Partielle Differentialgleichungen I

Mathematisch gesprochen sind partielle Differentialgleichungen DGLs, in welchen partielle Ableitungen einer gesuchten Funktion in unterschiedlichen Variablen auftreten.
In der Physik treten partielle DGLs immer dann auf, wenn (klassische) Felder oder Observablen in Raum und Zeit lokal beschrieben werden können; die Beziehung zwischen dem Feld an einem gegebenen Raumzeitpunkt und den (partiellen) Ableitungen des Feldes nach Raum- und Zeitkoordinaten an diesem Punkt ergeben eine partielle Differentialgleichung.

Beispiele für derartige partielle Differentialgleichungen sind einige der grundlegenden Gleichungen der Physik

1) Poisson-Gleichung der Elektrostatik

$$\Delta \phi(\vec{r}) = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \phi(x,y,z) = -4\pi \rho(\vec{r})$$

2) Wärmeleitungs- / Diffusionsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} T(x,t) = -\varkappa \frac{\partial^2}{\partial x^2} T(x,t)$$

3) Schrödinger-Gleichung der Quantenmechanik (in 1D)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x,t) + V(x)\,\psi(x,t)$$

Wir wollen im folgenden zwei typische Situationen unterscheiden, welche bei der Lösung einer partiellen DGL auftreten können:

1) Anfangswertprobleme

Gegeben sind die Anfangsbedingungen eines physikalischen Systems und gesucht ist die Zeitentwicklung des Systems.

Bsp: Zeitlich und räumlich aufgelöste Wärmeleitung für gegebene Anfangsbedingung

2) Randwertprobleme

Gegeben ist der Zustand eines physikalischen Systems „am Rand", gesucht ist der Zustand außerhalb des „Randes".

Bsp: Berechnung des elektostatischen Feldes aus der Poisson-Gl. für eine gegebene Ladungsverteilung.

Im allgemeinen unterscheiden wir die folgenden Typen von Randbedingungen:

- Dirichlet-Randbedingungen: Werte der Funktion am Rand fest.
- Neumann-Randbedingungen: Werte der Ableitung am Rand fest.
- periodische Randbedingungen: $\psi(L) = \psi(0)$ oder $\left.\frac{\partial \psi}{\partial x}\right|_{x=L} = \left.\frac{\partial \psi}{\partial x}\right|_{x=0}$

Für beide Problemstellungen werden wir im folgenden einfache, iterative Verfahren kennenlernen, um diese zu lösen.

Partielle DGLs : Diskretisierung via endliche Differenzen

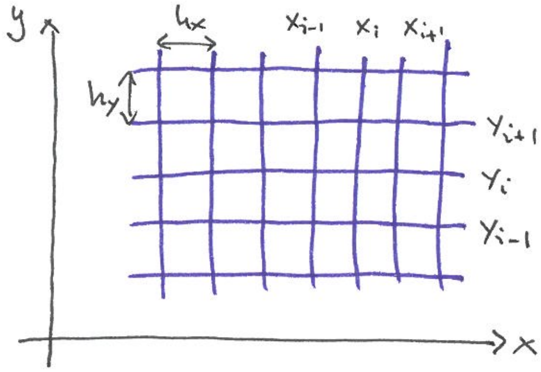
Als ersten Schritt, eine partielle DGL zu lösen, wollen wir diese diskretisieren. Dazu nähern wir die partiellen Ableitungen als Differenzquotienten an.

Betrachten wir dazu das folgende Beispiel:

$$\frac{\partial}{\partial x} \psi(x,y) + \frac{\partial}{\partial y} \psi(x,y) = f(x, y, \psi(x,y))$$

wobei die Funktion $f(x, y, \psi)$ gegeben sei und $\psi(x,y)$ gesucht sei.

Wir führen ein Netz an Koordinaten $\{(x_i, y_i)\}$ wie folgt ein:

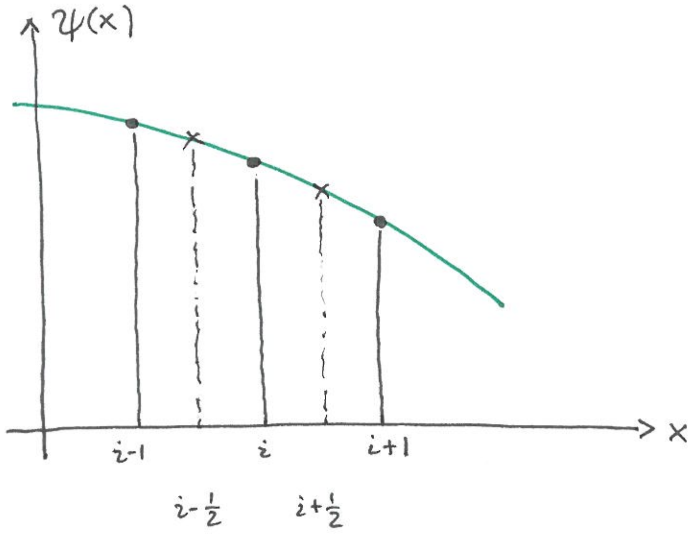


Damit nähern wir nun die partiellen Ableitungen als Differenzquotienten wie folgt am Punkt (x_i, y_i) an:

$$\left.\frac{\partial \psi}{\partial x}\right|_{i,j} \approx \frac{\psi(x_{i+1}, y_j) - \psi(x_i, y_j)}{x_{i+1} - x_i} = \frac{1}{h_x}\left(\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}\right)$$

$$\left.\frac{\partial \psi}{\partial y}\right|_{i,j} \approx \frac{1}{h_y}\left(\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}\right)$$

Für höhere Ableitungen verfahren wir ähnlich.
Zweite Ableitungen lassen sich wie folgt berechnen:



$$\psi'_{i-\frac{1}{2}} = \frac{1}{h_x}\left(\psi_i - \psi_{i-1}\right)$$

$$\psi'_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{h_x}\left(\psi_{i+1} - \psi_i\right)$$

$$\psi''_i = \frac{1}{h_x}\left(\psi'_{i+\frac{1}{2}} - \psi'_{i-\frac{1}{2}}\right)$$

$$= \frac{1}{h_x^2}\left(\psi_{i+1} + \psi_{i-1} - 2\psi_i\right)$$

Setzen wir die diskretisierten Ableitungen in die DGL ein und erhalten:

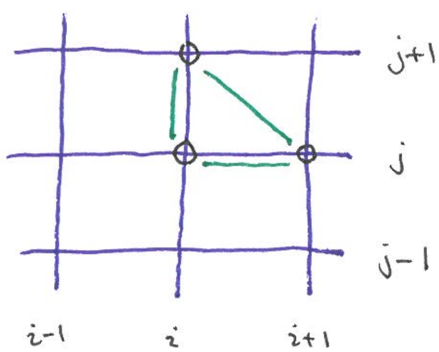
$$\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,y) + \frac{\partial}{\partial y}\psi(x,y) = f(x,y,\psi(x,y))$$

$$\downarrow$$

$$\frac{1}{h}\left(\psi_{i+1,j} + \psi_{i,j+1} - 2\psi_{i,j}\right) = f(x_i, y_j, \psi_{ij}) = f_{ij} \qquad (*)$$

für $h_x = h_y = h$

Diese Gleichung verknüpft also drei Punkte im Diskretisierungsnetz:



Anfangswertprobleme: Rekursionsgleichungen

Angenommen $\{\psi_{i,0}\}$ seien für alle i bekannt = Anfangswert.

Eine einfache Umformung der diskretisierten DGL in (*) ergibt:

$$\psi_{i+1,j} = h \cdot f_{ij} + 2\psi_{i,j} - \psi_{i,j+1}$$

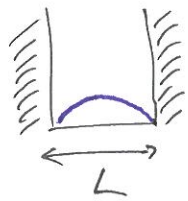
was einer einfachen Rekursionsformel entspricht und somit eine sequentielle / iterative Rechnung der Form

$$\{\psi_{i,0}\} \rightarrow \{\psi_{i,1}\} \rightarrow \{\psi_{i,2}\} \rightarrow \dots$$

erlaubt.

Beispiel: Zeitabhängige Schrödingergleichung für 1d Potentialtopf

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t)$$



mit der Randbedingung:

$$\psi(0,t) = \psi(L,t) = 0$$

und Anfangsbedingung: $\psi(x,0)$ bekannt.

1) Diskretisierung der Zeitableitung

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) \approx \frac{1}{h_t}\left(\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}\right)$$

2) Diskretisierung der räumlichen Ableitung

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t) \approx \frac{1}{h_x^2}\left(\psi_{i+1,j} + \psi_{i-1,j} - 2\psi_{ij}\right)$$

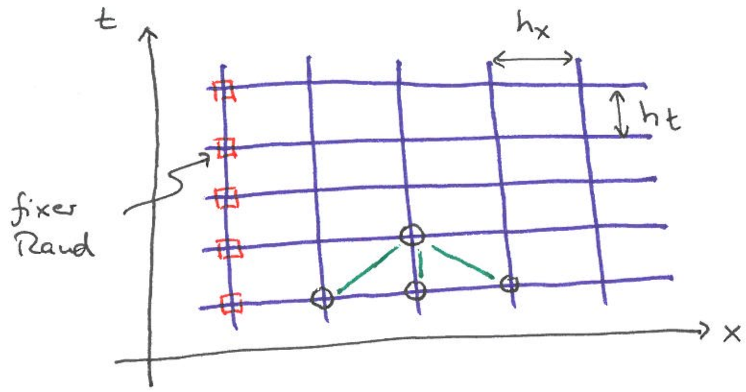
3) Mit $\hbar = 1$, $m = 1$ erhalten wir damit für die diskretisierte Form der Schrödinger-Gleichung:

$$i \frac{1}{h_t} \left(\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j} \right) = - \frac{1}{2h_x^2} \left(\psi_{i+1,j} + \psi_{i-1,j} - 2\psi_{ij} \right)$$

Aufgelöst nach $\psi_{i,j+1}$ ergibt sich:

$$\boxed{\psi_{i,j+1} = \psi_{ij} + \frac{i}{2} \frac{h_t}{h_x^2} \left(\psi_{i+1,j} + \psi_{i-1,j} - 2\psi_{ij} \right)}$$

Wenn also als Anfangswerte $\{\psi_{i,0}\}$ gegeben seien und wir für alle Schritte $\psi_{0,j} = \psi_{L,j} = 0$ erzwingen (Randbedingung), dann können wir diese Rekursionsgleichungen iterativ abarbeiten.



Unter welchen Umständen das aus den Rekursionsgleichungen abgeleitete Verfahren stabil ist, bedarf einer detaillierten Analyse (→ numerische Mathematik). Das Ergebnis ist folgende Bedingung für Stabilität

$$\frac{h_t}{h_x^2} < \frac{1}{2} \qquad \text{bzw.} \qquad \varkappa \cdot \frac{h_t}{h_x^2} < \frac{1}{4}$$

(Schrödinger-Gl.) (Diffusions-Gleichung)

Wir sehen also, daß für partielle DGLs mit 2. Ordnung räumlicher Ableitung und 1. Ordnung zeitlicher Ableitung es nicht ausreicht die Zeitdiskretisierung h_t proportional zur räumlichen Diskretisierung h_x zu wählen. Vielmehr gilt:

$$\boxed{h_t \ll O(h_x^2)}$$