Tepelná rovnice by měla být zasazena do úplného termodynamického rámce (1. a 2. zákon termodynamiky).
Matematici: nestandardní přístup
zaslechnou pojem entropie

$$\eta(t) := S(u)(t) = \int_\Omega u \log u$$

Studujme evoluci této veličiny v případě, kdy u řeší

$$\boxed{\begin{aligned} &\frac{\partial u}{\partial t} - \Delta u = 0 \quad v\ (0;\infty)\times\Omega \\ &u(0,\cdot) = u_0 \quad v\ \Omega \\ &\frac{\partial u}{\partial n} = \underset{\nabla u}{\underset{\shortparallel}{q}}\cdot n = 0 \quad na\ (0,+\infty)\times\partial\Omega \end{aligned}}$$

speciální řešení

Pak

$u = u(t,x)$

$$\frac{d}{dt} S(u) = \frac{d}{dt}\int_\Omega u \log u \, dx =$$

$$= \int_\Omega (\partial_t u \log u + \partial_t u)\, dx = \int_\Omega \partial_t u\,(\log u + 1)\, dx$$

$$\overset{\text{rce}}{=} \int_\Omega \Delta u\,(\log u + 1)\, dx$$

$$\overset{\text{per-partes}}{=} \int_{\partial\Omega} \frac{\partial u}{\partial n}(\log u + 1)\, dx - \int_\Omega \frac{\nabla u\cdot\nabla u}{u}\, dx = -\int_\Omega \frac{|\nabla u|^2}{u}$$

Protože víme: je-li $u_0 > 0$ na části Ω, pak $u > 0$ všude v $(0,+\infty)\times\Omega$, tak $\log u$ je dobře definován; a poslední člen v předchozím výpočtu je nekladný. Tedy celková entropie soustavy, tj. veličina $\eta(t) := \int_\Omega u \log u$ je klesající funkce vzhledem k času.

Schrödingerova rovnice

nebo „komplexní pravděpodobnostní amplituda"

Komplexní funkce $\psi(t,x) = X(t,x) + iY(t,x)$ se nazývá vlnová fce v kvantové mechanice když řeší rci

$$i\partial_t\psi + \Delta\psi - V(x)\psi = 0$$ Lineární rce

$V(x)$ – potenciál, reprezentující prostředí ve kterém se kvantová částice vyskytuje

Nelineární S-rce

$$i\partial_t\psi + \Delta\psi + c|\psi|^2\psi = 0$$

$c|\psi|^2$ – potenciál vytvořen lokální intenzitou $|\psi|^2$

samointeragující potenciál způsobuje
- zaostření $\longrightarrow c<0$
- rozostření $\longrightarrow c>0$

vlnové fce

$$i\partial_t\psi + \Delta\psi = 0 \iff \boxed{\partial_t\psi - i\Delta\psi = 0}$$ Blízká ~~…~~ tepelné rci

Cauchyho úloha pro tepelnou rci ($s\ f\equiv 0$):

$$u(t,x) = \frac{1}{(4\pi t)^{d/2}}\int_{\mathbb{R}^d} e^{-\frac{|x-y|^2}{4t}}u_0(y)\,dy = (u_0 * \phi^{(t,\cdot)})(x) \qquad \phi(t,x) := \frac{1}{(4\pi t)^{d/2}}e^{-\frac{|x|^2}{4t}}$$

tepelné jádro klesá rychle $\to \infty$

Cauchyho úloha pro Schrödingerovu rci: formálně nahradit $t \to it$

$$(*)\quad u(t,x) = \frac{1}{(4\pi i t)^{d/2}}\int_{\mathbb{R}^d} e^{\frac{i|x-y|^2}{4t}}u_0(y)\,dy = (u_0 * \phi(t,\cdot))(x) \qquad \phi(t,x) = \frac{1}{(4\pi i t)^{d/2}}e^{+\frac{i|x|^2}{4t}}$$

$$\sqrt{i} = e^{\frac{i\pi}{4}}$$

schrödingerovo jádro neklesá pro $|x|\to\infty$, zato osciluje rychle v ∞.

Rigorózní(ji): Pomocí F.T. a vzorce (●) v Příkladu 3 str 17/21 (21. strana kap. 17): $\widehat{e^{i\alpha|x|^2}}(\xi) = \left(\frac{\pi i}{\alpha}\right)^{d/2}e^{-\frac{\pi i}{\alpha}|\xi|^2}$ (●)

Aplikuj F.T. na
$$\begin{cases} \partial_t u - i\Delta u = 0 & v\ (0,\infty)\times\mathbb{R}^d \\ u(0,\cdot) = u_0 & v\ \mathbb{R}^d \end{cases}$$

Pak

$$\boxed{\begin{aligned}\partial_t \hat u(t,\xi) + i4\pi^2|\xi|^2 \hat u(t,\xi) &= 0\\ \hat u(0,\xi) &= \hat u_0(\xi)\end{aligned}} \qquad e^{4\pi^2 i t}$$

$$\left(\hat u(t,\xi)\, e^{4\pi^2 i t|\xi|^2}\right) = \hat u_0(\xi)$$

$$(**) \quad \boxed{\hat u(t,\xi) = e^{-4\pi^2 i t|\xi|^2}\, \hat u_0(\xi)}$$

S použitím (●) s $\alpha = \frac{1}{4t}$ dostáváme
$$e^{-4\pi^2 i t|\xi|^2} = \frac{1}{(4\pi i t)^{d/2}}\, \widehat{e^{\frac{i|x|^2}{4t}}}(\xi) = \widehat{\frac{1}{(4\pi i t)^{d/2}}\, e^{\frac{i|x|^2}{4t}}}(\xi)$$

tedy
$$\hat u(t,\xi) = \underbrace{\widehat{\frac{1}{(4\pi i t)^{d/2}}\, e^{\frac{i|x|^2}{4t}}}(\xi)}_{\phi(t,x)}\, \hat u_0(\xi) = \widehat{(\phi(t,\cdot) * u_0)}(\xi)$$

což dává vzorec (*).

Důsledek:
$$\|u(t,\cdot)\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d)} \le \frac{1}{(4\pi|t|)^{d/2}} \|u_0\|_{L^1(\mathbb{R}^d)}$$

Ze vzorce (**) plyne $|\hat u(t,\xi)| = |\hat u_0(\xi)| \quad \forall t$

Tedy
$$\|u(t,\cdot)\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} = \|\hat u(t,\cdot)\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} = \|\hat u_0\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} = \|u_0\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}$$

Podobně jako jsme F.T. pro $\varphi \in \mathcal{S}$ rozšířili na F.T. pro $\varphi \in L^2$ lze rozšířit „vzorec" (řešitelnost) Cauchyho úlohy pro $u(t,\cdot), u_0 \in \mathcal{S}$ rozšířit pro $u(t,\cdot), u_0 \in L^2$.

Zatímco vzorec pro (vedení) řešení Cauchyho úlohy (tepelné rce) platí pro $t>0$,
vzorec (kvantové) —"— volné Schrödingerovy rovnice platí *) pro $t \in \mathbb{R}$

~~Zatímco, řešení~~ Srovnání (tepelné/difúzní) rce se Schrödingerovou rovnicí se pokusil provést --- , viz bc-práce: ______

*) Schrödingerova rce je reverzibilní v čase, tepelná nikoliv.

Často je užitečné hledat řešení rovnic ve speciálním tvaru (radiálně symetrické, axiálně symetrické, samopodobnost, ...). Další třídou jsou rovinné nebo cestující vlny. S nimi jsme se setkali u transportní a vlnové rovnice. Zkusme se podívat co o nich můžeme zjistit u ostatních evolučních rovnic, které jsme probrali.

- Je-li $u=u(t,x)$, $t\in\mathbb{R}, x\in\mathbb{R}$, ve tvaru
$$u(t,x) = V(x-\sigma t)$$
pak u se nazývá cestující vlna s rychlostí σ a profilem V.

- Obecněji: řešení $u = u(t,x_1,\dots,x_d)$ ve tvaru
$$u(t,x) = V(y\cdot x - \sigma t)$$
se nazývá rovinná vlna (kde y je normála vlnovou frontou) s rychlostí $\frac{\sigma}{|y|}$, profilem V a [illegible]

Speciálním typem (řešení) jsou ve tvaru komplexní rovinné vlny:

(★) $$\boxed{u(t,x) = e^{i(y\cdot x - \sigma t)}}$$

kde $\sigma\in\mathbb{C}$, $\underbrace{y=(y_1,\dots,y_d)}_{\text{vlnové číslo}}\in\mathbb{R}^d$, σ časová frekvence

U následujících 3 rovnic se zaměříme na vztah mezi y a σ.

TEPELNÁ ROVNICE

① Je-li u tvaru (★), pak pro tepelnou rovnici platí.
$$\partial_t u - \Delta u = (i\sigma + |y|^2)u$$
Tedy u ve tvaru (★) je řešením tepelné rovnice pokud
$$\sigma = -i|y|^2, \text{ což implikuje}$$
$$u(t,x) = e^{iy\cdot x - |y|^2 t}$$ řeší tepelnou rci pro $\forall y\in\mathbb{R}^d$.

Odtud plyne, že

$$e^{-|y|^2 t}\cos(y\cdot x) \quad a \quad e^{-|y|^2 t}\sin(y\cdot x)$$

řeší také tepelnou rovnici.

Protože σ je ostře imaginární, dostáváme člen

$e^{-|y|^2 t}$ který je reálný, nezáporný, exponenciální a odpovídá tlumení, poklesu, <u>disipaci</u>

② $\boxed{\text{VLNOVÁ RCE}}$

$$\partial_{tt}u - \Delta u \overset{(\ast)}{=} (-\sigma^2+|y|^2)u = 0 \quad \text{pokud} \quad \boxed{\sigma = \pm|y|}$$

Tedy
$$u(t,x) = \cos(y\cdot x \pm |y|t) + i\sin(y\cdot x \pm |y|t)$$
řeší vlnovou rci. Protože σ je <u>reálné</u>, nenastanou žádné disipativní efekty, absolutní hodnota rychlosti šíření je $\frac{|\sigma|}{|y|} = 1$ pro tato řešení.

③ $\boxed{\text{KLEIN-GORDONOVA RCE}}$ $\partial_{tt}u - \Delta u + m^2 u = 0$ vede

$$(-\sigma^2+|y|^2+m^2)u = 0 \quad \text{pokud} \quad \sigma = \pm(|y|^2+m^2)^{1/2}$$

Nyní však
$$\frac{\sigma}{|y|} = \pm\frac{(|y|^2+m^2)^{1/2}}{|y|}$$
závisí nelineárně na frekvenci počáteční hodnoty $\underset{\cos(y\cdot x)+i\sin(y\cdot x)}{e^{iy\cdot x}}$: pomaleji oscilující řešení cestují rychleji.

Vlny odlišných frekvencí, které se šíří, odlišnou rychlostí vytváří <u>disperzi</u>

④ $\boxed{\text{SCHRÖDINGEROVA RCE}}$ Vložíme-li ansatz $(\ast)$ do Schrödingerovy rovnice, pak

$$i\partial_t u + \Delta u = (\sigma - |y|^2)u$$

a tedy u tvaru $(\ast)$ řeší (SE) pokud $\sigma = |y|^2$. Tedy $u(t,x) = e^{i(y\cdot x - |y|^2 t)}$ řeší (SE) a zobrazuje <u>disperzi</u>.