Wiskunde

Fourier Transforms

Van Fourier transformaties tot stochastische differentiaalvergelijkingen

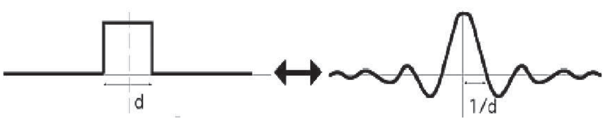
Prof.dr. J. van Neerven[1]

Wie de colleges Fourieranalyse (3e jaars B.Sc.) en Stochastische Differentiaalvergelijkingen (keuzevak M.Sc.) volgt zal niet snel op het idee komen dat deze vakken iets met elkaar te maken hebben, maar niets is minder waar. Een duidelijke hint dat er verbanden zijn is het feit dat de standaard normale verdeling een dekpunt is voor de Fourier transformatie. Zodra men dieper in de materie duikt blijkt dit slechts het topje van een ijsberg te zijn.

Uitgaande van een eenvoudige identiteit voor de Fourier getransformeerde van de afgeleide van een functie, die aan de orde komt in het college Fourieranalyse, zal ik proberen uit te leggen waarom quantumfluctuaties normaal verdeeld zijn. In de analyse van dit probleem komen we uiteindelijk terecht bij een klasse van stochastische differentiaalvergelijkingen, die bestudeerd wordt bij het college Stochastische Differentiaalvergelijkingen en waaraan in Delft veel onderzoek wordt verricht. Uiteraard kunnen we in het bestek van dit korte artikel niet alles in detail uitleggen, maar om toch een stukje echte wiskunde te laten zien is het onvermijdelijk enkele formules te gebruiken. Voor de grote lijn van het betoog is het niet nodig die allemaal precies te begrijpen; de bedoeling is ook om de nieuwsgierigheid op te wekken!

Fourier transformaties Laten we beginnen met de definitie van de *Fourier getransformeerde* van een functie $f : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$. Dit is de functie $\mathscr{F} f : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ met als voorschrift

$$\mathscr{F} f(x) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ixy} f(y)\, dy.$$



Figuur 1: Voorbeeld van een Fouriertransformatie

Hier moeten we ons natuurlijk druk maken over de vraag of - en in welke zin - de integraal goed gedefinieerd is. Om te vermijden dat we hier, en bij de andere functies die we verderop tegenkomen, problemen krijgen beperken we tot functies uit de zogenaamde *Schwartz klasse* $\mathscr{S}$. Dit zijn functies $f : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ die oneindig vaak differentieerbaar zijn en de eigenschap hebben dat er voor alle $i, j = 0, 1, 2, \ldots$ een constante M_{ij} bestaat zodanig dat

$$|x^i f^{(j)}(x)| \leqslant M_{ij} \text{ voor alle } x \in \mathbb{R}.$$

[1] Jan van Neerven doceert het B.Sc. vak Fourieranalyse en het M.Sc. keuzevak Stochastische Differentiaalvergelijkingen

Figuur 2: Joseph Fourier (1768-1830)

Alles wat we zeggen kan worden uitgebreid naar kwadratisch integreerbare functies, maar dit vergt enige kennis van de maattheorie en die zullen we hier niet veronderstellen.

Een voorbeeld van een functie in $\mathscr{S}$ is de standaard normale verdeling

$$\gamma(x) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}x^2}.$$

Zoals reeds vermeld is γ een dekpunt onder de Fourier transformatie:

$$\mathscr{F}\gamma = \gamma.$$

Als f een functie in $\mathscr{S}$ is, dan behoren $\mathscr{F} f$ alsmede de functies Pf en Qf, gedefinieerd door

$$(Pf)(x) = -if'(x), \qquad (Qf)(x) = xf(x),$$

eveneens tot $\mathscr{S}$, en een partiële integratie laat zien dat

$$\mathscr{F}(Pf) = Q(\mathscr{F} f).$$

Als we $\mathscr{F}$, P en Q opvatten als lineaire afbeeldingen op $\mathscr{S}$ naar zichzelf, dan kunnen we de bovenstaande identiteit inkorten tot $\mathscr{F}P = Q\mathscr{F}$.

Observabelen De operatoren P en Q spelen een belangrijke rol in de quantummechanica als de observabelen voor impuls en positie. Hier is het van belang te weten dat in de quantummechanica de rollen van klassieke observabelen, zoals plaats, impuls en energie, en hun mogelijke waarden worden overgenomen door *zelfgeadjungeerde operatoren* en hun *spectrum*. Een lineaire operator A, gedefinieerd op een vectorruimte V voorzien van een inwendig product $\langle \cdot, \cdot \rangle$, heet *zelfgeadjungeerd* als geldt

$$\langle Af, g \rangle = \langle f, Ag \rangle$$

voor alle $f, g \in V$. Het *spectrum* van een lineaire operator A is de verzameling van alle $\lambda \in \mathbb{C}$ waarvoor $\lambda - A$ niet inverteerbaar is. Het spectrum van een zelfgeadjungeerde operator bevat enkel reële waarden; in de fysica correspondeert dit met het gegeven dat metingen altijd reële uitkomsten opleveren. De *toestand* van een quantummmechanisch systeem wordt beschreven door een element van $f \in V$ dat genormaliseerd is als $\langle f, f \rangle = 1$. In deze situatie geeft het inwendig product

$$\langle Af, f \rangle$$

de verwachte waarde van de observabele A als het systeem in de toestand ψ verkeert.
Op onze vectorruimte $\mathscr{S}$ definiëren we het inwendig product van twee functies f en g als

$$\langle f, g \rangle := \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\overline{g(x)}\, dx.$$

Ten aanzien van dit inproduct zijn de operatoren P en Q inderdaad zelfgeadjungeerd: voor P volgt dit uit een partiële integratie en voor Q is dit triviaal.
Dat P de observabele voor positie is, is niet moeilijk te begrijpen: de 'positie x' vervangen we door de operator 'vermenigvuldigen met x'. De keuze van Q is minder voor de hand liggend. Het idee hierachter is dat positie en frequentie van een golf gerelateerd zijn via de Fourier transformatie. Nu postuleert de quantummechanica dat de impuls p van een golf proportioneel is aan de frequentie. Dit laat in feite zien dat ook p en x gerelateerd zijn via de Fourier transformatie! De formule $\mathscr{F}(Pf) = Q(\mathscr{F}f)$ relateert de operatoren P en Q via de Fourier transformatie, hetgeen suggereert dat Q de operator voor impuls moet zijn.
Met behulp van de productregel voor differentiëren zien we dat P en Q aan de *Heisenberg commutatierelatie*

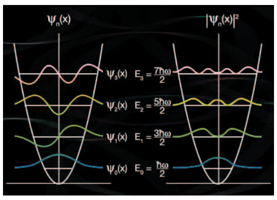
$$QP - PQ = iI$$

voldoen, waarbij I de identiteitsoperator op $\mathscr{S}$ voorstelt.

Quantumfluctuaties Laten we nu eens kijken naar de quantum harmonische oscillator met Hamiltoniaan $H = \frac{1}{2}P^2 + \frac{1}{2}Q^2$. In deze uitdrukking kunnen we $\frac{1}{2}P^2$ en $\frac{1}{2}Q^2$ interpreteren als de observabelen voor de kinetische- en potentiële energie; vergelijk deze formule met de Hamiltoniaan van de klassieke harmonische oscillator. Hieronder zullen we zien dat het spectrum van H gelijk is aan $\{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots\}$ en geheel uit eigenwaarden bestaat. Preciezer gezegd, er is een orthonormale basis $(\psi_n)_{n=0}^{\infty}$ in $\mathscr{S}$ (d.w.z. $\langle \psi_m, \psi_n \rangle = \delta_{mn}$) met de eigenschap dat

$$H\psi_n = (n + \tfrac{1}{2})\psi_n, \qquad n = 0, 1, 2, \dots.$$

De functie ψ_n beschrijft de toestanden met energie $n + \frac{1}{2}$.



Figuur 3: De energietoestanden van de quantum harmonische oscillator

De volgende verrassende stelling zegt dat de observabelen P en Q in de *grondtoestand* ψ_0 'normaal verdeeld' zijn.

Stelling. *Zij X een $N(0, \frac{1}{2})$-normaal verdeelde toevalsvariabele. Dan geldt*

$$\langle P^k\psi_0, \psi_0 \rangle = \langle Q^k\psi_0, \psi_0 \rangle = \mathbb{E}(X^k), \qquad k = 0, 1, 2, \dots$$

De fysische interpretatie van het feit dat de hogere even momenten ongelijk nul zijn is dat er 'quantumfluctuaties' optreden. De momenten $M_k := \mathbb{E}(X^k)$ kunnen expliciet berekenend worden met behulp van de genererende functie

$$M(z) := \sum_{k=0}^{\infty} \frac{M_k}{k!} z^k = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{zx - x^2}\, dx = e^{-\frac{1}{4}z^2}$$

via de observatie dat $M_k = M^{(k)}(0)$, de k-de afgeleide van M in het punt 0.
Het bewijs van de stelling is bijzonder elegant en daarom geven we er een schets van. Zij $\widetilde{\gamma}(x) := e^{-x^2}/\sqrt{\pi}$ de kansdichtheid van X. We beschouwen de 'gewogen' Schwartz klasse $\widetilde{\mathscr{S}}$ bestaande uit alle functies $f : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ met de eigenschap dat $\sqrt{\widetilde{\gamma}} f$ een functie in $\mathscr{S}$ is. Het is duidelijk dat de lineaire afbeelding

$$Jf := \sqrt{\widetilde{\gamma}} f$$

een bijectie $J : \widetilde{\mathscr{S}} \to \mathscr{S}$ geeft. Ten aanzien van het 'gewogen' inwendige product op $\widetilde{\mathscr{S}}$,

$$\langle f, g \rangle_{\widetilde{\mathscr{S}}} := \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\overline{g(x)}\,\widetilde{\gamma}(x)\, dx,$$

geldt bovendien $\langle f, g \rangle_{\widetilde{\mathscr{S}}} = \langle Jf, Jg \rangle$. We kunnen de operator J gebruiken om de operatoren P en Q die we eerder op $\mathscr{S}$ hebben beschouwd over te zetten naar $\widetilde{\mathscr{S}}$. Preciezer gezegd, op $\widetilde{\mathscr{S}}$ beschouwen we de operatoren $\widetilde{P}$ en $\widetilde{Q}$ die gedefinieerd worden door de relaties

$$J\widetilde{P} = PJ, \quad J\widetilde{Q} = QJ.$$

Het is gemakkelijk na te rekenen dat $\widetilde{P}$ en $\widetilde{Q}$ expliciet gegeven worden door

$$(\widetilde{P}f)(x) := ixf(x) - if'(x) \quad \text{en} \quad (\widetilde{Q}f)(x) := xf(x)$$

te nemen. Als we $\widetilde{H}$ definiëren door in het bovenstaande overal de rollen van P en Q te vervangen door $\widetilde{P}$ en $\widetilde{Q}$, krijgen we na enig rekenwerk

$$\widetilde{N}f = -\tfrac{1}{2}f''(x) + xf'(x) + \tfrac{1}{2}f(x).$$

Het elementair om na te gaan dat de rij Hermite polynomen $(h_n)_{n=0}^{\infty}$ voldoet aan

$$\widetilde{H}h_n = (n + \tfrac{1}{2})h_n, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Inderdaad, dit volgt uit de definiërende recurrente betrekking

$$h_0(x) = 1, \quad h_1(x) = 2x, \quad h_{n+1}(x) = 2xh_n(x) - 2nh_{n-1}(x),$$

die tevens laat zien dat de geschaalde polynomen $h_n/\sqrt{n!2^n}$ een orthonormale basis in $\widetilde{\mathscr{S}}$ vormen. Wegens $J\widetilde{H} = HJ$ hebben de functies $\psi_n := Jh_n\sqrt{n!2^n}$ alle gewenste eigenschappen.
Voor het bewijs van de stelling merken we op dat $(\widetilde{Q}^k h_0)(x) = x^k$, en dus

$$\langle Q^k\psi_0, \psi_0 \rangle = \langle \widetilde{Q}^k h_0, h_0 \rangle_{\widetilde{\mathscr{S}}} = \int_{-\infty}^{\infty} x^k \widetilde{\gamma}(x)\, dx = \mathbb{E}(X^k).$$

De identiteit $\langle P^k\psi_0, \psi_0\rangle = \mathbb{E}(X^k)$ is iets lastiger te bewijzen, maar voor kleine k is het niet moeilijk deze met de hand na te rekenen. Het algemene geval volgt uit de zogenaamde Campbell-Hausdorff formule

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}(AB-BA)}$$

toegepast op de operatoren A en B gegeven door $(Af)(x) = -zxf(x)$ en $(Bf)(x) = zf'(x)$; merk op dat $((A+B)f)(x) = iz(\widetilde{P}f)(x)$. Dit geeft na enig rekenen

$$\langle e^{iz\widetilde{P}}\psi_0, \psi_0\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} e^{izx}\widetilde{\gamma}(x)\,dx,$$

en de formule voor $\langle P^k\psi_0, \psi_0\rangle = \mathbb{E}(X^k)$ door k maal te differentiëren naar z en het resultaat te evaluren in $z = 0$.

Stochastische differentiaalvergelijkingen De operator

$$\widetilde{N} := \widetilde{H} - \tfrac{1}{2}I$$

heeft spectrum $\{0, 1, 2, \dots\}$ en staat bekend als de *Ornstein-Uhlenbeck operator*. Deze operator heeft tal van fraaie eigenschappen en is het onderwerp van veel onderzoek. In zekere zin is $\widetilde{N}$ het analogon op $\widetilde{\mathscr{S}}$ van de Laplace operator $-\frac{1}{2}\Delta$ op $\mathscr{S}$. Om dit te zien schrijven we $Df = f'$ voor de afgeleide van functies in $\mathscr{S}$ en krijgen via partiële integratie $\langle Df, g\rangle = \langle f, D^*g\rangle$, waar $(D^*g)(x) := -g'(x)$. Dit geeft de formule

$$-\tfrac{1}{2}\Delta = \tfrac{1}{2}D^*D.$$

Met de notatie $\widetilde{D}f = f'$ voor de afgeleide van functies f in $\widetilde{\mathscr{S}}$ vinden we op dezelfde manier de formule $\langle \widetilde{D}f, g\rangle_{\widetilde{\mathscr{S}}} = \langle f, \widetilde{D}^*g\rangle_{\widetilde{\mathscr{S}}}$, waar nu $(\widetilde{D}^*g)(x) = -g'(x) + 2xg(x)$. We krijgen een extra term omdat we bij de partiële integratie ook de term $\widetilde{\gamma}$ moeten differentiëren. Dit levert de analoge formule

$$\widetilde{N} = \tfrac{1}{2}\widetilde{D}^*\widetilde{D}.$$

Deze analogie kunnen we als volgt uitbuiten. Uit de stochastische analyse is bekend dat de operator $-\frac{1}{2}\Delta$ de standaard Brownse beweging genereert. Het voert iets te ver om precies uit te leggen wat daarmee bedoeld wordt; voor dit betoog volstaat het om te weten dat een standaard Brownse beweging een stochastisch proces is dat de diffusie van een deeltje beschrijft dat op tijdstip $t = 0$ losgelaten wordt in de oorsprong. We kunnen ons de vraag stellen of de Ornstein-Uhlenbeck operator $\widetilde{N}$ ook een interessant stochastisch proces genereert. Dit is inderdaad het geval en dit proces staat bekend als het *Ornstein-Uhlenbeck proces*. Zoals een standaard Brownse beweging $(B_t)_{t\geqslant 0}$ de oplossing is van de stochastische differentiaalvergelijking

$$dU_t = dB_t, \quad U_0 = 0,$$

zo blijkt het Ornstein-Uhlenbeck proces de oplossing te zijn van de vergelijking

$$dU_t = -U_t\,dt + dB_t, \quad U_0 = 0.$$

We zullen geen poging doen om uit te leggen wat deze vergelijkingen betekenen (zie daarvoor het M.Sc. keuzevak Stochastic Differential Equations), maar we kunnen de volgende observatie maken. Als we de 'drift term' $-U(t)\,dt$ weglaten reduceert de vergelijking tot de vorige en wordt de oplossing gegeven door een standaard Brownse beweging. Laten we daarentegen de 'diffusie term' dB_t weg, dan resteert de deterministische vergelijking $dU_t = -U_t\,dt$ die wordt opgelost door $U_t = e^{-t}U_0$. Het Ornstein-Uhlenbeck process kan nu beschreven worden als een 'superpositie' van een Brownse beweging en exponentieel verval. Enerzijds wil het deeltje van de oorsprong wegdiffunderen als een Brownse beweging, maar tegelijk wordt het via exponentieel verval naar de oorsprong teruggetrokken. In de limiet $t \to \infty$ ontstaat er een limietverdeling, en men kan aantonen dat die $N(0, \frac{1}{2})$-verdeeld is! Dit is precies de verdeling die we zijn tegengekomen bij de quantum harmonische oscillator.

Het bovenstaande kan worden gegeneraliseerd naar stochastische *partiële* differentiaalvergelijkingen. Dit levert Ornstein-Uhlenbeck operatoren op in oneindig veel variabelen op. Om deze operatoren te bestuderen is een gedegen kennis van de functionaalanalyse nodig. Dit brengt ons tenslotte bij het lopende onderzoek in onze vakgroep!