Πανεπιστήμιο Πελοποννήσου

Σχολή Οικονομίας και Τεχνολογίας

Τμήμα Πληροφορικής και Τηλεπικοινωνιών

Π.Μ.Σ. στην Επιστήμη Υπολογιστών

Μεταπτυχιακή Διπλωματική Εργασία

Κβαντική Ανάλυση Σήματος

Δημοσθένης Κων. Μιχόπουλος

ΑΜ: 2022202102014

Επιβλέπων Καθηγητής: Κωνσταντίνος Πέππας

Κυπαρισσία 2022

Κβαντική Ανάλυση Σήματος

Πανεπιστήμιο Πελοποννήσου

Σχολή Οικονομίας και Τεχνολογίας

Τμήμα Πληροφορικής και Τηλεπικοινωνιών

Π.Μ.Σ. στην Επιστήμη Υπολογιστών

Μεταπτυχιακή Διπλωματική Εργασία

Κβαντική Ανάλυση Σήματος

Δημοσθένης Κων. Μιχόπουλος

ΑΜ: 2022202102014

Επιβλέπων Καθηγητής: Κωνσταντίνος Πέππας

Κυπαρισσία 2022

Ἀφιερώνεται στοὺς γνήσιους

ἐρευνητὲς τῆς ἐπιστήμης

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

Ακρωνύμια 7

Πρόλογος 8

Εισαγωγή 12

Κεφάλαιο 1ο

Στοιχεία Κβαντικής Μηχανικής

1.1 Σωμάτια και κύματα 20

1.2.1 Η Εξίσωση Schrödinger 22

1.3 Η Ερμηνεία της σχολής της Κοπεγχάγης 24

1.4 Το σωματίδιο εντός πηγαδιού απειρόβαθου δυναμικού μιας διάστασης 26

1.5 Γραμμικοί διανυσματικοί χώροι – Τα μαθηματικά της κβαντομηχανικής 29

1.5.1 Γραμμικοί τελεστές 30

1.5.2 Ιδιοδιανύσματα και Ιδιοτιμές 32

1.5.3 Γεωμετρική Ερμηνεία 34

1.5.3.1 Ευκλείδειος διανυσματικός χώρος 34

1.5.3.2 Διανυσματικός χώρος συναρτήσεων 35

1.5.3.3 Διανυσματικός χώρος Hilbert 36

1.6 Συνεχές φάσμα ιδιοτιμών 38

1.7 Μέση τιμή και αβεβαιότητα 38

1.8 Ο αρμονικός ταλαντωτής 39
1.8.1 Γραμμικές διαφορικές εξισώσεις με σταθερούς συντελεστές 40
1.8.2 Κβαντικός αρμονικός ταλαντωτής 46
1.8.3 Λύση διαφορικών εξισώσεων με τη χρήση σειρών 48
1.8.4 Κβαντικός αρμονικός ταλαντωτής II 50
1.9 Τα αξιώματα της Κβαντικής Μηχανικής 59

Κεφάλαιο 2ο

Κβαντική επεξεργασία σήματος

2.1 Συναρτήσεις αυτοσυσχέτισης 62
2.2 Διαμόρφωση συχνότητας (Dimensionality reduction in the frequency domain) 73
2.3 Διαμόρφωση χρόνου (Dimensionality reduction in the time domain) 73
2.4 Προσέγγιση Padè (Padè approximant - PA) 75
2.5 Φασματική ανάλυση και συστήματα ανομοιογενών γραμμικών εξισώσεων 78
2.6 Εξαγωγή του ακριβούς αριθμού των αρμονικών από σήματα χρόνου 79
2.6.1 Φιλτράρισμα μιας αρμονικής 83
2.6.2 Φιλτράρισμα περισσότερων αρμονικών 84
2.7 Αλγόριθμος του Lanczos 85
2.6.1 Ο αναδρομικός αλγόριθμος Lanczos για τα διανύσματα βάσης |ψn> 86

Συμπεράσματα 95
Βιβλιογραφία 97

Ακρωνύμια

ABC: Absorbing Boundary Conditions

ARMA: Auto-Regressive Moving Average

CSI: Chemical Shift Imaging

DFT: Discrete Fourier Transform

DLP: Decimated Linear Predictor

DPA: Decimated Padè Approximant

DSD: Decimated Signal Diagonalization

ESPRIT: Estimation of Signal Parameters via Rotation Invariance

FD: Filter Diagonalization

FFT: Fast Fourier Transform

FPT: Fast Padè Transform

GSO: Gram–Schmidt Orthogonalization

HLSVD: Hankel–Lanczos Singular Value Decomposition

ICR: Ion Cyclotron Resonance

LCModel: Linear Combination of Model *in vitro* Spectra

lhs: left-hand side

LP: Linear Predictor

MRI: Magnetic Resonance Imaging

MRS: Magnetic Resonance Spectroscopy

MRSI: Magnetic Resonance Spectroscopic Imaging

MUSIC: Multiple Signal Classification

NMR: Nuclear Magnetic Resonance

PA: Padè Approximant

SPECT: Single Photon Emission Computerized Tomography

ΠΡΟΛΟΓΟΣ

Η ανάλυση σήματος είναι ένας κλάδος της μηχανικής που εστιάζει στην ανάλυση, τροποποίηση και σύνθεση σημάτων όπως ο ήχος, οι εικόνες αλλά και οι επιστημονικές μετρήσεις. Οι τεχνικές επεξεργασίας σήματος χρησιμοποιούνται για τη βελτιστοποίηση των μεταδόσεων, την αποδοτικότητα της ψηφιακής αποθήκευσης, τη διόρθωση παραμορφωμένων σημάτων, την υποκειμενική ποιότητα βίντεο και επίσης για τον εντοπισμό στοιχείων ενδιαφέροντος σε ένα μετρούμενο σήμα. Οι αρχές της επεξεργασίας σήματος μπορούν να βρεθούν στις κλασικές τεχνικές αριθμητικής ανάλυσης του 17ου αιώνα. Η ψηφιακή βελτίωση αυτών των τεχνικών μπορεί να βρεθεί στα συστήματα ψηφιακού ελέγχου της δεκαετίας του 1940 και του 1950.

Η επεξεργασία σήματος ωρίμασε και άκμασε τις δεκαετίες του 1960 και του 1970, και η ψηφιακή επεξεργασία σήματος χρησιμοποιήθηκε ευρέως με εξειδικευμένα τσιπ επεξεργαστών ψηφιακού σήματος στη δεκαετία του 1980.

Η αναλογική επεξεργασία σήματος αφορά σήματα που δεν έχουν ψηφιοποιηθεί, όπως στα περισσότερα συστήματα ραδιοφώνου, τηλεφώνου και τηλεόρασης του 20ού αιώνα. Αυτό περιλαμβάνει γραμμικά ηλεκτρονικά κυκλώματα καθώς και μη γραμμικά. Τα πρώτα είναι, για παράδειγμα, τα παθητικά φίλτρα, τα ενεργά φίλτρα, οι ολοκληρωτές και οι γραμμές καθυστέρησης. Τα μη γραμμικά κυκλώματα περιλαμβάνουν συγκρίσεις, πολλαπλασιαστές (μίκτες συχνοτήτων, ενισχυτές ελεγχόμενης τάσης), φίλτρα ελεγχόμενης τάσης, ταλαντωτές ελεγχόμενης τάσης και βρόχους κλειδώματος φάσης.

Η επεξεργασία σήματος συνεχούς χρόνου αφορά σήματα που ποικίλλουν με την αλλαγή του συνεχούς τομέα (χωρίς να λαμβάνονται υπόψη ορισμένα μεμονωμένα σημεία διακοπής). Οι μέθοδοι επεξεργασίας σήματος περιλαμβάνουν τη διαμόρφωση χρόνου και τη διαμόρφωση συχνότητας. Αυτή η τεχνολογία ασχολείται κυρίως με τη μοντελοποίηση γραμμικού αμετάβλητου χρόνου συνεχούς συστήματος, αναπόσπαστο τμήμα της απόκρισης μηδενικής κατάστασης του συστήματος, τη ρύθμιση της λειτουργίας συστήματος και το συνεχές φιλτράρισμα του χρόνου των ντετερμινιστικών σημάτων.

Η επεξεργασία σήματος διακριτού χρόνου αφορά σήματα δειγματοληψίας, που ορίζονται μόνο σε διακριτά χρονικά σημεία και ως εκ τούτου κβαντίζονται χρονικά, αλλά όχι σε μέγεθος. Η αναλογική επεξεργασία σήματος διακριτού χρόνου είναι μια τεχνολογία που βασίζεται σε ηλεκτρονικές συσκευές όπως κυκλώματα δειγματοληψίας και διατήρησης, αναλογικής διαίρεσης χρόνου, αναλογικών γραμμών καθυστέρησης και καταχωρητών μετατόπισης αναλογικής ανάδρασης. Αυτή η τεχνολογία ήταν προπομπός της επεξεργασίας ψηφιακών σημάτων και εξακολουθεί να χρησιμοποιείται στην προηγμένη επεξεργασία σημάτων. Η έννοια της επεξεργασίας σήματος διακριτού χρόνου αναφέρεται επίσης σε μια θεωρητική βάση που εισάγει μια μαθηματική βάση για την επεξεργασία ψηφιακών σημάτων, χωρίς να λαμβάνει υπόψη το σφάλμα κβαντισμού.

Η ψηφιακή επεξεργασία σήματος είναι η επεξεργασία ψηφιοποιημένων σημάτων δειγματοληψίας διακριτού χρόνου. Η επεξεργασία γίνεται από υπολογιστές γενικής χρήσης ή από ψηφιακά κυκλώματα όπως ASIC, προγραμματιζόμενες στο πεδίο συστοιχίες πύλης ή εξειδικευμένους επεξεργαστές ψηφιακού σήματος (τσιπ DSP). Τυπικές λειτουργίες που υποστηρίζονται από το υλικό αυτό είναι τα κυκλικά buffer και οι πίνακες αναζήτησης. Παραδείγματα αλγορίθμων είναι ο γρήγορος μετασχηματισμός Fourier (FFT), το φίλτρο πεπερασμένης παλμικής απόκρισης (FIR), το φίλτρο Infinite Impulse Response (IIR) και τα προσαρμοστικά φίλτρα όπως τα φίλτρα Wiener και Kalman.

Η μη γραμμική επεξεργασία σήματος περιλαμβάνει την ανάλυση και την επεξεργασία σημάτων που παράγονται από μη γραμμικά συστήματα και μπορεί να είναι στο χρόνο, τη συχνότητα ή τους χωροχρονικούς τομείς. Τα μη γραμμικά συστήματα μπορούν να παράγουν πολύ σύνθετες συμπεριφορές, συμπεριλαμβανομένων των διακλαδώσεων, του χάους, των αρμονικών και των υποαρμονικών, οι οποίες δεν μπορούν να παραχθούν ή να αναλυθούν χρησιμοποιώντας γραμμικές μεθόδους.

Η πολυωνυμική επεξεργασία σήματος είναι ένας τύπος μη γραμμικής επεξεργασίας σήματος, όπου τα πολυωνυμικά συστήματα μπορούν να ερμηνευθούν ως εννοιολογικά ευθείες επεκτάσεις γραμμικών συστημάτων στη μη γραμμική περίπτωση.

Η στατιστική επεξεργασία σήματος είναι μια προσέγγιση που αντιμετωπίζει τα σήματα ως στοχαστικές διεργασίες, χρησιμοποιώντας τις στατιστικές τους ιδιότητες για την εκτέλεση εργασιών επεξεργασίας σήματος. Οι στατιστικές τεχνικές χρησιμοποιούνται ευρέως σε εφαρμογές επεξεργασίας σήματος. Για παράδειγμα, μπορεί κανείς να μοντελοποιήσει την κατανομή πιθανότητας του θορύβου που προκύπτει κατά τη φωτογράφηση μιας εικόνας και να κατασκευάσει τεχνικές που βασίζονται σε αυτό το μοντέλο για τη μείωση του θορύβου στην εικόνα που προκύπτει.

Η κβαντική επεξεργασία σήματος, ή οποία είναι και το αντικείμενο της ανά χείρας μελέτης και η οποία εδράζεται στα αξιώματα της κβαντικής, είναι ένας αλγόριθμος προσομοίωσης της Χαμιλτονιανής του υπό μελέτη συστήματος.

Πρόκειται για ένα πεδίο ιδιαιτέρως σύγχρονο, αν όχι ακόμα υπό διαμόρφωση, με περιορισμένη ξενόγλωσση βιβλιογραφία και σχεδόν ανύπαρκτη Ελληνική. Είναι μεγάλη η ευκαιρία που μου δόθηκε, και στο σημείο αυτό θα ήθελα να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα καθηγητή μου κ. Κωνσταντίνο Πέππα, για την επιλογή αυτού του θέματος, το οποίο, εκτός του ότι υπήρξε εξόχως ενδιαφέρον, μου δίνει και το έναυσμα για περεταίρω μελέτη, σε υψηλότερο ακαδημαϊκό επίπεδο, για εμβάθυνση και ανάλυση έως και των θεμελιωδών δομών της κβαντικής θεωρίας.

Κυπαρισσία, 26 Ὀκτωβρίου 2022
Μνήμη ἁγίου Δημητρίου τοῦ Μυροβλήτου

Δημοσθένης Κων. Μιχόπουλος

Εισαγωγή

Η κβαντομηχανική είναι ένας κλάδος της επιστήμης που ασχολείται με τις ατομικές και μοριακές ιδιότητες και συμπεριφορές σε μικροσκοπική κλίμακα. Αν και η θερμοδυναμική μπορεί να αφορά τη θερμοχωρητικότητα ενός αέριου δείγματος, η κβαντομηχανική ασχολείται με τις συγκεκριμένες αλλαγές στην περιστροφική ενεργειακή κατάσταση των μορίων. Η χημική κινητική μπορεί να ασχοληθεί με το ποσοστό της αλλαγής μιας ουσίας σε μια άλλη, αλλά αφορούν την κβαντική μηχανική οι αλλαγές στις δονητικές καταστάσεις και τις δομές των μορίων των αντιδρώντων καθώς αυτά μεταμορφώνονται. Η κβαντομηχανική ασχολείται επίσης με η περιστροφή των ατομικών πυρήνων και τους πληθυσμούς των ατόμων σε μια διεγερμένη κατάσταση.

Η φασματοσκοπία επίσης βασίζεται σε αλλαγές κβαντισμένων ενεργειακών επιπέδων πολλών τύπων. Η κβαντομηχανική θεωρείται κατ' αυτόν τον τρόπο ότι ενυπάρχει σε πολλούς άλλους τομείς της σύγχρονης επιστήμης. Η κατανόηση των κύριων ιδεών και μεθόδων της κβαντικής μηχανική είναι σημαντική για την ανάπτυξη της κατανόησης των διαφόρων κλάδων της επιστήμης, από την πυρηνική φυσική μέχρι την οργανική χημεία.

Οι σύγχρονες εφαρμογές της κβαντικής μηχανικής έχουν τις ρίζες τους στις εξελίξεις της φυσικής γύρω στα τέλη του 19ου και στις αρχές του 20ου αιώνα. Μερικά από τα πειράματα, ενός αιώνα τώρα ή και περισσότερο, εξακολουθούν να παρέχουν τη φυσική βάση της ερμηνείας της κβαντικής μηχανικής. Τα αποτελέσματα αυτών των πειραμάτων παρέχουν τα θεμέλια για τον τρόπο που ξέρουμε αυτά που ξέρουμε για τις σύγχρονες θεωρίες. Τα ονόματα που συνδέονται με τα επιτεύγματα αυτού του πρώιμου έργου (Planck, Einstein, Bohr, de Broglie, και άλλων) είναι θρυλικά στο το βασίλειο της φυσικής.

Η κυματοσυνάρτηση περιέχει μέσα της όλες τις πληροφορίες που μπορούν να γίνουν γνωστές σχετικά με το σωματίδιο. Αυτή η βασική προϋπόθεση αποτελεί τον ακρογωνιαίο λίθο της κβαντικής φυσικής και στόχος της είναι να βρεθεί πώς μπορούν να εξαχθούν πληροφορίες από την κυματοσυνάρτηση αλλά, και για το πως μπορεί κάποιος να εξάγει αυτήν την κυματοσυνάρτηση για ένα δεδομένο σύστημα.

Η ερμηνεία που έχει δοθεί, συνδέει την κυματοσυνάρτηση με τις πιθανότητες μέσα από τον τρόπο που προτάθηκε για πρώτη φορά από τον Max Born το 1925. Επομένως, αν και δεν είναι δυνατό να προσδιοριστεί με βεβαιότητα η θέση ενός σωματιδίου, είναι δυνατό να βρεθούν οι πιθανότητες παρατήρησής του σε κάθε δεδομένη θέση.

Η κβαντομηχανική επεξεργασία σήματος βασίζεται στην προσέγγιση του Padè (PA). Στη συνέχεια συνδέεται η PA και τον αλγόριθμο Lanczos και δημιουργείται η προσέγγιση Padè-Lanczos (PLA). Η PLA τίθεται σε λειτουργία με έναν αναδρομικό αλγόριθμο που ονομάζεται γρήγορος μετασχηματισμός Padè (FPT). Η FPT για οποιαδήποτε δεδομένη δυναμοσειρά ορίζεται από το μοναδικό πηλίκο δύο πολυωνύμων. Αυτή η επεξεργασία παρέχει ένα ουσιαστικό αποτέλεσμα ακόμη και όταν η αρχική συνάρτηση αποκλίνει.

Συν τοις άλλοις παρέχει τη δυνατότητα να επιταχυνθούν σημαντικά αργά συγκλίνουσες ακολουθίες/σειρές. Επιπλέον η FPT είναι μία αποτελεσματική μέθοδος λύσης γενικευμένων ιδιοπροβλημάτων.

Οι γενικές συναρτήσεις/ακολουθίες/σειρές μπορούν είτε να υπολογιστούν θεωρητικά είτε να μετρηθούν πειραματικά. Αυτό γίνεται μέσω των συναρτήσεων αυτοσυσχέτισης. Πράγματι οι συναρτήσεις αυτοσυσχέτισης αντιπροσωπεύουν μια πραγματική εναλλακτική διατύπωση της κβαντικής μηχανικής. Αυτό δε συμβαίνει μόνο επειδή όλα τα κύρια παρατηρήσιμα στοιχεία, π.χ. πλήρη ενεργειακά φάσματα, τοπική πυκνότητα καταστάσεων, σταθερές ποσοτικού ρυθμού, κ.λπ., εκφράζονται μέσω των συναρτήσεων αυτοσυσχέτισης, αλλά κυρίως επειδή αυτά και άλλα παρατηρήσιμα στοιχεία θα μπορούσαν να δοθούν πλήρως με όρους ορισμένων κατάλληλων, σχετικά μικρών τμημάτων πληροφορίας, τα οποία μπορούν να επισημανθούν, και αναλύονται χωριστά από τα ανεπιθύμητα/περιττά υπόλοιπα του πλήρους συνόλου των δεδομένων. Η απαιτούμενη μείωση διαστάσεων των μεγάλων προβλημάτων που αρχικά ερχόμαστε να αντιμετωπίσουμε, από την FPT μπορεί να επιτευχθεί με υποδιαιρέσεις, π.χ. παραθύρων, που χρησιμοποιούνται στην περιορισμένη ζώνη αποδεκατισμού.

Εναλλακτικά μπορεί να χρησιμοποιηθεί η τριδιαγωνοποίηση Lanczos δίνοντας αραιούς πίνακες Jacobi σε όρους των παραμέτρων σύζευξης Lanczos $\{\alpha_n,\beta_n\}$ που έχουν πολύ σημαντικές φυσικές ερμηνείες.

Η FPT είναι φυσικά ριζωμένη στην εικόνα της κβαντικής μηχανικής του Schrödinger και στη συνολική χρονικά ανεξάρτητη συνάρτηση Green για κάποιο σύστημα που βρίσκεται υπό μελέτη. Αυτό αποδίδει ένα ευέλικτο πλαίσιο για μια ενοποιημένη αντιμετώπιση της φασματοσκοπίας και των κρούσεων εντός του πλαισίου της επεξεργασίας σήματος και της κβαντικής μηχανικής.

Χρησιμοποιούμε τα σημεία σήματος χρόνου $\{c_n\}$ ως τα μόνα δεδομένα εισόδου για να εξαγάγουμε τις ακριβείς αναλυτικές εκφράσεις για την FPT, τα συνεχή κλάσματα, τα πολυώνυμα Lanczos $\{P_n(\omega), Q_n(\omega)\}$, τα ζεύγη $\{\alpha_n,\beta_n\}$, τα διανύσματα καταστάσεων Lanczos ψ_n, το σύνολο κυματοσυνάρτηση $\Upsilon(\omega)$ σε οποιαδήποτε συχνότητα ω και Χαμιλτονιανό τελεστή $\hat{\Omega}$.

Κατά την επεξεργασία σήματος αναλύουμε επίσης συνήθεις διαφορικές εξισώσεις. Η ανάλυση πραγματοποιείται στο πλαίσιο του λεγομένου αντιστρόφου προβλήματος επεξεργασίας αρμονικών συνιστωσών. Αυτό είναι ένα πρόβλημα αντιστροφής/ανακατασκευής που στοχεύει στην ανάκτηση με μονοσήμαντο τρόπο του συνόλου των πληροφοριών από το σήμα χρόνου εισόδου $\{c_n\}$, έτσι ώστε τα δεδομένα εξόδου να περιέχουν τον αριθμό K, τη θέση $\mathrm{Re}(\omega_k)$, το ύψος $|d_k|$, το πλάτος $\mathrm{Im}(\omega_k)$ και φάση $\mathrm{Arg}(d_k)$ κάθε μιγαδικής αρμονικής, συμπεριλαμβανομένων των περιπτώσεων εκφυλισμού συχνοτήτων κανονικής λειτουργίας $\{\omega_k\}$ λόγω επικάλυψης. Η FPT έχει τη μοναδική ικανότητα να παρέχει όλες αυτές τις παραμέτρους για τα μη εκφυλισμένα και εκφυλισμένα φάσματα με την μικρότερη δυνατή υπολογιστική προσπάθεια.

Αυτό μπορεί και επιτυγχάνεται πλήρως μόνο με δύο απλά βήματα: (1)την επίλυση ενός συστήματος γραμμικών εξισώσεων για την εξαγωγή των συντελεστών του χαρακτηριστικού πολυωνύμου $Q_K(\omega)$ απευθείας από τα $\{c_n\}$ και (2) βάζοντας σε ρίζα το $Q_K(\omega)$ ώστε να ληφθούν όλες οι αναζητούμενες σύνθετες συχνότητες $\{\omega_k\}$ $(1 \leq k \leq K)$. Μόνο το βήμα (1) χρειάζεται στη μη παραμετρική FPT, η οποία δίνεται από το πολυώνυμο πηλίκο $P_L(\omega)/Q_K(\omega)$. Αυτό αποδίδει το φασματικό σχήμα στη FPT για οποιοδήποτε ω. Στο πρόβλημα ποσοτικοποίησης της παραμετρικής FPT απαιτείται η εκτέλεση του βήματος (2) που δίνει όλες τις K μιγαδικές συχνότητες $\{\omega_k\}$. Τα αντίστοιχα μιγαδικά πλάτη $\{d_k\}$ λαμβάνονται από δύο ξεχωριστές ρητές εκφράσεις για το μη εκφυλισμένο και το εκφυλισμένο φάσμα. Αντίθετα, άλλες παραμετρικές μέθοδοι είναι πολύ πιο απαιτητικές υπολογιστικά.

Σε σχέση με τη γραμμική FFT, τα πλεονεκτήματα της μη γραμμικής FPT είναι η σημαντικά αυξημένη ανάλυση για το ίδιο μήκος σήματος ή η ίδια ανάλυση για μικρότερα μήκη σήματος. Επιπλέον, σε αντίθεση με άλλες μη γραμμικές μεθόδους (FD, κ.λπ.) που συνήθως υφίστανται μεγάλες ταλαντώσεις πριν τελικά σταθεροποιηθούν, η FPT παρουσιάζει μια εντυπωσιακά σταθερή σύγκλιση για αυξανόμενα μήκη σήματος. Αυτό είναι το παρόν εύρημα μέσω μιας ενδεικτικής φασματικής ανάλυσης του σήματος χρόνου, το οποίο έχει μετρηθεί πειραματικά μέσω Μαγνητικού Συντονισμού. Η φασματοσκοπία (MRS), σε ένταση μαγνητικού πεδίου 7T, κωδικοποιείται από τον εγκέφαλο ενός υγιούς εθελοντή.

Αναλύουμε επίσης μη φυσικούς (ψευδείς ή εξωγενείς) συντονισμούς στην παραμετρική εκτίμηση φασμάτων. Οι ψευδείς κορυφές προέρχονται από τη διαφθορά του θορύβου του σήματος χρόνου και από το λεγόμενο πρόβλημα υπερκαθορισμού. Αν το σήμα μήκους N συμβαίνει να έχει λιγότερες από N/2 κορυφές, το πρόβλημα γίνεται αλγεβρικά υπερκαθορισμένο, αφού υπάρχουν περισσότερες εξισώσεις παρά άγνωστοι.

Αυτό οδηγεί σε μοναδικές τιμές που σχετίζονται με ψευδείς κορυφές που αντιπροσωπεύουν ψευδείς αντηχήσεις. Στην PA, οι εξωτερικές ρίζες θα μπορούσαν να εμφανιστούν τόσο στον αριθμητή όσο και στον παρονομαστής του πολυωνύμου. Ψεύτικες ρίζες στον πολυωνυμικό παρονομαστή της PA είναι ανεπιθύμητες, καθώς οδηγούν σε μη φυσικές αιχμές στο φάσμα Padè.

Οι ψευδείς ρίζες στο πολυώνυμο του αριθμητή της PA είναι επίσης ανεπιθύμητες, αφού δημιουργούν αντισυντονισμούς και αυτό καταστρέφει τη φάση καθώς και το χαρακτηρα μοναδικότητας της PA.

Δεδομένης της αρχικής κατάστασης $|\Phi_0)$ ενός συστήματος τη στιγμή t = 0, οι ιδιοκαταστάσεις Schrödinger $|\Phi_n)$ σε μεταγενέστερο χρόνο nτ λαμβάνονται μέσω του τελεστή εξέλιξης **U**. Για να μπορέσουμε να εξάγουμε το φάσμα ιδιοτιμών του **U**, μπορούν να χρησιμοποιηθούν τεχνικές διαγωνοποίησης με το βασικό σύνολο Schrödinger $\{|\Phi_n)\}$.

Η λήψη αραιών πινάκων διαγωνοποίησης παρέχεται με εναλλαγή της βάσης από το σύνολο ιδιοδιανυσμάτων Schrödinger $\{|\Phi_n)\}$ προς το σύνολο βάσης Lanczos $\{|\psi_n)\}$ όπου δημιουργούνται έμμεσα τα διανύσματα $\{|\psi_n)\}$ μέσω αναδρομικής ακολουθίας. Ο προκύπτων πίνακας εξέλιξης **U**(τ) είναι τριδιαγώνιος. Κάθε διάνυσμα κατάστασης $|\psi_n)$ είναι ένα αποτέλεσμα επαναλαμβανόμενων εφαρμογών του **U**(τ) στο αρχικό κυματικό πακέτο $|\psi_0) = |\Phi_0)$. Από εκεί προκύπτει μια έκφραση στην οποία δίνεται το γενικό διάνυσμα $|\psi_n\rangle$ ως γραμμικός συνδυασμός των ιδιοκαταστάσεων Schrödinger.

Κεφ. 1ο

Στοιχεία Κβαντικής Μηχανικής

Από όλες τις επιστήμες που έχει δημιουργήσει ο ανθρώπινος νους, η Φυσική είναι η πλέον συγκροτημένη και θεμελιώδης. Συγκροτημένη διότι κάθε επιστημονικός κλάδος της Φυσικής εδράζει σε λιγοστές απαριθμημένες αξιωματικές προτάσεις, από τις οποίες αναπτύσσεται και αναλύεται ένα μεγάλο, πλούσιο σε νοήματα και αξιοθαύμαστο σε κάθε λεπτομέρειά του, επιστημονικό, κάθε φορά, οικοδόμημα, και θεμελιώδης διότι κάθε άλλη θετική επιστήμη εδράζει στην Φυσική ή έχει δημιουργηθεί προκειμένου να υπηρετήσει την Φυσική.

Επιγραμματικά αν επιχειρούσε κάποιος να αποτυπώσει τις απαρχές της Φυσικής θα μπορούσε να υποστηρίξει ότι 1) η Νευτώνεια Μηχανική θεμελιώνεται στους τρεις νόμους του Νεύτωνα, 2) ο Ηλεκτρομαγνητισμός στις τέσσερις εξισώσεις του Μάξουελ, 3) η Θερμοδυναμική στους τρεις νόμους της, 4) η σχετικότητα στα δύο αξιώματα του Αϊνστάιν.

Τι συμβαίνει όμως με την Κβαντομηχανική; Η Κβαντομηχανική, αν και εδράζεται και αυτή σε απαριθμημένα αξιώματα, τα οποία θα δούμε στην συνέχεια, μοιάζει να είναι μια ιδιότυπη παραφωνία σε ένα πολύ καλά εναρμονισμένο μουσικό σύνολο. Παραφωνία γιατί, ας μην κρυβόμαστε, είναι μια θεωρία η οποία δεν βγάζει νόημα· κανείς δεν μπορεί να εξηγήσει τι λέει[1], και ιδιότυπη, διότι εντούτοις λειτουργεί· οι θεωρητικές της προβλέψεις επαληθεύονται πειραματικά.

Ο σκοπός αυτής της διπλωματικής εργασίας δεν είναι να παραθέσει τις ιστορικές επιστημονικές ανάγκες και τα εναύσματα, αλλά και τα στάδια, που οδήγησαν στην συγκρότηση της Κβαντικής Θεωρίας, για τα οποία υπάρχει πλούσια ξενόγλωσση αλλά και ελληνόγλωσση βιβλιογραφία [1,2,3] , αλλά να καταδείξει τις βασικές αρχές της στοχεύοντας να δώσει νόημα και περιεχόμενο σ' αυτό που ο τίτλος της προοικονομεί· την Κβαντική Ανάλυση Σήματος.

1.1 Σωμάτια και κύματα

Στην επιστήμη της Φυσικής «πρωταγωνιστούν» δύο φυσικές οντότητες· τα σώματα και τα κύματα. Στην Μηχανική για παράδειγμα έχουμε σώματα, τροχαλίες ελατήρια κ.τ.λ., δυνάμεις που ασκούνται πάνω σε αυτά, αλλά και πολλά άλλα φυσικά μεγέθη, που μετρούν τις ιδιότητές τους, ενώ στην Κυματική και στον Ηλεκτρομαγνητισμό έχουμε καθαρά κυματικές θεωρίες και μεγέθη όπως το μήκος κύματος και η συχνότητα που δεν μπορούν να συσχετιστούν με σώματα ή σωμάτια.

Γενικότερα αυτές οι δύο έννοιες των σωματιδίων και των κυμάτων είναι αντιφατικές μεταξύ τους και, μέχρι σήμερα τουλάχιστον, δεν έχει βρεθεί ο τρόπος αυτές να συμβιβαστούν,

---

[1]Richard Feynman: "I think I can safely say that nobody really understands quantum mechanics", https://www.youtube.com/watch?v=5tvzmuUPpNw&ab_channel=NomenNominandum

καθώς το σωματίδιο είναι εντοπισμένο και αδιαίρετο ενώ το κύμα είναι εκτεταμένο και διαιρετό.

Αν και εννοιολογικά το χάσμα μεταξύ κυμάτων και σωματιδίων είναι ακόμα αγεφύρωτο, εντούτοις, μαθηματικά – τυπολογικά, είναι γεφυρωμένο και τις γέφυρες έχουν χτίσει ο Max Planck και ο Louis De Broglie με τις σχέσεις **E = hν** και $\boldsymbol{\lambda = \frac{h}{p}}$ που αντίστοιχα καθένας τους ανακάλυψε.

Οι δύο αυτές σχέσεις συνδέουν την ενέργεια και την ορμή ενός σώματος με ένα μήκος κύματος και μια συχνότητα, τα οποία όπως είπαμε είναι καθαρά κυματικά μεγέθη, που του αντιστοιχούν. Εννοιολογικά υπάρχει πρόβλημα πως ακριβώς εμφανίζεται (ή συνυπάρχει) αυτό το κύμα με το υπό μελέτη σωμάτιο, και ακόμα και στις μέρες μας αυτό είναι ένα ανοιχτό θέμα της Φυσικής και υπάρχει μια σειρά από απόπειρες ερμηνειών που έχουν γίνει για να το εξηγήσουν, αλλά πειραματικά είναι ένα επαληθευμένο γεγονός, ότι τα σωμάτια εμφανίζουν κυματικές ιδιότητες[2].

Η ερμηνεία που έχει επικρατήσει είναι η λεγόμενη της σχολής της Κοπεγχάγης, η οποία διατηρεί τα εννοιολογικά κενά, αλλά δεδομένου ότι έχει θεωρητική πρόταση, η οποία και επαληθεύεται από το πείραμα, μας είναι πολύ χρήσιμη. Πριν όμως μιλήσουμε για την ερμηνεία της σχολής της Κοπεγχάγης είναι απαραίτητο να αναφερθούμε στην εξίσωση του Schrödinger.

2 Το πείραμα των Davisson-Germer.

1.2.1 Η Εξίσωση Schrödinger

Στην Κβαντομηχανική τα φυσικά συστήματα διέπονται από την εξίσωση του Schrödinger, η οποία αποτελεί το αντίστοιχο θεμελιώδες αξίωμα για την εν λόγω θεωρία, ανάλογο με τους τρεις νόμους του Νεύτωνα στην Μηχανική και με όσα αναφέραμε παραπάνω για τους άλλους κλάδους της Φυσικής.

Όπως όλα τα αξιώματα, έτσι και η εξίσωση του Schrödinger δεν αποδεικνύεται, αλλά απλά επαληθεύεται από το πείραμα. Εντούτοις μπορούμε να προσεγγίσουμε το πως σκέφτηκε ο Schrödinger για να φτάσει στην εξίσωσή του.

Στην Κλασική Κυματική Θεωρία, ένα κύμα με καθορισμένη γωνιακή συχνότητα ω και κυματαριθμό k είναι αναγκαστικά ένα επίπεδο κύμα που περιγράφεται από την συνάρτηση:

$$\Psi(x,t) = e^{i(kx-\omega t)} \tag{1.}$$

Εισάγουμε στην παραπάνω εξίσωση τις σχέσεις των Planck

$$\omega = \frac{E}{\hbar} \tag{2.}$$

και De Broglie

$$k = \frac{p}{\hbar} \tag{3.}$$

και παίρνουμε:

$$\Psi(x,t) = e^{i(px-Et)/\hbar} \tag{4.}$$

Εκτελώντας τις παρακάτω υποτυπώδεις μερικές παραγωγίσεις έχουμε:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2} e^{\frac{i(px-Et)}{\hbar}} \qquad (5.)$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i\frac{E}{\hbar} e^{\frac{i(px-Et)}{\hbar}} \qquad (6.)$$

Και συνδυάζοντας τις παραπάνω σχέσεις με την κλασική σχέση ενέργειας ορμής

$$E = \frac{p^2}{2m} + V \qquad (7.)$$

έχουμε:

$$i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi \qquad (8.)$$

που είναι η γνωστή χρόνο-εξαρτημένη εξίσωση Schrödinger.

Αν ακολουθήσουμε τώρα την μέθοδο του χωρισμού μεταβλητών έχουμε:

$$\Psi(x,t) = \Psi(x)f(t)$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \Psi\frac{df}{dt} \qquad , \qquad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{d^2 \Psi}{dx^2}f$$

η εξίσωση Schrödinger γίνεται:

$$ih\frac{1}{f}\frac{df}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\Psi}\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \qquad (9.)$$

Τώρα το αριστερό μέλος της εξίσωσης είναι μια συνάρτηση του t και το δεξιό μέλος μια συνάρτηση του x. Η μόνη περίπτωση για να συμβαίνει αυτό είναι να ισούται το κάθε μέλος της εξίσωσης με μια σταθερά για την οποία επιλέγουμε την Ε, καθώς τα δύο μέλη έχουν διαστάσεις ενέργειας.

Εξισώνοντας το δεξιό μέλος της παραπάνω εξίσωσης με Ε καταλήγουμε στην χρόνο-ανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi}{dx^2} + V\Psi = E\Psi \quad (10.)$$

Το κάθε υπό μελέτη κβαντικό σύστημα περιγράφεται από την εξίσωση Schrödinger που του αντιστοιχεί, η επίλυση της οποίας οδηγεί στην εύρεση των κβαντικών καταστάσεων του. Τι εννοούμε όμως όταν λέμε κβαντικές καταστάσεις ενός συστήματος θα το δούμε στην επόμενη υποενότητα.

1.3 Η Ερμηνεία της σχολής της Κοπεγχάγης

Το γεγονός ότι οι έννοιες του σωματίου και του κύματος δεν κατέστη δυνατόν ποτέ να συμβιβαστούν οδήγησε την Σύγχρονη Φυσική στην Αρχή του Κυματοσωματιδιακού Δυϊσμού· στην αποδοχή δηλαδή ότι αυτές οι δύο θεωρήσεις είναι αλληλοσυμπληρούμενες και ότι τις χρειαζόμαστε και τις δύο προκειμένου να έχουμε μια πλήρη εικόνα για την φύση.

Επιλέγουμε δηλαδή κάθε φορά εμείς να θεωρήσουμε ένα φυσικό φαινόμενο ως φαινόμενο μεταξύ σωματιδίων ή ως κυματικό φαινόμενο ανάλογα με το ποιο από τα δύο μας εξυπηρετεί καλύτερα στην μελέτη μας και παύουμε να πασχίζουμε *να συμβιβάσουμε τα **ασυμβίβαστα***!

Το πρόβλημα εντείνεται από το γεγονός ότι η κυματοσυνάρτηση που προκύπτει από την επίλυση της εξίσωσης του Schrödinger είναι πειραματικά μη παρατηρίσιμη· τα πειράματα δηλαδή δεν ανιχνεύουν κάποιο νέο μέγεθος που να μπορούμε να το αποδώσουμε σε αυτήν.

Το θέμα επί της ουσίας ἔχει λύσει η πειραματικά επαληθεύσιμη στατιστική θεώρηση του Max Born, η οποία θεωρεί ότι η κυματοσυνάρτηση δεν αντιπροσωπεύει ένα φυσικά παρατηρήσιμο κλασικό κύμα αλλά ένα «κύμα πιθανότητας» και ότι το τετράγωνο της απόλυτης τιμής της κυματοσυνάρτησης ($|\Psi(x)|^2$) μας δίνει την πυκνότητα πιθανότητας – δηλαδή την πιθανότητα ανά μονάδα μήκους (ή όγκου) – να βρούμε το σωματίδιο σε μια περιοχή του χώρου.

$$P(x,t) = |\Psi(x,t)|^2 \qquad (11.)$$

Εκ του ορισμού αυτού προκύπτει και η συνθήκη κανονικοποίησης που οφείλει να ικανοποιεί κάθε συνάρτηση στην κβαντική μηχανική:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2 = 1 \qquad (12.)$$

Ο ίδιος ο Born αναγνώριζε ότι η θεώρηση αυτή ήταν μια αυθαίρετη επινόηση, που όμως επαλήθευε το σύνολο των πειραματικών δεδομένων.

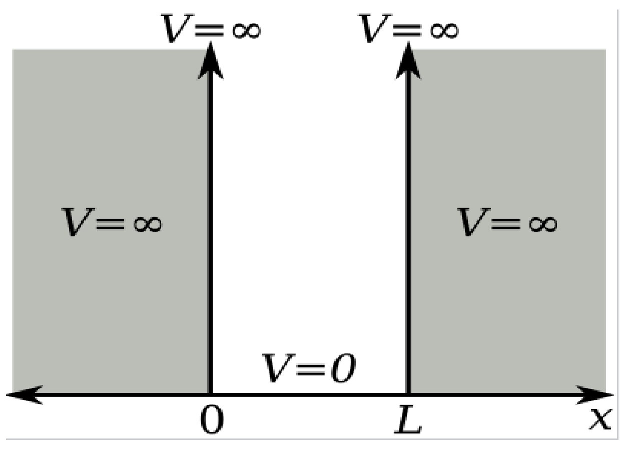
Η θεωρία επομένως λειτουργούσε (και λειτουργεί) έχοντας όμως σημαντικά εννοιολογικά προβλήματα και καταργήσει την κλασική θεώρηση λειτουργίας της φύσης επιφέροντας ένα πρωτόγνωρο για τα επιστημονικά δεδομένα φαινόμενο· το γεγονός μια θεωρία να λειτουργεί, να επαληθεύει δηλαδή τις προβλέψεις της, χωρίς όμως να υπάρχει τρόπος κάποιος να μπορεί να εξηγήσει πως γίνεται αυτό και πολύ περισσότερο να μπορεί να του προσδώσει οποιαδήποτε έννοια μηχανισμού.

1.4 Το σωματίδιο εντός πηγαδιού απειρόβαθου δυναμικού μιας διάστασης

Για λόγους επάρκειας κατανοήσεως της κβαντικής θεωρίας επιλέξαμε στο σημείο αυτό να παραθέσουμε ένα χαρακτηριστικό παράδειγμα· αυτό του εγκλωβισμού ενός σωματιδίου σε πηγάδι απειρόβαθου δυναμικού μιας διάστασης, το οποίο προσομοιάζει τον εγκλωβισμό ενός ηλεκτρονίου σε ένα μόριο.
Η εξίσωση του δυναμικού δίνεται από την σχέση:

$$V(x) = \begin{cases} 0, 0 \leq x \leq L \\ +\infty, x < 0 \; \kappa\alpha\iota \; x > L \end{cases}$$

Έχει τιμή μηδέν εντός του πηγαδιού και άπειρη εκτός αυτού.



Εικόνα 1: Απειρόβαθο Πηγάδι Δυναμικού (Πηγή: Wikipedia)

Από την εξίσωση (10) έχουμε:

$$- \frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \mathrm{V}\Psi = \mathrm{E}\Psi$$

Δεδομένου ότι το δυναμικό εντός των ορίων του πηγαδιού είναι μηδέν η παραπάνω σχέση γίνεται:

$$- \frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \mathrm{E}\Psi \qquad (13.)$$

Μία αποδεκτή λύση αυτής της εξίσωσης είναι η:

$$\Psi_n = A \sin\frac{n\pi x}{L} \qquad (14.)$$

Καθώς το δυναμικό είναι άπειρο εκτός του πηγαδιού η πιθανότητα να βρεθεί το σωμάτιο εκεί είναι μηδέν ($P = |\Psi(x)|^2 = 0$), επομένως $\Psi(x) = 0$ και επειδή η συνάρτηση Ψ είναι συνεχής πρέπει να είναι μηδέν και στα όρια του πηγαδιού ($\Psi(0) = \Psi(L) = 0$).

Παραγωγίζουμε δύο φορές την Ψ(x) ως προς x και παίρνουμε:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = \frac{n\pi}{L} A \cos\frac{n\pi x}{L} \qquad (15.)$$

και

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{n^2\pi^2}{L^2} A \sin\frac{n\pi x}{L} = -\frac{n^2\pi^2}{L^2}\Psi \qquad (16.)$$

Με αντικατάσταση στην (11) παίρνουμε:

$$E_n = \frac{n^2h^2}{8mL^2} = n^2E_1 \quad (17.)$$

Η εξίσωση (17) δίνει τις δυνατές τιμές της ενέργειας που μπορεί να πάρει το σωματίδιο εντός του πηγαδιού και παρατηρούμε ότι είναι κβαντισμένες, καθώς εξαρτώνται μόνο από την τιμή του ακέραιου αριθμού n. Η τιμή n=0 μηδενίζει παντού την Ψ και απορρίπτεται καθώς δεν έχει φυσική σημασία.

Παρουσιάζει εξαιρετικό ενδιαφέρον ότι ο ακέραιος n, που εμφανιζόταν αυθαίρετα στην παλιά κβαντική θεωρία από τον Bohr, πλέον προκύπτει με μαθηματικό τρόπο, ως απόρροια της λύσης της εξίσωσης του Schrödinger, η οποία, όπως είπαμε, αποτελεί τον θεμελιώδη αξιωματικό νόμο της κβαντομηχανικής.

Στην εικόνα 2 παρατίθενται τα διαγράμματα για τις κυματοσυναρτήσεις του σωματιδίου και οι ενεργειακές στάθμες που μπορεί να καταλάβει το σωματίδιο στο πηγάδι απειρόβαθου δυναμικού μιας διάστασης.

Εικόνα 2: Κυματοσυναρτήσεις του σωματιδίου για την περίπτωση του απειρόβαθου πηγαδιού, Ενεργειακές στάθμες του σωματιδίου – Πηγή Φυσική Γ΄ Λυκείου ΟΕΔΒ.

Η επίλυση της εξίσωσης Schrödinger συνεπώς δίνει τις ενεργειακές στάθμες τις οποίες μπορεί να καταλάβει το σωματίδιο, το οποίο δεν μπορεί να βρίσκεται οπουδήποτε στον χώρο παρά μόνο σε συγκεκριμένες περιοχές όπου μεσολαβεί ενεργειακό χάσμα μεταξύ τους. Η τιμή της ενέργειάς του παίρνει διακριτές τιμές – παρουσιάζει δηλαδή κβάντωση.

1.5 Γραμμικοί διανυσματικοί χώροι – Τα μαθηματικά της κβαντομηχανικής.

Είδαμε ότι σε κάθε πραγματοποιήσιμη κατάσταση ενός φυσικού συστήματος αντιστοιχεί μια κυματοσυνάρτηση (η οποία δεν έχει κάποιο φυσικό νόημα παρά είναι ένα καθαρά μαθηματικό μέγεθος), η οποία περιέχει όλες τις πειραματικά ελέγξιμες πληροφορίες για την κατάσταση του φυσικού συστήματος.

Η κυματοσυνάρτηση Ψ μπορεί να αναπτυχθεί σε μια σειρά ιδιοσυναρτήσεων ψ_n. Δηλαδή:

$$\Psi = \sum \mathrm{c_n} \psi_\mathrm{n} \qquad (18.)$$

Οι συντελεστές $\mathrm{c_n}$ εκφράζουν το βαθμό που κάθε ιδιοσυνάρτηση συμμετέχει στον σχηματισμό της Ψ.

Ιδιοσυναρτήσεις ενός τελεστή Α ονομάζονται οι συναρτήσεις που ικανοποιούν την εξίσωση ιδιοτιμών:

$$\mathbf{A}\psi_\mathrm{n} = \mathrm{a}\psi_\mathrm{n} \qquad (19.)$$

Πρόκειται για την δράση ενός τελεστή Α σε μια συνάρτηση Ψ που ξαναδίνει την συνάρτηση Ψ πολλαπλασιασμένη με έναν αριθμό *α*, που ονομάζεται ιδιοτιμή του τελεστή Α.

Στην κβαντομηχανική σε κάθε φυσικό μέγεθος αντιστοιχεί ένας τελεστής Α. Οι μόνες δυνατές τιμές του φυσικού μεγέθους Α είναι οι ιδιοτιμές του. Η πιθανότητα, κατά την διάρκεια μια μέτρησης, να εμφανισθεί η ιδιοτιμή α_n είναι:

$$\mathbf{P_n} = |\mathbf{C_n}|^2 \qquad (20.)$$

Η αυτονόητη απαίτηση το άθροισμα των πιθανοτήτων για όλα τα ενδεχόμενα αποτελέσματα να ισούται με την μονάδα οδηγεί στη σχέση:

$$\sum_{\mathbf{n=1}}^{\infty} \mathbf{P_n} = \sum_{\mathbf{n=1}}^{\infty} |\mathbf{C_n}|^2 = \mathbf{1} \qquad (21.)$$

1.5.1 Γραμμικοί τελεστές

Ένας τελεστή **Α** ονομάζεται γραμμικός (linear) εάν ισχύει η σχέση:

$$\mathbf{A}(\lambda_1\Psi_1 + \lambda_2\Psi_2) = \lambda_1\mathbf{A}\Psi_1 + \lambda_2\mathbf{A}\Psi_2 \qquad (22.)$$

όπου λ_1, λ_2 σταθερές.

Για τους γραμμικούς τελεστές ισχύουν οι εξής ιδιότητες:

α) Πολλαπλασιασμός ενός τελεστή με μια σταθερά c:

$$(\mathrm{c}\mathbf{A})\Psi = \mathrm{c}(\mathbf{A}\Psi) \qquad (23.)$$

β) Άθροισμα δύο τελεστών **Α** και **Β** : **S = A + B**:

$$\mathbf{S}\Psi = \mathbf{A}\Psi + \mathbf{B}\Psi \qquad (24.)$$

γ) Γινόμενο δύο τελεστών **Α** και **Β** : **P = A x B**: (25.)

$$\mathbf{P}\Psi = \mathbf{A} \times \mathbf{B}\Psi = \mathbf{A}(\mathbf{B}\Psi) \qquad (26.)$$

Σημείωση: Το γινόμενο δύο τελεστών δεν έχει εν γένει την αντιμεταθετική ιδιότητα:

$$\mathbf{A \times B \neq B \times A} \qquad (27.)$$

Οι τελεστές που εμφανίζονται στην κβαντομηχανική είναι ερμητιανοί. Αυτό σημαίνει ότι έχουν:

α) πραγματική μέση τιμή ($\mathbf{A} = \mathbf{A}^*$).

β) πραγματικές ιδιοτιμές

γ) ορθογώνιες ιδιοσυναρτήσεις.

Στην κβαντομηχανική, σε κάθε φυσικό μέγεθος αντιστοιχεί ένας τελεστής. Στον πίνακα 1 απεικονίζονται οι βασικότεροι τελεστές, που χρησιμοποιούνται στην κβαντική φυσική.

Πίνακας 1: Κυριότεροι τελεστές της Κβαντικής Φυσικής

Μεταβλητή	Σύμβολο	Τελεστής
Συντεταγμένη κατά τον άξονα **x**	x	$\hat{\mathrm{x}} \to x$
Συντεταγμένη κατά τον άξονα **y**	y	$\hat{\mathrm{y}} \to y$
Συντεταγμένη κατά τον άξονα **z**	z	$\hat{\mathrm{z}} \to z$
Μέτρο διανύσματος θέσης	r	$\hat{\mathrm{r}} \to r$
Συντεταγμένη της ορμής κατά τον άξονα **x**	p_x	$\hat{\mathrm{p}}_x \to -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$
Συντεταγμένη της ορμής κατά τον άξονα **y**	p_y	$\hat{\mathrm{p}}_y \to -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}$
Συντεταγμένη της ορμής κατά τον άξονα **z**	p_z	$\hat{\mathrm{p}}_z \to -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$
Διάνυσμα της ορμής	$\mathbf{p}$	$\hat{\mathbf{p}} \to -i\hbar \left(\mathbf{i}\frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{j}\frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{k}\frac{\partial}{\partial z} \right) = -i\hbar \nabla$
Κινητική ενέργεια	$T = p^2/2m$	$\hat{\mathrm{T}} \to -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$
Hamiltonian, Χαμιλτονιανή	H	$\hat{\mathrm{H}} = \hat{\mathrm{T}} + \hat{\mathrm{V}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t)$
Ολική ενέργεια	E	$\hat{\mathrm{E}} = \hat{\mathrm{H}} \to i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$

1.5.2 Ιδιοδιανύσματα και Ιδιοτιμές

Γενικά, δρώντας ένας τελεστής πάνω σε μια συνάρτηση την μετατρέπει σε μια άλλη συνάρτηση:

$$\mathbf{A}\Psi_1 = \Psi_2 \qquad (28.)$$

Στην ειδική περίπτωση όπου:

$$\mathbf{A}\Psi_1 = \alpha_1\Psi_1 \qquad (29.)$$

λέμε ότι η συνάρτηση Ψ_1 είναι **ιδιοσυνάρτηση (eigenfunction)** του τελεστή **A** και η σταθερά α_1 είναι η **ιδιοτιμή (eigenvalue)** του τελεστή **A** που αντιστοιχεί στην συγκεκριμένη ιδιοσυνάρτηση Ψ_1.

Ένας τελεστής μπορεί να έχει μία, περισσότερες, ή και άπειρες, ιδιοσυναρτήσεις και αντίστοιχες, εν γένει, ιδιοτιμές. Σε κάθε ιδιοσυνάρτηση αντιστοιχεί πάντα μία μόνο ιδιοτιμή. Το αντίθετο όμως δεν συμβαίνει πάντα, καθώς είναι δυνατόν στην ίδια ιδιοτιμή να αντιστοιχούν περισσότερες από μία ιδιοσυναρτήσεις. Στην περίπτωση αυτή λέμε ότι η συγκεκριμένη ιδιοτιμή είναι **εκφυλισμένη (degenerated)**.

Η λύση της εξίσωσης Schrödinger δίνει τις ιδιοσυναρτήσεις ενός συστήματος, οι οποίες είναι **ορθογώνιες (orthogonal)** μεταξύ τους. Δηλαδή, ικανοποιούν την σχέση:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{\mathbf{n}}^{*}\Psi_{\mathbf{m}}dx = 0 \ \text{, για } n \neq m \qquad (30.)$$

Αν συνδυαστεί ο ορθογωνιότητα των ιδιοσυναρτήσεων με την συνθήκη κανονικοποίησης (εξ. 12.), τότε προκύπτει η σχέση:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{\boldsymbol{n}}^{*} \Psi_{\boldsymbol{m}} dx = \delta_{n,m} \qquad (31.)$$

Ισχύει ότι: $\delta_{n,m} = 1$ όταν n=m

και $\delta_{n,m} = 0$ όταν $n \neq m$

Οι συναρτήσεις που ικανοποιούν την εξίσωση (30) ονομάζονται **ορθοκανονικές (orthonormal)**.

Συνεπώς, οι ιδιοσυναρτήσεις ενός συστήματος, οι οποίες και προκύπτουν από την λύση της εξίσωσης Schrödinger είναι ορθοκανονικές. Καθεμιά κυματοσυνάρτηση Ψ συνιστά ένα διάνυσμά κατάστασης και καθεμιά ιδιοσυνάρτηση $\Psi_{\boldsymbol{n}}$ ένα ή ιδιοδιάνυσμα ενός διανυσματικού χώρου Hilbert.

Κάθε σύνολο των ιδιοδιανυσμάτων $\Psi_{\boldsymbol{1}}, \Psi_{\boldsymbol{2}},..., \Psi_{\boldsymbol{n}}$ εκτός του ότι είναι ορθοκανονικό, αποτελεί και μια **πλήρη βάση** του διανυσματικού χώρου Hilbert. Η πληρότητα έχει την έννοια ότι οποιοδήποτε διάνυσμα κατάστασης μπορεί να γραφεί ως γραμμικός συνδυασμός των ιδιοδιανυσμάτων της βάσης.

Σύμφωνα με το συμβολισμό του Dirac ένα διάνυσμα κατάστασης συμβολίζεται με ένα διάνυσμα ket $|\Psi >$ και συμπληρώνεται με ένα διάνυσμα bra $< \Psi|$, ώστε όταν τα βάζουμε μαζί να έχουμε την παρένθεση bracket $< \Psi| \Psi >$, που ορίζει το εσωτερικό γινόμενο δύο διανυσμάτων κατάστασης.

1.5.3 Γεωμετρική Ερμηνεία

Γενικά διανυσματικός χώρος είναι ένα σύνολο διανυσμάτων **a,b,c,...** όπου ορίζεται η πρόσθεση διανυσμάτων **a + b** και ο πολλαπλασιασμός διανύσματος με βαθμωτό μέγεθος λ**b**.

- Το άθροισμα δύο διανυσμάτων είναι και αυτό διάνυσμα **a + b = c**. Ισχύουν η αντιμεταθετική (**a + b = b + a**) και η προσεταιριστική ιδιότητα **(a + b) + c = a + (b + c).** υπάρχει το μηδενικό διάνυσμα **0** και για κάθε διάνυσμα **a** το αντίστροφό του, ώστε **a + (-a) = 0.**
- Ο πολλαπλασιασμός ενός διανύσματος **a** με ένα μιγαδικό βαθμωτό μέγεθος λ δίνει ένα νέο διάνυσμα **b** = λ**a**. Ισχύουν η επιμεριστική ιδιότητα λ(**a** + **b**) = λ**a** + **λb** και η προσεταιριστική ιδιότητα λ(μ **a) =** (λμ) **a.**
- Το εσωτερικό γινόμενο δύο διανυσμάτων **a** , **b** ορίζεται ως: **<a|b>** = **<b|a>***. Ως μέτρο του διανύσματος |**a >** ορίζεται το $\sqrt{<\mathbf{a}|\mathbf{a}>}$.

1.5.3.1 Ευκλείδειος διανυσματικός χώρος

Ο πιο γνωστός διανυσματικός χώρος είναι ο τρισδιάστατος χώρος. Εκεί ένα διάνυσμα **a** γράφεται:

$$|\mathbf{a}>= a_1|e_1>+ a_2|e_2>+ a_3|e_3> \qquad (32.)$$

Τα διανύσματα βάσης είναι ορθογώνια όταν τα εσωτερικά τους γινόμενα ικανοποιούν τις σχέσεις:

$$< e_1 \mid e_2 \; >=< e_1 \mid e_3 \; >=< e_2 \mid e_3 \; >= 0 \qquad (33.)$$

και είναι κανονικοποιημένα όταν:

$$< e_1 \mid e_1 \; >=< e_2 \mid e_2 \; >=< e_3 \mid e_3 \; = 1 \qquad (34.)$$

Αυτά μπορούν να γενικευθούν για οποιοδήποτε N – διάστατο ορθοκανονικό σύνολο διανυσμάτων $(e_1, e_2, \dots, e_{\mathrm{N}})$ με εσωτερικό γινόμενο:

$$< e_{\mathrm{n}} \mid e_m \; >= \; \delta_{n,m} \qquad (35.)$$

1.5.3.2 Διανυσματικός χώρος συναρτήσεων

Ακριβώς τα ίδια ισχύουν και για έναν ∞ - διάστατο διανυσματικό χώρο, όπου ως διανύσματα θεωρούμε τις συναρτήσεις f (x) και ως διανύσματα βάσης τις u_{n} (x).

Ως παράδειγμα μπορούμε να αναφέρουμε τις συναρτήσεις βάσης

$$u_{\mathrm{n}}\,(\mathrm{x}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos nx, \quad \mathrm{n} = 0, 1, 2 \dots \qquad (36.)$$

Η f (x) μπορεί να αναπτυχθεί κατά Fourier:

$$\mathrm{f(x)} = \sum_{n=0}^{\infty} f_n \, u_{\mathrm{n}}\,(\mathrm{x}) \qquad (37.)$$

ή αν γραφεί με συμβολισμό Dirac:

$$\mid \mathrm{f} > \; = \; \sum_{n=0}^{\infty} f_n \mid u_n > \qquad (38.)$$

Το εσωτερικό γινόμενο δύο συναρτήσεωνu_{n} (x), u_{m} (x) του απειροδιάστατου διανυσματικού χώρου των συναρτήσεων ορίζεται με το ολοκλήρωμα:

$$< u_{\mathrm{n}} \mid u_{\mathrm{m}} >= \int_{-\pi}^{\pi} dx\, u_{\mathrm{n}}(\mathrm{x}) u_{\mathrm{m}}(\mathrm{x}) \qquad (39.)$$

1.5.3.3 Διανυσματικός χώρος Hilbert

Η διαφορά που εμφανίζεται στους διανυσματικούς χώρους Hilbert με τους διανυσματικούς χώρους των συναρτήσεων είναι ότι στους χώρους Hilbert πρέπει να διατηρηθεί η σειρά των όρων στο εσωτερικό γινόμενο, καθώς το ολοκλήρωμα περιλαμβάνει την μιγαδική συζυγή της πρώτης συνάρτησης:

$$<\varphi| \psi >= \int_{-\pi}^{\pi} dx\, \varphi^{*}(\mathrm{x})\psi(\mathrm{x}) \qquad (40.)$$

Από αυτόν τον ορισμό του βαθμωτού γινομένου δύο συναρτήσεων απορρέουν οι ακόλουθες ιδιότητες:

- $<\varphi| \psi >= \int_{-\pi}^{\pi} dx\, \varphi^{*}(\mathrm{x})\psi(\mathrm{x}) = (\int_{-\pi}^{\pi} dx\, \varphi(\mathrm{x})\Psi^{*}(\mathrm{x}))^{*} =< \psi| \varphi >^{*}$ (41.)
- $<\varphi\big| \lambda\psi = \lambda < \varphi\big|\psi >, < \lambda\varphi\big| \psi > \lambda^{*} < \varphi\big|\psi >, \lambda \in C$ (42.)

Ισχύει ότι όταν $<\varphi| \psi >= 0$, τότε οι $|\,\varphi >$, $|\,\psi >$ είναι ορθογώνιες και όταν $< \psi| \psi >= 1$, τότε η $|\,\psi >$ είναι κανονικοποιημένη.

Η χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger

$$\mathbf{H}|\psi_n> = \mathrm{E_n}|\psi_n> \tag{43.}$$

είναι μια εξίσωση ιδιοτιμών για τον Χαμιλτονιανό τελεστή **H** με ιδιοσυναρτήσεις $|\psi_n>$ και αντίστοιχες ιδιοτιμές $\mathrm{E_n}$. Το σύνολο των ιδιοσυναρτήσεων $\{|\psi_n>\}$ είναι ορθοκανονικό και πλήρες και αποτελεί μια βάση ενός διανυσματικού χώρου συναρτήσεων.

Οποιαδήποτε συνάρτηση $|\psi>$ μπορεί να γραφεί ως γραμμικός συνδυασμός των ιδιοσυναρτήσεων $|\psi_n>$:

$$|\psi>= \sum_n \mathrm{c_n}\,|\psi_n> \tag{44.}$$

Μπορούμε να υπολογίσουμε τα πλάτη $\mathrm{c_n}$ με τον ακόλουθο τρόπο:

$$\begin{aligned} <\psi_m|\psi> &= <\psi_m|\sum_n \mathrm{c_n}\,|\psi_n> \\ &= \sum_n \mathrm{c_n} <\psi_m|\psi_n> \\ &= \sum_n \mathrm{c_n}\delta_{m,n} \\ &= \mathrm{c_n} \end{aligned}$$

Άρα
$$\mathrm{c_n} = <\psi_n|\psi> \tag{45.}$$

Επομένως, οι συνιστώσες ενός διανύσματος $|\psi>$, στη βάση των ιδιοδιανυσμάτων $|\psi_n>$, είναι οι μιγαδικοί αριθμοί $<\psi_n|\psi>$, που προκύπτουν ως προβολές του $|\psi>$ στη βάση των $|\psi_n>$.

Η πληρότητα της βάσης αποτυπώνεται στη σχέση:

$$\sum_n |\psi_n><\psi_n| = \mathbf{I} \tag{46.}$$

1.6 Συνεχές φάσμα ιδιοτιμών

Υπάρχει η περίπτωση το φάσμα ιδιοτιμών ενός τελεστή είναι συνεχές

$$\mathbf{A}|\,\psi_\alpha >= \alpha|\psi_\alpha >, \alpha \in (-\infty, +\infty)\ . \tag{47.}$$

Στην περίπτωση αυτή το ανάπτυγμα της $|\psi>$ στη βάση των ιδιοδιανυσμάτων $|\psi_\alpha>$ γίνεται με το ολοκλήρωμα

$$\int da < \psi_a \,|\, \psi > |\psi_\alpha > \tag{48.}$$

1.7 Μέση τιμή και αβεβαιότητα

Η μέση τιμή και η αβεβαιότητα μιας μεταβλητής που αντιστοιχεί σε έναν τελεστή **A** υπολογίζεται από τη σχέση:

$$\begin{aligned} < \mathbf{A} > &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\boldsymbol{A}\psi(x) = < \psi\,|\boldsymbol{A}|\,\psi > \\ &= \sum_n c_n^* < \psi_n \,|\, \mathbf{A} \,|\, \sum_\mathrm{m} \mathrm{c_m} \,|\, \psi_m > \\ &= \sum_{n,m} c_n^*\, \mathrm{c_m} < \psi_n \,|\, \mathbf{A}\,|\psi_m > \end{aligned} \tag{49.}$$

και από την εξίσωση ιδιοτιμών

$$\begin{aligned} < \mathbf{A} > &= \sum_{n,m} c_n^*\, \mathrm{c_m}\alpha_\mathrm{m} < \psi_n \,|\, \psi_m > \\ &= \sum_{n,m} c_n^*\, \mathrm{c_m}\alpha_\mathrm{m}\delta_{n,m} \\ &= \sum_n |c_n|^2\ . \end{aligned} \tag{50.}$$

Ομοίως βρίσκουμε ότι $< \boldsymbol{A^2} >= \sum_n |c_n|^2 \, a_n^2$ και στη συνέχεια μπορούμε να υπολογίσουμε την αβεβαιότητα από τη σχέση:

$$\Delta A = \sqrt{< \boldsymbol{A^2} > - < \boldsymbol{A^2} >^2} \qquad (51.)$$

1.8 Ο αρμονικός ταλαντωτής

Τα περισσότερα απ' όσα μας είναι γνωστά για τη δομή των ατόμων και των μορίων προκύπτουν από τη μελέτη της αλληλεπίδρασης της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας με την ύλη. Οι δονήσεις στα μοριακά συστήματα αποτελούν μια από τις ιδιότητες που παρέχει τη βάση για τη μελέτη των μοριακών δομών με φασματοσκοπικές τεχνικές. Η υπέρυθρη φασματοσκοπία παρέχει την πειραματική τεχνική για τη μελέτη των αλλαγών στις καταστάσεις δόνησης στα μόρια.

Η επεξεργασία των μοριακών δονήσεων ξεκινάει εξετάζοντας ένα αντικείμενο που δονείται καθώς βρίσκεται προσδεμένο σε ένα ελατήριο και αναπτύσσονται κάποιες από τις φυσικές έννοιες και τις μαθηματικές τεχνικές που χρησιμοποιούνται.

Ένα αντικείμενο προσαρτημένο σε ένα ελατήριο υπακούει το γνωστό νόμο του Hooke, ο οποίος περιγράφει το σύστημα ως προς τη δύναμη (F) που ασκείται στο αντικείμενο από το ελατήριο και τη μετατόπιση του (x) από τη θέση ισορροπίας:

$$F = -kx \qquad (52.)$$

Σε αυτή την εξίσωση, x είναι η απόσταση του αντικειμένου από την θέση ισορροπίας τους και το k είναι η σταθερά του ελατηρίου. Το αρνητικό πρόσημο στην εξ. (51) δείχνει ότι η δύναμη επαναφοράς είναι στην αντίθετη κατεύθυνση από τη μετατόπιση. Η ενέργεια που απαιτείται για να προκαλέσει τη μετατόπιση γίνεται δυναμική ενέργεια που δίνεται στο αντικείμενο και υπολογίζεται από το ολοκλήρωμα:

$$\int_0^x F(x)\,dx = \int_0^x -kx\,dx = \frac{1}{2}kx^2 \qquad (53.)$$

Η γωνιακή συχνότητα ταλάντωσης δίνεται από τον τύπο:

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \qquad (54.)$$

Η μεταβολή της μετατόπισης με το χρόνο βρίσκεται κάνοντας χρήση του δεύτερου νόμου του Νεύτωνα, F = ma. Η ταχύτητα βρίσκεται από την παράγωγο της απόστασης ως προς το χρόνο dx/dt, και η επιτάχυνση από την παράγωγο της ταχύτητας με χρόνο d^2x/dt^2. Επομένως, σε διαφορική μορφή, η F=ma γράφεται:

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \frac{k}{m}x = 0 \qquad (55.)$$

1.8.1 Γραμμικές διαφορικές εξισώσεις με σταθερούς συντελεστές.

Μια γραμμική διαφορική εξίσωση με σταθερούς συντελεστές παρουσιάζει τη μορφή

$$a_n(x)\frac{d^n y}{dx^n} + a_{n-1}(x)\frac{d^{n-1} y}{dx^{n-1}} + \cdots + a_1(x)\frac{dy}{dx} + a_0(x)y = F(x) \quad .(56.)$$

Αν η εξίσωση αυτή είναι δεύτερης τάξης έχουμε:

$$a_2(x)\frac{d^2 y}{dx^2} + a_1(x)\frac{dy}{dx} + a_0(x)y = F(x) \quad (57.)$$

Σε γενική μορφή, αυτή η εξίσωση μπορεί να γραφεί:

$$a_2 D^2 y + a_1 D y + a_0 = F(x) \quad (58.)$$

Για να λυθεί αυτή η διαφορική εξίσωση χρησιμοποιούμε μια βοηθητική εξίσωση, η οποία έχει τη μορφή

$$f(D)y = 0 \quad (59.)$$

όταν η γενική διαφορική εξίσωση μπορεί να γραφεί ως

$$f(D)y = F(x) \quad (60.)$$

και η οποία ονομάζεται **συμπληρωματική εξίσωση.**

Ας υποθέσουμε πως έχουμε να λύσουμε την εξίσωση

$$\frac{d^2 y}{dx^2} - 5\frac{dy}{dx} + 4y = 10x \quad (61.)$$

η οποία μπορεί να γραφεί υπό τη μορφή

$$\left(D^2 - 5D + 4\right)y = 10x \ . \quad (62.)$$

Η λύση αυτής της εξίσωσης δίνεται από τη σχέση

$$y = C_1 e^{ax} + C_2 e^{bx} \quad (63.)$$

στην οποία τα α και β πρέπει να προσδιορίζονται από τις λύσεις της συμπληρωματικής εξίσωσης

$$m^2 - 5m + 4 = 0 \tag{64.}$$

που έχει ως λύσεις την m=1 και την m=4.
Επομένως η σχέση (61) γίνεται

$$y = C_1 e^x + C_2 e^{4x} \tag{65.}$$

Αν παραγωγίσουμε την παραπάνω σχέση έχουμε

$$Dy = \frac{dy}{dx} = C_1 e^x + 4C_2 e^{4x} \tag{66.}$$

και

$$D^2 y = \frac{d^2 y}{dx^2} = C_1 e^x + 16C_2 e^{4x} \tag{67.}$$

Συνεπώς, η βοηθητική εξίσωση (58) γίνεται

$$\left(D^2 - 5D + 4\right) y = D^2 y - 5Dy + 4y = 0 \tag{68.}$$

ή $C_1 e^x + 16C_2 e^{4x} - 5\left(C_1 e^x + 4C_2 e^{4x}\right) + 4\left(C_1 e^x + C_2 e^{4x}\right) = 0$ (69.)

Μία λύση αυτής της εξίσωσης είναι η

$$y = \frac{5}{2}x + \frac{25}{8} \tag{70.}$$

Η λύση αυτή επαληθεύει και τη γενική διαφορική εξίσωση (59).

Η λύση της εξίσωσης (60) είναι το άθροισμα των δύο εκφράσεων:

$$y = C_1 e^x + C_2 e^{4x} + \frac{5}{2}x + \frac{25}{8} \tag{71.}$$

Στα περισσότερα προβλήματα, αρκεί να ληφθεί μια γενική λύση. "Μοναδικές" λύσεις που δεν περιγράφουν τη φυσική συμπεριφορά του υπό μελέτη συστήματος αγνοούνται. Υπάρχουν δύο αυθαίρετες σταθερές εντός της λύσης που προέκυψε. Φυσικά, οι σταθερές αυτές καθορίζονται από τους φυσικούς περιορισμούς του συστήματος.

Η εξίσωση

$$D^2 y + y = 0 \tag{72.}$$

έχει ως βοηθητική εξίσωση την

$$m^2 + 1 = 0 \tag{73.}$$

που έχει σαν λύση την $m = \pm i$. Οπότε η γενική λύση είναι η

$$y = C_1 e^{ix} + C_2 e^{-ix} \tag{74.}$$

Μία λύση της εξίσωσης (70) είναι της μορφής

$$y = A \sin x + B \cos x \tag{75.}$$

Μια διαφορική εξίσωση μπορεί να έχει μόνο μία γενική λύση, οπότε η λύση της εξίσωσης (73) και της (74) πρέπει να είναι ίσες. Επομένως

$$y = C_1 e^{ix} + C_2 e^{-ix} = A \sin x + B \cos x$$

(76.)

Για x = 0 τότε $C_1 + C_2 = B$.

Αν παραγωγίσουμε την εξίσωση (75) παίρνουμε

$$\frac{dy}{dx} = C_1 i e^{ix} - C_2 i e^{-ix} = A\cos x - B\sin x \qquad (77.)$$

Για x = 0 παίρνουμε:

$$i(C_1 - C_2) = A \qquad (78.)$$

Επομένως έχουμε:

$$C_1 e^{ix} + C_2 e^{-ix} = C_1(\cos x + i\sin x) + C_2(\cos x - i\sin x) \qquad (79.)$$

Αν $C_2 = 0$ και $C_1 = 1$ παίρνουμε:

$$e^{ix} = \cos x + i\sin x \qquad (80.)$$

Αν $C_2 = 1$ και $C_1 = 0$ παίρνουμε:

$$e^{-ix} = \cos x - i\sin x \qquad (81.)$$

Οι εξισώσεις (79) και (80) είναι οι γνωστοί τύποι του Euler.

Αν υποθέσουμε ότι έχουμε να λύσουμε την διαφορική εξίσωση:

$$y'' + 2y' + 5y = 0 \qquad (82.)$$

$$\leftrightarrow \qquad (D^2 + 2D + 5)y = 0$$

Σε αυτήν την περίπτωση, η βοηθητική εξίσωση είναι η:

$$m^2 + 2m + 5 = 0 \tag{83.}$$

που έχει σαν λύσεις τις:

$$m = \frac{-2 \pm \sqrt{4-20}}{2} = -1 \pm 2i \tag{84.}$$

Τότε η εξίσωση (81) γίνεται:

$$y = C_1 e^{(-1+2i)x} + C_2 e^{(-1-2i)x} \tag{85.}$$

$$\leftrightarrow \quad y = C_1 e^{-x} e^{2ix} + C_2 e^{-x} e^{-2ix} = e^{-x}\left(C_1 e^{2ix} + C_2 e^{-2ix}\right) \tag{86.}$$

$$\leftrightarrow \quad y = e^{-x}(A \sin 2x + B \cos 2x) \tag{87.}$$

Γενικά αν η βοηθητική εξίσωση έχει λύσεις της μορφής $\alpha \pm \beta i$, τότε η λύση της διαφορικής εξίσωσης είναι της μορφής:

$$y = e^{ax}(A \sin bx + B \cos bx) \tag{88.}$$

Αν μια διαφορική εξίσωση είναι της μορφής:

$$y'' + a^2 y = 0 \tag{89.}$$

τότε η βοηθητικής εξίσωση είναι η

$$m^2 + a^2 = 0 \tag{90.}$$

και έχει ως λύσεις τις $m = \pm ia$. Επομένως η εξίσωσης (88) μπορεί να γραφεί ως :

$$y = C_1 e^{aix} - C_2 e^{-aix} = A\cos ax + B\sin ax \qquad (91.)$$

1.8.2 Κβαντικός αρμονικός ταλαντωτής

Ένα από τα πολύ χρήσιμα μοντέλα στην κβαντική μηχανική είναι ο κβαντικός αρμονικός ταλαντωτής. Αυτό το μοντέλο παρέχει τη βάση για τη μελέτη της δόνησης στους χημικούς δεσμούς και επομένως είναι απαραίτητο μέρος για τη μελέτη της φασματοσκοπίας.

Η δυναμική ενέργεια ενός δονούμενου αντικείμενου δίνεται από τον τύπο

$$V = \frac{1}{2}kx^2 \qquad (92.)$$

ή

$$V = \frac{1}{2}mx^2\omega^2 \qquad (93.)$$

Η συνολική ενέργεια του ταλαντωτή είναι το άθροισμα της δυναμικής και της κινητικής του ενέργειας. Ο τελεστής της κινητικής ενέργειας Τ, στη μονοδιάστατη μορφή του, δίνεται από τη σχέση:

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} \qquad (94.)$$

Επομένως η Χαμιλτονιανή του αρμονικού ταλαντωτή είναι η:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + 2\pi^2\nu^2 mx^2 \qquad (95.)$$

Αν θέσουμε b=2πνm/ ħ, η εξίσωση του Schrödinger

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

γίνεται:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - b^2x^2\right)\psi = 0 \tag{96.}$$

Σε αυτή την εξίσωση, η δυναμική ενέργεια μεταβάλλεται με x^2, και επειδή είναι μία μη γραμμική συνάρτηση, αυτή η εξίσωση είναι πολύ πιο σύνθετη από αυτές που περιγράψτε τον κλασικό αρμονικό ταλαντωτή. Η διερεύνηση αυτής της εξίσωσης κύματος δείχνει ότι η λύση της πρέπει να είναι μια συνάρτηση τέτοια ώστε η δεύτερη παράγωγός της να περιέχει και την αρχική συνάρτηση και συντελεστής x^2. Μια συνάρτηση που ικανοποιεί αυτήν την απαίτηση είναι η $\exp(-bx^2)$ Η λύση μπορεί πραγματικά να γραφτεί ως

$$\psi = c\left[\exp\left(-bx^2\right)\right] \tag{97.}$$

όπου b και c είναι σταθερές. Επιπλέον, είναι δυνατό να φανεί ότι αυτή η λύση ικανοποιεί την εξίσωση (96). Η λύση της εξίσωσης με αυστηρά μέσα απαιτεί να επιλυθεί με μια μέθοδο που χρησιμοποιεί μια άπειρη σειρά. Πριν από την χρήση αυτής της τεχνικής σε μια εξίσωση της πολυπλοκότητας της εξίσωσης (96), θα περιγράψουμε τη λύση των διαφορικών εξισώσεων με αυτήν την τεχνική σε πιο απλές περιπτώσεις.

1.8.3 Λύση διαφορικών εξισώσεων με τη χρήση σειρών

Ένας μεγάλος αριθμός προβλημάτων διατυπώνονται σε όρους διαφορικών εξισώσεων που έχουν μεταβλητούς συντελεστές. Η κβαντική επεξεργασία του αρμονικού ταλαντωτή είναι ένα τέτοιο πρόβλημα.

Αν θεωρήσουμε τη διαφορική εξίσωση

$$\frac{dy}{dx} = y \tag{98.}$$

με αρχικές συνθήκες y=1 στο x=0 έχουμε:

$$\frac{dy}{dx} - y = 0 \tag{99.}$$

και η βοηθητικής εξίσωση είναι η

$$m - 1 = 0 \tag{100.}$$

Με χρήση της τεχνικής που είδαμε στην υποενότητα (1.8.1) εύκολα βρίσκουμε τη λύση e^x.

Ας υποθέσουμε ότι η λύση της εξίσωσης (98) μπορεί να αναπαρασταθεί από τη σειρά

$$y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + a_4 x^4 + \cdots \tag{101.}$$

Με παραγώγιση της παραπάνω σχέσης και με χρήση της εξίσωσης (97) βρίσκουμε:

$$\frac{d}{dx}\left(a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + \cdots\right) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 \cdots \quad (102.)$$

Τελικά παίρνουμε:

$$a_0 = a_1 \qquad a_1 = 2a_2 \qquad a_2 = 3a_3 \qquad a_3 = 4a_4$$

$$a_2 = \frac{a_1}{2} = \frac{a_0}{2!} \qquad a_3 = \frac{a_2}{3} = \frac{a_0}{6} = \frac{a_0}{3!} \qquad a_4 = \frac{a_3}{4} = \frac{a_0}{4!}$$

Η εξίσωση (100) μπορεί να γραφεί και ως

$$y = a_0\left(1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \cdots\right) \quad (103.)$$

Από τις αρχικές συνθήκες y=1 στο x=0 βρίσκουμε ότι α_0=1.

Άρα βρίσκουμε:

$$y = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \cdots \quad (104.)$$

Αξίζει να επισημάνουμε ότι έχουμε επαληθεύσει τη γνωστή σειρά:

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \cdots \quad (105.)$$

και η λύση μας αυτή ταυτίζεται με την λύση που βρήκαμε παραπάνω.

1.8.4 Κβαντικός αρμονικός ταλαντωτής ΙΙ

Είδαμε ότι η μηχανική ενέργεια του αρμονικού ταλαντωτή δίνεται από τη σχέση

$$E = T + V.$$

Στη θέση ισορροπίας το ελατήριο δεν παραμορφώνεται, άρα η V=0 και η Τ είναι ένα μέγιστη, με αποτέλεσμα η συνολική ενέργεια να είναι Ε=Τ. Στα άκρα της ταλάντωσης, ο ταλαντωτής έρχεται σε στιγμιαία σε ηρεμία και η κινητική ενέργεια είναι 0 (Τ=0) πριν αλλάξει κατεύθυνση. Επομένως, σε αυτές τις θέσεις η συνολική ενέργεια είναι η δυναμική ενέργεια, (Ε=V). Κοντά στα άκρα της ταλάντωσης όπου η ταχύτητα του ταλαντωτή είναι μικρή δαπανάται το μεγαλύτερο μέρος του χρόνου κίνησή του. Ως αποτέλεσμα, κοντά στη θέση ισορροπίας όπου η ταχύτητα είναι η μεγαλύτερη, η πιθανότητα εύρεσης του ταλαντωτή είναι η μικρότερη. Όπως θα αναπτυχθεί παρακάτω, η πιθανότητα εύρεσης του ταλαντωτή σε οποιοδήποτε σημείο της τροχιάς του είναι αντιστρόφως ανάλογη με την ταχύτητα του σε εκείνο το σημείο.

Η συνολική ενέργεια του ταλαντωτή μπορεί να αναπαρασταθεί ως εξάρτηση από πλάτος Α της ταλάντωσής του από τη σχέση

$$E = \frac{1}{2}kA^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 A^2 \quad . \tag{106.}$$

Η δυναμική του ενέργεια δίνεται από τη σχέση

$$V = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \, . \tag{107.}$$

Από τη γενική μορφή της εξίσωσης Schrödinger έχουμε

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad . \tag{108.}$$

Η Χαμιλτονιανή για τον αρμονικό ταλαντωτή γράφεται

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \tag{109.}$$

Και επομένως η εξίσωση του Schrödinger γίνεται

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)\psi = E\psi \tag{110.}$$

$$\leftrightarrow \qquad \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{m^2\omega^2 x^2}{\hbar^2}\right)\psi = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi \tag{111.}$$

$$\leftrightarrow \qquad \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = -\left(\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{m^2\omega^2 x^2}{\hbar^2}\right)\psi \tag{112.}$$

Επειδή αυτή δεν είναι μια γραμμική διαφορική εξίσωση είναι δυσκολότερο να βρεθεί η λύση της. Αν υποθέσουμε ότι η λύση της έχει τη μορφή

$$\psi = c\left[\exp\left(\frac{-m\omega x^2}{2\hbar}\right)\right] . \tag{113.}$$

όπου b και c είναι σταθερές. Αυτή η λύση μπορεί να επαληθευτεί αντικαθιστώντας το ψ στην εξίσωση (111). Αυτό επιτυγχάνεται παίρνοντας την απαιτούμενη πρώτη και δεύτερη παράγωγο

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = -2bxc\left[\exp\left(-bx^2\right)\right] \tag{114.}$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -2bc\left[\exp\left(-bx^2\right)\right] + 4b^2cx^2\left[\exp\left(-bx^2\right)\right] \tag{115.}$$

Το δεξί μέλος της εξίσωσης (111) γίνεται

$$-\left(\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2\right)\psi = -\frac{2mE}{\hbar^2}c\left[\exp\left(-bx^2\right)\right] + \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2c\left[\exp\left(-bx^2\right)\right] \tag{116.}$$

Πρέπει να σημειωθεί ότι και οι δύο εξισώσεις (114) και (115) περιέχουν όρους του x^2 και όρους που δεν περιέχουν το x, εκτός της εκθετικής συνάρτησης. Ως εκ τούτου, οι όροι που περιέχουν το x^2 μπορεί να θεωρηθούν ως ίσοι και να πάρουμε

$$\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2c\left[\exp\left(-bx^2\right)\right] = 4b^2cx^2\left[\exp\left(-bx^2\right)\right] \tag{117.}$$

απ' όπου οδηγούμαστε στη σχέση

$$4b^2 = \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2} \tag{118.}$$

$$\leftrightarrow \qquad b = \frac{m\omega}{2\hbar} \tag{119.}$$

Εξισώνοντας τους όρους που δεν περιέχουν το x παίρνουμε

$$E = \frac{b\hbar^2}{m} \tag{120.}$$

και αντικαθιστώντας το b από την εξίσωση (118) καταλήγουμε στη σχέση

$$E = \frac{1}{2}\omega\hbar \quad . \tag{121.}$$

Επομένως για $b = m\omega/2\hbar$ και $E = \omega\hbar/2$ η εξίσωση

$$\psi = c\left[\exp\left(-bx^2\right)\right]$$

επαληθεύει την εξίσωση Schrödinger, η οποία, με αντικατάσταση της τιμής που βρήκαμε για το b γίνεται

$$\psi = c\left[\exp\left(\frac{-m\omega x^2}{2\hbar}\right)\right]$$

Στην πραγματικότητα, αυτή είναι η λύση για τον αρμονικό ταλαντωτή στη χαμηλότερη ενεργειακή του κατάσταση. Αν και υποθέσαμε ότι η λύση έχει αυτή τη μορφή, είναι τώρα απαραίτητο για να δείξουμε πώς επιλύεται το πρόβλημα.

Θα εξετάσουμε τώρα η λύση του προβλήματος του αρμονικού ταλαντωτή ξεκινώντας με την κυματική εξίσωση, η οποία μπορεί να γραφτεί ως

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{1}{2}kx^2\right)\psi = 0 \qquad (122.)$$

Αν θέσουμε

$$\alpha = \frac{2mE}{\hbar^2} \qquad (123.)$$

και

$$\beta = \frac{2\pi(mk)^{1/2}}{h} \qquad (124.)$$

η εξίσωση (113) γίνεται

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left(\alpha - \beta^2 x^2\right)\psi = 0 \qquad (125.)$$

Η συνήθης διαδικασία που χρησιμοποιείται σε αυτό το σημείο είναι η αλλαγή μεταβλητής

$$\psi = c\left[\exp\left(\frac{-m\omega x^2}{2\hbar}\right)\right] \tag{126.}$$

Η δεύτερη παράγωγος που σχετίζεται με αυτήν την εξίσωση είναι η

$$\frac{d^2}{dx^2} = \beta\frac{d^2}{dz^2} \tag{127.}$$

Η εξίσωση Schrödinger πλέον γράφεται ως

$$\beta\frac{d^2\psi}{dz^2} + \left(\alpha - \beta^2 x^2\right)\psi = 0 \tag{128.}$$

$$\leftrightarrow \quad \frac{d^2\psi}{dz^2} + \left(\frac{\alpha}{\beta} - \beta x^2\right)\psi = 0 \tag{129.}$$

$$\leftrightarrow \quad \frac{d^2\psi}{dz^2} + \left(\frac{\alpha}{\beta} - z^2\right)\psi = 0 \tag{130.}$$

Εάν η λύση εκφραστεί ως συνάρτηση του z, το αποτέλεσμα γίνεται

$$\psi(z) = u(z)\exp\left(-\frac{z^2}{2}\right) \tag{131.}$$

απ' όπου προκύπτει η πρώτη παράγωγος της

$$\psi' = u'\exp\left(-\frac{z^2}{2}\right) - uz\exp\left(-\frac{z^2}{2}\right) \tag{132.}$$

και η δεύτερη

$$\psi'' = u'' \exp\left(-\frac{z^2}{2}\right) - u'z \exp\left(-\frac{z^2}{2}\right) - u'z \exp\left(-\frac{z^2}{2}\right)$$
$$-u \exp\left(-\frac{z^2}{2}\right) + uz^2 \exp\left(-\frac{z^2}{2}\right) \qquad (133.)$$

ή

$$\psi'' = u'' \exp\left(-\frac{z^2}{2}\right) - 2u'z \exp\left(-\frac{z^2}{2}\right) - u \exp\left(-\frac{z^2}{2}\right) + uz^2 \exp\left(-\frac{z^2}{2}\right)$$

(134.)

Αν συνδυαστούν οι εξισώσεις (130), (133) και (129) προκύπτει η σχέση

$$\frac{d^2u}{dz^2} - 2z\frac{du}{dz} + \left(\frac{\alpha}{\beta} - 1\right)u = 0 \qquad (135.)$$

ή

$$\frac{d^2u}{dz^2} - 2z\frac{du}{dz} + 2nu = 0 \qquad (136.)$$

όπου n = [(α/β)-1]

Η εξίσωση (135) είναι εξίσωση της μορφής Hermite. Πριν εξετάσουμε τη λύση της μέσω μιας σειράς θα παρουσιάζουμε τα επίπεδα ενέργειας του αρμονικού ταλαντωτή. Κάνοντας χρήση της σχέσης

$$\frac{\alpha}{\beta} = 2n + 1 \qquad (137.)$$

και των τύπων (122) και (123) βρίσκουμε

$$\frac{\alpha}{\beta} = \frac{8\pi mE}{2h\sqrt{mk}} = \frac{4\pi E\sqrt{m}}{h\sqrt{k}} \quad . \qquad (138.)$$

Εξισώνοντας τα δεξιά μέλη των εξισώσεων (136) και (137), βρίσκουμε

$$2n+1=\frac{4\pi E\sqrt{m}}{h\sqrt{k}} \tag{139.}$$

Λύνοντας αυτήν την εξίσωση ως προς E βρίσκουμε

$$E=\frac{h}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}}\left(n+\frac{1}{2}\right)=\hbar\sqrt{\frac{k}{m}}\left(n+\frac{1}{2}\right) \tag{140.}$$

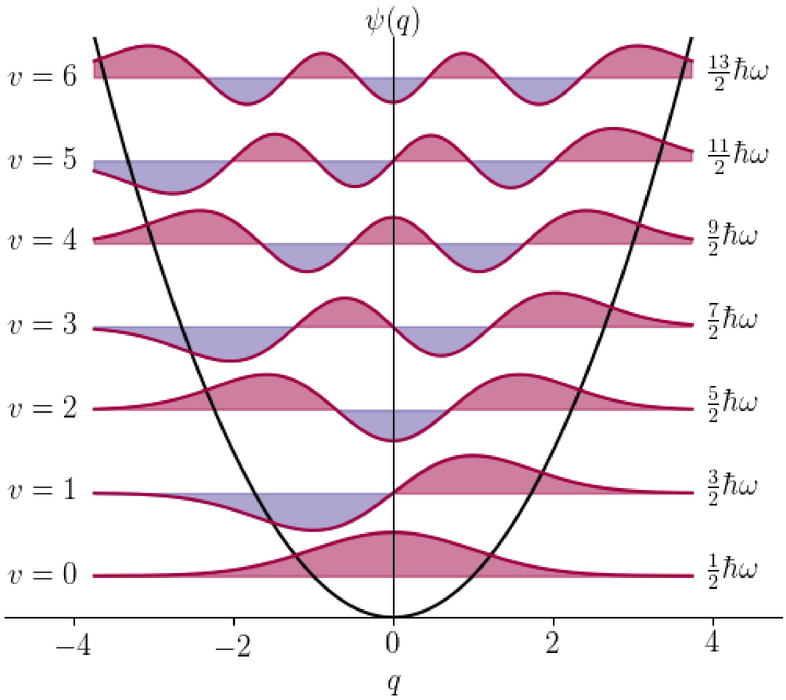
Καθώς η συχνότητα ταλάντωσης δίνεται από τον τύπο $\nu=(1/2\pi)(k/m)^{1/2}$ και γνωρίζουμε ότι $\omega=2\pi\nu$, καταλήγουμε στη σχέση

$$E=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) \tag{141.}$$

Τα επίπεδα ενέργειας ταλάντωσης του αρμονικού ταλαντωτή μπορούν να εκφραστούν με όρους του κβαντικού αριθμού υ από την εξίσωση

$$E=\left(V+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{142.}$$

Η εφαρμογή αυτής της εξίσωσης έχει ως αποτέλεσμα μια σειρά ενεργειακών επιπέδων, όπως φαίνεται στην εικόνα 3. Η απόσταση μεταξύ των ενεργειακών επιπέδων είναι ħω, και υπάρχει μία ενέργεια μηδενικού σημείου στο (1/2) ħω. Το 1900, η μελέτη της ακτινοβολίας του μέλανος σώματος από τον Planck προέβλεψε την ίδια διάταξη των ενεργειακών επιπέδων.



Εικόνα 3: Τα κβαντισμένα επίπεδα ενέργειας του αρμονικού ταλαντωτή – Πηγή: Wiki Science

Σχεδόν 30 χρόνια αργότερα η κβαντική λύση των στο πρόβλημα του αρμονικού ταλαντωτή οδήγησε στο ίδιο αποτέλεσμα.

Η λύση της εξίσωσης του Hermite μπορεί να γραφεί ως

$$\frac{d^2u}{dz^2} - 2z\frac{du}{dz} - 2pz = 0 \tag{143.}$$

όπου p είναι ακέραιος αριθμός. Υποθέσουμε ότι η λύση μπορεί να εκφραστεί από μια σειρά που μπορεί να γραφτεί ως

$$H(z) = a_0 + a_1 z + a_2 z^2 + \cdots = \sum_{p=0}^{\infty} a_p z^p \tag{144.}$$

και οι παράγωγοί της μπορούν να βρεθούν:

$$H'(z) = a_1 + 2a_2 z + 3a_3 z^2 \cdots = \sum_{p=0}^{\infty} p a_p z^{p-1} \qquad (145.)$$

$$H''(z) = 2a_2 + 6a_3 z + 12a_4 z^2 + \cdots = \sum_{p=0}^{\infty} p(p-1) a_p z^{p-2} \qquad (146.)$$

Καθώς η H'' δεν συμπεριλαμβάνει τους όρου α_0 και α_1, η εξίσωση (145) μπορεί να γραφεί ως

$$H''(z) = \sum_{p=0}^{\infty} (p+1)(p+2) a_{p+2} z^p \quad . \qquad (147.)$$

Η εξίσωση του Hermite τώρα γράφεται:

$$\sum_{p=0}^{\infty} \left[(p+1)(p+2) a_{p+2} + (2n - 2p) a_p \right] z^p = 0 \qquad (148.)$$

Για να επαληθεύεται η εξίσωση (147) για κάθε z πρέπει η παράσταση μέσα στις αγκύλες να είναι ίση με μηδέν:

$$\left[(p+1)(p+2) a_{p+2} + (2n - 2p) a_p \right] = 0 \qquad (149.)$$

Αυτή η εξίσωση αν λυθεί ως προς α_{p+2} δίνει

$$a_{p+2} = \frac{-(2n-2p)}{(p+1)(p+2)} a_p \quad . \qquad (150.)$$

Αυτός είναι ο αναδρομικός από τον οποίο μπορούν να προσδιοριστούν οι συντελεστές της απ’ όπου προκύπτουν οι ιδιοκαταστάσεις του αρμονικού ταλαντωτή:

$$
\begin{aligned}
\psi_0 &= N_0 \exp\left(-z^2\right) \\
\psi_1 &= N_1 (2z) \exp\left(-z^2\right) \\
\psi_2 &= N_2 \left(4z^2 - 2\right) \exp\left(-z^2\right) \\
\psi_3 &= N_3 \left(8z^3 - 12z\right) \exp\left(-z^2\right)
\end{aligned}
\qquad (151.)
$$

1.9 Τα αξιώματα της Κβαντικής Μηχανικής

Η κβαντική θεωρία, όπως είναι διατυπωμένη, συνοψίζεται σε πέντε τελικά αξιώματα. Αυτά είναι τα εξής:

Αξίωμα 1ο : Η κατάσταση ενός κβαντομηχανικού συστήματος περιγράφεται πλήρως από κυματοσυνάρτηση Ψ(x,t). Η πιθανότητα για ένα σωματίδιο να βρεθεί σε χρόνο t_0 σε ένα χώρο εύρους dx με κέντρο το x_0 δίνεται από $\Psi^*(x_0,t_0)\ \Psi(x_0,t_0)dx$.

Αξίωμα 2ο : Για κάθε μετρούμενη ιδιότητα/ποσότητα του συστήματος στην κλασική μηχανική, όπως θέση, ορμή και ενέργεια υπάρχει ένας αντίστοιχος τελεστής στην κβαντική μηχανική. Ένα εργαστηριακό πείραμα που μετράει την τιμή κάθε τέτοιας μετρούμενης ιδιότητας, προσομοιώνονται στη θεωρία με την εφαρμογή του αντίστοιχου τελεστή στην κυματοσυνάρτηση του συστήματος.

Αξίωμα 3ο : Για οποιαδήποτε μέτρηση μιας μετρούμενης ιδιότητας που αντιστοιχεί στον τελεστή Â, οι μόνες τιμές που θα μετρηθούν είναι οι ιδιοτιμές του τελεστή.

Αξίωμα 4ο : Αν ένα σύστημα βρίσκεται σε μια κατάσταση που περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση Ψ(x,t), και η τιμή της μετρώμενης ιδιότητας μετράται μια φορά για πολλά ίδια συστήματα, η μέση τιμή (ονομάζεται και αναμενόμενη τιμή) όλων αυτών των μετρήσεων δίνεται από την σχέση:

$$
\langle \alpha \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\ \hat{A}\Psi(x,t)dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\ \Psi(x,t)dx} \qquad (152.)
$$

Αξίωμα 5ο : Η εξέλιξη ενός κβαντομηχανικού συστήματος με το χρόνο καθορίζεται από τη χρονοεξαρτώμενη εξίσωση Schrödinger: $$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V\Psi$$

ΚΕΦ. 2^{ο}

Κβαντική επεξεργασία σήματος

Μεταξύ των επιστημών που σηματοδοτούν την αρχή της νέας χιλιετίας, η επιστήμη της επεξεργασίας των σημάτων και των εικόνων κατατάσσεται σε πολύ υψηλή θέση. Αυτό συμβαίνει επειδή τα σήματα είναι πράγματι καθολικές αποκρίσεις αντικειμένων σε διαταραχές, που κυμαίνονται από γαλαξιακά διαστρικά φαινόμενα έως το κεντρικό νευρικό σύστημα, αλλά και τον γενετικό κώδικα.

Στον τομέα αυτό συνεργάζονται μερικά από τα σημαντικότερα διεπιστημονικά ερευνητικά πεδία σε βασικές και εφαρμοσμένες επιστήμες, γεφυρώνοντας τη μηχανική και την τεχνολογία.

Τα σήματα είναι επίσης άμεσα επιδεκτικά αναρίθμητων πρακτικών εφαρμογών συμπεριλαμβανομένου του ζητήματος της υγείας του ανθρώπου. Χαρακτηριστικά αναφέρουμε μόνο μερικά από τα κυριότερα πεδία όπου τα σήματα παίζουν βασικό ρόλο, όπως ο μαγνητικός συντονισμός μοριακής δέσμης [4], ο πυρηνικός μαγνητικός συντονισμός (NMR) [5]–[6], ο συντονισμός ιόντων κυκλοτρονίων (ICR), η φασματοσκοπία μάζας [7]–[8], η φασματοσκοπία μαγνητικού συντονισμού (MRS) [9]–[10], η μαγνητική τομογραφία (MRI) [11]–[12], η φασματοσκοπική μαγνητική τομογραφία, η απεικόνιση (MRSI) [13]–[14] που ονομάζεται επίσης απεικόνιση χημικής μετατόπισης (CSI), η ηλεκτρονική τομογραφία εκπομπής μονού φωτονίου (SPECT) [15]–[16], κ.λπ.

Η λειτουργία αυτών των σύγχρονων μηχανημάτων κατέστη δυνατή χάρη στην αξιοσημείωτη συνεργασία των μαθηματικών, της φυσικής, της ιατρικής, αλλά και της πληροφορικής.

Όλα τα εμπορικά λογισμικά τα οποία τα συναντούμε ενσωματωμένα σε όργανα μέτρησης, π.χ. φασματόμετρα, βασίζονται, επί του παρόντος, στο γρήγορο μετασχηματισμό Fourier (FFT) [17]–[18], παρά τη διαθεσιμότητα πολλών, πράγματι, μεθόδων επεξεργασίας σήματος και εικόνας υψηλής ανάλυσης.

Ο λόγος για αυτό είναι ότι οι περισσότερες από τις υπάρχουσες παραμετρικές μεθόδους στην επεξεργασία σήματος είναι εγγενώς ασταθείς [19]. Αυτό σημαίνει ότι οι ρίζες των χαρακτηριστικών πολυωνύμων, που προκύπτουν, είναι μη φυσικές, δηλαδή ψευδείς. Αυτό λαμβάνει χώρα σε πολλές παραμετρικές μεθόδους όπως η γραμμική πρόβλεψη (LP) [20]–[21], η προσέγγιση Padè (Padè approximant - PA) [22]–[23], ο αλγόριθμος Lanczos [24]–[25], ο πολλαπλή ταξινόμηση σήματος (MUSIC) [26], η εκτίμηση των παραμέτρων σήματος μέσω της τεχνικής rotation invariance (ESPRIT) [27], ο μετασχηματισμός Padè–Laplace [28], η διαγωνοποίηση φίλτρου (FD) [29]–[30], η διαγωνιοποίηση του αποδεκατισμένου σήματος (DSD) [31]–[32], ο γρήγορος μετασχηματισμός Padè (FPT) [33]–[10], κ.λπ.

2.1 Συναρτήσεις αυτοσυσχέτισης

Αρχικά είναι απαραίτητο να μιλήσουμε για τις συναρτήσεις αυτοσυσχέτισης, οι οποίες εισαγωγικά κατασκευάζονται, με πειραματικό ή και με θεωρητικό τρόπο, προκειμένου να αποκτήσουν μαθηματική έκφραση τα προσλαμβανόμενα σήματα.

Οι συναρτήσεις αυτοσυσχέτισης (Auto-correlation functions-ACF) ορίζουν τον τρόπο που τα σημεία δεδομένων σε μια χρονική σειρά σχετίζονται, κατά μέσο όρο, με τα προηγούμενα σημεία δεδομένων (Box, Jenkins, & Reinsel, 1994). Με άλλα λόγια, μετρούν την ομοιότητα του σήματος σε διαφορετικούς χρόνους καθυστέρησης.

Οι συναρτήσεις αυτοσυσχέτισης C(t) είναι ανεξάρτητες από την προέλευση από την οποία δημιουργούνται και, επομένως, μπορούν να κατασκευαστούν θεωρητικά ή να μετρηθούν πειραματικά όπως π.χ. τα σήματα χρόνου c(t). Ισχύει ότι C(t) = c(t).

<u>Οι συναρτήσεις αυτοσυσχέτισης C(t) ή τα χρονικά σήματα c(t) αντιπροσωπεύουν το στιγμιαίο πλάτος πιθανότητας εμφάνισης του αντίστοιχου, εξαρτώμενου από το χρόνο διανύσματος κατάστασης |φ(t)> του εξεταζόμενου συστήματος.</u>

Αυτό είναι σημαντικό για δύο λόγους, καθώς μπορούν να χρησιμοποιηθούν (1) πειραματικά ακατέργαστα σήματα C(t), άμεσα, χωρίς απαραίτητα να βασιζόμαστε στη θεωρία για να συμπεράνουμε με υπολογισμούς τα βασικά παρατηρήσιμα μεγέθη και (2) μετρημένα σήματα χρόνου c(t) που είναι αναγνωρίσιμα ως μετρήσεις ανά κανάλι, τα οποία μπορούν άμεσα και δυναμικά να συνυφανθούν με τη θεωρία σε ένα βαθύτερο θεμελιώδες επίπεδο για την απόδοση πολυτιμότερων φασματικών πληροφοριών.

Πρέπει να τονιστεί ότι η έννοια της αυτοσυσχέτισης πρωτοεμφανίστηκε ως υπολογιστικό εργαλείο, αλλά αμέσως μετά ξεπέρασε τον αρχικό της σκοπό. Αυτό συνέβη επειδή οι συναρτήσεις αυτοσυσχέτισης αντιπροσωπεύουν μια εναλλακτική διατύπωση της κβαντικής μηχανικής.

Πολλά από τα κύρια παρατηρήσιμα στοιχεία, π.χ. πλήρη ενεργειακά φάσματα, τοπική πυκνότητα καταστάσεων, ποσοτικές σταθερές ρυθμού εξέλιξης συστήματος και άλλα σχετικά μεγέθη, εκφράζονται μέσω συναρτήσεων αυτοσυσχέτισης ή κατάλληλων μετασχηματισμών τους.

Άλλα σημαντικά παρατηρήσιμα στοιχεία θα μπορούσαν να δοθούν πλήρως από άποψη ορισμένων κατάλληλα, σχετικά μικρών μερών του σήματος που θα μπορούσαν να ξεχωρίσουν και να αναλυθούν χωριστά. Προκειμένου να δημιουργηθούν θεωρητικά οι συναρτήσεις αυτοσυσχέτισης C(t), όλες οι παραμετρικές μέθοδοι απαιτούν τις παραμέτρους μεγίστων $\{\omega_k, d_k\}$, οι οποίες υπολογίζονται ως ζεύγη μιγαδικών αριθμών. Αυτές οι παράμετροι είναι οι θεμελιώδεις συχνότητες $\{\omega_k\}$ και τα σχετικά πλάτη $\{d_k\}$ που αποτελούν τις φυσικές αρμονικές των οποίων ο γραμμικός συνδυασμός K όρων αντιπροσωπεύει το δομικό στοιχείο κάθε μεμονωμένο σημείου σήματος χρόνου c_n από το σύνολο $\{c_n\}$. Εδώ, τα στοιχεία μπορούμε να γνωρίζουμε είναι η θέση, το πλάτος και το ύψος της k κορυφής/συντονισμού $\{\mathrm{Re}(\omega_k), \mathrm{Im}(\omega_k), |d_k|\}$.

Η φυσική κάθε δεδομένου συστήματος εδράζεται στη μαθηματική έννοια της συνάρτησης Green $(\zeta|\hat{\mathrm{G}}(\omega)|\xi)$, όπου ο $\hat{\mathrm{G}}(\omega)$ είναι ο τελεστής Green.

$$\hat{\mathrm{G}}(\omega) = \frac{1}{(\omega + i\eta)\hat{1} - \hat{\Omega}}. \tag{153.}$$

όπου $\hat{\Omega} \in \mathcal{H}$.

Στην κβαντομηχανική, ο τελεστής $\hat{\Omega}$ είναι η τυπική Χαμιλτονιανή. Γενικά οι ιδιοτιμές $\{\omega_k\}_{k=1}^{K}$ είναι μιγαδικοί αριθμοί. Ο συνολικός αριθμός K των συχνοτήτων $\{\omega_k\}$ είναι οποιοσδήποτε πεπερασμένος θετικός ακέραιος ή το άπειρο. Η FPT καθορίζει ακριβώς αυτόν τον αριθμό από τις συνθήκες μοναδικότητας του πολυωνυμικού πηλίκου Padè για την συνάρτηση Green, η οποία είναι μια δυναμοσειρά με τα δεδομένα χρονικού σήματος.

Σε ορισμένες μεθόδους η Χαμιλτονιανή κατασκευάζεται με την εισαγωγή ενός καθαρά φανταστικού δυναμικού iW σύμφωνα με την αντικατάσταση $\hat{\Omega} \longrightarrow \hat{\Omega} + i\mathrm{W}\hat{1}$. Στην περιοχή αλληλεπίδρασης, η τιμή του W επιλέγεται να είναι αμελητέα μικρή και λαμβάνεται ως θετική στην ασυμπτωτική περιοχή σκέδασης. Το καθαρό αποτέλεσμα αυτών των λεγόμενων απορροφητικών οριακών συνθηκών - absorbing boundary conditions (ABC) [34]–[35] - είναι η αφαίρεση, δηλαδή η απορρόφηση του εξερχόμενου κυματοπακέτου που αντιστοιχεί σε καταστάσεις άμεσης σκέδασης που βρίσκονται στον ασυμπτωτικό τομέα. Το δυναμικό iW είναι κατά τα άλλα τεχνητό και μάλλον αυθαίρετο. Αυτό που έχει σημασία ότι το iW δεν αλλάζει καθόλου τη φυσική του προβλήματος. Η εισαγωγή αυτής της σύνθετης Χαμιλτονιανής είναι απαραίτητη για τη διόρθωση συντονισμών που είναι εγγενώς διαφορετικοί από τους γνήσιους των (φυσικών) δεσμευμένων καταστάσεων.

Τα πραγματικά ιδιοδιανύσματα των δεσμευμένων κατάστασεων με δυνατότητα τετραγωνικής ολοκλήρωσης σχετίζονται με διακριτές αρνητικές ιδιοενέργειες και Ερμιτιανές Χαμιλτονιανές. Οι καταστάσεις συντονισμού είναι επίσης τετραγωνικά ολοκληρώσιμες, αλλά συνδέονται με μιγαδικές ενέργειες με θετικά πραγματικά μέρη που ανήκουν σε ένα συνεχές φάσμα. Συνεχείς καταστάσεις Ερμιτιανών Χαμιλτονιανών δεν είναι κανονικοποιήσιμες και, ως εκ τούτου, δεν αντιπροσωπεύουν φυσικές καταστάσεις, ώστε να μην μπορούν να περιγράψουν σωματίδια. Η έννοια του ABC έρχεται να σώσει την κατάσταση μέσω της εισαγωγής σύνθετων Χαμιλτονιανών με κανονικοποιήσιμες κυματοσυναρτήσεις σκέδασης που αντιπροσωπεύουν φυσικές καταστάσεις. Το κρίσιμο πρακτικό πλεονέκτημα αυτής της μεθόδου, που καθιστά τον τελεστή μιγαδικό είναι ότι το φάσμα του δεν χρειάζεται να περιλαμβάνει συνεχείς καταστάσεις που είναι δύσκολες σε υπολογισμούς.

Μια μέθοδος που θα μπορούσε να παρέχει μια επαρκή φασματική αναπαράσταση του τελεστή Green θα ήταν μία από τις βασικές εισόδους με ανεκτίμητη πρακτική εφαρμογή στη θεωρία της κβαντομηχανικής για τη σκέδαση και τη φασματοσκοπία. Εάν ο τελεστής $\hat{\Omega}$ είναι διαθέσιμος τότε όλα τα παρατηρήσιμα μεγέθη θα μπορούσαν να εξαχθούν από τη γενική συνάρτηση Green.

$$\mathcal{G}_{if}(\omega) = (\Phi_{0f}|\hat{\mathrm{G}}(\omega)|\Phi_{0i}) \tag{154.}$$

Ισχύει ότι

$$\mathcal{G}(\omega) \equiv (\Phi_0|\hat{\mathrm{G}}(\omega)|\Phi_0) \tag{155.}$$

όπου $|\Phi_0)$ είναι η αρχική κατάσταση του συστήματος.

Στις μεθόδους μελέτης δέσμιων καταστάσεων, το πλήρες σύνολο ιδιοκαταστάσεων $\{|\Upsilon_k)\}$ του τελεστή Schrödinger $\hat{\Omega}$ καθίσταται διαθέσιμο με τη λήψη του ζεύγους των λύσεων $\{\omega_k, |\Upsilon_k)\}$ της ανεξάρτητης του χρόνου εξίσωσης ιδιοτιμών

$\hat{\Omega}\ |\Upsilon_k) = \omega_k\ |\Upsilon_k)$ ή λύνοντας μια γενικότερη εξίσωση ιδιοτιμών $f(\hat{\Omega})|\Upsilon k) = f(\omega k)|\Upsilon k)$

$$\hat{\Omega}|\Upsilon_k) = \omega_k|\Upsilon_k) \qquad f(\hat{\Omega})|\Upsilon_k) = f(\omega_k)|\Upsilon_k) \qquad (156.)$$

όπου $k < K$.

Κύριο αξίωμα της κβαντικής μηχανικής είναι ότι το σύνολο των πληροφοριών κάθε συστήματος περιέχεται στις ιδιοσυναρτήσεις συναρτήσεις $\{|\Upsilon_k)\}$, το σύνολο των οποίων διέπεται από την σχέση πληρότητας

$$\sum_{k=1}^{K} \hat{\pi}_k = \hat{1} \qquad \hat{\pi}_k = |\Upsilon_k)(\Upsilon_k| \qquad (\Upsilon_{k'}|\Upsilon_k) = c_0\delta_{k,k'} \qquad (157.)$$

Αξίζει να επισημάνουμε στη σχέση (157) χρησιμοποιείται η τοπική πληρότητα περιορίζοντας την άθροιση σε k μόνο όρους. Το άθροισμα πάνω από το k στην εξίσωση (157) θα πρέπει να περιλαμβάνει ολοκλήρωση πάνω στο συνεχές τμήμα του φάσματος του $\hat{\Omega}$. Αυτό προς το παρόν παραλείπεται, αφού οι συντονισμοί λαμβάνονται υπόψη μέσω του φάσματος του μη Ερμιτιανού δυναμικού τελεστή $\hat{\Omega}$. Αν εισάγουμε στην παράσταση (156) τον τελεστή μονάδας $\hat{1}$ ως $\hat{\mathrm{G}}(\omega) = \hat{\mathrm{G}}(\omega)\hat{1}$ οδηγούμαστε στην ακόλουθη φασματική αναπαράσταση του τελεστή Green:

$$\hat{\mathrm{G}}(\omega) = \sum_{k=1}^{K} \frac{\hat{\pi}_k}{\omega - \omega_k} \qquad \mathcal{G}(\omega) = \sum_{k=1}^{K} \frac{d_k}{\omega - \omega_k}. \qquad (158.)$$

Εδώ, d_k είναι τα σύνθετα πλάτη που που σχετίζονται με τις ιδιοσυχνότητες $\{\omega_k\}$ που είναι οι πόλοι της συνάρτησης Green.

$$d_k = (\Phi_0|\Upsilon_k)^2 \qquad (159.)$$

Στη συνέχεια ο $\hat{\Omega}$ προσδιορίζεται από τις ακόλουθες σχέσεις:

$$\hat{\Omega} = \sum_{k=1}^{K} \omega_k \hat{\pi}_k \qquad f(\hat{\Omega}) = \sum_{k=1}^{K} f(\omega_k)\hat{\pi}_k \tag{160.}$$

όπου $f(\hat{\Omega})$ είναι οποιαδήποτε αναλυτική συνάρτηση του $\hat{\Omega}$.

Στην κβαντική ανάλυση σήματος, για την χρόνο-εξαρτημένη εξίσωση Schrödinger χρησιμοποιούμε τον συμβολισμό:

$$i\frac{\partial}{\partial t}|\Phi(t)) = \hat{\Omega}|\Phi(t)). \tag{161.}$$

Οι τελεστές είναι ανεξάρτητοι από το χρόνο, ενώ οι κυματοσυναρτήσεις εξαρτώνται από αυτόν. Οι καταστάσεις Schrödinger $|\Upsilon)$ και $|\Phi)$ συνδέονται μεταξύ τους από το ολοκλήρωμα Fourier [59, 60]:

$$|\Upsilon(u)) = \frac{1}{2\pi}\int_0^\infty \mathrm{d}t\, \mathrm{e}^{i\omega t}\,|\Phi(t)) \qquad |\Upsilon_k) = \frac{1}{2\pi}\int_0^\infty \mathrm{d}t\, \mathrm{e}^{i\omega_k t}\,|\Phi(t)) \tag{162.}$$

όπου $u = \exp(-i\omega\tau)$ και $u_k = \exp(-i\omega_k\tau)$

Γνωρίζουμε ότι $|\Phi(t)) = \hat{\mathrm{U}}(t)|\Phi_0)$ και $|\Phi_0) \equiv |\Phi(0))$, όπου ο $\hat{\mathrm{U}}(t)$ είναι ο γραμμικός τελεστής δυναμικής εξέλιξης του συστήματος:

$$\hat{\mathrm{U}}(t) = \mathrm{e}^{-i\hat{\Omega}t}. \tag{163.}$$

Η $|\Phi_0)$ αντιπροσωπεύει μια αρχικά μη ορθοκανονική ιδιοκατάσταση του υπό μελέτη φυσικού συστήματος την χρονική στιγμή t = 0

$$\|\Phi_0\|^2 \equiv (\Phi_0|\Phi_0) = C_0 = c_0 \neq 0 \qquad (164.)$$

Το υπό μελέτη σύστημα είναι κατάλληλα προετοιμασμένο ώστε η αρχική του ιδιοκατάσταση $|\Phi_0)$ να μας είναι γνωστή. Επομένως, αν ο $\hat{\Omega}$ και η $|\Phi_0)$ είναι αρχικά γνωστά, τότε μπορεί να προσδιοριστεί η $|\Phi(t))$ του συστήματος για οποιαδήποτε άλλη χρονική στιγμή $t > 0$. Προκύπτει ότι

$$\hat{U}(t) = \sum_{k=1}^{K} e^{-i\omega_k t}\hat{\pi}_k \qquad \mathrm{Im}(\omega_k) < 0. \qquad (165.)$$

$$C(t) = (\Phi_0|\Phi(t)) = (\Phi_0|\hat{U}(t)|\Phi_0) \qquad (166.)$$

Η συνάρτηση αυτοσυσχέτισης C(t) μετρά τον βαθμό συσχετισμών μεταξύ των καταστάσεων $|\Phi(t = 0))$ και $|\Phi(t \neq 0))$ υπό την επίδραση του δυναμικού τελεστή $\hat{\Omega}$. Είναι η παρουσία του τελεστή $\hat{G}(\omega)$ που κάνει τις $|\Phi(t))$ διαφέρουν από την $|\Phi_0))$.

Η αρχική κατάσταση $|\Phi_0)$ είναι ένα διάνυσμα μη μηδενικής κατάστασης $|\Phi_0) \neq |0)$, όπως συνηθίζεται να λέγεται στην κβαντομηχανική. Διάδοση του αρχικού «μηδενικού διάνυσματος» $|\Phi_0)=|0)$ από t=0 και μετά θα οδηγούσε αναπόφευκτα στο $|\Phi(t))=|0)$ για οποιαδήποτε μεταγενέστερη στιγμή $t \neq 0$, οπότε αυτό το ενδεχόμενο αποκλείεται ως μη ενδιαφέρον.

Σε μεγάλους χρόνους t, η συνάρτηση αυτοσυσχέτισης C(t) θα είναι αριθμητικά αναξιόπιστη λόγω ασταθειών που εμφανίζονται. Στην πραγματικότητα, εάν δεν υπάρξουν αστάθειες στη C(t) κατά την παραγωγή ενός φάσματος, αυτό θα μπορούσε μόνο να σημαίνει ότι στην ασυμπτωτική περιοχή $t\rightarrow\pm\infty$ δεν έχει επιτευχθεί καλή προσέγγιση, με συνέπεια ορισμένα από τα μακροβιότερα από τα «παροδικά σήματα» (transients) να μην έχουν βρει αρκετό χρόνο για να αποσυντεθούν [36]. Ο όρος «παροδικό σήμα» συνήθως αναφέρεται σε ένα φαινόμενο που αναπτύσσεται στο χρόνο και το οποίο εξαφανίζεται μετά από μια αρκετά μεγάλη χρονική καθυστέρηση ($t \rightarrow \infty$) [37]. Τέτοια είναι οι φάκελοι των, π.χ. πειραματικά κωδικοποιημένων σημάτων χρόνου που προκύπτουν ως γραμμικοί συνδυασμοί αποσβεννυμένων εκθετικών $\{\exp(-i\omega_k t)\}$ με σταθερά πλάτη $\{d_k\}$. Κατ' αυτόν τον τρόπο όλες οι σύνθετες συχνότητες $\{\omega_k\}$ πρέπει να έχουν το αρνητικό το φανταστικό μέρος τους $\mathrm{Im}(\omega_k) < 0$.

Το ολοκλήρωμα Fourier $F(\omega)$ της συνάρτησης αυτοσυσχέτισης $C(t)$ δίνεται από τη σχέση

$$F(\omega) = \frac{1}{T} \int_0^T \mathrm{d}t \, C(t) \, \mathrm{e}^{i\omega t}. \tag{167.}$$

και αυτή είναι, στην πράξη, η συνάρτηση Green του υπό μελέτη συστήματος.

Αυτό το ολοκλήρωμα μπορεί να ψηφιοποιηθεί με τις ακόλουθες εκφράσεις:

$$F_k = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} C_n \, \mathrm{e}^{in\tilde{\omega}_k \tau} = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} C_n \mathrm{e}^{2i\pi nk/N} \tag{168.}$$

όπου $$\tilde{\omega}_k \equiv \frac{2\pi k}{T} = \frac{2\pi k}{N\tau} \quad \text{με} \quad 0 \leq k \leq N-1 \tag{169.}$$

Τα στοιχεία C_n μπορούν να υπολογιστούν από τον αντίστροφο μετασχηματισμό Fourier:

$$C_n = \sum_{k=0}^{N-1} F_k \mathrm{e}^{-in\tilde{\omega}_k \tau} = \sum_{k=0}^{N-1} F_k \mathrm{e}^{-2i\pi nk/N} \qquad (0 \le n \le N-1)$$

(170.)

όπου έχει συμπεριληφθεί η ιδιότητα της ορθογωνιότητας της βάσης:

$$\frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \mathrm{e}^{2i\pi (n-m)k/N} = \delta_{n,m} \qquad (171.)$$

Εξ' αιτίας της εκθετικής φύσης του τελεστή εξέλιξης $\hat{\mathrm{U}}(\tau)$ η κατασκευή του αντίστοιχου ψηφιακού του $\hat{\mathrm{U}}(t) = \hat{\mathrm{U}}(t_n) = \hat{\mathrm{U}}(n\tau)$ σε χρόνο $t = t_n \equiv n\tau$ γίνεται απλά υψώνοντας τον στη νιοστή δύναμη:

$$\hat{\mathrm{U}}(n\tau) = \hat{\mathrm{U}}^n(\tau) \qquad \hat{\mathrm{U}}(\tau) = \mathrm{e}^{-i\hat{\Omega}\tau} \Longrightarrow |\Phi_n) = \hat{\mathrm{U}}^n(\tau)|\Phi_0). \quad (172.)$$

Το σύνολο $\{|\Phi_n)\}$ αναπαριστά την βάση Schrödinger. Ως ψηφιακή μορφή της εξίσωσης (163) μπορεί να θεωρηθεί η

$$\hat{\mathrm{U}}^n(\tau) = \sum_{k=1}^{K} \mathrm{e}^{-in\omega_k \tau} \hat{\pi}_k \qquad \mathrm{Im}(\omega_k) < 0. \qquad (173.)$$

Τότε οι εξισώσεις ιδιοτιμών παίρνουν τη μορφή

$$\hat{\mathrm{U}}(\tau)|\Upsilon_k) = u_k|\Upsilon_k) \qquad u_k = \mathrm{e}^{-i\omega_k \tau} \qquad f(\hat{\mathrm{U}})|\Upsilon_k) = f(u_k)|\Upsilon_k).$$

(174.)

Και τελικά παίρνουμε την ψηφιακή συνάρτηση αυτοσυσχέτισης:

$$C_n = (\Phi_0|\Phi_n) = (\Phi_0|\hat{\mathrm{U}}^n(\tau)|\Phi_0) \qquad C_n = \sum_{k=1}^{K} d_k u_k^n. \qquad (175.)$$

Ενα μεγάλο μέρος των πειραματικά κωδικοποιημένων σημάτων χρόνου c(t), σε πολλά πεδία, αποδίδει φάσματα που προσεγγίζονται καλά με αθροίσματα απόσβεσης εκθετικών συναρτήσεων

$$c(t) = \sum_{k=1}^{K} d_k \mathrm{e}^{-i\omega_k t}. \tag{176.}$$

Με άλλα λόγια, τέτοια σήματα είναι ακριβώς όπως οι συναρτήσεις αυτοσυσχέτισης. Αυτό σημαίνει ότι στον άξονα του χρόνου, κάθε σημείο σήματος $c_n \equiv c(n\tau)$ της πειραματικά καταγεγραμμένης ακολουθίας $\{c_n\}$ δημιουργείται από έναν γραμμικό συνδυασμό των διακριτών εξασθενημένων εκθετικών

$$c_n = \sum_{k=1}^{K} d_k \mathrm{e}^{-in\omega_k \tau} = \sum_{k=1}^{K} d_k u_k^n \tag{177.}$$

με την προϋπόθεση ότι τα πλάτη $\{d_k\}$ προσδιορίζονται μέσω της σχέσης $d_k = (\Phi_0|\Upsilon_k)^2$. Ως εκ τούτου, τέτοια πειραματικά μετρημένα τα σήματα είναι μαθηματικά ισοδύναμα με τις συναρτήσεις αυτοσυσχέτισης τόσο στις ψηφιακές όσο και στις αναλογικές αναπαραστάσεις [29]–[38]

$$c_n = C_n \qquad c(t) = C(t). \tag{178.}$$

2.2 Διαμόρφωση συχνότητας (Dimensionality reduction in the frequency domain)

Το πλεονέκτημα της κβαντομηχανικής επεξεργασίας σήματος είναι άμεση εξάρτηση του εξεταζόμενου συστήματος, του οποίου περιγράφεται η χρονική εξέλιξη, από μια διαφορική εξίσωση πρώτης τάξης, η οποία είναι η εξίσωση Schrödinger για το διάνυσμα συνεχούς ή αναλογικής κατάστασης |Φ(t)>. Η γραμμικότητα της εξίσωση Schrödinger επιβάλει ότι οποιοδήποτε άθροισμα των καταστάσεων {|Φ (t) >}, με σταθερούς συντελεστές, την ικανοποιεί επίσης. Εκεί οφείλεται και η ευελιξία αυτής της μεθόδου, η οποία λειτουργεί με διανύσματα καταστάσεων που επιτρέπουν αλλαγές βάση, έτσι ώστε να μπορεί να αλλάξει η βάση χωρίς να αλλάζουν τις ζητούμενες λύσεις.

Εάν το μήκος του σήματος N δεν είναι πολύ μεγάλο, π.χ. της τάξης του $N_{cut} \leq 300$, τότε η βάση Schrödinger {|Φ n >} πρέπει να είναι αρκετά μεγάλη.

Ωστόσο, για πλέον μεγάλες τιμές του N, μπορεί κανείς να καταφύγει στην τεχνική της παραθυροποίησης (windowing) [29]–[30] –[38].

2.3 Διαμόρφωση χρόνου (Dimensionality reduction in the time domain)

Μία μέθοδος παραθυροποίησης, που είναι γνωστή ως αποδεκατισμός περιορισμένης ζώνης (band-limited decimation [31, 38]) εκτελείται απευθείας στο αρχικό εκτενές σήμα $\{C_n\}$, μήκους N και οδηγεί σε ένα σύντομο σήμα στο οποίο θα μπορούσε να εφαρμοστεί οποιαδήποτε επιθυμητή μέθοδος για μετέπειτα επεξεργασία. Η περιορισμένη ζώνη αποδεκατισμού μπορεί να εξαχθεί με την ακόλουθη διαδικασία.

Αρχικά μας δίνεται ένα διακριτό σήμα χρόνου $\{C_n\}$, $(0 \le n \le N-1)$, μήκους N, το οποίο και ψηφιοποιούμε με χρήση δειγματοληψίας ίσης απόστασης και ρυθμό τ. Για να αρχικοποιήσουμε την παραθυροποίηση στον τομέα χρόνου, το σήμα $\{C_n\}$ υποβάλλεται πρώτα στο γρήγορο μετασχηματισμό Fourier (FFT). Αυτό αποδίδει ένα φάσμα χαμηλής ανάλυσης, καθώς το N είναι γενικά ανεπαρκώς μεγάλο για το μετασχηματισμό, ώστε να εξαχθούν οι κομβικές συχνότητες $\{\omega_k\}$ από τις $\{C_n\}$. Ο FFT ορίζεται μόνο στα σημεία του πλέγματος Fourier $\tilde{\omega}_k = 2\pi k/(N\tau)$. Παίρνουμε αυτά τα τελευταία σημεία και υποδιαιρούμε ολόκληρο το φάσμα Fourier σε M διαστήματα (παράθυρα). Βεβαιωνόμαστε ότι κάθε ένα από αυτά τα παράθυρα περιέχει το πολύ π.χ. 300 σημεία πλέγματος Fourier και βρίσκουμε το φάσμα Fourier $\{F_k^{\mathrm{bld}}\}$.

Για σκοπούς σάρωσης και ελέγχου της εγκυρότητας της διαδικασίας, σε ολόκληρο το εύρος ζώνης, υπολογίζουμε τα φάσματα Fourier ξεχωριστά σε κάθε ένα από τα παράθυρα M, εφαρμόζοντας το FFT στα λεγόμενα «bandlimited decimated′ (bld)» σήματα $\{c_n^{\mathrm{bld}}\}(0 \le n \le N_d - 1)$ ενός μικρότερου μήκους $N_d = [N/M]$, όπου [x] είναι το ακέραιο μέρος του πραγματικού αριθμού x. Με κατασκευή οποιουδήποτε παράθυρου $[\omega_{min}, \omega_{max}]$, τα φάσματα $\{F_k^{\mathrm{bld}}\}$ που προκύπτουν από την FFT είναι πανομοιότυπα με τα αντίστοιχα φάσματα Fourier $\{F_k\}$ που λαμβάνονται από το αρχικό σήμα $\{c_n\}$. Αυτό αποτελεί το κρίσιμο χαρακτηριστικό του band-limited αποδεκατισμού σήματος, καθώς διατηρείται πλήρως το περιεχόμενο σε καθένα από αυτά τα M παράθυρα [31, 38].

2.4 Προσέγγιση Padè (Padè approximant - PA)

Η PA είναι ένα εκτενώς μελετημένο θέμα του τομέα των επιστημονικών υπολογισμών [22]–[23]. Αυτή η μέθοδος ονομάζεται z-transform στη βιβλιογραφία για την επεξεργασία σήματος. Το αρκτικόλεξο ARMA χρησιμοποιείται για την PA στη μαθηματική στατιστική και στη θεωρία πιθανοτήτων που ασχολείται με στοχαστικά φαινόμενα. Φυσικά, το PA/ARMA ισχύει τόσο για τα ντετερμινιστικά, όσο και για τα στοχαστικά σήματα.

Αν και υπάρχει ένας σημαντικός αριθμός πιο ισχυρών μη γραμμικών μετασχηματισμών [39, 40, 41, 42], ωστόσο, η PA εξακολουθεί να είναι η πιο συχνά χρησιμοποιούμενη ορθολογική προσέγγιση, όχι μόνο στη φυσική, αλλά και σε άλλες βασικές και εφαρμοσμένες επιστήμες [43]–[44].

Ο κύριος λόγος είναι ότι η PA συχνά ξεπερνά τους ανταγωνιστές της σε στιβαρότητα και απλότητα. Η κυρίαρχη λογική για μια σταθερή καθιέρωση της PA στη φυσική είναι αυτή της μαθηματικής ισοδυναμίας της με μια σειρά από τις κορυφαίες μεθόδους στην κβαντική μηχανική, π.χ. επεκτάσεις διαταραχών Born, επεκτάσεις πεπερασμένης κατάταξης με διαχωρίσιμες δυναμικές επεκτάσεις, οι αρχές μεταβλητότητας Schwinger, συναρτήσεις Green, οι ορίζουσες Fredholm, κ.λπ. [45]–[46].

Το θεώρημα Weierstrass [47] δηλώνει ότι, καταρχήν, κάθε συνεχής συνάρτηση σε έναν δεδομένο τομέα μπορεί να προσεγγιστεί με οποιαδήποτε προδιαγεγραμμένη ακρίβεια από ένα πολυώνυμο. Ωστόσο, στην πράξη πολλές συναρτήσεις διαθέτουν μοναδικότητες σε ορισμένες περιοχές εντός του πεδίου ορισμού τους, έτσι ώστε να απαιτούνται και άλλες προσεγγίσεις εκτός από αυτές των πολυωνύμων.

Μία από τις δυνατότητες είναι να χρησιμοποιηθεί το πολυώνυμο:

$$f(z) \approx \frac{A_L(z)}{B_K(z)} \tag{179.}$$

όπου $A_L(z)$ και $B_K(z)$ είναι συνήθη πολυώνυμα L και K βαθμού αντίστοιχα

$$A_L(z) = \sum_{\ell=0}^{L} a_\ell z^\ell \qquad B_K(z) = \sum_{k=0}^{K} b_k z^k \tag{180.}$$

Γενικά, η μεταβλητή z και οι συντελεστές $\{a_\ell, b_k\}$ έχουν μιγαδικές τιμές.

Το πολυώνυμο $A_L(z)/B_K(z)$ της εξίσωσης (179) σχηματίζει ένα δισδιάστατο Πίνακας L × K, που ονομάζεται πίνακας Padè (Padè table), ο οποίος αντιπροσωπεύει ένα σύνολο συναρτήσεων διαφόρων βαθμών L και K. Η αρχική ιδέα του πίνακα Padè δεν οφείλεται στον ίδιο τον Padè, αλλά μάλλον στον Frobenius [48] που το 1879 ανέπτυξε τον βασικό αλγοριθμικό. Ωστόσο, πριν από τον Frobenius, πηλίκα δύο πολυωνύμων μελετήθηκαν σε βάθος από τον Prony, το 1797, από τον Cauchy, το 1821, και στη συνέχεια από τον Jacobi, το 1845 [22]. Πιο συγκεκριμένα, ο Frobenius [48] καθιέρωσε τη θεωρία από αυτό που αργότερα ήταν γνωστό ως το κανονικός πίνακας Padè (normal Padè table), ο οποίος συμπεριλαμβάνει όλα διακριτά στοιχεία.

Στο σημείο αυτό εισάγεται ο συμβολισμός $[L/K]_f(z)$, προκειμένου να οριστεί η PA μιας συνάρτησης f(z):

$$[L/K]_f(z) \equiv \frac{A_L(z)}{B_K(z)} \qquad K \geq L \tag{181.}$$

Αυτός ο ορισμός της PA ισχύει υπό την προϋπόθεση ότι ικανοποιούνται οι ακόλουθες τρεις προϋποθέσεις: (α) τα πολυώνυμα αριθμητή και παρονομαστή $A_L(z)$ και B_K (z) δεν έχουν κοινούς διαιρέτες εκτός από έναν πιθανό σταθερό όρο, (β) B_K (z) ≠0 και (γ) η ανάπτυξη της f (z) σε σειρά Maclaurin

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^n \tag{182.}$$

και η ανάπτυξη της $[L/K]_f(z)$ σε δυνάμεις του z συμφωνούν μία προς μία μεταξύ τους. Οι συντελεστές $\{C_n\}$ στην (182) είναι γνωστοί πραγματικοί ή μιγαδικοί αριθμοί, αλλά δεν χρειάζεται να ταυτιστούν με τις συναρτήσεις αυτοσυσχέτισης.

Η συνθήκη (γ) μπορεί να δηλωθεί ισοδύναμα ως

$$f(z) - \frac{A_L(z)}{B_K(z)} = O(z^{L+K+1}) \tag{183.}$$

Εδώ, η εμφάνιση του αλγεβρικού συμβόλου O δείχνει ότι το δεξιό μέλος της εξίσωσης (183) αντιπροσωπεύει μια σειρά δυνάμεων του z που περιέχει τους όρους $\{z^{L+K+m}\}$ για m ≥ 1. Με άλλα λόγια, εξ ορισμού, η PA για τη συνάρτηση f (z) της εξίσωσης (183) δίνεται από την εξίσωση (181), που προϋποθέτει ότι η ισότητα

$$f(z) = \frac{A_L(z)}{B_K(z)} \tag{184.}$$

ισχύει για όλες τις τάξεις z^{L+K} , δηλαδή ότι κάθε συντελεστής των υψηλότερων όρων z^{L+K+m} με m ≥ 1 λαμβάνεται αυτόματα ως μηδέν. Μεγάλης σημασίας είναι το γεγονός ότι σε κάθε εφαρμογή της PA υπάρχει ένα και μοναδικό πολυώνυμο βαθμού (L, K) $A_L(z)/B_K(z)$ για τη σειρά (182) της συνάρτησης f(z). Ο μηδενισμός του πολυωνύμου αριθμητή, $A_L(z)=0$, δίνει τις ρίζες L της εξίσωσης f(z)=0. Ομοίως ο μηδενισμός του πολυωνύμου του παρονομαστή, $B_k(z)=0$, δίνει τον αριθμό k των πόλων της συνάρτησης f (z), δηλαδή τον αριθμό των αρμονικών που συγκροτούν το υπό μελέτη σήμα.

2.4 Φασματική ανάλυση και συστήματα ανομοιογενών γραμμικών εξισώσεων

Κατά τη μελέτη ενός φάσματος, μια ακολουθία σημείων σήματος χρόνου $\{c_n\}_{n=0}^{N-1}$ είναι διαθέσιμη και ο στόχος είναι να λύσουμε το αντίστροφο πρόβλημα ανακατασκευάζοντας τις φασματικές αρμονικές με τα πλάτη και τις συχνότητες τους.

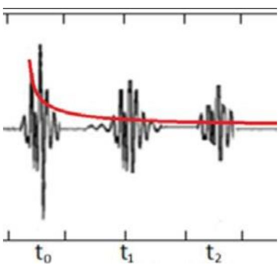
Κάθε σημείο σήματος $c_n \equiv c(n\tau)$ από την πειραματικά καταγεγραμμένη ακολουθία $\{c_n\}$ κατασκευάζεται από έναν γραμμικό συνδυασμό διακριτών φθινόντων εκθετικών σειρών

$$c_n = \sum_{k=1}^{K} d_k e^{-in\omega_k\tau} = \sum_{k=1}^{K} d_k u_k^n \quad . \qquad (185.)$$

Η αναπαράσταση (185), η οποία κατά τα άλλα είναι μια γεωμετρική ακολουθία, είναι επίσης γνωστή ως το πρόβλημα της αρμονικής αντιστροφής (harmonic inversion problem) [49, 24, 50, 51]. Υπάρχουν πολλές φαινομενικά διαφορετικές, αλλά συχνά μαθηματικά ισοδύναμες μέθοδοι, για την επίλυση του αντιστρόφου προβλήματος και οι περισσότερες από αυτές καταφεύγουν σε ένα σύστημα γραμμικών εξισώσεων με ορισμένα σημαντικά υπολογιστικά στάδια ανάλυσης. Για παράδειγμα, το DPA [38] λύνει ένα τέτοιο σύστημα λαμβάνοντας τους συντελεστές του πολυωνύμου του παρονομαστή, ο οποίος είναι ίσος με το χαρακτηριστικό πολυώνυμο. Το ίδιο σύστημα συναντάται και στο DLP [38] που λύνει ένα επιπλέον σύστημα γραμμικών εξισώσεων για τα πλάτη $\{d_k\}$.

Ως εκ τούτου, πράγματι για την επίλυση του προβλήματος της αρμονικής αντιστροφής, πολύ συχνά χρειάζεται να επιλυθεί ένα σύστημα γραμμικών ανομοιογενών εξισώσεων.

2.5 Εξαγωγή του ακριβούς αριθμού των αρμονικών από σήματα χρόνου



Σε περιπτώσεις που η PA δεν λειτουργεί και αν υποθέσουμε ότι μας δίνεται μια ακολουθία μερικών αθροισμάτων, όπως αυτά που συναντάμε στη Φασματοσκοπία με ανάλυση Fourier ως σήματα χρόνου ή μια γενική ακολουθία $\{A_n\}$ οποιονδήποτε άλλων αριθμών ως δεδομένων εισόδου, τότε μπορούμε να εφαρμόσουμε τη μέθοδο εξαγωγή του ακριβούς αριθμού των αρμονικών από σήματα χρόνου.

Η φασματική ανάλυση μιας τέτοιας ακολουθίας και η αναζήτηση της βάσης της που είναι η περιοριστική τιμή B του A_n επιτυγχάνεται στο $n \to \infty$. Η κύρια προσοχή εστιάζεται στη βελτίωση του ρυθμού σύγκλισης του $\{A_n\}$ καθώς το n αυξάνεται απείρως. Αυτό είναι πολύ σημαντικό ειδικά για τον μετασχηματισμό Fourier $F(\tilde{\omega}_k)$ των σημείων σήματος χρόνου $\{c_n\}$.

Για να επιλυθούν στενά απέχουσες συχνότητες $\{\omega_k\}$ η FFT πρέπει να έχει αρκετά μεγάλο μήκος Τ, δηλαδή τα σημεία $\{c_n\}$ πρέπει να καταγράφονται για μεγάλες τιμές του ακεραίου n, που μετρά το χρόνο ($t = t_n = n\tau$). Σε αυτά τα μεγάλα n ο "φάκελος" οποιουδήποτε σήματος $\{c_n\}$ συνήθως φτάνει στην ασυμπτωτική ουρά του. Τότε τίθεται το βασικό ερώτημα για το αν θα ήταν δυνατή η εξαγωγή περισσότερων από των βασικών πληροφοριών (και κατ' αυτόν τον τρόπο η επίτευξη της απαιτούμενης ανάλυσης στην κλίμακα των συχνοτήτων) από τα προηγούμενα καταγεγραμμένα σημεία του σήματος.

Πολλές φορές, το $\{c_n\}$, χωρίς απαραίτητα να εισέλθει στον ασυμπτωτικό τομέα χρόνου, επιφορτίζεται από τυχαίο θόρυβο. Αυτό είναι ένα θέμα γενικής σημασίας που περιλαμβάνει όχι μόνο δεδομένες αργά συγκλίνουσες ακολουθίες, αλλά και αποκλίνουσες ακολουθίες ή σειρές που συναντώνται σε πολλούς ερευνητικούς τομείς.

Σε αυτές τις περιπτώσεις, ζητούμενο είναι να διαθέτουμε μια απλή και στιβαρή μέθοδο που να μπορεί να επιταχύνει αργά συγκλίνουσες ακολουθίες, καθώς και πρόκληση σύγκλισης σε αποκλίνουσες σειρές μέσω της έννοιας της αναλυτικής συνέχειας [52, 53, 54].

Ο γραμμικός επιταχυντής του Euler μπορεί να εκτελέσει αυτήν τη διαδικασία [55]–[56]. Η μέθοδος Euler είναι ένας ισχυρός γραμμικός μετασχηματισμός αργά συγκλινόντων ακολουθιών. Αυτή η μορφή γραμμικού μετασχηματισμού μπορεί επίσης να συμβάλει σημαντικά σε σειρές και, ως παράδειγμα, μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την άθροιση μιας ασυμπτωτικής σειράς [57].

Η κύρια ιδέα των μετασχηματισμών μη γραμμικού μετασχηματισμού είναι ότι και οι δύο (γραμμικοί και μη γραμμικοί) μπορούν να βελτιώσουν την σύγκλιση ακολουθιών που συγκλίνουν αργά αλλά και να μετατρέψουν αποκλίνουσες ακολουθίες σε συγκλίνουσες. Ως συνέπεια αυτού του γεγονότος έχουμε την εκδήλωση ενός αθροίσματος των στοιχείων A_n της αρχικής ακολουθίας $\{A_n\}$. Ένας μη γραμμικός μετασχηματισμός είναι ένας σταθμισμένος μέσος όρος της προέλευσης όλων των μελών από το σύνολο $\{A_n\}$.

Μετά από αυτές τις πρώτες παρατηρήσεις, θα εστιάσουμε την προσοχή μας στις γεωμετρικές ακολουθίες που συναντώνται στην επεξεργασία σήματος. Για αυτόν τον ειδικό σκοπό, θα είναι πιο βολικό να χρησιμοποιήσουμε το πιο οικείο σύμβολο c_n αντί για A_n.

Η πρώτη ιδέα που μπορεί να έχει κάποιος καθώς προσπαθεί να βελτιώσει τον ρυθμό σύγκλισης της ακολουθίας «γενικευμένων» σημείων σήματος $\bar{c}_n = \bar{c}_\infty + c_n$ είναι η εξάλειψη των όρων με την πιο έντονη παροδική συμπεριφορά στο όριο $n \to \infty$. Ένα τυπικό σήμα χρόνου c_n μοντελοποιείται με τη γεωμετρική ακολουθία :

$$\bar{c}_n = \bar{c}_\infty + c_n \qquad c_n = \sum_{k=1}^{K} d_k u_k^n \qquad u_k = \mathrm{e}^{-i\omega_k \tau} \tag{186.}$$

όπου $\mathrm{Im}(\omega_k) < 0$.

Αξίζει να σημειωθεί ότι στην επεξεργασία σήματος, είναι υψίστης σημασίας ζητούμενο το να μπορούμε να βρούμε τον ακριβή αριθμός k των μεταβατικών αρμονικών του ερευνώμενου σήματος. Αυτές οι αρμονικές $\{d_k u_k^n\}$, που αντιπροσωπεύουν μεταβολίτες στο MRS, οδηγούν σε κορυφές/συντονισμούς στο αντίστοιχο φάσμα συχνοτήτων που πρέπει να είναι ποσοτικοποιημένο. Το πρώτο βήμα σε κάθε αξιόπιστη φασματική ποσοτικοποίηση είναι η ακρίβεια του προσδιορισμού του αριθμού των αρμονικών. Η απουσία μεθόδου για μια αδιαμφισβήτητη εξαγωγή του k οδηγούσε σε μια κοινή πρακτική που συνίστατο στην εικασία του αριθμού, όπως γίνεται συνήθως π.χ. στα LP, HLSVD, LCModel [58], κ.λπ

Αναπόφευκτα, οποιαδήποτε εικασία k ή θα υποτιμούσε είτε θα υπερεκτιμούσε τον αληθινό αριθμό τους. Ως εκ τούτου, προέκυπταν απαράδεκτα αποτελέσματα, ιδιαίτερα στην ιατρική διαγνωστική που βασιζόταν στο MRS ή στο MRSI. Ωστόσο, όπως θα δείξουμε, το να υποθέσουμε ή και να εικάσουμε το k είναι περιττό, αφού το αριθμός των αρμονικών μπορεί να προσδιοριστεί ακριβώς μέσω του μετασχηματισμού Shanks $e_k(c_n)$[61], ο οποίος δίνεται από την σχέση

$$e_k(A_n) = \frac{\begin{vmatrix} A_n & A_{n+1} & \cdots & A_{n+k} \\ \Delta A_n & \Delta A_{n+1} & \cdots & \Delta A_{n+k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Delta A_{n+k-1} & \Delta A_{n+k} & \cdots & \Delta A_{n+2k-1} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ \Delta A_n & \Delta A_{n+1} & \cdots & \Delta A_{n+k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Delta A_{n+k-1} & \Delta A_{n+k} & \cdots & \Delta A_{n+2k-1} \end{vmatrix}}. \qquad (187.)$$

Η απόδειξη έγκειται στο να χρησιμοποιηθεί ο μετασχηματισμός $e_k(c_n)$ για να φιλτράρει όλες τις αρμονικές από τα δεδομένα σήματος χρόνου, που εκφράζεται ως άθροισμα αποσβεσμένων μιγαδικών εκθετικών με σταθερά ή εξαρτώμενα από το χρόνο πλάτη.

2.5.1 Φιλτράρισμα μιας αρμονικής, $c_n = d_1 u_1^n$

Αρχικά, ως πρωτότυπο μιας φυσικής αρμονικής ομάδας που αποσβένει μετά από αρκετά μεγάλο χρονικό διάστημα, θα εξετάσουμε το απλούστερο σήμα c_n που περιγράφεται από μία μόνο μεταβατική αρμονική $d_1 u_1^n$ και δίνεται από την εξίσωση

$$\bar{c}_n = \bar{c}_\infty + d_1 u_1^n \equiv \bar{c}_\infty + c_n \qquad (188.)$$

όπου $d_1 \neq 0$ και $0 < u_1 < 1$.

Αυτή είναι η μαθηματική αρμονική της αντίστοιχης φυσικής αρμονικής, γιατί το υπόλοιπο $d_1 u_1^n$ της ακολουθίας $\{\bar{c}_n\}$ εξαφανίζεται ως n→ ∞ λόγω του χαρακτηριστικού $|u_1| < 1$. Για μη γραμμικούς μετασχηματισμούς του, η συνθήκη $|u_1| < 1$ είναι μόνο θέμα ευκολίας, αλλά όχι ανάγκης. Οι μη γραμμικοί μετασχηματισμοί όπως αυτοί των Aitken, Shanks, Padè και παρόμοιων έχουν νόημα και για $|u_1| \geq 1$.

Στην απλούστερη περίπτωση (61) με μία αρμονική, κάθε μέλος c_n της ακολουθίας $\{\bar{c}_n\}$ εξαρτάται μόνο από τις τρεις παραμέτρους d_1, u_1 και $\bar{c}_\infty$ Επομένως, η αλγεβρική συνθήκη για τον προσδιορισμό $\bar{c}_\infty$ της οριακής τιμής της ακολουθίας (61) δίνεται με την παροχή μόνο τριών διαδοχικών όρων $\bar{c}_{n-1}$, $\bar{c}_n$ και $\bar{c}_{n+1}$ από το σύνολο $\{\bar{c}_n\}$:

$$\bar{c}_{n-1} = \bar{c}_\infty + d_1 u_1^{n-1} \qquad \bar{c}_n = \bar{c}_\infty + d_1 u_1^n \qquad \bar{c}_{n+1} = \bar{c}_\infty + d_1 u_1^{n+1} \quad (189.)$$

Λύνοντας το σύστημα αυτών των τριών εξισώσεων για $\bar{c}_\infty$ βρίσκουμε

$$\bar{c}_\infty \equiv \mathcal{S}(\bar{c}_n) = e_1(\bar{c}_n) = \frac{\bar{c}_{n+1}\bar{c}_{n-1} - \bar{c}_n^2}{\bar{c}_{n+1} - 2\bar{c}_n + \bar{c}_{n-1}} \qquad (190.)$$

Στο σημείο αυτό, αν χρησιμοποιηθεί ο τύπος του Aitken [61] οδηγούμαστε στη σχέση:

$$\mathcal{S}(\bar{c}_n) = \bar{c}_{n-1} - \frac{(\Delta\bar{c}_{n-1})^2}{\Delta^2\bar{c}_{n-1}} \qquad (191.)$$

όπου $\Delta^2\bar{c}_{n-1} = \Delta(\bar{c}_n - \bar{c}_{n-1}) = \bar{c}_{n+1} + \bar{c}_{n-1} - 2\bar{c}_n$

Ο μετασχηματισμός Aitken είναι ακριβής μόνο εάν η ακολουθία διαθέτει μία μόνο μεταβατική αρμονική.

Η σχέση (190) δείχνει ξεκάθαρα την ικανότητα της διαδικασίας για φιλτράρισμα, δηλαδή για εξάλειψη του παροδικού $d_1u_1^n$, φτάνοντας έτσι απευθείας στο όριο $\bar{c}_\infty$ της ακολουθίας $\{\bar{c}_n\}$. Αυτό μπορεί να φανεί εκτελώντας τους υπολογισμούς των πεπερασμένων διαφορικών εξισώσεων πρώτης και δεύτερης τάξης ως εξής:

$$\begin{aligned}
&\Delta\bar{c}_n = d_1u_1^n(u_1 - 1) \qquad \Delta^2\bar{c}_n = d_1u_1^n(u_1 - 1)^2 \\
&\mathcal{S}(\bar{c}_n) = e_1(\bar{c}_n) = \bar{c}_{n-1} - \frac{(\Delta\bar{c}_{n-1})^2}{\Delta^2\bar{c}_{n-1}} = \bar{c}_{n-1} - d_1u_1^{n-1} \\
&\qquad = (\bar{c}_\infty + d_1u_1^{n-1}) - d_1u_1^{n-1} = \bar{c}_\infty
\end{aligned} \qquad (192.)$$

2.5.2 Φιλτράρισμα περισσότερων αρμονικών, $c_n = d_1u_1^n + d_2u_2^n$, $c_n = d_1u_1^n + d_2u_2^n + d_3u_3^n + \cdots + d_Ku_K^n$

Ανάλογες διαδικασίες, με σαφώς πολυπλοκότερες υπολογιστικές πράξεις, ακολουθούνται στην περίπτωση που στο προσλαμβανόμενο σήμα υποτεθούν δύο ή περισσότερες μεταβατικές αρμονικές. Σε κάθε περίπτωση επιτυγχάνεται ο εντοπισμός του $\bar{c}_\infty$, που είναι η οριακή τιμή της υπό μελέτη ακολουθίας, και κατά συνέπεια ο ακριβής αριθμός των αρμονικών που την συγκροτούν.

Για δύο μεταβατικές αρμονικές ισχύει:

$$\bar{c}_n = \bar{c}_\infty + (d_1 u_1^n + d_2 u_2^n) \equiv \bar{c}_\infty + c_n \qquad (193.)$$

$$e_2(\bar{c}_n) = \frac{\begin{vmatrix} \bar{c}_n & \bar{c}_{n+1} & \bar{c}_{n+2} \\ \Delta\bar{c}_n & \Delta\bar{c}_{n+1} & \Delta\bar{c}_{n+2} \\ \Delta\bar{c}_{n+1} & \Delta\bar{c}_{n+2} & \Delta\bar{c}_{n+3} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 \\ \Delta\bar{c}_n & \Delta\bar{c}_{n+1} & \Delta\bar{c}_{n+2} \\ \Delta\bar{c}_{n+1} & \Delta\bar{c}_{n+2} & \Delta\bar{c}_{n+3} \end{vmatrix}} \qquad (194.)$$

$$= \frac{v_1\bar{c}_n - v_2\bar{c}_{n+1} + v_3\bar{c}_{n+2}}{v_1 - v_2 + v_3} \equiv \frac{\mathcal{N}_2}{\mathcal{D}_2} \qquad (195.)$$

$$\left.\begin{aligned} v_1 &= \Delta\bar{c}_{n+1}\Delta\bar{c}_{n+3} - (\Delta\bar{c}_{n+2})^2 \\ v_2 &= \Delta\bar{c}_n\Delta\bar{c}_{n+3} - \Delta\bar{c}_{n+1}\Delta\bar{c}_{n+2} \\ v_3 &= \Delta\bar{c}_n\Delta\bar{c}_{n+2} - (\Delta\bar{c}_{n+1})^2 \end{aligned}\right\} . \qquad (196.)$$

Για k μεταβατικές αρμονικές έχουμε:

$$e_2(\bar{c}_n) = \frac{\mathcal{N}_2}{\mathcal{D}_2} = \bar{c}_\infty \qquad e_K(\bar{c}_n) = \frac{\mathcal{N}_K}{\mathcal{D}_K} = \bar{c}_\infty \qquad (197.)$$

2.6 Αλγόριθμος του Lanczos

Ο αλγόριθμοw Lanczos είναι μια επαναληπτική μέθοδος που επινοήθηκε από τον Cornelius Lanczos και είναι μια προσαρμογή μεθόδων ισχύος για την εύρεση των "πιο χρήσιμων" ιδιοτιμών και ιδιοδιανυσμάτων ενός Ερμιτιανού τελεστή. Αν και η αρχική μέθοδος ήταν υπολογιστικά αποτελεσματική, όπως διατυπώθηκε, εντούτοις, δεν ήταν χρήσιμη λόγω της αριθμητικής της αστάθειας. Το 1970, οι Ojalvo και Newman έδειξαν πως να γίνει η μέθοδος αριθμητικά. Αυτό επιτεύχθηκε με τη χρήση μιας μεθόδου για τον καθαρισμό των φορέων Lanczos (δηλαδή με επανειλημμένη επαναορθογωνοποίηση κάθε φορέα. Στην αρχική τους εργασία, αυτοί οι συγγραφείς, πρότειναν επίσης πως να επιλεγεί ένα αρχικό διάνυσμα (δηλαδή να χρησιμοποιηθεί μια γεννήτρια τυχαίων αριθμών ώστε να γίνει ο προσδιορισμός κάθε στοιχείου του αρχικού διανύσματος) και πρότειναν μια εμπειρικά προσδιορισμένη μέθοδο για τον προσδιορισμό του.

3.6.1 Ο αναδρομικός αλγόριθμος Lanczos για τα διανύσματα βάσης |ψn>

Κατά την επεξεργασία του σήματος, στην πράξη, ψηφιοποιούμε ισόποσα τον συνεχή (αναλογικό) χρόνο: $t = t_n = n\Delta t = n\tau$, ($n=0,1,2,\ldots,N-1$), $= \frac{T}{N}$.

Ισχύει ότι:

$$C_n \equiv C(n\tau) \qquad |\Phi_n) \equiv |\Phi(n\tau)) \tag{198.}$$

Ο αλγόριθμος Lanczos [24]–[62] είναι μία από τις πιο ευρέως χρησιμοποιούμενες μεθόδους λύσης ιδιοτιμών για μεγάλους πίνακες. Αυτή η αναδρομική μέθοδος συνήθως διατυπώνεται με το δυναμικό τελεστή $\hat{\Omega}$, αλλά αρχικά θα χρησιμοποιήσουμε τον τελεστή εξέλιξης $\hat{\mathrm{R}}(u)$. Η μελέτη μας θα εστιαστεί στον φορέα $\hat{\mathrm{U}}(\tau)$. Αυτός είναι ο φορέας της συνάρτησης Green και δίνεται από την εξίσωση:

$$\hat{\mathrm{R}}(u) = [u\hat{1} - \hat{\mathrm{U}}(\tau)]^{-1} \qquad u = \mathrm{e}^{-i\omega\tau} \tag{199.}$$

Ο τελεστής εξέλιξης $\hat{\mathrm{U}}(\tau)$ υπολογίζεται από την εξίσωση

$$\mathcal{R}(u) = (\Phi_0|\hat{\mathrm{R}}(u)|\Phi_0) \tag{200.}$$

Αν εκτελέσουμε τώρα μια παράλληλη μελέτη των φασμάτων του $\hat{\mathrm{U}}(\tau)$ και του $\hat{\mathrm{R}}(u)$, θα δούμε ότι μία από τις δυνατότητες ώστε να πάρουμε το φάσμα του τελεστή εξέλιξης $\hat{\mathrm{U}}(\tau)$ είναι να διαγωνοποιηθεί η αρχική ιδιοτιμή σε μια βολικά επιλεγμένη πλήρη ορθοκανονική βάση. Μια τέτοια βάση μπορεί να κατασκευαστεί με τις καταστάσεις Lanczos $\{|\psi_n)\}$ που σχετίζονται με τον πίνακα U = {Un,m}. Οι καταστάσεις Lanczos $\{|\psi n)\}$ δημιουργούνται επί του παρόντος από τις αναδρομική σχέση [49, 24,63]:

$$\beta_{n+1}|\psi_{n+1}) = \{\hat{\mathrm{U}}(\tau) - \alpha_n\}|\psi_n) - \beta_n|\psi_{n-1}) \qquad (n > 0) \qquad |\psi_0) = |\Phi_0) \tag{201.}$$

$$\alpha_n = \frac{(\psi_n|\hat{\mathrm{U}}(\tau)|\psi_n)}{(\psi_n|\psi_n)} \qquad \beta_n = \frac{(\psi_{n-1}|\hat{\mathrm{U}}(\tau)|\psi_n)}{(\psi_{n-1}|\psi_{n-1})} \qquad \beta_0 = 0. \tag{202.}$$

Τα στοιχεία του πίνακα στο σύνολο βάσης του Lanczos $\{|\psi_n)\}$ είναι διαφορετικά από αυτά των καταστάσεων Schrödinger $\{|\Phi_n)\}$. Αν πολλαπλασιάσουμε την εξίσωση (201) με τους όρους $\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_n$ οδηγούμαστε στο αποτέλεσμα:

$$(\beta_1\beta_2\cdots\beta_{n-1}\beta_n)\beta_{n+1}|\psi_{n+1})$$
$$= [\hat{\mathrm{U}}(\tau) - \alpha_n](\beta_1\beta_2\cdots\beta_{n-1}\beta_n)|\psi_n) - (\beta_1\beta_2\cdots\beta_{n-1}\beta_n)\beta_n|\psi_{n-1})$$
$$[(\beta_1\beta_2\cdots\beta_{n-1}\beta_n\beta_{n+1})|\psi_{n+1})]$$
$$= [\hat{\mathrm{U}}(\tau) - \alpha_n][(\beta_1\beta_2\cdots\beta_{n-1}\beta_n)|\psi_n)] - \beta_n^2[(\beta_1\beta_2\cdots\beta_{n-1})|\psi_{n-1})]$$
$$|\tilde{\psi}_{n+1}) = \{\hat{\mathrm{U}}(\tau) - \alpha_n\}|\tilde{\psi}_n) - \beta_n^2|\tilde{\psi}_{n-1})$$

$$|\tilde{\psi}_n) \equiv \bar{\beta}_n|\psi_n) \qquad \bar{\beta}_n = \prod_{m=1}^{n}\beta_m \neq 0 \qquad n \geq 1 \qquad |\tilde{\psi}_0) = |\Phi_0). \tag{203.}$$

Η εναλλακτική αναδρομή (203) περιλαμβάνει τις μονικές καταστάσεις του Lanczos (monic Lanchos states) $|\tilde{\psi}_n)$. Εδώ, ο όρος «monic» χρησιμεύει για να δείξει ότι για κάθε δεδομένο ακέραιο n, ο υψηλότερος όρος $|\Phi_n)$, στο πεπερασμένο άθροισμα που ορίζει το διάνυσμα $|\tilde{\psi}_n)$ έχει πάντα ένα πολλαπλασιαστικό συντελεστή ίσο με μονάδα παρόμοια με ένα μονικό πολυώνυμο (monic polynomial) [64].

Οι καταστάσεις Lanczos $|\tilde{\psi}_n)$ είναι ορθογώνιες, αλλά μη κανονικοποιημένες, σε αντίθεση με τις ορθοκανονικοποιημένες καταστάσεις Lanczos $\{|\psi_n)\}$. Κατά την κατασκευή τους, και οι δύο ακολουθίες $\{|\psi_n)\}$ και $\{|\tilde{\psi}_n)\}$ οδηγούν σε ορισμένους γραμμικούς συνδυασμούς δυνάμεων του τελεστή $\hat{\mathrm{U}}(\tau)$ που ενεργεί στην αρχική κατάσταση $|\Phi_0)$. Επομένως, λόγω της σχέσης $|\Phi_n) = \hat{\mathrm{U}}^n(\tau)|\Phi_0)$ τα διανύσματα $\{|\psi_n)\}$ και $|\tilde{\psi}_n)$ είναι ορισμένα αθροίσματα των καταστάσεων Schrödinger $\{|\Phi_n)\}$.

Για παράδειγμα, παίρνουμε:

$$
\begin{aligned}
|\tilde{\psi}_1) &= |\Phi_1) - \alpha_0|\Phi_0) \\
|\tilde{\psi}_2) &= |\Phi_2) - (\alpha_0 + \alpha_1)|\Phi_1) + (\alpha_0\alpha_1 - \beta_1^2)|\Phi_0) \\
|\tilde{\psi}_3) &= |\Phi_3) - (\alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2)|\Phi_2) + \{(\alpha_0\alpha_1 - \beta_1^2) + \alpha_2(\alpha_0 + \alpha_1) - \beta_2^2\}|\Phi_1) \\
&\quad + \{\alpha_0\beta_2^2 - \alpha_2(\alpha_0\alpha_1 - \beta_1^2)\}|\Phi_0).
\end{aligned}
\tag{204.}
$$

Χρησιμοποιώντας την εξίσωση (202) υπολογίζουμε αναλυτικά αρκετές σταθερές σύζευξης $\{\alpha_n, \beta_n\}$ ως συναρτήσεις των σημείων σήματος $\{c_n\}$ και παίρνουμε τα αποτελέσματα:

$$
\begin{aligned}
\alpha_0 &= \frac{c_1}{c_0} \qquad \alpha_1 = \frac{c_0^2 c_3 - 2c_0c_1c_2 + c_1^3}{c_0(c_0c_2 - c_1^2)} \\
\alpha_2 &= [(2c_1c_2c_3 + c_0c_2c_4 - c_0c_3^2 - c_1^2c_4 - c_2^3)(c_0c_2 - c_1^2)]^{-1} \\
&\quad \times (c_0^2c_2^2c_5 - 2c_0c_1^2c_2c_5 + c_1^4c_5 + 2c_0c_1c_2^2c_4 + 3c_1^2c_2^2c_3 - 2c_0c_1c_2c_3^2 \\
&\quad - 2c_0^2c_2c_3c_4 - 2c_1^3c_2c_4 + 2c_0c_1^2c_3c_4 - c_1^3c_3^2 - c_1c_2^4 + c_0^2c_3^3) \\
\beta_0 &= 0 \qquad \beta_1^2 = \frac{c_0c_2 - c_1^2}{c_0^2}
\end{aligned}
$$

$$
\beta_2^2 = c_0\frac{2c_1c_2c_3 + c_0c_2c_4 - c_0c_3^2 - c_1^2c_4 - c_2^3}{(c_0c_2 - c_1^2)^2} \tag{205.}
$$

$$
c_0^3\beta_1^4\beta_2^2 = 2c_1c_2c_3 + c_0c_2c_4 - c_0c_3^2 - c_1^2c_4 - c_2^3. \tag{206.}
$$

Αφού δημιουργηθεί το σύνολο $\{\alpha_n,\beta_n\}$, ο πίνακας $U = \{U_{n,m}\}$ γίνεται αυτόματα διαθέσιμος. Αυτό φαίνεται προβάλλοντας την εξίσωση (201) στην κατάσταση $(\psi_m|$ και χρησιμοποιώντας τη σχέση

$$
\mathrm{U}_{n,m}^{(s)} = (\psi_m|\hat{\mathrm{U}}^s(\tau)\psi_n) = (\psi_n|\hat{\mathrm{U}}^s(\tau)|\psi_m) = \mathrm{U}_{m,n}^{(s)} \tag{207.}
$$

για s = 1 για να πάρουμε [49, 63]

$$\mathrm{U}_{n,m} = c_0(\alpha_n \delta_{n,m} + \beta_m \delta_{n+1,m} + \beta_n \delta_{n,m+1}) \equiv c_0 \mathrm{J}_{n,m}. \tag{208.}$$

Εδώ, τα στοιχεία $U_{n,m}$ συμβολίζονται εναλλακτικά με $c_0J_{n,m}$ για να υποδείξουν ότι ο πίνακας U στη βάση {|ψn)} είναι ένας τριδιαγώνιος πίνακας, ο οποίος ονομάζεται ισοδύναμα ο πίνακας Jacobi ή πίνακας J και συμβολίζεται με J = {$J_{n,m}$}. Ως εκ τούτου, στη βάση Lanczos ο πίνακας εξέλιξης U αποκτά αυτόματα την τριδιαγώνιο μορφή ενός πίνακα J σε πεπερασμένη διάσταση, ας πούμε M × M, έτσι ώστε U_M = trid_M[β, α, β] ≡ c_0J_M. Αυτό οφείλεται στον ορισμό της βάσης {|ψn)} στην οποία το παραπάνω στοιχείο μήτρας $U_{n,m}$ είναι ίσο με μηδέν για |m − n| > 1 ή αλλιώς $(\psi_m|\psi_m) = (\psi_0|\psi_0) = (\Phi_0|\Phi_0) = c_0 = 0$ για οποιοδήποτε μη αρνητικό ακέραιο m. Έτσι, γενικά, η σχέση ορθογωνικότητας για τη βάση {|ψn)} είναι δίνεται από τη σχέση:

$$(\psi_m|\psi_n) = c_0\delta_{n,m} \tag{209.}$$

Έχουμε λοιπόν :

$$\mathbf{U}_M = c_0\mathbf{J}_M \qquad \mathbf{J}_M = \begin{pmatrix} \alpha_0 & \beta_1 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \beta_1 & \alpha_1 & \beta_2 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & \beta_2 & \alpha_2 & \beta_3 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \beta_3 & \alpha_3 & \cdots & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \beta_{M-2} & \alpha_{M-2} & \beta_{M-1} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \beta_{M-1} & \alpha_{M-1} \end{pmatrix}. \tag{210.}$$

Αυτός είναι ένας πίνακας σε τριδιαγώνια μορφή που ονομάζεται επίσης μήτρα Jacobi.

Προκειμένου να εκτελεστούν αυτοί οι υπολογισμοί υπάρχουν αρκετά προγράμματα, όπως οι ρουτίνες COMQR και F02AMF από το EISPACK [65] και οι αντίστοιχες βιβλιοθήκες NAG [66].

Είναι ενδιαφέρον να τονίσουμε ότι ο τελεστής εξέλιξης καλύπτει μόνο ένα μέρος του γενικά απεριόριστου διανυσματικού χώρου του υπό μελέτη συστήματος. Αν υποθέσουμε ότι θέλουμε να υπολογίσουμε K ιδιοτιμές $\{u_k\}$ του πίνακα εξέλιξης U_N. Παρά τους εγγενείς περιορισμούς του παραπάνω μοντέλου, επιλέγοντας το M να είναι αρκετά μεγάλο, ο πίνακας J (210) μπορεί να εξάγει καλές κατά προσέγγιση ιδιοτιμές $\{u_k^M\}$ στο ακριβές σύνολο $\{u_k\}$. Αυτό είναι το λεγόμενο φαινόμενο Lanczos που δηλώνει ότι ο ακριβής πίνακας και η προσέγγισή του c_0J μοιράζονται ένα κοινό σύνολο ιδιοτιμών υπό τον όρο ότι το M είναι αρκετά μεγάλο [67]. Στην πράξη, το M επιλέγεται συνήθως να είναι μεγαλύτερο από το K για να διασφαλιστεί ότι όντως εξάγονται όλες οι σχετικές ιδιοτιμές στο επιλεγμένο διάστημα. Η σχέση M > K υποδηλώνει τοπική υπερπληρότητα της βάσης $\{|\psi n)\}_{n=0}^{M-1}$. Υπερπληρότητα σημαίνει ότι ο αριθμός των εξισώσεων είναι μεγαλύτερος τον αριθμό των αγνώστων (M > K).

Παρόλα αυτά υπάρχει η αναγκαιότητα ανεύρεσης μιας μεθόδου για τον απευθείας προσδιορισμό του ακριβούς αριθμού K των συντονισμών από τα ακατέργαστα δεδομένα που είναι διαθέσιμα ως πειραματικά μετρούμενα σήματα χρόνου $\{c_n\}$. Στη FPT, ωστόσο, ο πραγματικός αριθμός K των συντονισμών προσδιορίζεται χωρίς οποιαδήποτε ασάφεια από τη μοναδικότητα του πολυωνυμικού πηλίκου Padè για μία δεδομένη σειρά των σημείων σήματος εισόδου $\{c_n\}$ [49, 57].

Στον αλγόριθμο Lanczos, δεν είναι απαραίτητος ένας αρκετά μεγάλος αριθμός M μόνο για τη λήψη ιδιοτιμών με ακρίβεια, αλλά και για την επίτευξη καλών ιδιοδιανυσμάτων. Για ένα αρκετά μεγάλο M, η βάση $\{|\psi n)\}_{n=0}^{M-1}$ μπορεί να καλύπτει περίπου τον διανυσματικό χώρο των κυματοσυναρτήσεων $\{|\,?_k^M\,)\}$ στο επιλεγμένο εύρος συχνοτήτων.

Κατ' αυτόν τον τρόπο οδηγούμαστε σε μία πολύ αξιόπιστη προσέγγιση για τα ιδιοδιανύσματα $|\Upsilon_k)$:

$$|\Upsilon_k^M) = \sum_{n=0}^{M-1} Q_{n,k}|\psi_n). \tag{211.}$$

όπου τα στοιχεία $Q_{n,k}$ υπολογίζονται από την σχέση:

$$\begin{aligned}\sum_{n=0}^{M-1} Q_{n,k}(\psi_m|\hat{\mathrm{U}}(\tau)|\psi_n) &= u_k \sum_{n=0}^{M-1} Q_{n,k}(\psi_m|\psi_n) \\ &= c_0 u_k \sum_{n=0}^{M-1} Q_{n,k}\delta_{n,m} = c_0 u_k Q_{m,k}.\end{aligned} \tag{212.}$$

Ο αλγόριθμος Lanczos είναι μια low-storage μέθοδος ορθογωνοποίησης, σε αντίθεση με την αντίστοιχη ορθογωνοιοποίηση Gram–Schmidt (GSO) που χρησιμοποιεί όλες τις καταστάσεις σε κάθε στάδιο λειτουργίας της. Φυσικά, τα τελικά αποτελέσματα ταυτίζονται στις GSO και Lanczos ορθογωνικοποιήσεις.

Η κατάσταση $|\psi_n)$ είναι ουσιαστικά η n-ιοστή σε σχέση με τη $|\psi_0)$. Αλλά η εξάρτηση της $|\psi_n)$ από τις άλλες ιδιοσυναρτήσεις θεωρείται σημαντική μόνο ως προς τους δύο πλησιέστερους γείτονες της (τροχιακά) $|\psi_{n+1})$ και $|\psi_{n-1})$. Μία χρήσιμη συνέπεια αυτού του γεγονότος είναι ότι, στην πράξη, η (n + 1) επανάληψη που αποδίδει την κατάσταση $\beta_{n+1}|\psi_{n+1})$ χρειάζεται να χρησιμοποιήσει μόνο τις δύο προηγούμενες καταστάσεις $|\psi_{n-1})$ και $|\psi_n)$.

Αυτή η οικονομία είναι το κλειδί για την επιτυχία της συγκεκριμένης μεθόδου σε σχέση με την GSO, η οποία απαιτεί τη χρήση όλων των ήδη γνωστών τροχιακών για κάθε νέο ιδιοδιάνυσμα. Ως εκ τούτου, η αναδρομή (201) είναι επίσης γνωστή και ως προσέγγιση του πλησιέστερου γείτονα, ή ως μοντέλο της αλυσίδας.

Αυτό το μοντέλο ικανοποιεί την εύλογη φυσική απαίτηση που έχει η τοπική πυκνότητα των καταστάσεων να καθορίζεται κατά κύριο λόγο από τα τοπικά τροχιακά, ενώ προοδευτικά τα πιο απομακρυσμένα τροχιακά να παίζουν λιγότερο σημαντικό ρόλο. Αυτό συμβαίνει επειδή η ισχυρότερη επίδραση στην κατάσταση ενδιαφέροντος αναμένεται φυσικά να προέλθει από τα πλησιέστερα τροχιακά χωρίς να ενδιαφέρουν πολλές άλλες καταστάσεις που θα μπορούσαν να λειτουργήσουν ως εμπόδια.

Η αναδρομή κατάστασης Lanczos είναι μια μαθηματική συνταγή που χρησιμοποιεί τη φυσική έννοια ενός τοπικού περιβάλλοντος. Σαφώς, κάθε διαδοχικό τροχιακό στην αλυσίδα των τροχιακών ομαδοποιείται προοδευτικά στην περιφέρεια του περιβάλλοντος του αρχικού τροχιακό $|\psi_0) = |\Phi_0)$. Το μέτρο της επίδρασης αυτού του περιβάλλοντος στη διερευνημένη κατάσταση του συστήματος δίνεται από τις παραμέτρους σύζευξης $\{\alpha_n, \beta_n\}$. Είναι τότε σαφές ότι το μοντέλο της αλυσίδας, στην πραγματικότητα, περιγράφει τη συνολική εξέλιξη του συστήματος από τη δεδομένη αρχική κατάσταση $|\Phi_0)$.

Συμπερασματικά μπορούμε να πούμε ότι ο αλγόριθμος Lanczos παράγει ένα διαδιδόμενο κυματοπακέτο και το οδηγεί στην τριδιαγωνοποίηση ενός πίνακα U(τ). Ο αναδρομικός τύπος

(201) είναι ένας τρόπος δημιουργίας τοπικής αναπαράστασης της Χαμιλτονιανής. Αυτό το μοντέλο ικανοποιεί την εύλογη φυσική απαίτηση που υπάρχει ώστε η τοπική πυκνότητα των καταστάσεων να καθορίζεται κατά κύριο λόγο από το ίδιο το τοπικό τροχιακό, ενώ προοδευτικά τα πιο απομακρυσμένα τροχιακά παίζουν λιγότερο σημαντικό ρόλο. Η αναδρομή κατάστασης Lanczos είναι μια μαθηματική συνταγή προσομοίωσης της φυσικής κατάστασης ενός τοπικού περιβάλλοντος.

Συμπεράσματα

Σκοπός της μελέτης υπήρξε η αποτίμηση των γενικών και θεμελιωδών αρχών που συγκροτούν τη μεθοδολογία της κβαντικής ανάλυσης σήματος. Εκ της μελέτης αυτής προέκυψαν τα ακολουθούντα συμπεράσματα:

1. Όταν διεξάγεται ανάλυση κάποιου σήματος, ανεξαρτήτως της προελεύσεως του, υπό την επωνυμία κβαντική, οφείλεται να υπηρετούνται οι αρχές της κβαντικής μηχανικής. Αυτές είναι ότι κάθε υπό μελέτη σύστημα περιγράφεται από ένα πλήρες και ορθοκανονικό σύνολο ιδιοσυναρτήσεων (ή ιδιοδιανυσμάτων) το οποίο επαληθεύει την εξίσωση Schrödinger που του αντιστοιχεί.
2. Επειδή είναι αδύνατον τις περισσότερες φορές να βρεθεί η εξίσωση Schrödinger του υπό μελέτη συστήματος, η εργασία που γίνεται είναι να επινοούνται και να εφαρμόζονται μαθηματικές μέθοδοι οι οποίες κατασκευάζουν τα ιδιοδιανύσματα.
3. Οι πλέον διαδεδομένες μέθοδοι, τις οποίες χρησιμοποιεί και συνδυάζει η συντριπτική πλειοψηφία των λογισμικών που εκτελεί κβαντική ανάλυση σήματος και που αναπτύχθηκαν στην ανά χείρας μελέτη, είναι ο μετασχηματισμός Fourier, η προσέγγιση Padè και ο αλγόριθμος Lanczos.
4. Ο αλγόριθμος Lanczos είναι μια low-storage μέθοδος ορθογωνοποίησης. Η εξάρτηση κάθε ιδιοσυνάρτησης από τις

άλλες ιδιοσυναρτήσεις θεωρείται σημαντική μόνο ως προς τους δύο πλησιέστερους γείτονες της. Αυτό επιφέρει μια τεράστια υπολογιστική οικονομία. Αντίθετα, σε άλλες μεθόδους, όπως π.χ. με την αντίστοιχη ορθογωνοιοποίηση Gram–Schmidt, που συναντάται στα περισσότερα βιβλία κβαντικής φυσικής και μαθηματικών μεθόδων φυσικής, υπάρχει η ανάγκη να χρησιμοποιηθούν όλες οι ιδιοκαταστάσεις σε κάθε στάδιο λειτουργίας τους.

Βιβλιογραφία

1. Τραχανάς Στέφανος, *Κβαντομηχανική Ι, Θεμελιώδεις Αρχές - Απλά Συστήματα – Δομή της Ύλης*, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης, Κρήτη 2016.
2. Ταμβάκης Κυριάκος, *Εισαγωγή στην Κβαντομηχανική*, Leader Books, Αθήνα 2003.
3. Martin Plenio, *Quantum Mechanics*, 2nd term 2002, Imperial College.
4. Rabi I I 1937 *Phys. Rev.* **51** 652, Rabi I I, Zacharias J R, Millmann S and Kusch P 1938 *Phys. Rev.* **53** 318, Rabi I I, Zacharias J R, Millmann S and Kusch P 1939 *Phys. Rev.* **55** 526.
5. Purcell E U, Torrey H C and Pound R V 1946 *Phys. Rev.* **69** 37.
6. Deschampes M, Burghardt I, Derouet C, Bodenhausen G and Belki´c Dˇz 2000 *J. Chem. Phys.* **113** 1630.
7. Comisarow M B and Marshall A G 1974 *Can. J. Chem.* **52** 1997.
8. Belki´c Dˇz, Dando P A, Taylor H S, Main J and Shin S-K 2000 *J. Phys. Chem.* A, **104** 11 677, Belki´c Dˇz 2000 *Many-Particle Spectroscopy of Atoms, Molecules and Surfaces* ed, J Berakdar (Halle: Max-Planck-Institut f¨ur Mikrostrukturphysik) p 122, Belki´c Dˇz 2000 *Many-Particle Spectroscopy of Atoms, Molecules and Surfaces* ed, J Berakdar (Halle: Max-Planck-Institut f¨ur Mikrostrukturphysik) p 134.
9. Frahm J, Bruhn H, GyngellM L,Merbolt K D, H¨anicke V and Sauter R 1989 *Magn., Reson. Med.* **11** 47.

10. Belki´c Dˇz 2004 *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res.* A **525** 379.
11. Brown T R, Kincaid B M and Uˇgurbil K 1982 *Proc. Natl Acad. Sci., USA* **79** 3523, Brown T R, Kincaid B M and Uˇgurbil K 1982 *Proc. Soc. Phot. Opt. Instrum. Eng.* **347** 354.
12. Belki´c Dˇz and Belki´c K 2003 *High-Resolution Magnetic Resonance Imaging, (MRI),* IEEE Medical Imaging Conference (MIC), Abstract Number, 1971 (CD), Portland (Oregon).
13. Brown T R, Kincaid B M and Uˇgurbil K 1982 *Proc. Natl Acad. Sci.* **79** 3523.
14. Belki´c K 2004 *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res.* A **525** 313.
15. Natarrer F 1986 *The Mathematics of Computerized Tomography* (New York: Wiley)
16. Novikov R 1999 *Ark. Math.* **37** 141
17. Gauss C F 1866 *Werke* [Collected works of Gauss C F] vol 3 (G¨ottingen: K¨onig. Gesellsch. der Wissensch.) p 265.
18. Bracewell R N 1990 *Science* **248** 697.
19. Schur I 1917 *J. Reine Angew. Math.* **147** 205.
20. Prony R 1795 *J. l'´E cole Polytechnique* **1** 24.
21. Porat B 1994 *Digital Processing of Random signals, Theory and Methods* (Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall)
22. Jacobi C G J 1845 *J. Reine Angew. Math.* **30** 127.
23. Driscoll T A and Fornberg B 2001 *Num. Algorithms* **26** 77.
24. Lanczos C 1950 *J. Res. Nat. Bur. Stand.* **45** 255, Lanczos C 1952 *J. Res. Nat. Bur. Stand.* **49** 33
25. Hiller J R 1991 *Phys. Rev.* D **44** 2504.
26. Schmidt R O 1986 *IEEE Trans. Antennas Propagat. AP* **34** 276,
27. Roy R, Paulraj A and Kailath T 1986 *IEEE Trans. Acoust. Speech and Signal Process. ASSP* **34** 1340

28. Chisholm J S R, Genz A C and Pusterla M, 1976 *J. Comput. Appl. Math.* **2** 73
29. Neuhauser D 1990 *J. Chem. Phys.* **93** 2611
30. Vijay A and Wyatt R E 2000 *Phys. Rev.* E **62** 4351
31. Belki´c Dˇz, Dando P A, Taylor H S and Main J 1999 *Chem. Phys. Lett.* **315** 135
32. Kunikeev S D and Taylor H S 2004 *J. Chem. Phys.* **108** 743.
33. Belki´c Dˇz 2002 *Magn. Res. Mater. Phys. Biol. Med. (MAGMA) Suppl. no 1* **15** 36.
34. Lill J V, Parker G A and Light J C 1982 *Chem. Phys. Lett.* **89** 483.
35. Feit M D and Fleck Jr. J A 1989 *Opt. Lett.* **14** 662.
36. Kr¨oger H 1992 *Phys. Rep.* **210** 45.
37. Shanks D 1949 *Naval Ordnance Laboratory Memorandum* (NOLM 9994: Project no NOL-4-Re9d-21-2, White Oak, MD) p 1.
38. Belki´c Dˇz, Dando P A, Main J and Taylor H S 2000 *J. Chem. Phys.* **133** 6542.
39. Sidi A 2003 *Practical Extrapolation Methods: Theory and Applications* (Cambridge: Cambridge University Press).
40. Weniger E J 1989 *Comput. Phys. Rep.* **10** 189.
41. Belki´c Dˇz 2001 *Modern Spectral Methods for Direct and Inverse Problems (J. Comput. Meth. Sci. Eng., Topical Issue (no 2))* vol 1, ed Dˇz Belki´c, p i.
42. Levin D 1973 *Int. J. Comput. Math.* **3** 371.
43. Weinberg L 1962 *Network Analysis and Synthesis* (New York: McGraw-Hill).
44. Georgiou T T 1987 *SIAM J. Math. Anal.* **18** 1248.
45. W. Kohn 1947 *Phys. Rev.* **71** 635.
46. Coleman J P 1976 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **9** 1079.
47. Weierstrass K T W 1885 *K. Akad. Wiss. Berlin* p 789.

48. Wall H S 1931 *Trans. Am. Math. Soc.* **33** 511.

49. Belki´c Dˇz 2003 *J. Comput. Meth. Sci. Eng.* **3** 109.

50. Mandelshtam V A and Taylor H S 1997 *J. Chem. Phys.* **107** 6756.

51. Geronimus J 1946 *Mat. Ann.* **47** 742.

52. Belki´c Dˇz 2004 *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res.* A **525** 372.

53. Shanks D 1949 *Naval Ordnance Laboratory Memorandum* (NOLM 9994: Project no NOL-4-Re9d-21-2, White Oak, MD) p 1.

54. Schlessinger L and Schwartz C 1966 *Phys. Rev. Lett.* **16** 1173.

55. Poncelet J V 1835 *J. Reine Angew. Math.* **13** 1.

56. Wynn P 1971 *The Computer Journal* **14** 437.

57. Belki´c Dˇz 2004 *J. Comput. Meth. Sci. Eng.* **4** 355.

58. Provencher S W 1993 *Magn. Reson. Med.* **30** 672.

59. Brenig W and Haag R 1959 *Fortschr. Phys.* **7** 183 (in German) (Engl. transl. M H Ross (ed) 1963 *Quantum Scattering Theory* (Bloomington, IN: Indiana University Press) p 13).

60. Belki´c Dˇz 2004 *Principles of Quantum Scattering Theory* (Bristol: Institute of Physics Publishing).

61. Aitken A C 1926 *Proc. R. Soc. Edinburgh* **46** 289, Aitken A C 1937 *Proc. R. Soc. Edinburgh* **57** 269.

62. Duncan A and Roskies R 1985 *Phys. Rev.* D **31** 364.

63. Haydock R, Heine V and Kelly P J 1972 *J. Phys. C: Solid State Phys.* **5** 2845.

64. Dahlquist F and Bj¨ork °A 1974 *Numerical Methods* (Englewood Cliffs, NJ: Prentice- Hall).

65. Smith B T, Boyle J M, Dongarra J J, Garbow B S, Klema V C and Moler C B 1976, *Matrix Eigensystem Routines—EISPACK Guide (Lectures Notes in Computer, Science 6)* 2nd edn (New York: Springer) p 277.

66. NAG Fortran Library *NAG: Numerical Algorithms Group*, 256 Banbury Road, Oxford OX2 7DE, UK

67. Cullum J K and Willoughby R A 1985 *Lanczos Algorithm for Large Symmetric, Eigenvalue Computations* (Boston, MA: Birkh¨auser).