Kémiai matematika
10. gyakorlat

Busai Ágota
agota.busai@gmail.com
www.math.bme.hu/~bgotti

2016.11.24.

Az előző gyakorlatról megmaradt feladatok:

13. Milyen feltételekkel ortogonális egy $f(x)$ $L_2(-\infty,\infty)$-beli valós függvény a saját deriváltjára?

AZ ALÁBBI FELADATOKRA MAJD VISSZATÉRÜNK A FÉLÉV VÉGÉN

Definíció (Dirac-féle delta függvény (δ)): Nem tradicionális értelemben vett függvény.
Lehet „pongyolán” úgy definiálni, mint egy „függvényt” a valós számegyenesen, ami mindenütt zérus, kivéve az origót, ahol végtelen:

$$\delta(x) = \begin{cases} \infty & \text{ha } x = 0 \\ 0 & \text{ha } x \neq 0 \end{cases},$$

továbbá kielégíti az alábbi azonosságot

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)\mathrm{d}x = 1.$$

Mértékként

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)f(x)\mathrm{d}x = f(0)$$

Definíció (Dirac mérték):

$$\delta_{x_0}(A) = \begin{cases} 1 & \text{ha } x_0 \in A \\ 0 & \text{ha } x_0 \notin A \end{cases}$$

$\delta(x)$ néhány tulajdonsága:

(i) $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-x_0)f(x)\mathrm{d}x = f(x_0)$

(ii) $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(\alpha x)\mathrm{d}x = \frac{1}{|\alpha|}$

(iii) $\delta(-x) = \delta(x)$ (páros függvény)

Definíció (konvolúció): $f(x)$ és $g(x)$ függvények *konvolúciója*: $(f * g)(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(y)g(x-y)\mathrm{d}y$

14. Mutassuk meg, hogy $f * \delta = \delta * f = f$!

Definíció (Fourier-transzformáció): Legyen az f függvény abszolút integrálható, ekkor az f függvény *Fourier-transzformáltja*:

$$\mathcal{F}f(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{\imath\omega t} f(t)\mathrm{d}t,$$

az f függvény *inverz Fourier-transzformáltja*

$$\mathcal{F}^{-1}f(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-\imath\omega t} f(\omega)\mathrm{d}\omega.$$

Tétel: Legyen f és g két abszolút integrálható függvény, Fourier-transzformáltjukat jelölje F és G. Ekkor:

(i) $\mathcal{F}(\alpha f + \beta g) = \alpha F + \beta G$ (linearitás)

(ii) $\mathcal{F}(x \mapsto f(\frac{x}{a}))(\omega) = |a|F(a\omega)$ (dilatáció)

(iii) $\mathcal{F}(x \mapsto f(x-x_0))(\omega) = \mathrm{e}^{\imath\omega x_0} F(\omega)$ (eltolási tétel)

(iv) $\mathcal{F}(x \mapsto \mathrm{e}^{-\imath\omega_0 x} f(x))(\omega) = F(\omega-\omega_0)$ (moduláció)

(v) $\mathcal{F}(x \mapsto x^n f(x))(\omega) = \imath^n F^{(n)}(\omega)$ (differenciálás „frekvenciában”)

(vi) $\mathcal{F}(f^{(n)}(x))(\omega) = (\imath\omega)^n F(\omega)$ (differenciálás „időben”)

Megjegyzés: A Fourier-transzformációt a legtöbbször úgy interpretáljuk, hogy az $f(t)$ függvény egy időtől függő jel, $\mathcal{F}f(\omega) = F(\omega)$ pedig a jelben lévő ω körfrekvenciájú komponens komplex amplitúdója.

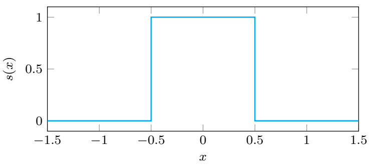
Tétel (Euler-formula): $\mathrm{e}^{\imath x} = \cos x + \imath \sin x$

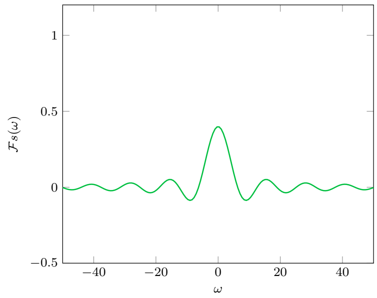
Állítás: $\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{\imath\omega x}\, \mathrm{d}\omega$

15. Határozzuk meg az

$$s(x) = \begin{cases} 1, & \text{ha } |x| \leq \frac{1}{2} \\ 0, & \text{ha } |x| > \frac{1}{2} \end{cases}$$

négyszögimpulzus Fourier-transzformáltját!





16. Fourier-transzformáljuk a Dirac-deltát!

17. Fourier-transzformáljuk az azonosan 1 függvényt!

18. Bizonyítsuk be, hogy a konvolúció Fourier-transzformáltja az alábbi módon írható fel a tényezők Fourier-transzformáltjának szorzataként!

$$\mathcal{F}(f * g)(\omega) = \sqrt{2\pi}\mathcal{F}f(\omega)\mathcal{F}g(\omega)$$

HF 19. Mutassuk meg, hogy az $\left\{ |f_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \mathrm{e}^{\imath kx}, k \in \mathbb{Z} \right\}$ ONB $L_2(-\pi, \pi)$-n!

---

1. Legyenek $\widehat{P}$ és $\widehat{Q}$ olyan hermitikus operátorok, amelyek kommutálnak. Legyenek a $\widehat{P}$ operátor sajátértékei p_i-k, és a $\widehat{Q}$ operátor sajátértékei q_i-k. Mutassuk meg, hogy ha $\widehat{P} + \widehat{Q} = \widehat{E}$ (ahol $\widehat{E}$ az egységoperátort jelöli), akkor $\forall i: \; p_i = 1 - q_i$!

Állítás: Ha $\widehat{A}$ és $\widehat{B}$ hermitikus operátorok kommutálnak, akkor van közös sajátvektorrendszerük.

2. Adottak $\varphi_1(x) = x, \varphi_2(x) = x^2 \in L_2[0, 1]$ függvények!

(a) Állítsd elő a $\varphi_1^N(x), \varphi_2^N(x)$ ortonormált bázisfüggvényeket $L_2[0, 1]$-en a fenti $\varphi_1(x), \varphi_2(x)$ függvényekből!

HF (b) Add meg a $\widehat{V} = x$ operátor mátrixát a $\varphi_1^N(x), \varphi_2^N(x)$ bázisban!

HF (c) Add meg a $\widehat{W} = \dfrac{1}{x}$ operátor mátrixát a $\varphi_1^N(x), \varphi_2^N(x)$ bázisban!

HF (d) Add meg a $\widehat{D} = \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ operátor mátrixát a $\varphi_1^N(x), \varphi_2^N(x)$ bázisban!

3. Mutasd meg, hogy az $L_2(-\infty, \infty)$ felett értelmezett $\widehat{D} = \dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}$ operátor hermitikus!

4. Tekintsük a kétdimenziós tér egy ortonormált bázisát: $|e_1\rangle, |e_2\rangle$. A $\widehat{T}$ tükröző operátor hatása a bázisvektorokra a következő:

$$\widehat{T}\,|e_1\rangle = |e_1\rangle$$
$$\widehat{T}\,|e_2\rangle = -\,|e_2\rangle$$

A $\widehat{C}$ forgató operátor az alábbiak szerint transzformálja a bázisvektorokat:

$$\widehat{C}\,|e_1\rangle = -\,|e_1\rangle$$
$$\widehat{C}\,|e_2\rangle = -\,|e_2\rangle$$

HF (a) Mutassuk meg, hogy $\widehat{T}^2 = \widehat{E}$.

(a) Kommutál-e a $\widehat{T}$ és a $\widehat{C}$ operátor?

(b) Adjuk meg a $(2 + \widehat{T})^{-1}$ operátort! (**HF** ellenőrizni)

Megjegyzés: Általában két tetszőleges tükröző operátor és forgató operátor nem kommutál.

5. A $\varphi_1(x) = \dfrac{1}{\sqrt{2}}$ és $\varphi_2(x) = \sqrt{\dfrac{3}{2}}x$ függvények ortonormáltak $L_2[-1, 1]$-en.

(a) Bontsuk fel az $f(x) = \sin(\pi x)$ függvényt φ_2-vel párhuzamos és merőleges komponensekre!

HF (b) Adjuk meg a $\widehat{D} = \imath \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ operátort ábrázoló mátrixot a $\varphi_1(x), \varphi_2(x)$ bázisán! Mit tudunk a mellékátlóbeli elemek viszonyáról?

HF 6. Legyen $|a\rangle, |b\rangle$ ONB, $\widehat{T} = |a\rangle\langle a| - |b\rangle\langle b|$. Add meg a $\widehat{T}|v\rangle$ vektort, ha $|v\rangle = |a\rangle - |b\rangle$! Sajátvektora-e $\widehat{T}$-nek a $|v\rangle$ vektor?

Definíció (normáloperátor): $\widehat{N}$ operátor *normáloperátor*, ha $[\widehat{N}, \widehat{N}^\dagger] = 0$.

HF 7. (a) Igazold, hogy az *antihermitikus* operátorok *normáloperátorok*.

(b) Mutasd meg, hogy az *antihermitikus* operátorok sajátértékei tisztán képzetes számok.

(c) Bizonyítsd be, hogy ha $\widehat{A}$ *antihermitikus* operátor, akkor $\mathrm{e}^{\widehat{A}}$ *unitér* (azaz az adjungáltja az inverze).

8. Lássuk be, hogy ha az $\widehat{A}$ és $\widehat{B}$ hermitikus operátorok nem kommutálnak, akkor nincs közös sajátvektor-rendszerük.

9. Add meg az xy-síkra vetítés opretárának mátrixát a háromdimanziós tér $|x\rangle = \begin{pmatrix}1 & 0 & 0\end{pmatrix}^\dagger$, $|y\rangle = \begin{pmatrix}0 & 1 & 0\end{pmatrix}^\dagger$, $|z\rangle = \begin{pmatrix}0 & 0 & 1\end{pmatrix}^\dagger$ ortonormált bázisában!

---

10. Határozd meg az $f'(x) = g(x)$ (közvetlenül integrálható, elsőrendű, homogén) DE megoldását!

11. Határozd meg az $y'(x) = f(x)y(x)$ (szeparábilis, elsőrendű, homogén) DE megoldását!

12. Határozd meg az $y'(x) = f(x)g(y(x))$ (szeparábilis, elsőrendű, homogén) DE megoldását!

13. Határozd meg az $y'(x) = \dfrac{\cos^2(y(x))}{x^2}$ azon megoldását, amelyre $y(1) = \dfrac{\pi}{4}$!

14. Határozd meg az $\dot{x}(t) = 5x(t)(2 - x(t))$, $x(0) = 1$ kezdetiérték-probléma megoldását!

Az alábbi feladatokra már nem jutott idő ezen a gyakorlaton:

15. Határozd meg az alábbi elsőrendű inhomogén lineáris KDE-k megoldását az állandók variálásának módszerével!

(a) $y'(t) = \dfrac{y'(t)}{t} + t$

(b) $\dot{x}(t) + 2x(t) = \mathrm{e}^t$, $x(0) = 0$

16. Határozd meg az $\dot{x}(t) + 2x(t) = 10 + \cos(5t)$, $x(0) = 0$ kezdetiérték-probléma megoldását próbafüggvény módszerrel!

17. Oldjuk meg az alábbi kezdetiérték-problémákat!

(a) $\dot{x}(t) = x(t) + y(t),\ \dot{y}(t) = 4y(t) - 2x(t),\ x(0) = 0,\ y(0) = -1$

(b) $\dot{x}(t) = y(t) + 2\,\mathrm{e}^t,\ \dot{y}(t) = x(t) + t^2,\ x(0) = 1,\ y(0) = 1$

(c) $\dot{x}_1(t) = x_2(t),\ \dot{x}_2(t) = x_1(t),\ \dot{x}_3(t) = x_3(t) + x_4(t),\ \dot{x}_4(t) = 4x_4(t) - 2x_3(t)$
$x_1(0) = 1,\ x_2(0) = 1,\ x_3(0) = -2,\ x_4(0) = 4$

18. Határozd meg az alábbi másodrendű differenciálegyenletek általános megoldását!

(a) $\ddot{x}(t) + 9x(t) = 0$

(b) $\ddot{x}(t) - 6\dot{x}(t) + 10x(t) = 0$

(c) $\ddot{x}(t) - 8\dot{x}(t) + 7x(t) = 0$

19. Határozd meg az alábbi másodrendű inhomogén differenciálegyenlet általános megoldását!

$$\ddot{x}(t) - 5\dot{x}(t) + 6x(t) = t\,\mathrm{e}^t$$

20. Szeparálással oldjuk meg az $f(x, y)$ függvényre vonatkozó alábbi parciális differenciálegyenletet!

(a) $\dfrac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \dfrac{\partial f}{\partial y} = 0$

(b) $2\dfrac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \dfrac{1}{y^2}\dfrac{\partial f}{\partial y}$

21. Oldjuk meg Laplace-transzformáció segítségével az alábbi kezdetiérték-problémákat!

(a) $\dot{x}(t) = x(t),\ x(0) = 3$

(b) $2\dot{x}(t) - x(t) = 0,\ x(0) = \frac{1}{2}$

(c) $\ddot{x}(t) = -x(t),\ x(0) = 0,\ \dot{x}(0) = -2$

(d) $2\dot{x}(t) + x(t) = \mathrm{e}^{2t},\ x(0) = 1$

(e) $\dot{x}(t) = x(t) + 3y(t),\ \dot{y}(t) = -x(t) + 5y(t),\ x(0) = 1,\ y(0) = 0$

$f(t)$	$F(s) = (\mathcal{L}f)(s)$	$f(t)$	$F(s) = (\mathcal{L}f)(s)$
1	$\frac{1}{s}$	t^n	$\frac{n!}{s^{n+1}}$
$\mathrm{e}^{\alpha t}$	$\frac{1}{s-\alpha}$	$t^n\,\mathrm{e}^{\alpha t}$	$\frac{n!}{(s-\alpha)^{n+1}}$
$\sin(\omega t)$	$\frac{\omega}{s^2+\omega^2}$	$\mathrm{e}^{\alpha t}\sin(\omega t)$	$\frac{\omega}{(s-\alpha)^2+\omega^2}$
$\cos(\omega t)$	$\frac{s}{s^2+\omega^2}$	$\mathrm{e}^{\alpha t}\cos(\omega t)$	$\frac{s-\alpha}{(s-\alpha)^2+\omega^2}$
$\mathrm{e}^{\alpha t}\,f(t)$	$F(s-\alpha)$	$t^n f(t)$	$(-1)^n F^{(n)}(s)$
$f'(t)$	$sF(s) - f(0)$	$f^{(n)}(t)$	$s^n F(s) - \sum_{i=0}^{n-1} s^{n-1-i} f^{(i)}(0) =$
			$= s^n F(s) - s^{n-1}f(0) - s^{n-2}f'(0) - \cdots - sf^{(n-2)}(0) - f^{(n-1)}(0)$