

Lösungstechniken für partielle Differentialgleichungen I

Alexander Eberspächer

24. April 2012

Um eventuell vorhandene Lücken in der Rechenkunst zu schließen wollen wir kurz partielle Differentialgleichungen einführen und über Lösungstechniken sprechen. Ganz ohne jede mathematische Strenge werden so die wichtigsten Begriffe kurz angerissen. Die Methode der Separation der Variablen wird etwas detaillierter besprochen.

Literatur: Farlow [1] und Arfken&Weber [2].

1 Einführung

1.1 Definition

Eine so genannte *partielle Differentialgleichung* ist eine Differentialgleichung, in der partielle Ableitungen auftauchen. Ein Beispiel ist Poissonsgleichung

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \phi(\mathbf{r}) = -\frac{\rho(\mathbf{r})}{\epsilon_0}, \quad (1)$$

die den Zusammenhang von elektrischem Potential ϕ und Ladungsdichteverteilung ρ beschreibt.

Weitere Beispiele sind die Schrödingergleichung (in Ortsdarstellung)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}, t) \right] \psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t), \quad (2)$$

die Wellengleichung

$$\left[\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \right] \psi(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (3)$$

sowie die Maxwell-Gleichungen

$$\operatorname{div} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \frac{\rho(\mathbf{r}, t)}{\epsilon_0}, \quad (4)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (5)$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t), \quad (6)$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \mu_0 \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t), \quad (7)$$

ein gekoppeltes System partieller Differentialgleichungen. Die Hamilton-Jacobi-Differentialgleichung

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p} = \nabla_{\mathbf{q}} S, t) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0 \quad (8)$$

mit $S = S(\mathbf{q}, t)$ kennen Sie bereits.

1.2 Bedeutung

Partielle Differentialgleichungen sind von so großer Bedeutung, weil wir die Grundgesetze der Physik als ebensolche Gleichungen schreiben können (Hamilton-Jacobi-DGL, Maxwell-Gl., Schrödinger-Gl., Einsteinsche Feldgl., ...).

1.3 Klassifikation

Es gibt eine Vielzahl von Möglichkeiten, partielle Differentialgleichungen zu klassifizieren, darunter folgende:

Ordnung Die Ordnung einer partiellen Differentialgleichung ist die Ordnung der höchsten darin auftretenden partiellen Ableitung. Die Schrödingergleichung (2) ist also beispielsweise wie die meisten Gleichungen von Interesse zweiter Ordnung.

homogen/inhomogen Taucht neben der gesuchten Funktion (und deren Ableitungen) kein weiterer (unabhängiger) Term auf, so nennen wir die Gleichung *homogen*, andernfalls ist die Gleichung *inhomogen*. Mit dem Differentialoperator \mathcal{L} und der Funktion f schreiben wir also

$$\mathcal{L} f = g,$$

was für $g = 0$ eine homogene Gleichung ist und für $g \neq 0$ eine inhomogene Gleichung darstellt. Die Poissonsgleichung (1) ist beispielsweise eine inhomogene Gleichung, falls Ladungen vorhanden sind. Die für $\rho(\mathbf{r}) = 0$ resultierende homogene Gleichung heißt auch Laplace-Gleichung.

konstante oder veränderliche Koeffizienten Sind die Koeffizienten vor der gesuchten Funktion (und deren Ableitungen) alle fest, so spricht man von einer Differentialgleichung mit konstanten Koeffizienten, andernfalls spricht man von einer Differentialgleichung mit variablen Koeffizienten. Ist in der Schrödingergleichung (2) beispielsweise das Potential $V(\mathbf{r}, t) = \text{const}$, so liegt eine Gleichung mit konstanten Koeffizienten vor.

linear/nichtlinear Treten in einer Gleichung die gesuchte Funktion (und deren Ableitungen) nur linear auf, so klassifiziert man die Gleichung als lineare Differentialgleichung. Für diese gilt das *Superpositionsprinzip*! Eine Beispiel für eine nichtlineare Differentialgleichung ist die Gross-Pitaevski-Gleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) + \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m} |\psi(\mathbf{r})|^2 \right] \psi(\mathbf{r}) = \mu \psi(\mathbf{r}), \quad (9)$$

die Bose-Einstein-Kondensate beschreibt.¹ Die Hamilton-Jacobi-Gleichung (8) ist ebenfalls nichtlinear (die Hamiltonfunktion ist quadratisch in p !).

¹In diesen kommt in der Vielteilchen-Schrödingergleichung neben dem Fallenpotential V noch eine Art Hartkugel-Wechselwirkung $c\delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ hinzu. Aus dieser resultiert in einer sog. "mean field" Beschreibung die Nichtlinearität $|\psi(\mathbf{r})|^2$.

1.4 Randbedingungen

Ein Problem ist erst dann vollständig beschrieben, wenn neben der Differentialgleichung auch noch *Randbedingungen* gegeben werden. Die genaue Form der Randbedingungen folgt aus physikalischen Betrachtungen. Werden zu einer (linearen) Differentialgleichung mehrere Lösungen gefunden, so müssen die Lösungen so superponiert werden, dass die Randbedingungen erfüllt sind.

Man unterscheidet oft zwischen

Randwertproblemen Bei diesen Problemen werden die gesuchte Funktion (oder deren Ableitungen) auf dem Rand des Definitionsgebietes vorgegeben.

Anfangswertproblem Ist für eine Variable der Definitionsbereich offen (zum Beispiel die Zeit $t \in [0; +\infty)$), so spricht man für einen am Rand vorgegebenen “Anfangswert” auch von einem Anfangswertproblem.

1.4.1 Typen von Randbedingungen

Es werden auch verschiedene Typen von Randbedingungen unterschieden. Gängig sind

Dirichlet-Randbedingungen Bei diesen Randbedingungen wird der Funktionswert auf dem Rand vorgegeben.

Neumann-Randbedingungen Hier werden Ableitungen vorgegeben. Beispiel: Poissongleichung mit gegebener Normalableitung $\partial_{\mathbf{n}}\phi = f(\mathbf{r})$ auf $\mathbf{r} \in \text{Rand}$.²

Etwas exotischer sind sicherlich

Cauchy-Randbedingungen Cauchy-Randbedingungen mischen Neumann- und Dirichlet-Randbedingungen so, dass für die gesuchte Funktion f auf dem Rand

$$f(\mathbf{r} \in \text{Rand}) = g(\mathbf{r}) \quad \text{und} \quad \partial_{\mathbf{n}}f(\mathbf{r} \in \text{Rand}) = h(\mathbf{r})$$

gelten muss.

Robin-Randbedingungen Robin-Randbedingungen kombinieren Neumann- und Dirichlet-Randbedingungen in *einer* Gleichung:

$$af(\mathbf{r} \in \text{Rand}) + b\partial_{\mathbf{n}}f(\mathbf{r} \in \text{Rand}) = g,$$

wobei a, b und g beliebige auf dem Rand definierte Funktionen sein dürfen.

2 Lösungstechniken

Zur Lösung partieller Differentialgleichungen gibt es viele Techniken, zu diesen zählen:

Separation der Variablen Diese einfache, aber mächtige Methode führt durch einen geeignet gewählten Ansatz eine partielle Differentialgleichung in n Variablen auf n gewöhnliche Differentialgleichungen zurück, die sich dann leichter lösen lassen. Diese Methode führt oft zum Erfolg, wenn die Randbedingungen separabel sind.

²Die Normalableitung $\partial_{\mathbf{n}}$ ist definiert als $\partial_{\mathbf{n}}\phi = \mathbf{n} \cdot \text{grad } \phi$, wobei \mathbf{n} normal auf der betrachteten Fläche steht. Sie projiziert also die Normalkomponente aus dem Gradienten. Im Falle eines elektrostatischen Potentials ϕ ist $\partial_{\mathbf{n}}\phi = -\mathbf{E} \cdot \mathbf{n}$ also parallel zur Normalkomponente des elektrischen Feldes.

Methode der Greenschen Funktion/“Fundamentallösung” Mit dieser Methode lassen sich inhomogene lineare partielle Differentialgleichungen lösen. Die Idee ist hierbei, die Inhomogenität in eine Summe aus lauter “Punktquellen” zu zerlegen und das Problem für *eine* beliebig positionierte Punktquelle zu lösen. Aus der Linearität der Differentialgleichung lässt sich dann durch Summation/Integration die Lösung für eine *beliebige* Inhomogenität zusammenbauen.

Koordinatentransformationen Durch geeignete Koordinatentransformationen können partielle Differentialgleichungen einfacher werden oder gar in gewöhnliche Differentialgleichungen zerfallen.

Integraltransformationen Die Idee hierbei ist, eine Integraltransformation durchzuführen, die das Problem vereinfacht. Die Fourier-Transformation beispielsweise macht aus einer Ableitung nach der Variable, in der transformiert wird eine einfache Multiplikation. Die so erhaltene Gleichung lässt sich nach der Transformation lösen und die Lösung in der ursprünglichen Variable durch Rücktransformationen gewinnen.

Numerische Techniken Es gibt für praktisch jedes Problem gut entwickelte numerische Methoden. Später im Seminar wollen wir eine davon kennenlernen.

Diese Liste ist nicht vollständig. Im Folgenden wollen wir ein paar Beispiele rechnen.

2.1 Separation der Variablen

Unter der “Separation der Variablen” versteht man Ansätze von beispielsweise der Form

$$u(\mathbf{r}) = X(x)Y(y)Z(z) \quad (10)$$

$$\text{bzw. } u(\mathbf{r}) = X(x) + Y(y) + Z(z) \quad (11)$$

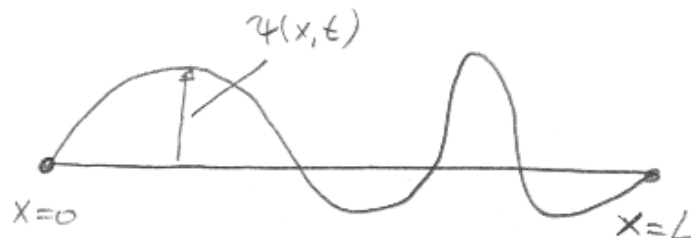
oder

$$u(\mathbf{r}, t) = U(\mathbf{r})T(t). \quad (12)$$

In diesen Ansätzen wird also die Abhängigkeit von einzelnen Variablen als Produkt oder Summe von Funktionen in nur einer Veränderlichen ausgedrückt. Diese Ansätze vereinfachen Probleme oftmals. Drei Beispiele aus der Physik sollen das verdeutlichen. Diese Methode eignet sich besonders, wenn die Randbedingungen separabel sind. In diesem Fall sind geeignete Koordinaten zu wählen.

2.1.1 Wellengleichung für eine schwingende Saite

Eine Saite sei bei $x = 0$ und $x = L$ fest eingespannt. Die Auslenkung der Saite am Punkt x zur Zeit t bezeichnen wir mit $\psi(x, t)$.



Die Wellengleichung in einer Dimension lautet

$$\partial_x^2 \psi(x, t) - \frac{1}{c^2} \partial_t^2 \psi(x, t) = 0. \quad (13)$$

Wir komplettieren das Problem durch die Randbedingungen

$$\psi(x = 0, t) = 0 \quad (14)$$

$$\text{sowie } \psi(x = L, t) = 0, \quad (15)$$

und die Anfangsbedingungen

$$\psi(x, t = 0) = f(x), \quad (16)$$

$$\text{und } \psi'(x, t = 0) = 0. \quad (17)$$

Die Randbedingungen müssen so gelten, weil die Saite fest eingespannt ist; die beiden Anfangsbedingungen für Auslenkung und Geschwindigkeit sind notwendig, weil die Differentialgleichung zweiter Ordnung in der Zeit ist. Diese “Anfangs-Randwertaufgabe” lösen wir nun mit dem Separationsansatz

$$\psi(x, t) = \phi(x)\tau(t), \quad (18)$$

in dem wir Orts- und Zeitabhängigkeit separieren.

Einsetzen des Ansatzes in die Differentialgleichung führt auf

$$\tau\phi'' - \frac{1}{c^2}\phi\tau'' = 0, \quad (19)$$

oder, nach Division durch $\phi\tau$, auf

$$\frac{\phi''}{\phi} - \frac{1}{c^2} \frac{\tau''}{\tau} = 0. \quad (20)$$

Die Striche stehen für Ableitungen nach dem jeweiligen Argument. Der erste Summand hängt nur von x ab, der zweite Summand nur von t . Die Gleichung soll für alle x und alle t erfüllt sein, also müssen beide Summanden für sich konstant identisch der so genannten Separationskonstanten sein! Die Konstante nehmen wir zunächst als positiv an und schreiben sie als $+\alpha^2$. Wir haben nun durch die Separation aus einer *partiellen* Differentialgleichung in zwei Variablen zwei *gewöhnliche* in je einer Variablen gewonnen! Wir lösen zunächst die Gleichung für die Zeitabhängigkeit,

$$\tau''(t) = +c^2\alpha^2\tau(t). \quad (21)$$

Die Gleichung hat die beiden Lösungen $\tau(t) = e^{\pm\alpha ct}$. Diese können wir allerdings physikalisch ausschließen, die eine der beiden Lösungen über alle Maßen wächst.

Wir wählen also die Konstante negativ als $-\alpha^2$. Die Gleichung

$$\tau''(t) = -c^2\alpha^2\tau(t) \quad (22)$$

hat die Lösung

$$\tau(t) = A \sin(cat) + B \cos(cat),$$

die wir mit $\omega := c\alpha$ als

$$\tau(t) = A \sin(\omega t) + B \cos(\omega t), \quad (23)$$

notieren.

Analog dazu ist die Lösung zu

$$\phi''(x) = -\alpha^2 \phi(x) \quad (24)$$

gleich

$$\phi(x) = C \sin(\alpha x) + D \cos(\alpha x) . \quad (25)$$

Mit den Randbedingungen bestimmen wir nun die Lösungen etwas genauer. Aus $\psi(x = 0, t) = \psi(x = L, t) = 0$ folgt

$$D = 0 , \quad (26)$$

$$\alpha = \frac{\pi m}{L} \quad m \in \mathbb{N} . \quad (27)$$

Wir definieren $k_m := \alpha_m = \pi m/L = \omega/c$.³ Für jedes m haben wir dann also eine Lösung

$$\psi_m(x, t) = \phi_m(x) \tau_m(t) = [A_m \sin(\omega_m t) + B_m \cos(\omega_m t)] C_m \sin(k_m x) \quad (28)$$

Weiterhin muss auch $\dot{\psi}(x, t = 0) = 0$ gelten, woraus

$$A_m = 0 \quad (29)$$

folgt. Mit einer weiteren Abkürzung $E_m := B_m C_m$ bleibt also für festes m

$$\psi_m(x, t) = E_m \cos(\omega_m t) \sin(k_m x) . \quad (30)$$

Wir müssen nun alle Lösungen für verschiedene m so superponieren, dass die Anfangsbedingung (16) erfüllt ist. Die allgemeine Lösung ist also

$$\psi(x, t) = \sum_{m=1}^{+\infty} E_m \cos(\omega_m t) \sin(k_m x) . \quad (31)$$

Um nun die E_m aus der Anfangsbedingung (16) zu bestimmen, erinnern wir uns an

$$\int_0^L \sin\left(\frac{\pi n}{L} x\right) \sin\left(\frac{\pi m}{L} x\right) dx = \frac{L}{2} \delta_{mn} . \quad (32)$$

was eine Orthogonalitätsrelation ist.⁴ Wir nutzen diese Relation nun zusammen mit (31) in (16) aus – dazu multiplizieren wir die Gleichung mit $\sin\left(\frac{\pi n}{L} x\right)$ und integrieren über die Saite. Es ergibt sich⁵

$$\begin{aligned} \int_0^L \psi(x, t = 0) \sin(k_n x) dx &= \sum_{m=1}^{+\infty} E_m \int_0^L \sin(k_m x) \sin(k_n x) dx \\ &= \sum_{m=1}^{+\infty} E_m \frac{L}{2} \delta_{nm} \\ &= \frac{L}{2} E_n . \end{aligned} \quad (33)$$

³Den Zusammenhang zwischen Wellenzahl k (“Frequenz im Ort”) und Frequenz ω (“Frequenz in der Zeit”) nennt man auch Dispersionsrelation – diese ist hier linear, $\omega = ck$.

⁴Die Sinusfunktionen sind für Indizes $m \neq n$ auf dem Intervall $[0; L]$ orthogonal.

⁵Summation und Integration dürfen vertauscht werden.

Die Koeffizienten E_m , die unsere Lösung (31) der Anfangsbedingung genügen lassen sind also durch

$$E_m = \frac{2}{L} \int_0^L \psi(x, t=0) \sin(k_m x) dx \quad (34)$$

bestimmt.

Man beachte den engen Zusammenhang unserer Lösung mit Fourier-Reihen. Zur Wahl des Vorzeichens der Separationskonstante sei gesagt, dass bei Differentialgleichungen des betrachteten Typs das Vorzeichen entweder oszillierendes oder exponentielles Verhalten führt.

2.1.2 Laplace-Gleichung für einen Kreis

Zu lösen sei die zweidimensionale Laplace-Gleichung

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right] \phi(x, y) = 0 \quad (35)$$

mit der Randbedingung, dass ϕ auf dem Einheitskreis $r = 1$ durch

$$\phi(r = 1, \theta) = u(\theta) \quad (36)$$

gegeben ist.

Die Symmetrie der Randbedingung spricht hier für die Verwendung von Polarkoordinaten. Der Laplaceoperator in ebenen Polarkoordinaten (r, θ) ist

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} . \quad (37)$$

Hier ist schon ersichtlich, dass die zu lösende Gleichung variable Koeffizienten haben wird – die Gleichung wird allerdings separabel sein!

Der Separationsansatz $\phi = \phi(r, \theta) = R(r)\Theta(\theta)$ führt auf

$$\Theta R'' + \frac{1}{r} \Theta R' + \frac{1}{r^2} R \Theta'' = 0 , \quad (38)$$

oder – nach Multiplikation mit $r^2/\Theta R$, auf

$$\underbrace{r^2 \frac{R''}{R} + r \frac{R'}{R}}_{=+\alpha^2} = - \underbrace{\frac{\Theta''}{\Theta}}_{=-\alpha^2} . \quad (39)$$

Das Vorzeichen der Separationskonstante wurde hier schon so gewählt, dass die Lösung periodisch in der (periodischen) Koordinate θ sein wird. Wir haben also durch eine ähnliche Vorgehensweise und ähnlicher Argumentation wie im vorigen Abschnitt wieder zwei *gewöhnliche* Differentialgleichungen gewonnen:

$$\Theta''(\theta) + \alpha^2 \Theta(\theta) = 0 \quad (40)$$

$$r^2 R''(r) + r R'(r) - \alpha^2 R(r) = 0 \quad (41)$$

Die erste Gleichung wird gelöst von

$$\begin{aligned} \Theta(\theta) &= A e^{\pm i\alpha\theta} \\ \text{beziehungsweise} \quad \Theta(\theta) &= A_1 \sin(\alpha\theta) + A_2 \cos(\alpha\theta), \end{aligned} \quad (42)$$

woraus wir eine Aussage über α gewinnen. Weil aufgrund der Symmetrie des Problems die Lösung 2π -periodisch sein muss, also

$$\Theta(\theta + 2\pi) = \Theta(\theta) \quad (43)$$

gelten muss, kann α nur eine ganze Zahl sein. Damit und mit der speziellen Form der Gleichung für R (r^n vor n -ter Ableitung) motiviert sich ein Potenzansatz für $R(r)$. Mit $R(r) = br^n$ finden wir durch einsetzen

$$\begin{aligned} r^2 n(n-1)r^{n-2} + rnr^{n-1} - \alpha^2 r^n &= 0 \\ \Leftrightarrow (n^2 - n + n)r^n - \alpha^2 r^n &= 0, \end{aligned} \quad (44)$$

woraus wir $n = \pm\alpha$ ablesen. Von der Superposition

$$R(r) = br^{+\alpha} + cr^{-\alpha} \quad (45)$$

können wir allerdings nur den ersten Term berücksichtigen, da der zweite Term für $r \rightarrow 0$ divergiert. Zusammengefasst haben wir nun die Lösungen

$$\phi_n(r, \theta) = r^n [E \sin(n\theta) + F \cos(n\theta)], \quad (46)$$

wobei Konstanten zusammengeführt wurden. Diese Lösungen müsste man jetzt so superponieren, dass die Randbedingung (36) erfüllt ist. Wenn man das Potential auf dem Rand in eine Fourierreihe zerlegt bedarf es dafür nicht mehr als einen Koeffizientenvergleich!

2.1.3 Von der zeitabhängigen Schrödingergleichung zur zeitunabhängigen Schrödingergleichung

Die Schrödingergleichung für ein zeitunabhängiges Potential $V = V(\mathbf{r})$ lautet

$$\underbrace{\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right]}_{:=\hat{H}} \psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t). \quad (47)$$

Der Operator $i\hbar\partial_t$ auf der rechten Seite ist dabei der Energie-Operator \hat{E} , der der Eigenwertgleichung

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}, t) = \hat{E}\psi(\mathbf{r}, t) = E\psi(\mathbf{r}, t) \quad (48)$$

genügen muss. Der Ansatz $\psi(\mathbf{r}, t) = \phi(\mathbf{r})\tau(t)$ führt dann auf

$$\phi(\mathbf{r}) i\hbar \partial_t \tau(t) = \phi(\mathbf{r}) E \tau(t) \quad (49)$$

beziehungsweise auf

$$\phi(\mathbf{r}) [i\hbar \partial_t \tau(t) - E \tau(t)] = 0, \quad (50)$$

was nach dem Satz vom Nullprodukt für alle Lösungen der *gewöhnlichen* Differentialgleichung

$$\tau'(t) = -\frac{i}{\hbar} E \tau(t) \quad (51)$$

erfüllt ist. Die Lösung dieser Gleichung ist

$$\tau(t) = e^{-iEt/\hbar}. \quad (52)$$

Setzt man das in (47) ein, so erhält man die *zeitunabhängige* Schrödingergleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right] \phi(\mathbf{r}) = E \phi(\mathbf{r}), \quad (53)$$

die natürlich leichter zu lösen ist als die zeitabhängige Version dieser Gleichung. Die Gesamtlösung $\psi(\mathbf{r}, t) = \phi(\mathbf{r}) e^{-iEt/\hbar}$ hat also eine zur Zeit proportionale Phase.

Literatur

- [1] S. J. Farlow, *Partial Differential Equations for Scientists and Engineers*. Dover, 1993.
- [2] G. Arfken and H. Weber, *Mathematical Methods for Physicists*. Elsevier, 2005.