Erinnerung: die Lösung u = u(t) zur skalaren Dgl

$$u''(t) + au(t) = f(t),$$
 $u(0) = u^{(0)},$ $u'(0) = u^{(1)},$ $a = \text{const.},$

ist gegeben durch

$$u(t) = v'(t) \cdot u^{(0)} + v(t) \cdot u^{(1)} + (v * f)(t), \tag{1}$$

wobei v die sogenannte Fundamentallösung ist, das heißt, v löst die skalare Dgl

$$v''(t) + av(t) = 0,$$
 $v(0) = 0,$ $v'(0) = 1.$

Unser Ziel ist es nun, ein ähnliches Ergebnis zu beweisen für ein Oszillatorkettenmodell, was ein System aus unendlich vielen Differentialgleichungen ist: die Differentialgleichungen sind

$$u_n''(t) = u_{n-1}(t) - 2u_n(t) + u_{n+1}(t), \qquad n \in \mathbb{Z}, \quad t \ge 0,$$
(2)

und wir haben die Anfangsbedingungen

$$u_n(0) = u_n^{(0)}, \qquad u_n'(0) = u_n^{(1)}, \qquad n \in \mathbb{Z}.$$
 (3)

Die physikalische Vorstellung: unendliche viele Atome, die wir mit Zahlen $n \in \mathbb{Z}$ durchnumerieren, sind nebeneinander angeordnet, und jedes wirkt mit seinen beiden Nachbarn über eine Federwirkung. Die Auslenkung des n-ten Atoms aus seiner Ruhelage wird beschrieben durch eine Funktion $u_n = u_n(t)$. Die Federkonstanten und Einzelmassen sind auf Eins normiert.



Das Ziel: eine verstehbare Lösungsformel, aus der man das Verhalten ablesen kann.

Insbesondere werden wir zeigen:

Lemma 0.1. Seien nur endlich viele der Anfangsdaten $u_n^{(0)}$ und $u_n^{(1)}$ ungleich Null. Dann ist eine Lösung zu (2), (3) gegeben durch

$$u_n(t) = \sum_{m \in \mathbb{Z}} \left(u_m^{(0)} \cdot J_{2(n-m)}(2t) + u_m^{(1)} \cdot \left(\sum_{l=|n-m|} J_{2l+1}(2t) \right) \right), \qquad n \in \mathbb{Z},$$

wobei J_{ν} mit $\nu \in \mathbb{C}$ die Besselfunktionen sind:

$$J_{\nu}(t) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m!\Gamma(m+\nu+1)} \left(\frac{t}{2}\right)^{2m+\nu}.$$

Wir vermerken einige Dinge:

• Man kann zeigen (z.B. durch Koeffizientenvergleich der Potenzreihen), daß

$$J_{2(n-m)}(2t) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \sum_{l=|n-m|} J_{2l+1}(2t),$$

und eine Beziehung dieser Art beobachten wir auch in (1),

- wir können n und m als Ortsvariable interpretieren, weil damit die Atome durchgezählt werden, und es ist $\sum_{m} u_{m}^{(0)} J_{2(n-m)}(2t)$ interpretierbar als eine Faltung über dem Ortsvariablenraum \mathbb{Z} ,
- Die Besselfunktion $J_k(s)$ ist exponentiell klein für s < |k|/2, hat ihren größten Beitrag bei $s \sim |k|$, und klingt für s > |k| langsam ab (wie $s^{-1/2}$, hat aber noch Oszillationen). Wenn also die Anfangsdaten z.B. ungleich Null sind nur für $|n| \le 3$, dann ist zur Zeit t die Lösung konzentriert bei $|n| \approx t$ (wir suchen einfach diejenigen n, für die $2|n-m| \approx 2t$). Das bedeutet, daß eine Welle durch die Federkette wandert (nach links oder rechts) mit Geschwindigkeit ungefähr gleich eins. Höhere Geschwindigkeiten sind nur um den Preis exponentieller Dämpfung möglich, geringere Geschwindigkeiten können aber vorkommen. Die Ausbreitungsgeschwindigkeit hängt auch von der Ortsfrequenz ab (in der Physik ist dieser Effekt als Dispersion bekannt).

Es gibt verschiedene Wege, Lemma 0.1 zu zeigen:

• mathematisch am exaktesten: wir machen eine Probe der Darstellungsformel, ob die dadurch gegebene Funktion wirklich eine Lösung ist. Ein solcher Beweis verwendet Formeln wie z.B.

$$\cos(z\sin\theta) = J_0(z) + 2\sum_{l=1}^{\infty} J_{2l}(z)\cos(2l\theta),$$
$$J_{-n}(z) = (-1)^n J_n(z),$$
$$J_{\nu-1}(z) - J_{\nu+1}(z) = 2J'_{\nu}(z),$$

die man z.B. durch Koeffizientenvergleich aller auftauchenden Potenzreihen zeigen kann (oder indem man die Laplace-Transformierten vergleicht).

• für das Verständnis der Zusammenhänge vielleicht nützlicher: ein Beweis dafür, daß jede Lösung die angegebene Gestalt haben **muß**. Für einen exakten Beweis einer solchen Aussage fehlen uns einige Werkzeuge aus der Funktionalanalysis (und die Zeit), sodaß wir jetzt Abstriche bei der logischen Präzision machen. Da wir auf jeden Fall den ersten • zur Verfügung haben, entsteht so keine Beweislücke.

Bemerkung 0.2. Zuerst bemerken wir, daß das Federkettensystem eine mechanische Energie besitzt. Wir setzen

$$\mathcal{E}(t) := \frac{1}{2} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \left((u'_n(t))^2 + (u_n(t) - u_{n-1}(t))^2 \right),\,$$

wobei wir hier annehmen, daß $u_n(t)$ und $u'_n(t)$ für $|n| \to \infty$ so schnell abklingen, daß die Reihe konvergiert. Dann gilt (falls die u_n eine Lösung bilden)

$$\mathcal{E}'(t) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \frac{1}{2} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \left((u'_n(t))^2 + (u_n(t) - u_{n-1}(t))^2 \right) \stackrel{*}{=} \frac{1}{2} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left((u'_n(t))^2 + (u_n(t) - u_{n-1}(t))^2 \right) = 0,$$

und hier setzen wir voraus, daß die Lösung so beschaffen ist, daß die Umformung (*) zulässig ist. (In den für uns relevanten Fällen klingen $u_n(t)$ und $u'_n(t)$ bei festem t exponentiell in |n| ab für $|n| \to \infty$, sodaß dann (*) erlaubt ist).

Dann folgt $\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}(0)$, und daraus lernen wir, daß bei Anfangsdaten identisch gleich Null (also $u_n^{(0)} = u_n^{(1)} = 0 \ (\forall n)$) auch $u_n(t) = 0$ für alle t und alle n, und deshalb sind die Lösungen zum System (2), (3) eindeutig, wenn wir nur solche Lösungen zum Wettbewerb zulassen, für die (*) erlaubt ist.

Für die Motivation der Lösungsformel aus Lemma 0.1 holen wir etwas weiter aus:

Lemma 0.3. Die Laplace-Transformierte von

$$K_{a,\nu} \colon t \mapsto a^{\nu} J_{\nu}(at), \qquad a > 0, \qquad \nu > -1,$$

wobei J_{ν} die Besselfunktion ist, lautet

$$z \mapsto \frac{\left(\sqrt{z^2 + a^2} - z\right)^{\nu}}{\sqrt{z^2 + a^2}}, \quad \Re z > 0,$$

und hier sind $\sqrt{\cdot}$ und $(\cdot)^{\nu}$ als die Hauptzweige zu verstehen.

Beweisskizze im empfehlenswerten Selbststudium. Wir benötigen die Aussage eigentlich nur für $\nu=n\in\mathbb{Z}$, und dann gibt es einen höchst eleganten Beweis über eine Integraldarstellung und den Residuensatz: Die Besselfunktionswerte $J_n(t)$ mit $n\in\mathbb{Z}$ sind nämlich gerade die Fourierkoeffizienten, die man erhält, wenn man die 2π -periodische Funktion $\varphi\mapsto \exp(\mathrm{i}t\sin\varphi)$ Fourier-entwickelt:

$$\exp(\mathrm{i}t\sin\varphi) = \sum_{n\in\mathbb{Z}} J_n(t)e^{\mathrm{i}n\varphi}.$$

Dies war ein Thema der Hausaufgaben, Blatt 5, unter dem Stichwort erzeugende Funktion. Die Theorie der Fourierreihen aus dem zweiten Semester liefert uns dann

$$J_n(at) = \frac{1}{2\pi} \int_{\tau - -\pi}^{\pi} e^{-i(n\tau - at\sin\tau)} d\tau,$$

und das führt uns dann direkt zu

$$\mathcal{L}\{K_{a,n}\}(z) = \frac{1}{2\pi} \int_{t=0}^{\infty} e^{-tz} \left(a^n \int_{\tau=-\pi}^{\pi} e^{-i(n\tau - at\sin\tau)} d\tau \right) dt$$

$$= \frac{a^n}{2\pi} \int_{\tau=-\pi}^{\pi} e^{-in\tau} \left(\int_{t=0}^{\infty} e^{-tz} e^{iat\sin\tau} dt \right) d\tau = \frac{a^n}{2\pi} \int_{\tau=-\pi}^{\pi} e^{-in\tau} \frac{1}{z - ia\sin\tau} d\tau$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{\tau=-\tau}^{\tau} \left(ae^{-i\tau} \right)^n \frac{1}{z - \frac{a}{2} \left(e^{i\tau} - e^{-i\tau} \right)} d\tau = \frac{1}{2\pi} \int_{\tau=-\pi}^{\tau} \left(ae^{-i\tau} \right)^n \frac{2 \left(ae^{-i\tau} \right)}{2z \cdot ae^{-i\tau} - a^2 + \left(ae^{-i\tau} \right)^2} d\tau.$$

Hier substituieren wir jetzt mit $w=ae^{-i\tau}$ und $\mathrm{d}w=-\mathrm{i}w\,\mathrm{d}\tau$. Wir umlaufen dann einen Kreis B mit Radius a um den Ursprung, im Uhrzeigersinn (also anders als gewohnt). Demnach ist

$$\mathcal{L}\{K_{a,n}\}(z) = \frac{1}{2\pi} \oint_B w^n \frac{2w}{2z \cdot w - a^2 + w^2} \frac{1}{-\mathrm{i}w} \, \mathrm{d}w = \frac{-1}{2\pi\mathrm{i}} \oint_B \frac{2w^n}{w^2 + 2zw - a^2} \, \mathrm{d}w.$$

Die Nullstellen des Nenners sind $w_{1,2} = -z \pm \sqrt{z^2 + a^2}$, und wir nehmen jetzt an, daß $z \in \mathbb{R}$ ist mit $z \gg a > 0$. Dann umläuft B nur $w_1 = -z - \sqrt{z^2 + a^2}$, und wir bekommen

$$\mathcal{L}\{K_{a,n}\}(z) = \operatorname*{res}_{w=w_1} \left\{ \frac{2w^n}{(w-w_1)(w-w_2)} \right\} = \frac{2w_1^n}{(w_1-w_2)} = \frac{\left(-z+\sqrt{z^2+a^2}\right)^n}{\sqrt{z^2+a^2}}.$$

Dies ist die Behauptung für $z \in \mathbb{R}$ mit $z \gg a$. Den Rest erledigt das Identitätstheorem für analytische Funktionen.

Korollar 0.4. Wir setzen $P_n(t) := J_{2n-1}(2t) + J_{2n+1}(2t)$ für $n \in \mathbb{N}_+$. Dann gilt

$$P_n * P_m = P_{n+m}, \quad n, m \in \mathbb{N}_+$$

Es dürfte recht schwierig sein, diese Identität ohne das Werkzeug der Laplace-Transformation zu beweisen!

Beweis. Es genügt zu zeigen, daß

$$\mathcal{L}\{P_{n+m}\} = \mathcal{L}\{P_n\} \cdot \mathcal{L}\{P_n\}, \qquad n, m \in \mathbb{N}_+,$$

und das ist aber eine mechanische Rechnung:

$$\begin{split} \mathcal{L}\{P_n\}(z) &= \frac{(\sqrt{z^2+4}-z)^{2n-1}}{2^{n-1}\sqrt{z^2+4}} \left(1 + \frac{(\sqrt{z^2+4}-z)^2}{4}\right), \\ 1 &+ \frac{(\sqrt{z^2+4}-z)^2}{4} = 1 + \frac{(z^2+4)-2z\sqrt{z^2+4}+z^2}{4} = \frac{1}{2}\left((z^2+4)-z\sqrt{z^2+4}\right) \\ &= \frac{1}{2}\sqrt{z^2+4}\left(\sqrt{z^2+4}-z\right), \\ \mathcal{L}\{P_n\}(z) &= \left(\frac{\sqrt{z^2+4}-z}{2}\right)^{2n} = \left(\sqrt{1+\frac{z^2}{4}}-\frac{z}{2}\right)^{2n}. \end{split}$$

Wir greifen den Gedanken hinter (1) auf:

Lemma 0.5. Eine Lösung zu (2) mit den speziellen Anfangsbedingungen

$$\begin{cases} u_n(0) = 0, & n \in \mathbb{Z}, \\ u'_n(0) = \begin{cases} 1 & : n = 0, \\ 0 & : n \neq 0. \end{cases} \end{cases}$$
 (4)

ist gegeben durch:

$$u_n(t) = \sum_{l=|n|}^{\infty} J_{2l+1}(2t), \qquad n \in \mathbb{Z},$$

Beweis. Ein logisch einwandfreier Beweis entsteht, indem man einfach eine Probe durchführt. Dies ist letztlich ein Training im kräftesparenden Rechnen und deshalb als freiwillige Übungsaufgabe zu empfehlen. (Leider wird bei diesem Beweis nicht sichtbar, wo die Lösungsformel herkommt.)

Die folgenden Betrachtungen sind stellenweise heuristisch geprägt und sollen motivieren, wie die angegebene Lösungsformel zustandekommt.

Pseudo-Beweis. Es erscheint physikalisch plausibel, daß das nullte Atom zwei Wellen in der Oszillatorkette erzeugt: eine Welle nach links, und eine Welle nach rechts. Hierzu sei auch auf das **Video** auf der Homepage verwiesen, in dem genau diese Fundamentallösung dargestellt wird.

Wir nutzen die Eindeutigkeit der Lösungen aus: wenn der unendliche Vektor $(\ldots, u_{-3}, u_{-2}, u_{-1}, u_0, u_1, u_2, u_3, \ldots)(t)$ das System (2) und die speziellen Anfangsbedingungen (4) löst, dann löst auch der "reflektierte Vektor" $(\ldots, u_3, u_2, u_1, u_0, u_{-1}, u_{-2}, u_{-3}, \ldots)(t)$ das System (2) und die speziellen Anfangsbedingungen (4). Die "Reflektion" bedeutet einfach, daß wir den Kristall um 180° herumdrehen. Aufgrund der Eindeutigkeit müssen beide Lösungen übereinstimmen, also insbesondere $u_1(t) = u_{-1}(t)$, für alle tf. Das kann man sich so vorstellen: weil $u'_0(t=0)=1$ ist, bewegt sich das nullte Atom für kleine Zeiten t nach rechts, und dabei schiebt es das erste Atom vor sich her, und das minus-erste Atom wird hinterher gezogen. Also bewegen sich die Atome mit den Nummern -1 und +1 beide nach rechts. In diesem Sinne ist die Erkenntnis $u_{-1} \equiv u_{+1}$ physikalisch plausibel.

Wir betrachten das n—te Atom mit $n \ge 1$. Dieses Atom (und sein Nachar an Position (n+1)) werden beeinflußt nur von der Welle, die nach rechts läuft, denn n ist positiv. Weil u_{n+1} zur Zeit t=0 Nullanfangswerte hat, und weil sämtliche Information des Atoms n+1 nur vom Atom n stammen kann, erwarten wir hier ein **lineares zeit-invariantes System**, und wir vermuten eine Beziehung

$$u_{n+1}(t) = (Q * u_n)(t), t \ge 0,$$

mit einer noch unbekannten Funktion Q = Q(t). Und weil die Atome nicht unterschieden werden können, erwarten wir ebenfalls

$$u_n(t) = (Q * u_{n-1})(t), t \ge 0,$$

mit derselben Funktion Q.

Dann ist

$$u'_n(t) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_{s=0}^t Q(t-s)u_{n-1}(s) \,\mathrm{d}s = Q(0)u_{n-1}(t) + (Q' * u_{n-1})(t),$$

und jetzt machen wir die **Annahme** Q(0) = 0. Weiteres Differenzieren liefert dann

$$u_n''(t) = Q'(0)u_{n-1}(t) + (Q'' * u_{n-1})(t.)$$

Andererseits haben wir aber auch

$$u_n''(t) = u_{n-1}(t) - 2u_n(t) + u_{n+1}(t)$$

= $u_{n-1}(t) - 2(Q * u_{n-1})(t) + (Q * Q * u_{n-1})(t).$

Diese beiden Darstellungen können wir gleichsetzen.

Schließlich ist physikalisch plausibel, daß Q für $t\to\infty$ höchstens exponentiell wächst. Dann können wir die Laplace–Transformation anwenden und kommen zu

$$Q'(0)\hat{u}_{n-1}(z) + (Q'')\hat{\ }(z) \cdot \hat{u}_{n-1}(z) = \hat{u}_{n-1}(z) - 2\hat{Q}(z) \cdot \hat{u}_{n-1}(z) + \left(\hat{Q}(z)\right)^2 \hat{u}_{n-1}(z)$$

$$\implies (Q'')\hat{\ }(z) + Q'(0) = 1 - 2\hat{Q}(z) + \left(\hat{Q}(z)\right)^2.$$

Nun ist bekanntlich $(Q'')(z) = z^2 \hat{Q}(z) - zQ(0) - Q'(0)$, also folgt

$$z^{2}\hat{Q}(z) = 1 - 2\hat{Q}(z) + \left(\hat{Q}(z)\right)^{2},$$

$$\implies \hat{Q}(z) = \frac{2+z^{2}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{2+z^{2}}{2}\right)^{2} - 1}.$$

Weil \hat{Q} eine Laplace-Transformierte ist, gilt $\hat{Q}(z) \to 0$ for $\mathbb{R} \ni z \to +\infty$, womit das + im \pm ausgeschlossen wird, und somit können wir (zumindest für große reelle $z \gg 1$) schlußfolgern, daß

$$\hat{Q}(z) = \frac{2+z^2}{2} - \sqrt{\left(\frac{2+z^2}{2}\right)^2 - 1} = \frac{2+z^2}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{4+4z^2+z^4-4}$$

$$= \frac{2+z^2}{2} - z\sqrt{1+\frac{z^2}{4}} = \frac{z^2}{4} - 2\cdot\frac{z}{2}\cdot\sqrt{1+\frac{z^2}{4}} + \left(1+\frac{z^2}{4}\right)$$

$$= \left(\frac{z}{2} - \sqrt{1+\frac{z^2}{4}}\right)^2 = \left(\frac{z}{2} + \sqrt{1+\frac{z^2}{4}}\right)^{-2},$$

und dies bringt uns zu

$$Q(t) = P_1(t) = J_1(2t) + J_3(2t) = \frac{2}{t}J_2(2t),$$

wobei wir hier die Beziehung

$$J_{\nu-1}(s) + J_{\nu+1}(s) = \frac{2\nu}{s} J_{\nu}(s),$$

genutzt haben, die man z.B. über Koeffizientenvergleich aller beteiligter Potenzreihen zeigen kann. Jetzt können wir die Funktion $u_0 = u_0(t)$ bestimmen. Wir wissen schon, daß $u_1 = u_{-1}$, also ist

$$u_0''(t) = u_1 + u_{-1} - 2u_0 = 2(Q * u_0)(t) - 2u_0(t), \qquad u_0(0) = 0, \quad u_0'(0) = 1,$$

und eine Laplace-Transformation dieser Gleichung liefert uns

$$(u_0'')\hat{\ }(z) = z^2 \hat{u}_0(z) - zu_0(z) - u_0'(0) = z^2 \hat{u}_0(z) - 1$$

= $2\hat{Q}(z) \cdot \hat{u}_0(z) - 2\hat{u}_0(z),$

was sich zusammenfassen läßt zu

$$(z^2 - 2\hat{Q}(z) + 2)\hat{u}_0(z) = 1,$$

und daraus erhalten wir schrittweise, daß

$$\left(z^2 - (2 + z^2 - z\sqrt{z^2 + 4}) + 2\right) \hat{u}_0(z) = 1,$$

$$z\sqrt{z^2 + 4} \cdot \hat{u}_0(z) = 1,$$

$$z\hat{u}_0(z) - 0 = \frac{1}{\sqrt{z^2 + 4}},$$

$$\mathcal{L}\{u_0'\}(z) = \frac{1}{\sqrt{z^2 + 4}},$$

$$u_0'(t) = J_0(2t),$$

und somit ist u_0 bestimmt als

$$u_0(t) = \int_{s=0}^t J_0(2s) ds = \sum_{l=0}^\infty J_{2l+1}(2t) = P_1(t) + P_3(t) + P_5(t) + \dots,$$

denn wir haben $J_{\nu-1}(\sigma) - J_{\nu+1}(\sigma) = 2J'_{\nu}(\sigma)$ sowie $\lim_{\nu \to \infty} J_{\nu}(\sigma) = 0$ für jedes feste σ .

6 LITERATUR

Die weiteren Funktionen u_1, u_2, \ldots , bestimmen wir über

$$u_1 = Q * u_0 = P_1 * (P_1 + P_3 + P_5 + \dots) = P_2 + P_4 + P_6 + \dots = \sum_{l=1}^{\infty} J_{2l+1}(2t),$$

$$u_2 = Q * u_1 = P_1 * (P_2 + P_4 + P_6 + \dots) = P_3 + P_5 + P_7 + \dots = \sum_{l=0}^{\infty} J_{2l+1}(2t),$$

und so weiter, und es ergibt sich dann

$$u_n(t) = \sum_{l=|n|}^{\infty} J_{2l+1}(2t), \qquad n \in \mathbb{Z},$$

was gleich unserer Behauptung ist.

Motivation und Beweis zu Lemma 0.1. Wir wissen, wie die Lösung aussieht, wenn alle Anfangsauslenkungen gleich Null sind, und alle Anfangsgeschwindigkeiten (bis auf eine) ebenfalls.

Wenn wir uns an (1) erinnern, kommen wir zur Vermutung, daß eine Lösungsdarstellung für den Fall der allgemeinen Anfangsdaten (3) gegeben sein könnte durch

$$u_n(t) = \sum_{m \in \mathbb{Z}} \left(u_m^{(0)} \cdot \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \sum_{l=|n-m|}^{\infty} J_{2l+1}(2t) \right) + u_m^{(1)} \cdot \left(\sum_{l=|n-m|} J_{2l+1}(2t) \right) \right).$$

Beachte hierbei, daß $J_{-n}(z)=(-1)^nJ_n(z)$. Wir können diese Darstellung noch umformen zu

$$u_n(t) = \sum_{m \in \mathbb{Z}} \left(u_m^{(0)} \cdot J_{2(n-m)}(2t) + u_m^{(1)} \cdot \left(\sum_{l=|n-m|} J_{2l+1}(2t) \right) \right),$$

und das ist die gewünschte Lösungsdarstellung. Eine Probe bestätigt, daß die dadurch dargestellten Funktionen u_n mit $n \in \mathbb{Z}$ wirklich Lösungen sind.

Weitere Ergebnisse zu diesem Oszillatorkettenmodell (und auch ein exakterer (aber auch abstrakterer) Beweis der Lösungsdarstellung in Lemma 0.1) findet sich in [1], zu finden als PrePrint im KOPS der Uni Konstanz.

Literatur

[1] Michael Dreher and Shaoqiang Tang. Time history interfacial conditions in multiscale computations of lattice oscillations. *Comput. Mech.*, 41(5):683–698, 2008.