1 Yhden satulapisteen reaalinen tapaus

Oletetaan, että

- polku γ kulkee reaaliakselia pitkin pisteestä a pisteeseen $b > a$
- g on kahdesti jatkuvasti derivoituva funktio
- $g''(x) < 0$ kaikilla $x \in (a, b)$
- löytyy *kriittinen piste* $x_0 \in (a, b)$, jossa $g'(x_0) = 0$

Satulapisteapproksimaatio, yksi reaalinen satulapiste

$$F(T) \approx f(x_0)\mathrm{e}^{g(x_0)T}\sqrt{\frac{2\pi}{-g''(x_0)T}} \qquad (T \to \infty)$$

$$F(T) \sim \sum_{n=0}^{\infty} \frac{G^{(2n)}(0)}{(2n)!!}(-g''(x_0)T)^{-n}\mathrm{e}^{g(x_0)T}\sqrt{\frac{2\pi}{-g''(x_0)T}}$$

2 Useamman satulapisteen reaalinen tapaus

Oletetaan, että

- polku γ kulkee reaaliakselia pitkin pisteestä a pisteeseen $b > a$
- g on kahdesti jatkuvasti derivoituva funktio

1. Etsitään funktion g *aidot lokaalit maksimit* eli pisteet x_i, joissa $g'(x_i) = 0$ ja $g''(x_i) < 0$
2. Koska g'' on jatkuva, löytyy jokaista pistettä x_i kohti jokin *väli* (a_i, b_i), *jossa* $g'' < 0$
3. Sovelletaan satulapisteapproksimaatiota jokaiselle välille,

$$F(T) \approx \sum_i f(x_i) \mathrm{e}^{g(x_i)T} \sqrt{\frac{2\pi}{-g''(x_i)T}} \qquad (T \to \infty)$$

Virhettä varten täytyy etsiä jokin estimaatti myös välien (a_i, b_i) ulkopuolelle jäävälle integraalin osalle

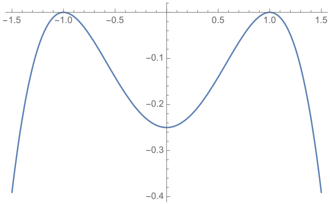
Satulapisteapproksimaatio ”kaksoishuippupotentiaalille”:

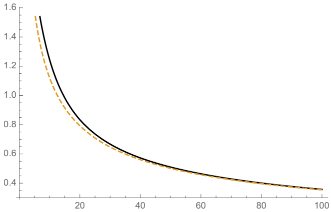
$$F(T) := \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{Tg(x)} \mathrm{d}x\,, \quad T > 0$$

$$g(x) := -\frac{1}{4}x^4 + \frac{1}{2}x^2 - \frac{1}{4}$$

(*Vasen kuva*) Eksponentin funktio $g(x)$

(*Oikea kuva*) $F(T)$ ja sen sp-approksimaatio $\sqrt{\frac{4\pi}{T}}$ (katkoviiva)





4 Satulapisteapproksimaatio kompleksitasossa

$$F(T) := \int_\gamma f(z) \mathrm{e}^{Tg(z)} \mathrm{d}z \,, \qquad T \in \mathbb{R}$$

- f, g analyyttisiä alueessa Ω
- polku γ kulkee alueen Ω sisällä
- Tunnetaan g:n *ei-degeroituneet kriittiset pisteet* $z_0 \in \Omega$,

$$g'(z_0) = 0 \,, \qquad g''(z_0) \neq 0$$

Esimerkki: $$\psi_t(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}p}{2\pi} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(px - t\frac{1}{2m}p^2\right)} \widehat{\psi}_0(p)$$

- x on *paikkamuuttuja* ja t *aikamuuttuja*
- $m > 0$ on hiukkasen *massa*
- $\widehat{\psi}_0(p)$ riippuu vain annetusta *alkutilasta* $\psi_0(x)$, kun $t = 0$

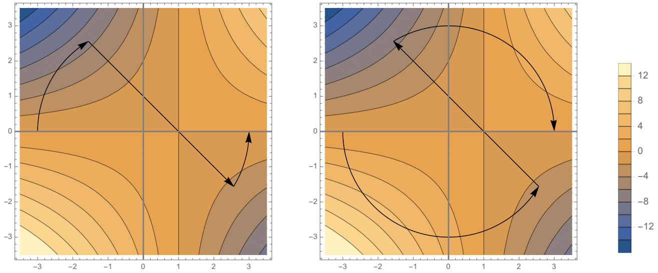
5 Vapaan Schrödingerin yhtälön asymptotiikka

$$\psi_t(x) = F(T) := \lim_{R\to\infty} \int_{\gamma_{-R\to R}} f(z)\mathrm{e}^{Tg(z)}\mathrm{d}z\,,$$

- $T := t/m > 0, \quad \alpha := \left|\frac{mx}{t}\right| \geq 0$
- $g(z) := \mathrm{i}\left(\alpha z - \frac{1}{2}z^2\right)$

$$\Rightarrow \quad g'(z) = \mathrm{i}(\alpha - z) \quad \text{ja} \quad g''(z) = -\mathrm{i}$$

Satulapisteapproksimaatiopolkuja ($\alpha = 1$, $R = 3$), taustalla $\mathrm{Re}\, g(x + \mathrm{i}y)$:

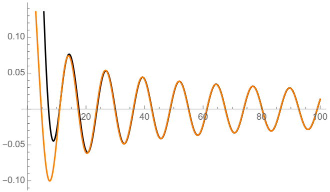


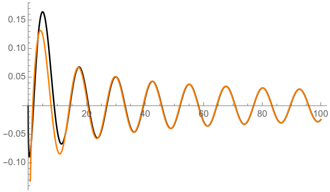
$$F(T) \approx f(z_0)\mathrm{e}^{Tg(z_0)}\sqrt{\frac{2\pi}{-g''(z_0)T}}, \quad z_0 = \alpha$$

$$\Rightarrow \quad \psi_t(x)|_{x=v_0 t} \approx \widehat{\psi}_0(mv_0)\mathrm{e}^{\mathrm{i}t\frac{1}{2}mv_0^2}\frac{1}{\sqrt{\mathrm{i}2\pi t/m}} \qquad (t \to \infty)$$

- Vapaan klassisen hidun rata olisi $x(t) = p_0 t/m \quad \Rightarrow \quad \frac{x(t)}{t} = \frac{p_0}{m}$
- Alkutilan funktio $\widehat{\psi}_0(p)$ kuvaa siis hiukkasen alkutilan *liikemäärän* $p_0 \approx mv_0$ jakauma
- Vaihetermi liittyy hiukkasen energiaan $E_0 := \frac{1}{2m}p_0^2 \approx \frac{1}{2}mv_0^2$

Kun $f(z) = (1 + 8(z-2)^2)^{-1}$ ja $\alpha = 1$ (*vasen kuva*) sp-approksimaation (oranssi) ja $F(T)$:n (musta) reaaliosa, ja (*oikea kuva*) imaginääriosa





7 Kompleksi satulapisteapproksimaatio, algoritmina

1. Etsitään kaikki funktion g *kriittiset pisteet* eli z_0, joilla $g'(z_0) = 0$
2. Valitaan näistä vain ne, jotka ovat *ei-degeneroituneita* eli *poistetaan* joukosta kaikki ne pisteet, joissa $g''(z_0) = 0$
3. Muokataan Cauchyn lauseen avulla integrointipolku γ poluksi $\tilde{\gamma}$ tavoitteena, että
   - polkua $\tilde{\gamma}$ pitkin $\mathrm{Re}\, g(z)$ on mahdollisimman pieni
   - polku $\tilde{\gamma}$ kulkee vähintään yhden ei-degeneroituneen kriittisen pisteen läpi

Tämän jälkeen voidaan polkua $\tilde{\gamma}$ edelleen muokata siten, että se kulkee jokaisen satulapisteen z_0 läpi "satulapistereittiä pitkin": Tavoitteena, että pisteen z_0 ympäristössä polulla $\tilde{\gamma}$ pätee

$$\mathrm{e}^{Tg(z)} = \mathrm{e}^{Tg(z_0)}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}T|g''(z_0)|y^2}$$

Tällöin saadaan suurilla $T \gg 1$

$$F(T) = \int_\gamma f(z)\mathrm{e}^{Tg(z)}\mathrm{d}z \approx \sum_{z_0 \in \mathrm{Ran}\,\tilde{\gamma}} (\pm 1) f(z_0)\mathrm{e}^{g(z_0)T}\sqrt{\frac{2\pi}{-g''(z_0)T}}$$

- Yllä merkki on *"$+$"*, jos satulapiste z_0 ylitetään "normaalisuuntaan" (*vasemmalta oikealle tai pystysuoraan ylhäältä alas*), muuten se on *"$-$"*
- Tässä olevassa *neliöjuuressa valitaan aina päähaaran arvo*

9 Optimaalisen satulapistereitin löytäminen

Kuinka löydetään $\tilde{\gamma}(t_0) = z_0$:n ympäristössä polku, jolle

$$g(\tilde{\gamma}(t_0 + y)) = g(z_0) - \frac{1}{2}|g''(z_0)|y^2 \text{ ?}$$

Morsen lemma

Olkoon $g \in H(\Omega)$ ja $z_0 \in \Omega$ on sen ei-degeneroitunut kriittinen piste: $g'(z_0) = 0$ ja $g''(z_0) \neq 0$. Löytyy ympäristö $z_0 \in U \subset \Omega$, ja kääntyvä analyyttinen kuvaus $h : U \to B_\varepsilon(0)$, jolle $h(z_0) = 0$, $h'(z_0) = 1$ ja

$$g(z) = g(z_0) + \frac{1}{2}g''(z_0)h(z)^2\,, \quad z \in U$$

$$\tilde{\gamma}(t_0 + y) := h^{-1}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}y)$$

$=$ toinen käyristä, jotka toteuttavat

$$\operatorname{Im} g(\tilde{\gamma}(t_0 + y)) = \operatorname{Im} g(z_0) = \text{vakio}$$

10 Eulerin–Maclaurinin summakaava

- Integraaleja voidaan aina approksimoida summilla käyttäen Riemannin summia:

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx h \sum_{j=1}^{n} f(a + (j-1)h)\,, \qquad h := \frac{b-a}{n} > 0$$

- Kaavalla voi myös approksimoida suuria summia integraaleilla (vrt. Cauchyn integraalitesti)
- Jos f on useita kertoja jatkuvasti derivoituva, tarkkuutta voi usein parantaa merkittävästi *Eulerin–Maclaurinin summakaavan* avulla (asymptoottinen sarjakehitelmä, kun $h \to 0^+$)

Eulerin–Maclaurinin summakaava

$$\sum_{j=1}^{n} f(a+(j-1)h) = \frac{1}{h}\int_a^b f(x)\mathrm{d}x - \frac{1}{2}[f(b)-f(a)]$$
$$+\frac{1}{12}h[f'(b)-f'(a)] + A_4 h^3\left[f^{(3)}(b)-f^{(3)}(a)\right]$$
$$+\cdots + A_{2m}h^{2m-1}\left[f^{(2m-1)}(b)-f^{(2m-1)}(a)\right] + R_{2m+1}\,,$$

jossa $m \in \mathbb{N}$ ja vastaava **jäännöstermi** toteuttaa arvion

$$|R_{2m+1}| \le \frac{2h^{2m}}{(2\pi)^{2m+1}}\int_a^b |f^{(2m+1)}(x)|\mathrm{d}x$$

Vakiot liittyvät *Bernoullin lukuihin* B_n: $A_{2k} := \dfrac{B_{2k}}{(2k)!}$,

$$B_2 = \frac{1}{6}\,,\quad B_4 = -\frac{1}{30}\,,\quad B_6 = \frac{1}{42}\,,\quad B_8 = -\frac{1}{30}\,,\quad B_{10} = \frac{5}{66}\,,\quad \ldots$$

12 Johdantoa: Diskreetti Fourier'n muunnos

Diskreetti Fourier'n muunnos, $\mathbb{C}^N \to \mathbb{C}^N$

$$\widehat{\psi}_n := \sum_{k=0}^{N-1} \mathrm{e}^{\mathrm{i}k2\pi\frac{n}{N}} \psi_k\,, \quad n = 0, 1, \ldots, N-1$$

Diskreetin Fourier'n muunnoksen käänteismuunnos

$$A[\,\Psi\,]_k := \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k2\pi\frac{n}{N}} \Psi_n\,, \qquad k = 0, 1, \ldots, N-1$$

- Tällöin $A[\,\widehat{\psi}\,]_k = \psi_k$ kaikilla vektoreilla ψ ja pisteissä k
- Molemmat kuvaukset voidaan esittään myös matriisien avulla
- Mitä tapahtuu, kun $N \to \infty$?

13 Fourier'n sarja

Annetuista kertoimista c_k, $k \in \mathbb{Z}$, tehty Fourier'n sarja

$$S(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} c_k \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} := \lim_{N\to\infty} \sum_{k=-N}^{N} c_k \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\,, \qquad x \in \mathbb{R}$$

- Funktio S on selvästi 2π-periodinen, eli $S(x+2\pi) = S(x)$
- Jos $\sum_k |c_k| < \infty$, suppenee sarja kaikkialla ja määrittelee *jatkuvan* funktion $S(x)$
- Jatkuvat periodiset funktiot ovat aina *rajoitettuja* ja niille löytyy pisteet, joissa ne saavat maksimi- ja minimiarvonsa

14 Fourier'n kertoimet

Olkoon f 2π-periodinen funktio, jolle

$$\int_0^{2\pi} |f(x)| \mathrm{d}x < \infty$$

Sen **Fourier'n kertoimet** määritellään itseisesti suppenevina integraaleina

$$\widehat{f}_k := \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(x) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \mathrm{d}x \,, \qquad k \in \mathbb{Z}$$

- Jonon $(\widehat{f}_k)$ Fourier'n sarjaa $S(x)$ kutsutaan funktion $f(x)$ *Fourier'n sarjaesitykseksi*
- Koska f on 2π-periodinen, voi *määritelmän integraalin aloitusarvoa siirtää mielivaltaisesti* (HT 3.3.a), esim.

$$\int_{-\pi}^{\pi} f(x) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \mathrm{d}x = \int_0^{2\pi} f(x) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \mathrm{d}x$$

Oletetaan, että $f : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ on **jatkuva** 2π-periodinen funktio, ja

$$\sum_{k=-\infty}^{\infty} \left|\widehat{f}_k\right| < \infty \,.$$

Tällöin funktion f Fourier'n sarjaesitys suppenee **jokaisessa pisteessä** kohti funktiota f:

$$f(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \widehat{f}_k \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} \,, \qquad x \in \mathbb{R}$$

- Tyypillisesti *epäjatkuvien* funktioiden Fourier'n sarjat suppevatkin vain määritelmän pääarvomielessä
- On tärkeää, että *periodinen funktio f on jatkuva myös päätepisteissä* 0 *ja* 2π

16 Funktion esittäminen Fourier'n sarjan avulla

Mitä tehdä, kun pyydetään laskemaan reaaliakselilla määritellyn funktion f Fourier'n sarja jollain välillä $[a, b]$, $a < b$?

1. Poistetaan toinen välin päätepisteistä, esim. $I :=]a, b]$
2. Määritellään funktio g välillä I funktion f rajoittumana tälle välille, eli asetetaan $g(x) = f(x)$, kun $x \in I$
3. *Jatketaan funktio g periodisesti koko reaaliakselille*, eli $g(x + mL) := g(x) = f(x)$, $x \in I$, $m \in \mathbb{Z}$, jossa $L = b - a > 0$
4. Käytetään L-periodisen funktion g Fourier'n sarjaa $S(x)$

Tällöin kaikilla $x \in I$, joilla $S(x) = g(x)$, on myös $S(x) = f(x)$, eli

Saatu sarja esittää funktiota f välin $[a, b]$ pisteissä

17 Dirichlet'n ehto

1. Funktiolla f on vain äärellisen monta *epäjatkuvuuspistettä* x_0 välillä $[0, 2\pi]$, joissa kaikissa löytyy funktiolle sekä vasemmalta ja oikealta otettu raja-arvo, eli luvut

$$f(x_0^-) := \lim_{x \to x_0^-} f(x) := \lim_{\substack{x \to x_0 \\ x < x_0}} f(x)$$

$$f(x_0^+) := \lim_{x \to x_0^+} f(x) := \lim_{\substack{x \to x_0 \\ x > x_0}} f(x)$$

2. Funktiolla f on vain äärellinen määrä *paikallisia ääriarvopisteitä* (maksimeja ja minimejä) välillä $[0, 2\pi]$

   (Tämä tarkoittaa sitä, että f ei saa oskilloida liian paljon.)

18 Dirichlet'n lause

Jos f on 2π-periodinen reaalifunktio, joka toteuttaa Dirichlet'n ehdon, sen Fourier'n sarja

$$S(x) := \sum_{k=-\infty}^{\infty} \widehat{f}_k \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx},$$

suppenee kaikilla $x \in \mathbb{R}$.

1. S **esittää funktiota** f **kaikissa sen jatkuvuuspisteissä**, eli $S(x) = f(x)$, jos x on piste, jossa f on jatkuva
2. Funktion f **epäjatkuvuuspisteissä**, saa S arvon epäjatkuvuuden muodostaman *hypyn puolivälistä*,

$$S(x) = \frac{1}{2}\left(f(x_0^-) + f(x_0^+)\right)$$

- Jos funktion f on *kompleksiarvoinen*, mutta sekä $\mathrm{Re}\, f$ että $\mathrm{Im}\, f$ toteuttavat erikseen Dirichlet'n ehdon, lause pätee

19 Trigonometriset sarjat

$$\sum_{k=-\infty}^{\infty} \widehat{f}_k \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} \left(a_k \cos(kx) + b_k \sin(kx)\right)$$

$$a_k = \widehat{f}_k + \widehat{f}_{-k} = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \cos(kx) \mathrm{d}x$$

$$b_k = \mathrm{i} \left(\widehat{f}_k - \widehat{f}_{-k}\right) = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \sin(kx) \mathrm{d}x$$

- Jos f on *reaaliarvoinen*, on myös $a_k, b_k \in \mathbb{R}$
- Jos f on *parillinen*, on $f(x) \sin(kx)$ pariton, joten $b_k = 0$
- Jos f on *pariton*, on $f(x) \cos(kx)$ pariton, joten $a_k = 0$