интеграл при малых k, где он имеет наибольшие значения. Тогда:

$$e^{-2\lambda t(1-\cos k)} \approx e^{-\lambda t k^2}$$

Что представляет из себя чётную функцию по k.

$$e^{ikn}\cdot e^{-\lambda t k^2} = \cos(kn)e^{-\lambda t k^2} + i\sin(kn)e^{-\lambda t k^2}$$

При этом вторая функция получается нечётной, так что её интеграл можно считать равным нулю на $[-\pi;\pi]$. Остается:

$$\int_{-\pi}^{\pi}\cos(kn)e^{-\lambda t k^2}\,\mathrm{d}k \approx \int_{-\infty}^{\infty}\left(1 - \frac{k^2n^2}{2}\right)e^{-\lambda t k^2}\,\mathrm{d}k$$

Так как значащий порядок находится вблизи нуля и пределы интегрирования можно взять до больших значений.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\lambda t k^2}\,\mathrm{d}k = \sqrt{\frac{\pi}{\lambda t}}$$

Второй проинтегрируем по частям два раза:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} k^2 e^{-\lambda t k^2}\,\mathrm{d}k = \int_{-\infty}^{+\infty} k\cdot k e^{-\lambda t k^2}\,\mathrm{d}k = -\cancelto{0}{\left.\frac{k\cdot e^{-\lambda t k^2}}{2\lambda t}\right|_{-\infty}^{+\infty}} + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-\lambda t k^2}}{2\lambda t}\,\mathrm{d}k =$$

$$= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\lambda^3 t^3}}$$

$$\boxed{p_n(t) \approx \sqrt{\frac{\pi}{\lambda t}} - \frac{k^2 n^2}{4\lambda t}\sqrt{\frac{\pi}{\lambda t}}}$$

4 Задание 4

По сумме геометрической прогрессии:

$$\sum_{m=1}^{N} \exp\left[\frac{2i\pi mn}{N}\right] = \frac{\exp\left[\frac{2i\pi n}{N}\right](\exp\left[2i\pi n\right] - 1)}{\exp\left[\frac{2i\pi n}{N}\right] - 1}$$

Если $n \neq 0$, тогда:

$$\exp\left[\frac{2i\pi n}{N}\right] - 1 \neq 0 \text{ (для } n \neq kN : k \in \mathbb{N})$$

В таком случае:

$$\exp[2i\pi n] = \cos(2\pi n) + i\cancelto{0}{\sin(2\pi n)} = 1$$

Так что получаем:

$$\sum_{m=1}^{N} \exp\left[\frac{2i\pi mn}{N}\right] = \frac{\exp\left[\frac{2i\pi n}{N}\right](\cancelto{1}{\exp\left[2i\pi n\right]} - 1)}{\exp\left[\frac{2i\pi n}{N}\right] - 1} = 0 \;:\; n \neq 0, N$$

В другом случае ($n = 0$):

$$\sum_{m=1}^{N} \exp\left[\frac{2i\pi \cancelto{0}{n}m}{N}\right] = \sum_{m=1}^{N} 1 = N$$

Если же $n = kN \;:\; k \in \mathbb{N}$:

$$\sum_{m=1}^{N} \exp\left[2i\pi km\right] = \sum_{m=1}^{N}\left(\cancelto{1}{\cos(2\pi km)} + \cancel{i\sin(2\pi km)}\right) = \sum_{m=1}^{N} 1 = N$$

Что и требовалось доказать.

5 Задание 5

В начальный момент:

$$p_n(t=0) = \delta_{n0} = \begin{cases} 1, & n = 0 \\ 0, & n \neq 0 \end{cases}$$

$$\Delta t = 1 \text{ с}$$

$$p_n(t+1) = (1 - 2\lambda p_n(t)) + \lambda p_{n-1}(t) + \lambda p_{n+1}(t)$$

$$p_n(t+1) - p_n(t) = -2\lambda p_n(t) + \lambda p_{n-1}(t) + \lambda p_{n+1}(t)$$

$$\Delta p_n(t+1) = \lambda(p_{n-1} + p_{n+1} - 2p_n)$$

$$p_n(t) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\mathrm{d}k}{2\pi} p(k,t) e^{ikn}$$

$$p(k,t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} p_n(t) e^{-ikn}$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} \frac{\mathrm{d}k}{2\pi} \cdot \Delta p(k,t+1) \cdot e^{ikn} = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} p(k,t) \cdot \lambda(e^{-ik} + e^{ik} - 2) e^{ikn}$$

Откуда мы получаем, что в некоторый момент:

$$\Delta p(k,t+1) = \frac{4p(k,t)\lambda(e^{-ik} + e^{ik} - 2)}{4}$$

$$\Delta p(k,t+1) = 2p(k,t)\lambda(\cos k - 1)$$

$$p(k,t) = p(k,t-1) + \Delta p(k,t) = p(k,t-1) - p(k,t-1) \cdot 2\lambda(1 - \cos k) =$$

$$= (1 - 2\lambda + 2\lambda \cos k) \cdot p(k,t-1)$$

$$p(k,t) = (1 - 2\lambda + 2\lambda \cos k)^t \cdot p(k,0)$$

$$p(k,0) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} p_n(0) e^{-ikn} = 1$$

$$p(k,t) = (1 - 2\lambda + 2\lambda \cos k)^t$$

Тогда:

$$p_n(t) = \int_{-\pi}^{\pi} p(k,t) e^{ikn} \frac{\mathrm{d}k}{2\pi} = \int_{-\pi}^{\pi} (1 - 2\lambda + 2\lambda \cos k)^t e^{ikn} \frac{\mathrm{d}k}{2\pi} =$$

Вынесем 2λ и избавимся от нечётной составляющей:

$$p_n(t) = 2^t \lambda^t \int_{-\pi}^{\pi} \left(\frac{1}{2\lambda} - 1 + \cos k \right)^t \cdot (\cos(kn) + \cancel{i\sin(kn)}) \frac{\mathrm{d}k}{2\pi} = \frac{2^t \lambda^t}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \left(\frac{1}{2\lambda} - 1 + \cos k \right)^t \cos(kn) \, \mathrm{d}k$$

Таким образом, для начальных условий:

$$p_n(0) = \delta_{n0}$$

Вероятность в момент $t \in N_\epsilon$ найти частицу в n-узле:

$$p_n(t) = \frac{2^t \lambda^t}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \left(\frac{1}{2\lambda} - 1 + \cos k \right)^t \cos(kn) \, \mathrm{d}k$$