

Skriptum zur Vorlesung

Mathematische Modellierung

Wintersemester 2006/2007

Martin Burger

Institut für Numerische und Angewandte Mathematik

martin.burger@uni-muenster.de

<http://www.math.uni-muenster.de/u/burger/>

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Grundprinzipien der Mathematischen Modellierung	5
2.1	Modellierungszyklus	5
2.2	Dimensionlose Variable und Skalierung	7
2.3	Sensitivitätsanalyse	10
2.4	Modellvereinfachung	11
3	Wärmeleitung	13
3.1	Thermodynamik	13
3.2	Transport	14
3.3	Materialgesetze	15
3.4	Die Wärmeleitungsgleichung	15
3.5	Phasenübergänge	19
4	Mechanik	21
4.1	Teilchenmechanik	21
4.2	Teilchenmechanik in Festkörpern	25
4.3	Von der Teilchenmechanik zum Kontinuum	26
4.4	Kontinuumsmechanik	29
4.5	Gleichungen der Strömungsmechanik	36
5	Akustik und Elektromagnetik	45
5.1	Die akustische Wellengleichung	45
5.2	Die Helmholtz-Gleichung	47
5.3	Die Maxwell-Gleichungen	48
5.4	Zeitharmonische Wellen	50
5.5	Potentialgleichung und Transversalwellen	51

Kapitel 1

Einleitung

Die Herleitung, Analysis, numerische Simulation, mathematischer Modelle von realen Prozessen ist die Grundaufgabe der modernen angewandten Mathematik. Selbst wenn man sich nur für Teilaspekte davon interessiert, ist es meist wichtig, die Bedeutung und Struktur der zu Grunde liegenden mathematischen Modelle zu verstehen. Zusammen mit den Vorlesungen *Mathematische Modelle in den Naturwissenschaften* und *Mathematische Modelle in den Wirtschaftswissenschaften* soll diese Vorlesung eine Einführung in die wichtigsten mathematischen Modelle verschiedener Anwendungsgebiete geben sowie die Grundlagen für eine Reihe weiterführender Lehrveranstaltungen bereit stellen (siehe die Auflistung im Anhang).

Als ein mathematisches Modell kann man grundsätzlich jede *berechenbare* (in deterministischem oder stochastischem Sinn) Menge mathematischer Vorschriften, Gleichungen und Ungleichungen bezeichnen, die einen Aspekt eines realen Vorgangs beschreiben sollen. Dabei sollte man sich von vornherein bewusst sein, dass es sich bei einem Modell immer um eine Vereinfachung handelt, und der reale Vorgang so gut wie nie in seiner vollen Komplexität beschrieben wird. Die erste Unterscheidung erfolgt in

- *qualitative Modelle*, d.h., Modelle, die prinzipiell die Struktur eines Prozesses beschreiben sollen und gewisse qualitative Voraussagen (etwa über langfristige Geschwindigkeit von Wachstum) ermöglichen sollen, aber keine expliziten Werte für die Variablen des Systems liefern.
- *quantitative Modelle*, d.h., Modelle, die für quantitative Voraussagen der Werte von gewissen Variablen benutzt werden sollen.

Qualitative Modelle verwendet man oft in den Wirtschaftswissenschaften (z.B. um die Dynamik der Preisbildung zu verstehen) und auch in manchen Naturwissenschaften wie der Ökologie (ein qualitatives Modell kann genügen um zu verstehen, ob sich ein ökologisches Gleichgewicht ausbildet oder ob es zu einer möglichen Katastrophe kommt). Im Allgemeinen bevorzugt man in Naturwissenschaft und Technik aber quantitative Modelle, und auch wir werden uns im Laufe dieser Vorlesung mit solchen beschäftigen.

Bevor man ein mathematisches Modell entwickelt oder bestehende Modelle auf einen speziellen Prozess anwendet, sollte man sich Klarheit über die (Orts- und Zeit-) Skalen verschaffen, auf denen man den Prozess betrachtet, und jene Skalen, die darauf eine Einwirkung haben. So werden etwa für die Beschreibung einer Strassenbeleuchtung quantenmechanische Effekte kaum von Bedeutung sein, andererseits können zum Beispiel bei einer turbulenten Strömung sehr kleine Wirbel die gesamte Dynamik stark beeinflussen. Die Reduktion auf sogenannte

relevante Skalen ist wichtig, um das Modell in einer sinnvollen Grösse zu halten, die dann auch eine numerische Simulation in akzeptabler Zeit erlaubt. Ebenso ist es wichtig, nur jene Effekte zu modellieren, die den Prozess auch tatsächlich beeinflussen, um das Modell und die Rechenzeit klein zu halten. Zum Beispiel könnte man bei der Modellierung einer Strömung auch die Wärmeleitung darin mitmodellieren. Da kleine Temperaturschwankungen aber vernachlässigbare Auswirkungen haben, wird man oft darauf verzichten, nur bei Prozessen mit starken Temperaturschwankungen (z.B. Gasturbinenbrennkammern) ist die Kopplung von Strömungs- und Wärmeleitungsmodellen unerlässlich.

Eine weitere Unterscheidung von mathematischen Modellen besteht in der Natur der Unbekannten,

- *Diskrete Modelle* bestehen aus einer endlichen Anzahl von Partikeln (Atomen, Molekülen, ...), deren Eigenschaften (Position, Geschwindigkeit, Spin, ...) durch das Modell beschrieben werden.
- *Kontinuumsmodelle* beschreiben die Dichten der Variablen, normalerweise als Funktionen von Ort und Zeit.

Da die meisten technischen Modelle eher auf makroskopischen Skalen von Interesse sind, werden wir in dieser Vorlesung vor allem Kontinuumsmodelle diskutieren, dabei aber in vielen Fällen auch Links zu entsprechenden diskreten Modellen herstellen.

Diese Vorlesung wird sich von vielen Lehrveranstaltungen (vor allem jenen des ersten Studienabschnitts) formal etwas unterscheiden, da wir hier weniger Augenmerk auf “exakte Mathematik” und Beweise legen, sondern eher versuchen unsere mathematischen Kenntnisse auf die Realität anzuwenden. Im Gegensatz zu einem rein mathematischen Problem kann man bei der mathematischen Modellierung auch nicht davon ausgehen, dass es eine “richtige” Antwort gibt, man kann nur versuchen aus einer Vielzahl von Möglichkeiten jene auszuwählen, die den gewünschten Zielen am ehesten genügt. Weiters werden wir viele Prinzipien nicht in allgemeingültigen Theoremen oder universellen Regeln diskutieren, sondern basierend auf speziellen Beispielen, da es meist keine allgemeingültigen Regeln für die Erstellung eines Modells gibt.

Kapitel 2

Grundprinzipien der Mathematischen Modellierung

Im folgenden diskutieren wir einige Grundprinzipien mathematischer Modellierung und des Arbeitens mit mathematischen Modellen. Ausführlichere Darstellung dieser Inhalte findet man in [10, 12].

2.1 Modellierungszyklus

Der Zyklus der mathematischen Modellierung läuft im allgemeinen wie folgt ab:

1. Verständnis des realen Problems.
2. Wahl der Skalen und der entsprechenden mathematischen Beschreibung.
3. Entwicklung eines mathematischen Modells.
4. Sensitivitätsanalyse und eventuelle Vereinfachung des Modells.
5. Numerische Simulation des Modells.
6. Interpretation der Lösung.
7. Vergleich der Lösung mit realen Daten.
8. Falls nötig, Verfeinerung des Modells oder (optimale) Änderung von Parametern.

Nicht zu vernachlässigen ist auch ein weiterer, abschliessender Schritt, nämlich die Präsentation der Ergebnisse. Damit werden wir uns im Proseminar beschäftigen.

Mathematische Modellierung ist, vor allem in der Technik, keine Einbahnstrasse. Die Modellierung verfolgt meist das klare Ziel durch besseres Verständnis gezielt in den Prozess eingreifen zu können. Dies kann durch die Anpassung von Parametern (Kontrolle) oder überhaupt durch Auslegung eines neuen Prozesses (Design) erfolgen. Deshalb werden sich in der Praxis die obigen Schritte stark gegenseitig (und nicht nur in aufsteigender Richtung) beeinflussen. So kann zum Beispiel die numerische Simulation und Interpretation der Lösung zum besseren Verständnis des Verhaltens des ursprünglichen Problems beitragen, oder auch dazu führen dass man die ursprüngliche Wahl der Skalen und des Modells korrigieren muss. Der gesamte Modellierungszyklus mit seinen Wechselwirkungen ist in Abbildung 2.1 dargestellt.

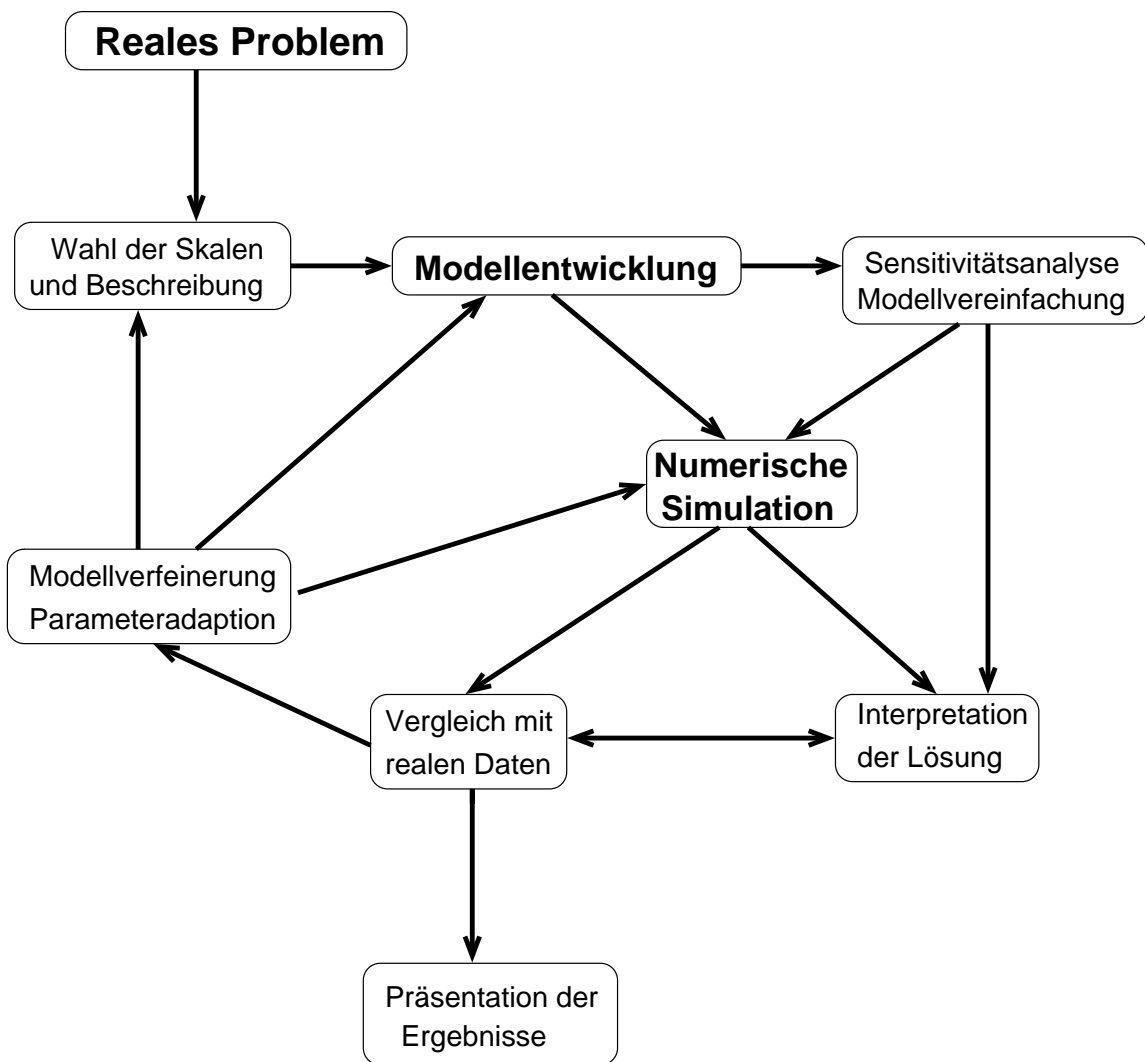


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung des Modellierungszyklus.

Der Vergleich mit realen Daten ermöglicht es oft, Fehlerquellen zu finden und zu eliminieren. Diese können von Modellierungsfehlern über Fehler bei der numerischen Berechnung (Diskretisierungsfehler, Verfahrensfehler, Rundungsfehler) bis hin zu Programmierfehlern bei der Implementierung reichen. Um diese effizient aufspüren zu können ist es wichtig, geeignete (einfache) Testfälle zu betrachten.

Für die weitere Diskussion der einzelnen Schritte werden wir nun ein “generisches Modell” verwenden, d.h., eine Abbildung der Form

$$y = \mathcal{M}(x(p); p), \quad (2.1)$$

wobei $\mathcal{M} : \mathcal{X} \times \mathcal{P} \rightarrow \mathcal{Y}$ eine Abbildung zwischen Mengen in (möglicherweise unendlichdimensionalen) Banachräumen ist. Wir werden $x \in \mathcal{X}$ als die *Variablen*, $y \in \mathcal{Y}$ als Output, und $p \in \mathcal{P}$ als externe *Parameter* betrachten. Wir betrachten das Modell zunächst als abstrakte Abbildungsvorschrift, in der Praxis wird die Auswertung des Operators \mathcal{M} aber die Lösung von Gleichungssystemen, Optimierungsproblemen, oder stochastische Simulationen erfordern, aus denen man die Variablen $x(p)$ bestimmt.

2.2 Dimensionlose Variable und Skalierung

Ein wichtiger erster Schritt bei der Betrachtung eines realen Modells ist Überführung in eine dimensionslose Form und eine geeignete Skalierung. Die Variablen und Parameter in einem technischen Modell haben im allgemeinen eine physikalische Dimension und es kann nur im Vergleich mit anderen auftretenden Grössen entschieden werden, ob ein Wert gross oder klein ist. Eine Länge von einem Millimeter ist zum Beispiel für die Simulation der Wärmeleitung in einem Wohnraum relativ klein, für die Simulation eines modernen Halbleitertransistors aber riesig. Um absolute Grössen zu erhalten, ist es wichtig alle auftretenden Grössen richtig zu skalieren.

Sei nun $x_i \in \mathbb{R}$ eine Komponente der Variablen, dann kann man die Skalierung als eine Variablentransformation der Form

$$\tilde{x}_i = f_i(x_i)$$

mit einer geeigneten bijektiven Funktion $f_i : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ betrachten. Optimalerweise sollte für in der Praxis auftretende Werte von x_i immer $\tilde{x}_i \approx 1$ oder $|\tilde{x}_i| \leq 1$ gelten. Um dies zu erreichen, muss man *typische Werte* der Variable x_i abschätzen, was meist eine grundlegende Einsicht in die Physik des Problems erfordert.

Die neue Variable \tilde{x}_i heisst *dimensionslos*, falls $f_i(x)$ keine physikalische Dimension hat. Die einfachste und häufigst eingesetzte Art der Skalierung ist eine affin-lineare, d.h.

$$\tilde{x}_i = a_i x_i + b_i,$$

mit Konstanten $a_i, b_i \in \mathbb{R}$. Dabei hat b_i keine physikalische Dimension und a_i^{-1} die selbe Dimension wie x_i , man wählt dann a_i als einen typischen Wert oder Maximalwert von x_i .

In der gleichen Weise wie die Variablen x_i kann man auch den Output y_j (und folglich die Abbildung \mathcal{M} skalieren und in dimensionslose Form \tilde{y}_j transformieren. Für die Parameter p_k bleibt dann weniger Freiheit, bei richtiger Skalierung erhält man automatisch dimensionslose Parameter \tilde{p}_k . Dies werden wir an einem einfachen Beispiel erläutern.

Beispiel 2.1. Wir betrachten den Flug eines (sehr kleinen) Balls, der über einer Ebene (mit Normale $(0, 0, 1)$) mit einer Kraft $\mathbf{V} = (V_1, V_2, V_3)$ abgeschossen wird und wollen als Output

seine maximal erreichte Höhe und die Entfernung bis zum Auftreffen auf der Ebene berechnen. Dazu führen wir zunächst die Zeit $t \in \mathbb{R}$ und die zeitabhängigen Variablen (x_1, x_2, x_3) ein, um die Ortskoordinaten des Balls zu bestimmen (wir ignorieren seinen Radius und betrachten den Ball einfach als Massepunkt). Wir wählen die Zeitskala und die Anfangswerte so, dass

$$\mathbf{x}(0) = (x_1(0), x_2(0), x_3(0)) = (0, 0, 0)$$

und

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt}(0) = \left(\frac{dx_1}{dt}(0), \frac{dx_2}{dt}(0), \frac{dx_3}{dt}(0) \right) = \mathbf{V} = (V_1, V_2, V_3)$$

gilt.

Aus den Newton'schen Bewegungsgleichungen erhalten wir dann (es wirkt nur die Schwerkraft)

$$\text{Masse} \times \text{Beschleunigung} = m \frac{d^2\mathbf{x}}{dt^2} = \text{Kraft} = -mg \frac{R^2}{(x_3(t) + R)^2} (0, 0, 1),$$

wobei m die Masse des Balls, g die Erdbeschleunigung und R der Erdradius ist. Um den Output zu berechnen benötigen wir noch Variablen T_1, T_2 und die Gleichungen

$$\frac{dx_3}{dt}(T_1) = 0, \quad x_3(T_2) = 0$$

um diese zu bestimmen. Der Output ist dann gegeben durch

$$y_1 = x_3(T_1), \quad y_2 = \sqrt{x_1(T_2)^2 + x_2(T_2)^2}.$$

Zusammenfassend hat das Modell also die Variablen t, T_1, T_2 , und $\mathbf{x}(t)$, die Parameter m, g, R , und \mathbf{V} , sowie den Output y_1, y_2 . Wir beginnen nun die Skalierung mit den Zeitvariablen und führen eine typische Zeitskala τ ein. Die transformierten dimensionslosen Variablen erhalten wir als

$$(\tilde{t}, \tilde{T}_1, \tilde{T}_2) = \tau^{-1}(t, T_1, T_2).$$

In gleicher Weise skalieren wir die Ortvariable mittels typischer Längen ℓ_i als

$$\tilde{x}_i(\tilde{t}) = \tilde{x}_i(\tau^{-1}t) = \ell_i^{-1}x_i(t).$$

Durch die Umskalierung der Zeit ändert sich auch die Zeitableitung, die wir mittels Kettenregel als

$$\frac{d\tilde{x}_i}{d\tilde{t}} = \frac{d(\ell_i^{-1}x_i)}{dt} \frac{dt}{d\tilde{t}} = \frac{\tau}{\ell_i} \frac{dx_i}{dt}$$

berechnen. Setzen wir diese Identität in die Formel für den Anfangswert ein, so erhalten wir

$$\frac{d\tilde{x}_i}{d\tilde{t}}(0) = \frac{\tau}{\ell_i} \frac{dx_i}{dt} = \frac{\tau}{\ell_i} V_i.$$

D.h., aus der Skalierung der Orts- und Zeitvariablen erhalten wir automatisch die dimensionslosen Geschwindigkeiten $\frac{\tau V_i}{\ell_i}$. In diesem Fall sind die gegebenen Werte aber die Geschwindigkeiten und wir kennen eigentlich keine typischen Längen, sodass wir die Skalierung als $\ell_i = \tau V_i$ wählen. Dies ist unmittelbar einleuchtend, denn wenn die Geschwindigkeit in eine Richtung

doppelt so gross ist wie in eine andere, wird der Ball auch ungefähr die doppelte Länge in dieser Richtung zurcklegen. Die dimensionslosen Anfangsbedingungen sind nun einfach

$$\frac{d\tilde{x}_i}{dt}(0) = 1.$$

Durch Anwendung der Kettenregel auf die zweiten Ableitungen der Bewegungsgleichung erhalten wir

$$\frac{d^2\tilde{x}_i}{d\tilde{t}^2} = \frac{\tau^2}{\ell_i} \frac{d^2x_i}{dt^2},$$

und damit die dimensionslosen Bewegungsgleichungen

$$\frac{d^2\tilde{x}_i}{d\tilde{t}^2}(\tilde{t}) = 0, \quad i = 1, 2$$

und

$$\frac{d^2\tilde{x}_3}{d\tilde{t}^2}(\tilde{t}) = -\frac{g\tau^2}{\ell_3} \frac{R^2}{(\ell_3^2\tilde{x}_3(\tilde{t}) + R)^2} = -\frac{\alpha}{(\beta\tilde{x}_3(\tilde{t}) + 1)^2},$$

mit den dimensionslosen Parametern $\alpha = \frac{g\tau^2}{\ell_3}$ und $\beta = \frac{\ell_3^2}{R^2}$. Wir haben nun noch die Freiheit, die typische Zeiteinheit τ zu wählen und können dies so realisieren, dass $\alpha = 1$ gilt. Daraus erhalten wir dann mit den obigen Gleichungen für ℓ_i

$$\tau = \frac{V_3}{g}, \quad \ell_i = \frac{V_3 V_i}{g}.$$

Man beachte, dass man aus der Skalierung automatisch Information über typische Orts- und Zeitskalen in Abhängigkeit der gegebenen Parameter (hier der Geschwindigkeiten und Erdbeschleunigung bekommt). Andererseits ist diese Wahl nicht eindeutig, wir hätten auch eine Skalierung so wählen können, dass $\beta = 1$ gilt.

Für den Output können wir die natürlichen Skalierungen

$$\tilde{y}_1 = \ell_3^{-1} y_1, \quad \tilde{y}_2 = \min\{\ell_1^{-1}, \ell_2^{-1}\} y_2$$

verwenden. Nehmen wir an, das $\ell_2 < \ell_1$ gilt, dann ist

$$\tilde{y}_1 = \tilde{x}_3(\tilde{T}_1), \quad \tilde{y}_2 = \sqrt{\tilde{x}_1(\tilde{T}_2)^2 + \gamma\tilde{x}_2(\tilde{T}_2)^2},$$

mit $\gamma = \frac{\ell_2^2}{\ell_1^2} < 1$.

Im resultierenden dimensionslosen System treten nur mehr die (dimensionslosen) Parameter $\beta = \frac{V_3^4}{R^2 g^2}$ und $\gamma = \frac{V_2^2}{V_1^2}$ auf, d.h. die Anzahl der Parameter reduziert sich von ursprünglich sechs auf zwei. So ein Verhalten ist typisch, es gibt fast immer redundante Parameter (hier die Masse m) bzw. weitere die man durch die Skalierung eliminiert. Die am Ende auftretenden Parameter sind fast immer relative Grössen zwischen den ursprünglichen Parametern, man nennt sie *effektive Parameter*.

2.3 Sensitivitätsanalyse

Ein weiterer wichtiger Aspekt der Modellierung ist die Sensitivitätsanalyse. Man betrachtet dabei die Sensitivität des Systems bezüglich der Parameter p . Im speziellen ist man daran interessiert, wie sich der Output des Modells bei kleinen Variationen der Parameter ändern wird.

Wenn wir ein generisches Modell mit Parametern p betrachten, so können wir den Output auch als Funktion der Parameter betrachten, d.h., $y = y(p)$. Bei einer kleinen Variation Δp der Parameter können wir die Änderung des Outputs gut durch eine Taylor-Approximation erster Ordnung beschreiben, d.h.,

$$y(p + \Delta p) \approx y(p) + \frac{\partial y}{\partial p}(p)\Delta p.$$

Für die relative Änderung haben wir dann die Abschätzung

$$\frac{\|\Delta y\|}{\|\Delta p\|} = \frac{\|y(p + \Delta p) - y(p)\|}{\|\Delta p\|} \preceq \left\| \frac{\partial y}{\partial p}(p) \right\|.$$

Damit können wir die relative Änderung erster Ordnung durch die Grösse der Ableitung nach dem Parameter abschätzen, man nennt diese deshalb auch *Sensitivität*.

Wir betrachten eine Sensitivitätsanalyse für das obige Beispiel 2.1 bezüglich einer Änderung der Geschwindigkeiten V_i . Wir beginnen mit der Sensitivität des Outputs y_1 bezüglich der vertikalen Anfangsgeschwindigkeit V_3 . Für die Variation gilt

$$\frac{\partial y_1}{\partial V_3} = \frac{\partial x_3}{\partial V_3}(T_1) + \frac{\partial x_3}{\partial t}(T_1) \frac{\partial T_1}{\partial V_3} = \frac{\partial x_3}{\partial V_3}(T_1).$$

Weiters können wir Anfangsbedingungen und Bewegungsgleichung bezüglich V_3 differenzieren, dies liefert

$$\frac{\partial x_3}{\partial V_3}(0) = 0, \quad \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial x_3}{\partial V_3}(0) = 1,$$

und

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \frac{\partial x_3}{\partial V_3} = 2g \frac{R^2}{(x_3 + R)^3} \frac{\partial x_3}{\partial V_3}.$$

Dieses System können wir als Anfangswertproblem für die Funktion $u(t) := \frac{\partial x_3}{\partial V_3}(t)$ sehen und da wir einen Anfangswert der Grössenordnung 1 haben, müssen wir auch mit

$$\left\| \frac{\partial y_1}{\partial V_3} \right\| = \|u(T_1)\| = \mathcal{O}(1)$$

rechnen. Dies bedeutet, dass V_3 einen starken Einfluss auf y_1 hat, was physikalisch unmittelbar einleuchtet, denn der Ball wird umso höher fliegen, umso schneller er in die vertikale Richtung abgeschossen wird.

Analog können wir die Sensitivität bezüglich V_1 betrachten. Dabei erhalten wir

$$\frac{\partial x_3}{\partial V_1}(0) = 0, \quad \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial x_3}{\partial V_1}(0) = 0,$$

und

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \frac{\partial x_3}{\partial V_1} = 2g \frac{R^2}{(x_3 + R)^3} \frac{\partial x_3}{\partial V_1}.$$

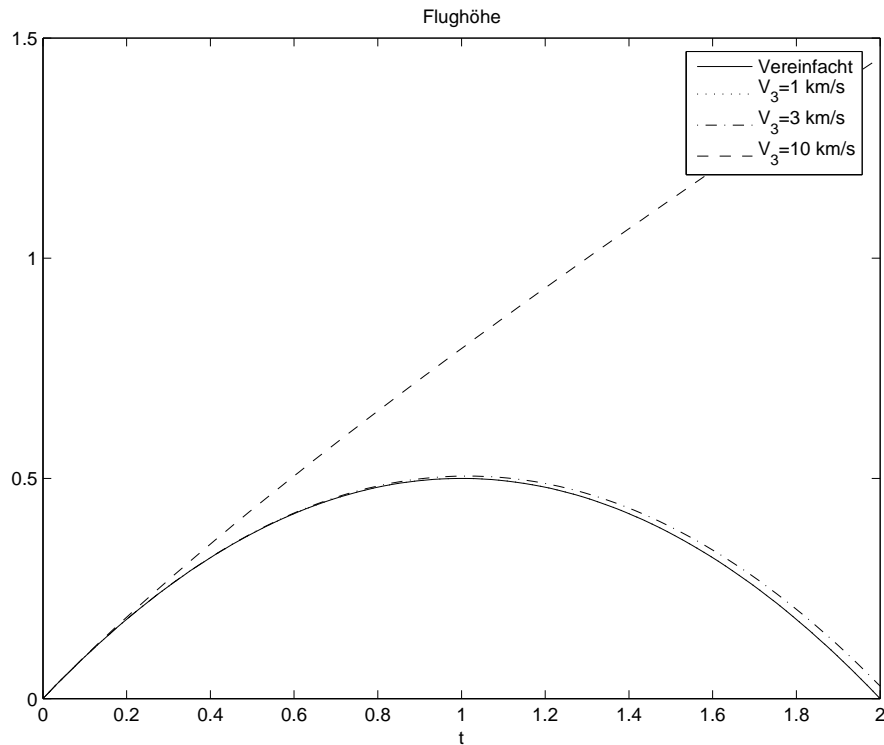


Abbildung 2.2: Lösung in Beispiel 2.1 für verschiedene Werte von β .

Dies ist ein homogenes Anfangswertproblem für $u(t) := \frac{\partial x_3}{\partial V_1}(t)$, woraus $u \equiv 0$ folgt. Daraus erhalten wir

$$\left\| \frac{\partial y_1}{\partial V_1} \right\| = \|u(T_1)\| = 0,$$

d.h., die Flughöhe hängt nicht von der Anfangsgeschwindigkeit V_1 ab, was ebenfalls physikalisch klar ist.

2.4 Modellvereinfachung

Sehr häufig enthalten Modelle Terme, die das Ergebnis nicht stark beeinflussen, aber die (numerische) Lösung des Modells erschweren. In solchen Fällen ist es wünschenswert, Modelle durch Weglassen dieser Terme zu vereinfachen.

Im speziellen vereinfacht man Modelle durch Eliminieren kleiner Terme und Parameter. Um entscheiden zu können, welche Terme klein sind, muss man das Problem geeignet skalieren, wie wir oben gesehen haben. Danach sieht man, welche Terme mit kleinen Parametern multipliziert werden und weggelassen werden können.

Wir illustrieren die Modellvereinfachung wieder für Beispiel 2.1. In der skalierten Version treten nur die Parameter β und γ auf. Im allgemeinen wird man vermuten, dass die Höhe des Balls klein im Vergleich zum Erdradius ist. Dieser Fall tritt ein für $V_3^2 \ll Rg$ und damit $\beta \ll 1$. Da β nun nur skalierte Terme multipliziert, können wir auch folgern, dass $\beta|\tilde{x}_i| \ll 1$

und damit $\beta\tilde{x}_i + 1 \approx 1$ gilt. Also vereinfachen wir die Bewegungsgleichung zu

$$\frac{d^2\tilde{x}_3}{d\tilde{t}^2} = -1$$

und erhalten die explizite Lösung $\tilde{x}_3 = \tilde{t} - \frac{\tilde{t}^2}{2}$, sowie $T_1 = \frac{V_3}{g}$ und $y_1 = \frac{V_3^2}{2g}$. Zum Vergleich des vereinfachten mit dem ursprünglichen Modell zeigt Abbildung 2.2 die Flughöhe aus dem vereinfachten Modell und die numerische Simulation des ursprünglichen Modells für drei verschiedene Werte der Anfangsgeschwindigkeit. Man erkennt, dass die Vereinfachung bis zu einer Anfangsgeschwindigkeit von 1km/s sehr gut das Modell approximiert. Bei 3km/s kommt es zu einer sichtbaren aber noch akzeptablen Abweichung vom Modell im Verlauf der Zeit, während das Verhalten bei 10km/s bereits völlig unterschiedlich ist.

Kapitel 3

Wärmeleitung

In diesem Abschnitt behandeln wir die mathematische Modellierung von Wärmeleitprozessen. Anhand dieser diskutieren wir die Grundprinzipien der Thermodynamik und wichtige Konzepte wie *Diffusion*, *Konvektion*, und *Strahlung*.

3.1 Thermodynamik

Das Grundkonzept der Thermodynamik ist jenes der *Wärme*, das einer ungeordneten Bewegung von Molekülen entspricht. Dieser Bewegung ist eine kinetische Energie zugeordnet, die als *Wärmeenergie* bezeichnet wird. Die *Temperatur* ist ein lineares Maß für den Mittelwert dieser Energie. Wenn m die Masse der Moleküle und v ihre Geschwindigkeit bezeichnet, dann ist der Druck p (Kraft pro Volumen) durch

$$pV = \frac{2}{3}N\overline{E_{kin}} = \frac{2}{3}N\left(\frac{m}{2}\overline{v^2}\right)$$

beschrieben, wobei V das Volumen, N die Anzahl der Teilchen, und $\overline{E_{kin}}$ die mittlere kinetische Energie der Teilchen bezeichnet. Verwendet man nun die Zustandsgleichung für ein ideales Gas

$$pV = NkT$$

mit der Temperatur T und der Boltzmann-Konstante $k = 1,38 \times 10^{-23} \text{J/K}$, so erhält man die Relation

$$T = \frac{m}{3k}\overline{v^2}.$$

Die weiteren wichtigen Konzepte der Thermodynamik sind energetischer Natur:

- Die *innere Energie* U bezeichnet die kinetische Energie der Teilchen des betrachteten Systems, die Energie der chemischen Bindungen der Teilchen des Systems, und ähnliche Effekte.
- Die *Enthalpie* H ist die Summe aus innerer Energie und Volumsarbeit, d.h., $H = U + pV$.

Die Erhaltung der Energie wird im ersten Hauptsatz der Thermodynamik beschrieben, der besagt, dass die Änderung der inneren Energie (ΔU) gleich der Summe aus zugeführter Wärmemenge (ΔQ) und geleisteter Arbeit ($-\Delta W$) ist. Da die Arbeit durch $W = pV$ gegeben ist, und somit $U + W = H$ gilt, können wir die Energieerhaltung als

$$\Delta(U + W) = \Delta H = \Delta Q \tag{3.1}$$

schreiben.

Um die Unordnung zu beschreiben (siehe zweiter Hauptsatz der Thermodynamik) verwendet man auch die *Entropie* S , die durch die Relation

$$\Delta Q = -T\Delta S$$

beschrieben ist, d.h., die Entropie ist gleich der zugeführten Wärmemenge pro Temperatur. Aus dem ersten Hauptsatz ist $\Delta S = \frac{\Delta H}{T}$. Der zweite Hauptsatz der Thermodynamik besagt nun, dass bei einem reversiblen Prozess $\Delta S = 0$ und bei einem irreversiblen Prozess $\Delta S > 0$ gilt.

3.2 Transport

Im Rahmen der kinetischen Gastheorie (cf. [3, 4]) kann Wärmeleitung als Energietransport durch die Teilchen interpretiert werden. Neben dem Energietransport können auch Masse und Impuls transportiert werden, diese Effekte sind vor allem im Falle von Strömungen interessant, wie wir später sehen werden.

Wir betrachten nun den Energietransport in einem Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ für positive Zeit $t > 0$. Zur makroskopischen Beschreibung verwenden wir kontinuierliche Dichten, d.h. für die Enthalpie h und für die Temperatur u , als Funktionen

$$h, u : \Omega \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}_+. \quad (3.2)$$

Die Grundlage für die Modellierung ist der erste Hauptsatz der Thermodynamik. Betrachten wir ein beliebiges Teilgebiet $D \subset \Omega$, dann ist die (zeitliche) Änderung der Enthalpie in D gleich der zugeführten Wärmemenge. Wärmezufuhr kann durch verteilte Wärmequellen (beschrieben durch ihre Dichte $f(x, t) \in \mathbb{R}$) oder Wärmefluss über den Rand des Teilgebietes (beschrieben durch den Flussvektor $\mathbf{q} \in \mathbb{R}^3$) auftreten. Damit erhalten wir

$$\frac{d}{dt}H(D, t) = \frac{d}{dt} \int_D h(x, t) \, dx = \int_D f(x, t) \, dx + \int_{\partial D} \mathbf{q}(x, t) \cdot \mathbf{n}(x) \, dS(x).$$

Mit Hilfe des Gauss'schen Satzes erhalten wir daraus die Identität

$$\int_D \left(\frac{\partial h}{\partial t} - \operatorname{div} \mathbf{q} - f \right) \, dx = 0. \quad (3.3)$$

Da das Teilgebiet D beliebig gewählt war, erhalten wir aus der schwachen Form (3.3) eine starke Form, nämlich die Differentialgleichung

$$\frac{\partial h}{\partial t} - \operatorname{div} \mathbf{q} = f \quad (3.4)$$

in $\Omega \times \mathbb{R}_+$. Man nennt (3.4) auch *Transportgleichung*. Die rechte Seite f kann als bekannte Funktion (bestimmt durch externe Quellen) angesehen werden, die Funktionen h und \mathbf{q} sind aber noch unbekannt. In der obigen Form ist die Beschreibung auch noch unabhängig von der Temperatur u . Man benötigt deshalb *Materialgesetze* (im Englischen auch *constitutive relations*), die solche Relationen herstellen. Im Gegensatz zu Relationen wie (3.4), die wir nur aus dem fundamentalen Prinzip der Energieerhaltung hergeleitet haben, sind Materialgesetze jeweils abhängig von den speziellen Situationen, die betrachtet werden.

3.3 Materialgesetze

Die Beziehung zwischen der Enthalpie und der Temperatur kann in vielen Fällen als linear modelliert werden, man erhält dann die Beziehung

$$h(x, t) = \rho c u(x, t), \quad (3.5)$$

wobei ρ die Dichte und c die spezifische Wärmekapazität des betrachteten Materials darstellen. Im einfachsten Fall sind ρ und c gegebene Konstante, in manchen Situationen ist es aber wichtig, Relationen der Form $\rho = \rho(x, u)$ und $c = c(x, u)$ zu betrachten. Dies ist zum Beispiel der Fall, wenn man es mit einer Mischung mehrerer Materialien zu tun hat, die verschiedene (konstante) Dichten und Kapazitäten haben. Die effektive Dichte und Kapazität sind dann ortsabhängige Funktionen, bestimmt durch das Material an der jeweiligen Position. Manche Materialien dehnen sich auch stark aus wenn die Temperatur steigt. In solchen Fällen ist es wiederum wichtig, die Relation $\rho = \rho(u)$ zu berücksichtigen.

Die Beziehung zwischen dem Wärmefluss \mathbf{q} und der Temperatur wird im allgemeinen durch *Diffusion* bestimmt, d.h., die Teilchen bewegen sich (mikroskopisch mittels einer Brown'schen Bewegung) bevorzugt in Richtungen des stärksten Temperaturgefälles um lokale Schwankungen der Temperatur auszugleichen. Da das lokal stärkste Temperaturgefälle in Richtung des Temperaturgradienten auftritt, ergibt sich daraus das *Fick'sche Gesetz* (auch *Fourier'sches Abkühlungsgesetz*)

$$\mathbf{q}(x, t) = \lambda \nabla u(x, t), \quad (3.6)$$

wobei $\lambda > 0$ den Wärmeleitkoeffizienten bezeichnet. Die spezielle Modellierung von λ hängt wieder von der jeweiligen Situation ab, und im allgemeinen die Form $\lambda = \lambda(x, u)$ annimmt. In manchen Situationen muss man auch Abhängigkeiten von ∇u berücksichtigen.

Falls das Material *anisotrop* ist, muss man die verschiedenen Transporteigenschaften in verschiedene Richtungen berücksichtigen und man erhält das anisotrope Fick'sche Gesetz

$$\mathbf{q}(x, t) = \Lambda \nabla u(x, t), \quad (3.7)$$

wobei $\Lambda \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ eine symmetrisch positiv definite Matrix (bestimmt durch die Hauptrichtungen der Anisotropie) ist.

3.4 Die Wärmeleitungsgleichung

Wir betrachten nun den Fall konstanter skalarer Werte von ρ , c und λ . Dann erhalten wir die Differentialgleichung

$$\frac{\partial u}{\partial t} - D \Delta u = f, \quad \text{in } \Omega \times \mathbb{R}^+ \quad (3.8)$$

wobei $D = \frac{\lambda}{c\rho}$ der (*Temperatur-*) *Leitwert* ist. Die lineare Wärmeleitungsgleichung (3.8) ist eine parabolische Differentialgleichung zweiter Ordnung. Aus der Theorie der partiellen Differentialgleichungen wissen wir, dass die Lösung nur dann eindeutig bestimmt ist, wenn wir Anfangswerte und Randbedingungen vorschreiben. Die natürliche Anfangsbedingung ist von der Form

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad x \in \Omega, \quad (3.9)$$

für eine gegebene Anfangstemperatur u_0 .

Randbedingungen

Um die Randbedingungen zu erhalten betrachten wir den Wärmefluss über den Rand $\partial\Omega$ und nehmen an, dass ausserhalb von Ω eine Umgebungstemperatur u^* gegeben ist. Im allgemeinen erfolgt die Wärmeübertragung mit der Umgebung durch Strömung (*Konvektion*). Dabei wird die Wärme in ein oder aus einem Fluid / Gass übertragen, indem das Fluid / Gas die Oberfläche eines anderen Volumens überströmt und dabei eine Temperaturangleichung erfolgt. Da der Wärmefluss über den Rand die Temperaturdifferenz auszugleichen versucht, erhalten wir

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = -\alpha (u - u^*) \quad (3.10)$$

mit einem positiven *Wärmeübergangskoeffizienten* $\alpha = \alpha(x, u; u^*)$. Für die Temperatur u bedeutet dies eine *Robin-Randbedingung* der Form

$$\lambda \frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} = -\alpha (u - u^*). \quad (3.11)$$

Besonders interessant sind zwei Grenzwerte von $\beta := \frac{\alpha}{\lambda} \rightarrow 0$:

- Für $\beta \rightarrow 0$ erhalten wir eine homogene Neumann-Randbedingung $\frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} = 0$, d.h., es erfolgt kein Austausch von Wärme mit der Umgebung. Dies ist bei einem *isolierten Rand* der Fall.
- Für $\beta \rightarrow \infty$ erhalten wir eine Dirichlet-Randbedingung $u = u^*$, d.h., der Wärmeaustausch mit der Umgebung ist so stark, dass sich die Temperatur am Rand jener der Umgebung anpasst.

Man beachte auch, dass man für $f = 0$ und im Fall eines isolierten Randes ein abgeschlossenes System erhält. Es gilt dann die Energieerhaltung

$$\frac{d}{dt} H(\Omega, t) = \int_{\Omega} \frac{\partial h}{\partial t}(x, t) dx = \int_{\Omega} \operatorname{div} \mathbf{q} dx = \int_{\partial\Omega} \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} dx = 0.$$

Eine weitere wichtige Form des Wärmeübergangs, vor allem in Luft, ist jener durch Strahlung, d.h., Wärme wird durch elektromagnetische Strahlung transportiert. Für Strahlung gilt das Stefan-Boltzmann'sche Gesetz

$$\lambda \frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} = -\sigma \epsilon (u^4 - (u^*)^4), \quad (3.12)$$

mit der Konstanten $\sigma = 5,67 \times 10^{-8} \frac{J}{sm^2K^4}$ und einem Materialparameter $\epsilon \in [0, 1]$.

Skalierung

Nun können wir die Wärmeleitungsgleichung (3.8) skalieren und in eine dimensionslose Form bringen. Der Einfachheit halber ignorieren wir innere Wärmequellen ($f = 0$). Dazu wählen wir eine typische Länge ℓ für das Gebiet Ω und Zeitskala τ (zunächst noch unbestimmt) und transformieren die Variablen zu

$$\tilde{x} = \ell^{-1}x, \quad \tilde{t} = \tau^{-1}t.$$

Weiters transformieren wir die Temperatur mittels einer Abschätzung T_0 für die auftretende Minimaltemperatur und einer Abschätzung ΔT der Temperaturschwankung zu

$$\tilde{u} = (\Delta T)^{-1}(u - T_0).$$

Mittels der Kettenregel erhalten wir daraus die skalierte Wärmeleitungsgleichung

$$\frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{t}} = \frac{D\tau}{\ell^2} \Delta_{\tilde{x}} \tilde{u}$$

mit der Randbedingung

$$\frac{\partial \tilde{u}}{\partial \mathbf{n}} = -\frac{\alpha \ell}{\lambda} (\tilde{u} - \tilde{u}^*).$$

und einer Anfangsbedingung $\tilde{u}(x, 0) = \tilde{u}_0(x)$, wobei wir \tilde{u}^* und \tilde{u}_0 mittels derselben Skalierung erhalten wie \tilde{u} .

Wir haben nun zwei effektive Parameter, aber die Zeitskala ist noch nicht festgelegt. Es scheint naheliegend, τ so zu wählen, dass der Diffusionskoeffizient gleich eins ist, d.h., $\tau = \frac{\ell^2}{D}$. Damit erhalten wir

$$\frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{t}} = \Delta_{\tilde{x}} \tilde{u}$$

und der einzig verbleibende Parameter ist der dimensionslose Wärmetübergangskoeffizient $\beta = \frac{\alpha \ell}{\lambda}$.

Eigenschaften der linearen Wärmeleitungsgleichung

Im Folgenden betrachten wir die skalierte Form der linearen Wärmeleitungsgleichung, d.h.,

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \Delta u && \text{in } \Omega \times \mathbb{R}_+ \\ \frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} &= -\beta(u - u^*) && \text{auf } \partial\Omega \times \mathbb{R}_+ \\ u &= u_0 && \text{in } \Omega \times \{0\} \end{aligned} \tag{3.13}$$

und betrachten einige ihrer Eigenschaften.

Wir multiplizieren nun die Gleichung mit u und integrieren über Ω , woraus wir mit dem Gauss'schen Satz und dem Einsetzen der Randbedingung die Identität

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t} u \, dx &= \int_{\Omega} \Delta u \, u \, dx = - \int_{\Omega} |\nabla u|^2 \, dx + \int_{\partial\Omega} \frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} u \, dS \\ &= - \int_{\Omega} |\nabla u|^2 \, dx - \beta \int_{\partial\Omega} (u - u^*) u \, dS \end{aligned}$$

erhalten. Wir können nun den ersten Term als

$$\int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t} u \, dx = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} u^2 \, dx$$

schreiben und erhalten nach Integration über t

$$\int_{\Omega} u^2 \, dx|_{t=s} + 2 \int_{\sigma}^s \left(\int_{\Omega} |\nabla u|^2 \, dx + \beta \int_{\partial\Omega} u^2 \, dS \right) ds = \int_{\Omega} u^2 \, dx|_{t=\sigma} + 2 \int_{\sigma}^s \beta \int_{\partial\Omega} u^* u \, dS \, dt.$$

Für $u^* = 0$ impliziert dies den monotonen Abfall des Funktionals $s \mapsto V(s) := \int_{\Omega} u^2 dx|_{t=s}$, das wegen $u \sim h$ auch als Varianz der Enthalpie interpretiert werden kann. Wegen der Poincaré-Ungleichung der Form

$$C \int_{\Omega} u^2 dx \leq 2 \left(\int_{\Omega} |\nabla u|^2 dx + \beta \int_{\partial\Omega} u^2 dx \right)$$

für eine Konstante $C > 0$ erhalten wir sogar

$$\frac{dV}{dt} \leq -CV(t)$$

und daraus den exponentiellen Abfall $V(t) \leq e^{-Ct}V(0)$. Als Konsequenz daraus erhalten wir die Konvergenz $u(\cdot, t) \rightarrow 0$ in $L^2(\Omega)$. Die Funktion $\hat{u}(x) = 0$ ist die entsprechende *stationäre Lösung*, sie erfüllt $\frac{\partial \hat{u}}{\partial t} = 0$ und $\Delta \hat{u} = 0$ sowie die Randbedingungen. Man beachte, dass für beliebige Anfangswerte die Temperatur sehr schnell gegen das immer gleiche Equilibrium konvergiert, was auch die irreversible Natur der Wärmeleitung mittels Diffusion zeigt.

Für allgemeinere zeitunabhängige Werte u^* können wir ebenfalls eine stationäre Lösung konstruieren, indem wir $\Delta \hat{u} = 0$ in Ω unter den obigen Randbedingungen lösen. Es lässt sich dann (ebenso wie oben) leicht der exponentielle Abfall des Funktionals $s \mapsto V(s) := \int_{\Omega} (u - \hat{u})^2 dx|_{t=s}$ zeigen. Für die elliptische Gleichung wissen wir, dass \hat{u} das Funktional

$$J(v) := \frac{1}{2} \left(\int_{\Omega} |\nabla v|^2 dx + \beta \int_{\partial\Omega} v^2 dS \right) - \int_{\partial\Omega} v u^* dS$$

minimiert. Dieses Funktional wird auch während der Wärmeleitung reduziert, was man durch Multiplikation der Gleichung mit $\frac{\partial u}{\partial t}$ und Integration über Ω und t sieht. Daraus erhalten wir die Identität

$$J(u)|_{t=s} = J(u)|_{t=\sigma} - \int_{\sigma}^s \int_{\Omega} \left| \frac{\partial u}{\partial t} \right|^2 dx dt.$$

Abschließend können wir noch den zweiten Hauptsatz der Thermodynamik betrachten, der Einfachheit halber im Fall $\beta = 0$. Die Entropie erfüllt $\frac{dS}{dH} = -\frac{1}{T}$ und wegen $H \sim T$ ist $S \sim -\ln T$. Wir nehmen an, dass $u \geq 0$ so skaliert ist, dass es eine Wahrscheinlichkeitsdichte über Ω entspricht. Dann können wir den Erwartungswert der Entropie in Ω als

$$S = - \int_{\Omega} u \ln u dx$$

auffassen. Es gilt dann

$$\frac{dS}{dt} = - \int_{\Omega} (\ln u + 1) \frac{\partial u}{\partial t} dx = \int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t} \ln u dx.$$

Durch Multiplikation der Gleichung mit $\ln u$ (auf der Menge $\{u > 0\}$) und Anwendung des Gauss'schen Satzes erhalten wir

$$\frac{dS}{dt} = - \int_{\{u>0\}} \Delta u \ln u dx = \int_{\{u>0\}} \frac{|\nabla u|^2}{u} dx \geq 0.$$

Solange $\nabla u \neq 0$ ist in diesem Fall $\frac{dS}{dt} > 0$, d.h., der Prozess ist irreversibel.

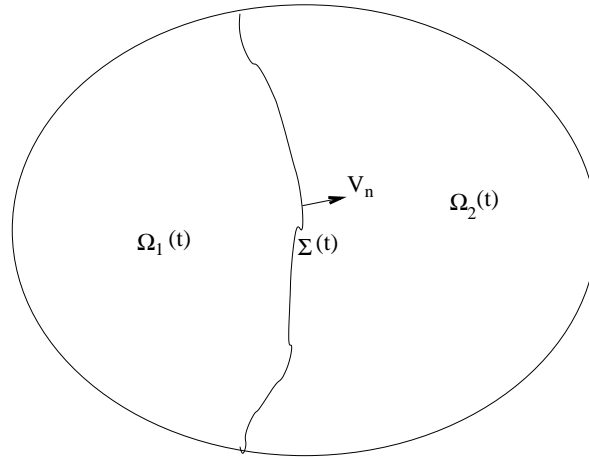


Abbildung 3.1: Schematische Darstellung des Stefan-Problems.

3.5 Phasenübergänge

Wir betrachten nun noch ein weiteres interessantes Kapitel der Thermodynamik, sogenannte Phasenübergänge wie zum Beispiel das Erstarren oder Schmelzen. Wir beginnen mit dem klassischen Modell für einen solchen Effekt, das sogenannte *Stefan-Problem*, das ursprünglich als Modell für das Schmelzen von Eisschollen entwickelt wurde. Dazu nehmen wir an, dass die Temperatur so skaliert ist, dass der Phasenübergang bei $u = 0$ auftritt.

Das Gebiet Ω besteht dann aus zwei Teilgebieten $\Omega_1(t)$ und $\Omega_2(t)$, die feste bzw. flüssige Phase beschreiben und durch ein Interface $\Sigma(t)$ getrennt werden. Da der Phasenübergang bei $u = 0$ auftritt, erhalten wir die Bedingung

$$u = 0 \quad \text{auf } \Sigma(t). \quad (3.14)$$

Für das Schmelzen wird Energie benötigt, beziehungsweise beim Erstarren wird Energie frei, die sogenannte latente Wärme L . Dadurch wird die Enthalpie geändert zu

$$h(x, t) = \begin{cases} c\rho u - L & \text{in } \Omega_1(t) \\ c\rho u & \text{in } \Omega_2(t) \end{cases} \quad (3.15)$$

Wir definieren nun als χ die Indikatorfunktion von $\Omega_1(t)$, d.h., $\chi(x, t) = 1$ für $x \in \Omega_1(t)$, und $\chi(x, t) = 0$ sonst. Dann erhalten wir als Modell für die Wärmeleitung

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\Delta u + \frac{L}{\rho c} \frac{\partial \chi}{\partial t}. \quad (3.16)$$

Mit (3.14) und (3.16) haben wir nun zwei Gleichung für die Unbekannten u und $\Sigma(t)$.

Zum besseren Verständnis des Terms $\frac{\partial \chi}{\partial t}$ in (3.16) betrachten wir eine eindimensionale Situation, in dem das Interface ein einziger Punkt ist, d.h., $\Sigma(t) = \{\xi(t)\}$ und ordnen die Phasen so an, dass $\chi(x, t) = 1$ für $x \geq \xi(t)$ gilt. Wir führen nun eine Mittelung über ein kleines Intervall $I(t) = (\xi(t) - \epsilon, \xi(t) + \epsilon)$ durch. Durch partielle Integration erhalten wir

$$\int_{I(t)} \left(\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{L}{\rho c} \frac{\partial \chi}{\partial t} \right) dx = D \left(\frac{\partial u}{\partial x}(\xi(t) - \epsilon, t) - \frac{\partial u}{\partial x}(\xi(t) + \epsilon, t) \right).$$

Um die linke Seite zu vereinfachen, können wir die Formel für die Ableitung eines zeitabhängigen Integrals

$$\frac{d}{dt} \int_{I(t)} g(x, t) dx = (g(\xi(t) + \epsilon, t) - g(\xi(t) - \epsilon, t)) \frac{d\xi}{dt} + \int_{I(t)} \frac{\partial g}{\partial t}(x, t) dx$$

benützen. Mit $g = u - \frac{L}{\rho c} \chi$ erhalten wir daraus

$$\begin{aligned} \int_{I(t)} \left(\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{L}{\rho c} \frac{\partial \chi}{\partial t} \right) dx &= \frac{d}{dt} \int_{I(t)} \left(u - \frac{L}{\rho c} \chi \right) dx + (u(\xi(t) - \epsilon, t) - u(\xi(t) + \epsilon, t)) \frac{d\xi}{dt} \\ &\quad + \frac{L}{\rho c} (\chi(\xi(t) + \epsilon, t) - \chi(\xi(t) - \epsilon, t)) \frac{d\xi}{dt}. \end{aligned}$$

Wir betrachten nun den Grenzwert $\epsilon \rightarrow 0$. Da das Volumen von $I(t)$ gleich 2ϵ ist, gehen alle Integralterme gegen Null. Weiters gilt

$$u(\xi(t) - \epsilon, t) - u(\xi(t) + \epsilon, t) \rightarrow 0,$$

da $u(\xi(t), t) = 0$ ist. Weiters haben wir aus der Definition von χ

$$\frac{L}{\rho c} (\chi(\xi(t) + \epsilon, t) - \chi(\xi(t) - \epsilon, t)) = \frac{L}{\rho c} (1 - 0) = \frac{L}{\rho c}.$$

Für die Ableitung $\frac{\partial u}{\partial x}$ können wir keine Stetigkeit annehmen, da u im allgemeinen nur eine schwache Lösung der Wärmeleitungsgleichung ist. Es gilt

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}(\xi(t) - \epsilon, t) - \frac{\partial u}{\partial x}(\xi(t) + \epsilon, t) \right) \rightarrow \left[\frac{\partial u}{\partial x} \right](\xi(t), t),$$

wobei $[\cdot]$ den Sprung einer Variable über das Interface bezeichnet. Damit erhalten wir mit den verbleibenden Termen die sogenannte *Stefan-Bedingung* für die Ausbreitungsgeschwindigkeit V des Interfaces, d.h.,

$$V(t) = \frac{d\xi}{dt}(t) = \frac{D\rho c}{L} \left[\frac{\partial u}{\partial x} \right](\xi(t), t).$$

Im mehrdimensionalen kann man analog eine *Stefan-Bedingung* herleiten (braucht dafür aber einiges an Differentialgeometrie für die Oberfläche $\Sigma(t)$), in jedem Punkt des Interfaces erhält man die Gleichung

$$V_n = \frac{D\rho c}{L} \left[\frac{\partial u}{\partial n} \right], \quad (3.17)$$

für die Normalgeschwindigkeit V_n der Oberfläche. Das Stefan-Problem lässt sich nun auch alternativ als die Lösung der Wärmeleitungsgleichung

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\Delta u \quad \text{in } \Omega \setminus \Sigma(t) \quad (3.18)$$

mit Dirichlet-Bedingung (3.14) auf dem Interface, und der zusätzlichen Gleichung (3.17) für die Bewegung von $\Sigma(t)$ schreiben.

Kapitel 4

Mechanik

Im Folgenden beschäftigen wir uns mit mathematischen Modellen in der Mechanik. Dabei hat man im wesentlichen zwei mögliche Beschreibungen: Die *Teilchenmechanik* beschäftigt sich mit Systemen von Punktmassen und deren Interaktion. In der *Kontinuumsmechanik*, die als Grenzwert für Systeme mit einer sehr grossen Anzahl an Teilchen gesehen werden kann, werden jedem Punkt im Raum Massendichten und Geschwindigkeiten zugeordnet. Eine mathematisch rigorose Herleitung von Modellen der Kontinuumsmechanik aus (atomaren) Teilchenmodellen gelingt jedoch nur in wenigen Fällen und ist ein interessantes Objekt aktueller Forschung.

Im allgemeinen werden wir Systeme im drei-dimensionalen euklidischen affinen Punktraum betrachten. Dem Punktraum \mathbb{R}^3 ordnen wir einen Vektorraum V zu, der aus den Differenzen

$$u = y - x, \quad y, x \in \mathbb{R}^3$$

besteht, den sogenannten *Verschiebungen*. Im allgemeinen macht es keinen Sinn, die Summe zweier Punkte zu betrachten, sodass wir alle wesentlichen Operationen im Vektorraum über den Verschiebungen betrachten werden. Wir ordnen dem Raum V das natürliche Skalarprodukt $u^T v$ zu, und die Norm $|u| = \sqrt{u^T u}$.

Wir beginnen mit einer Darstellung der Teilchenmechanik, die im wesentlichen [8] folgt, und motivieren dann den Übergang zur Kontinuumsmechanik. Danach leiten wir direkt die Gleichungen der Strömungsmechanik her und diskutieren deren Eigenschaften, basierend auf [11] und auch [5]. Wir werden nur kurz auf die Kontinuumsmechanik von Festkörpern verweisen, als Referenz für Interessierte dient [13].

4.1 Teilchenmechanik

In der Teilchenmechanik betrachten wir Modelle für sehr kleine Massen (Atome oder Moleküle), die wir als N Massenpunkte (ohne eigene räumliche Ausdehnung) idealisieren. Damit können wir das System beschreiben durch

$$\begin{aligned} r_i(t) \in \mathbb{R}^3 & : \text{Position des Teilchens } i \text{ zum Zeitpunkt } t \\ m_i \in \mathbb{R}_+ & : \text{Masse des Teilchens } i. \end{aligned}$$

Aus diesen beiden Grössen können wir auch den Impuls p_i und die Kraft f_i berechnen, gegeben durch die Newton'schen Gesetze als

$$p_i(t) = m_i r_i'(t) \quad (4.1)$$

$$f_i(t) = p_i'(t) = m_i r_i''(t). \quad (4.2)$$

Wir nehmen an, dass eine Kraft $g_{ij}(t) = G_{ij}(r_i, r_j)$ zwischen diesen Teilchen wirkt, ebenso wie eine äussere Kraft $F_i = F_i(r_i, t)$. Aus dem dritten Newton'schen Gesetz (Prinzip von Kraft und Gegenkraft) erhalten wir die Bedingung $g_{ij} = -g_{ji}$ und dies ist erfüllt für

$$G_{ij}(r_i, r_j) = \frac{r_i - r_j}{|r_i - r_j|} H_{ij}(|r_i - r_j|).$$

Wir erhalten nun aus der Kräftebilanz für ein Teilchen die Differentialgleichung

$$m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2}(t) = \sum_j \frac{r_i(t) - r_j(t)}{|r_i(t) - r_j(t)|} H_{ij}(|r_i(t) - r_j(t)|) + F_i(r_i(t), t),$$

die sogenannte *Bewegungsgleichung*.

Das Vorzeichen der Funktion H_{ij} bestimmt die Art der Wechselwirkung zwischen den Teilchen, wir unterscheiden in

$$\text{abstoßende Wechselwirkungen: } H_{ij}(\cdot) > 0$$

$$\text{anziehende Wechselwirkungen: } H_{ij}(\cdot) < 0.$$

Klassische Beispiele für die Wechselwirkung zwischen Teilchen sind:

- *Gravitationskräfte*, beschrieben durch $H_{ij}(s) = -G_0 \frac{m_i m_j}{s^2}$, wobei $G_0 > 0$ die Gravitationskonstante ist. In diesem Fall ist klarerweise $H_{ij} < 0$, d.h., die Wechselwirkung ist anziehend.
- *Elektrische Kräfte*, die zwischen geladenen Teilchen auftreten, werden durch

$$H_{ij}(s) = K \frac{Q_i Q_j}{s^2}$$

beschrieben, wobei K ein Proportionalitätsfaktor und Q_i die Ladung des Teilchens i ist. In diesem Fall kann die Wechselwirkung sowohl anziehend (wenn $Q_i Q_j < 0$ ist, d.h., die Teilchen i und j haben Ladungen verschiedener Vorzeichen) oder abstoßend (wenn $Q_i Q_j > 0$ ist, d.h., die Teilchen i und j haben Ladungen gleicher Vorzeichen) sein.

Die Bewegungsgleichungen sind ein gekoppeltes System gewöhnlicher Differentialgleichungen zweiter Ordnung, wir benötigen deshalb noch Anfangsbedingungen, im allgemeinen sind dies die Position $r_i(0)$ und der Impuls $p_i(0) = m_i r_i'(0)$. Die Bewegungsgleichungen lassen sich auch als System von Differentialgleichungen erster Ordnung schreiben, wenn man den Impuls als freie Variable betrachtet, es gilt dann

$$m_i \frac{dr_i}{dt}(t) = p_i(t) \quad (4.3)$$

$$\frac{dp_i}{dt}(t) = \sum_j \frac{r_i(t) - r_j(t)}{|r_i(t) - r_j(t)|} H_{ij}(|r_i(t) - r_j(t)|) + F_i(r_i(t), t). \quad (4.4)$$

Dieses System für die Positionen und Impulse der einzelnen Teilchen erfüllt einige Erhaltungsgleichungen für Gesamtgrößen des Systems. Eine solche ist der Gesamtimpuls $p = \sum_i p_i$, für den man aus Summation von (4.4) über i die Gleichung

$$\frac{dp}{dt} = \sum_{i,j} \frac{r_i(t) - r_j(t)}{|r_i(t) - r_j(t)|} H_{ij}(|r_i(t) - r_j(t)|) + \sum_i F_i(r_i(t), t)$$

erhält. Wegen

$$\begin{aligned} \sum_{i,j} \frac{r_i(t) - r_j(t)}{|r_i(t) - r_j(t)|} H_{ij}(|r_i(t) - r_j(t)|) &= \sum_{i>j} \frac{r_i(t) - r_j(t)}{|r_i(t) - r_j(t)|} H_{ij}(|r_i(t) - r_j(t)|) + \\ &\quad \sum_{i<j} \frac{r_i(t) - r_j(t)}{|r_i(t) - r_j(t)|} H_{ij}(|r_i(t) - r_j(t)|) \\ &= \sum_{i>j} \frac{r_i(t) - r_j(t)}{|r_i(t) - r_j(t)|} H_{ij}(|r_i(t) - r_j(t)|) - \\ &\quad \sum_{i>j} \frac{r_i(t) - r_j(t)}{|r_i(t) - r_j(t)|} H_{ij}(|r_i(t) - r_j(t)|) \\ &= 0 \end{aligned}$$

gilt

$$\frac{dp}{dt} = \sum_i F_i(r_i(t), t) =: F(t),$$

d.h., die Impulsänderung ist gleich der Summe der äusseren Kräfte. Wirken keine äusseren Kräfte, so bleibt der Gesamtimpuls konstant.

Eine weitere Erhaltungsgrösse ist der Drehimpuls L . Die einzelnen Drehimpulse sind gegeben durch

$$L_i = (r_i - r_0) \times p_i$$

für einen fixen Punkt $r_0 \in \mathbb{R}^3$, die Drehmomente durch

$$M_i = (r_i - r_0) \times F_i.$$

Der Gesamtdrehimpuls $L = \sum_i L_i$ erfüllt nun

$$\begin{aligned}
\frac{dL}{dt} &= \sum_i (r_i - r_0) \times \frac{dp_i}{dt} + \sum_i \underbrace{\frac{dr_i}{dt} \times p_i}_{=\frac{1}{m_i} p_i \times p_i = 0} \\
&= \sum_i (r_i - r_0) \times \left(\sum_j g_{ij} \right) + \sum_i \underbrace{(r_i - r_0) \times f_i}_{=M_i} \\
&= \sum_{i,j} r_i \times \frac{r_i - r_j}{|r_i - r_j|} H_{ij}(|r_i - r_j|) - r_0 \times \underbrace{\left(\sum_{i,j} \frac{r_i - r_j}{|r_i - r_j|} H_{ij}(|r_i - r_j|) \right)}_{=0, \text{ siehe oben}} + \sum_i M_i \\
&= \sum_{i>j} \underbrace{(r_i - r_j) \times \frac{r_i - r_j}{|r_i - r_j|} H_{ij}(|r_i - r_j|)}_{=0} + M \\
&= M,
\end{aligned}$$

d.h., die Änderung des Drehimpulses ist gleich dem Drehmoment.

Zum Abschluß betrachten wir auch noch die Energieerhaltung. Die kinetische Energie des Systems ist gegeben durch

$$T = \sum_i m_i \frac{|r'_i|^2}{2} = \sum_i \frac{|p_i|^2}{2m_i},$$

und die von den äusseren Kräften pro Zeit verrichtete Arbeit (Leistung) ist

$$W = \sum_i r'_i \cdot F_i = \sum_i \frac{p_i}{m_i} \cdot F_i.$$

Weiters lässt sich unter der obigen Form der Wechselwirkung eine potentielle Energie der Form

$$V = -\frac{1}{2} \sum_i \sum_j V_{ij}(|r_i - r_j|)$$

definieren, wobei V_{ij} eine Stammfunktion von H_{ij} ist. Die Gesamtenergie des Systems ergibt sich dann als $E = T + V$. Für die Änderung der kinetischen Energie erhalten wir

$$\begin{aligned}
\frac{dT}{dt} &= \sum_i \frac{p_i}{m_i} \cdot \frac{dp_i}{dt} = \sum_i \frac{dr_i}{dt} \cdot \frac{dp_i}{dt} \\
&= \sum_{i,j} \left(\frac{dr_i}{dt} \cdot \frac{r_i - r_j}{|r_i - r_j|} H_{ij}(|r_i - r_j|) \right) + \sum_i \frac{p_i}{m_i} \cdot \frac{dp_i}{dt} \\
&= \frac{1}{2} \sum_{i,j} \left(\left(\frac{dr_i}{dt} - \frac{dr_j}{dt} \right) \cdot \frac{r_i - r_j}{|r_i - r_j|} H_{ij}(|r_i - r_j|) \right) + W \\
&= \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{d}{dt} V_{ij}(|r_i - r_j|) + W \\
&= -\frac{dV}{dt} + W,
\end{aligned}$$

und damit

$$\frac{dE}{dt} = \frac{dT}{dt} + \frac{dV}{dt} = W,$$

d.h., es gilt wieder das Prinzip der Energieerhaltung (Änderung der Gesamtenergie gleich Leistung der äusseren Kräfte).

Die obigen Aussagen gelten im wesentlichen für *isotrope* Situationen, d.h., das Material verhält sich in alle Richtungen gleich. Bei *anisotropen* Materialien (in gewissen Kristallstrukturen) muss man im wesentlichen nur die euklid'sche Norm $|\cdot|$ im \mathbb{R}^3 durch ein geeignetes positives und homogenes Funktional $\gamma : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}_+$ ersetzen, das die Anisotropie modelliert. Die Wechselwirkungen haben dann die Form

$$G_{ij}(r_i, r_j) = \nabla\gamma(r_i - r_j)H_{ij}(\gamma(r_i - r_j)),$$

und die weiteren Aussagen lassen sich analog herleiten.

4.2 Teilchenmechanik in Festkörpern

Wir diskutieren nun noch kurz die Teilchenmechanik in Festkörpern mit Gitterstruktur, d.h., falls keine Kräfte wirken, sind alle Teilchenpositionen auf einem periodischen Gitter ausgerichtet. Der Einfachheit halber betrachten wir nur eine eindimensionale Modellsituation, mit einem Gitter gegeben durch die Punkte $x_i = (i-1)\ell$ für $i = 1, \dots, N$. Die Anfangsbedingung ist nun gegeben durch $r_i(0) = x_i$.

Falls die Kräfte nicht zu gross sind, kann man anstatt der Positionen der Massenpunkte auch die *Verschiebungen* zum Ruhezustand $u_i := r_i - x_i$ als Variable betrachten. Die Newton'schen Bewegungsgleichungen lauten dann

$$\begin{aligned} \frac{du_i}{dt}(t) &= m_i^{-1}p_i(t) & (4.5) \\ \frac{dp_i}{dt}(t) &= \sum_j \frac{u_i(t) - u_j(t) + (i-j)\ell}{|u_i(t) - u_j(t) + (i-j)\ell|} H_{ij}(|u_i(t) - u_j(t) + (i-j)\ell|) + F_i(x_i + u_i(t)), \end{aligned} \quad (4.6)$$

Wir betrachten nun den Fall eines Gleichgewichts, d.h., F_i hängt nicht von der Zeit ab und es stellt sich eine stationäre Situation ein. In diesem Fall ist $\frac{du_i}{dt}(t) = 0$ und auch $\frac{dp_i}{dt}(t) = 0$, somit ist die Gleichgewichtsbedingung

$$\sum_j \frac{u_i - u_j + (i-j)\ell}{|u_i - u_j + (i-j)\ell|} H_{ij}(|u_i - u_j + (i-j)\ell|) + F_i(x_i + u_i) = 0.$$

Wir nehmen nun an, dass die Verschiebungen klein sind im Vergleich zur Gittergrösse ℓ . Dann gilt

$$|u_i - u_j + (i-j)\ell| \approx |i-j|\ell$$

und somit können wir die Gleichgewichtsbedingung durch

$$\sum_j \frac{u_i - u_j + (i-j)\ell}{|i-j|\ell} H_{ij}(|i-j|\ell) + F_i(x_i + u_i) = 0$$

approximieren. Wenn wir nun weiters annehmen, dass nur die Interaktion der nächsten Nachbarn von Bedeutung ist, d.h. $H_{ij}(s) \approx 0$ für $s > \ell$ und dass $H_{ii-1} = H_{ii+1}$ gilt, dann reduziert sich die Gleichgewichtsbedingung zu

$$\frac{u_i - u_{i-1}}{\ell} \hat{H} + \frac{u_i - u_{i+1}}{\ell} \hat{H} + F_i(x_i + u_i) = 0,$$

mit $\hat{H} = H_{i,i-1}$, oder

$$\ell^{-2}(u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}) = \hat{H}^{-1} \ell^{-1} F_i(x_i + u_i).$$

Falls keine Kraft gilt, so erfüllen die Verschiebungen

$$\ell^{-2}(u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}) = 0.$$

Die Gleichgewichtsbedingung ist also ein diskretes Analog der Gleichung

$$\frac{d^2 u}{dx^2} = 0,$$

die man auch als Gleichgewicht im Rahmen der Kontinuumsmechanik herleiten kann.

4.3 Von der Teilchenmechanik zum Kontinuum

Um den Übergang zur Kontinuumsmechanik zu motivieren, betrachten wir im Folgenden eine geeignete Mittelung der Newton'schen Bewegungsgleichungen. Eine rigorose Herleitung der Kontinuumsmechanik aus diskreten Modellen (siehe [2]) kann im Rahmen dieser Vorlesung nicht geleistet werden.

Zur Mittelung betrachten wir eine Länge $h > 0$ und eine Kugel mit Mittelpunkt \hat{x} und Radius h , gegeben als

$$B_h(\hat{x}) = \{ x \in \mathbb{R}^3 \mid |x - \hat{x}| \leq h \}.$$

Betrachten wir nun ein System mit sehr vielen Massenpunkten ($N \rightarrow \infty$), dann kann man eine Massendichte durch Mittelung definieren, d.h.,

$$\rho_h(\hat{x}, t) = \frac{3}{4h^3} \sum_{r_i(t) \in B_h(\hat{x})} m_i.$$

Für diese Massendichte gilt nun als Funktion von h

- Für kleines h gibt es sehr grosse Schwankungen, da über wenige Moleküle gemittelt wird. Eine Änderung von h kann bedeuten, dass ein Molekül dazu kommt oder wegfällt, was einen sehr grossen Einfluss auf die Dichte hat.
- Für sehr grosses h muss man ebenfalls Schwankungen erwarten, da die Einflüsse über sehr grosse Entfernungen berücksichtigt werden.

Die Grundannahme der Mittelung besteht nun darin, dass es einen Bereich von Werten für h gibt, in dem ρ_h nahezu konstant bezüglich h ist, nur in einem solchen Bereich ist die Mittelung sinnvoll. Man kann diese Annahme auch dazu umformulieren, dass es eine Kugel mit Radius h gibt, die sehr viele Moleküle enthält, aber nicht zu gross im Vergleich zum typischen Länge

der Wechselwirkungen ist. Mathematisch gesehen betrachtet man einen Grenzwert $N \rightarrow \infty$, $h \rightarrow 0$, sodass Nh^3 konstant ist. Man nennt diese Art des Grenzübergangs zu einer Dichte auch den *hydrodynamischen Grenzwert*.

Um die lokalen Eigenschaften der Mittelung zu verstärken (und die Rechnungen zu erleichtern), verwendet man meist einen Kern ψ_h , der sein Maximum bei $x = 0$ erreicht und die Eigenschaften

$$\int_{\mathbb{R}} \psi_h(x) dx = 1, \quad \int_{B_h(0)} \psi_h(x) dx \approx 1$$

erfüllt, z.B., die Dichte einer Gauss'schen Normalverteilung mit geeigneter Varianz (Gauss Kern). Als gemittelte Massendichte definiert man dann

$$\rho_h(\hat{x}, t) = \sum_i m_i \psi_h(\hat{x} - r_i(t)),$$

d.h. man verteilt die Masse der Teilchen lokal um die Position. Wir können die Mittelung auch als Integration über die Ortsvariable x schreiben, indem wir die Dirac δ -Distribution verwenden, die durch

$$\int_{\mathbb{R}^3} \delta(x) \phi(x) dx = \phi(0), \quad \forall \phi \in C^0(\mathbb{R}^3)$$

definiert ist. Die mittlere Dichte ist dann

$$\rho_h(\hat{x}, t) = \int_{\mathbb{R}^3} m_i \delta(x - r_i(t)) \psi_h(\hat{x} - x) dx,$$

d.h., die Faltung des Kerns ψ_h mit der "empirischen Dichte" $\rho = \sum_i m_i \delta(\cdot - r_i)$. In analoger Weise definieren wir eine Impulsdichte

$$p_h(\hat{x}, t) = \sum_i p_i(t) \psi_h(\hat{x} - r_i(t)) = \sum_i m_i \frac{dr_i}{dt}(t) \psi_h(\hat{x} - r_i(t))$$

und die Geschwindigkeit (Impuls pro Masse)

$$v_h(\hat{x}, t) = \frac{p_h(\hat{x}, t)}{\rho_h(\hat{x}, t)}.$$

Nun können wir einfach die Gleichung der Massenerhaltung herleiten. Dazu berechnen wir die Zeitableitung von ρ_h als

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_h}{\partial t}(\hat{x}, t) &= - \sum_i m_i \nabla \psi_h(\hat{x} - r_i(t)) \frac{dr_i}{dt}(t) \\ &= - \sum_i p_i(t) \cdot \nabla \psi_h(\hat{x} - r_i(t)) \\ &= - \operatorname{div} \sum_i p_i(t) \psi_h(\hat{x} - r_i(t)) \\ &= - \operatorname{div} p_h(\hat{x}, t). \end{aligned}$$

Mit der obigen Definition der Geschwindigkeit erhalten wir schliesslich die Differentialgleichung

$$\frac{\partial \rho_h}{\partial t} + \operatorname{div} (v_h \rho_h) = 0.$$

In diesem Fall erhalten wir also eine exakte Differentialgleichung für die gemittelten Grössen, im allgemeinen werden diese aber nur approximativ eine Differentialgleichung erfüllen, wie wir im Fall der Impulserhaltung sehen werden.

Für die Zeitableitung des gemittelten Impulses gilt

$$\frac{\partial}{\partial t} p_h(\hat{x}, t) = \sum_i \frac{dp_i}{dt}(t) \psi_h(\hat{x} - r_i(t)) - \sum_i p_i(t) \nabla \psi_h(\hat{x} - r_i(t)) \cdot \frac{dr_i}{dt}(t).$$

In den ersten Term können wir die Bewegungsgleichung einsetzen, d.h.,

$$\sum_i \frac{dp_i}{dt}(t) \psi_h(\hat{x} - r_i(t)) = \sum_{i,j} g_{ij}(t) \psi_h(\hat{x} - r_i(t)) + \sum_i F_i(r_i(t), t) \psi_h(\hat{x} - r_i(t)).$$

Für den zweiten Term erhalten wir

$$- \sum_i p_i(t) \nabla \psi_h(\hat{x} - r_i(t)) \cdot \frac{dr_i}{dt}(t) = -\text{div} \left(\sum_i \frac{p_i(t) \otimes p_i(t)}{m_i} \psi_h(\hat{x} - r_i(t)) \right)$$

Für den lokalisierenden Kern haben wir bei geeigneter Skalierung

$$\psi_h(\hat{x} - r_i(t))^2 \approx \psi_h(\hat{x} - r_i(t))$$

und

$$\psi_h(\hat{x} - r_i(t)) \psi_h(\hat{x} - r_j(t)) \approx 0 \quad \text{für } i \neq j.$$

Damit haben wir

$$\begin{aligned} \sum_i \frac{p_i(t) \otimes p_i(t)}{m_i} \psi_h(\hat{x} - r_i(t)) &\approx \sum_{i,j} \frac{p_i(t) \otimes p_j(t)}{m_i} \psi_h(\hat{x} - r_i(t)) \psi_h(\hat{x} - r_j(t)) \\ &\approx v_h(\hat{x}, t) \otimes p_h(\hat{x}, t) \\ &= \rho_h(\hat{x}, t) v_h(\hat{x}, t) \otimes v_h(\hat{x}, t). \end{aligned}$$

D.h., der zweite Term kann approximiert werden durch

$$- \sum_i p_i(t) \nabla \psi_h(\hat{x} - r_i(t)) \cdot \frac{dr_i}{dt}(t) \approx -\text{div} (\rho_h(\hat{x}, t) v_h(\hat{x}, t) \otimes v_h(\hat{x}, t)).$$

Analog zu den gemittelten Grössen für Dichte und Impuls können wir auch die äussere Kraft mitteln und erhalten eine Kraftdichte als

$$f_h(\hat{x}, t) = \frac{1}{\rho_h(\hat{x}, t)} \sum_i F_i(r_i(t), t) \psi_h(\hat{x} - r_i(t)).$$

Es bleibt die Mittelung der inneren Wechselwirkungen, die man makroskopisch als *Spannungen* bezeichnet. Die Behandlung der Spannungen ist der schwierigste Teil, wir werden ihn deshalb auslassen und nur das Resultat verwenden, nämlich eine Approximation der Form

$$\sum_{i,j} g_{ij}(t) \psi_h(\hat{x} - r_i(t)) \approx \text{div} \tau_h(\hat{x}, t),$$

wobei τ ein geeigneter Spannungstensor (symmetrische 3×-Matrix ist).

Damit ist die Gleichung für die gemittelten Impulse

$$\frac{\partial}{\partial t} p_h(\hat{x}, t) + \operatorname{div} (\rho_h(\hat{x}, t) v_h(\hat{x}, t) \otimes v_h(\hat{x}, t)) \approx \operatorname{div} \tau_h(\hat{x}, t) + \rho_h(\hat{x}, t) f_h(\hat{x}, t)$$

Andererseits können wir den Impuls auch durch Dichte und Geschwindigkeit ausdrücken und erhalten somit zusammen mit der Massenerhaltung

$$\frac{\partial}{\partial t} p_h(\hat{x}, t) = \rho_h(\hat{x}, t) \frac{\partial v_h}{\partial t}(\hat{x}, t) + v_h(\hat{x}, t) \frac{\partial \rho_h}{\partial t}(\hat{x}, t) = \rho_h(\hat{x}, t) \frac{\partial v_h}{\partial t}(\hat{x}, t) - v_h(\hat{x}, t) \operatorname{div} p_h(\hat{x}, t).$$

Dann können wir auch eine gemittelte Gleichung für die Geschwindigkeiten angeben, nämlich

$$\rho_h \frac{\partial v_h}{\partial t} + \rho_h v_h \cdot \nabla v_h \approx \operatorname{div} \tau_h + \rho_h f_h.$$

Wir werden diese Gleichung im nächsten Kapitel direkt aus für ein Kontinuumsmodell herleiten.

Abschließend bemerken wir, dass die Mittelung zwar Funktionen des Orts \hat{x} liefert, man sich aber immer bewusst sein sollte, dass diese punktwisen Dichte keine sinnvollen Aussagen über das Verhalten auf einer Längenskala kleiner als h zulässt.

4.4 Kontinuumsmechanik

Im Folgenden werden wir einige fundamentale Gleichungen der Kontinuumsmechanik herleiten. Dabei werden wir besonderes Augenmerk auf die Gleichungen der Strömungsdynamik legen, für detaillierte Modelle der Festkörpermechanik verweisen wir auf die entsprechenden Vorlesungen zur Kontinuumsmechanik sowie auf [13].

Bei Strömungen handelt es sich um physikalische Massekontinua, d.h. Körper im euklidischen Raum, die als Menge ihrer Massepunkte aufgefaßt werden. Die Herleitung der Gleichungen der Strömungsdynamik beruht dann auf einigen wesentlichen physikalischen Grundprinzipien:

- Für alle Zeiten $t > 0$, existiert eine wohldefinierte Massendichte $\rho(x, t)$, sodaß die Masse $m(\Omega, t)$ in der Region Ω zum Zeitpunkt t gegeben ist durch

$$m(\Omega, t) = \int_{\Omega} \rho(x, t) \, dx$$

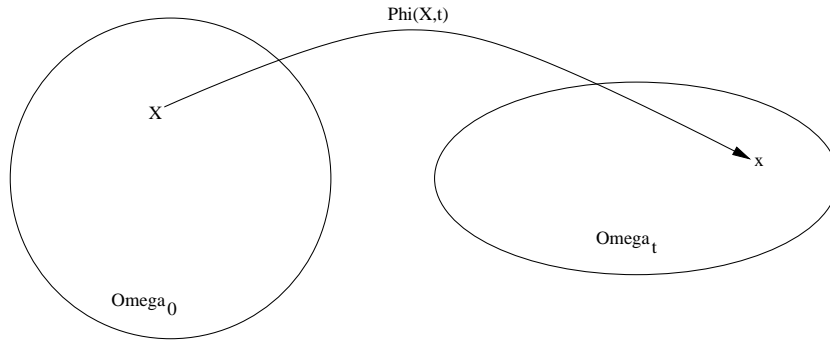
- Masse wird weder produziert noch vernichtet.
- Die Impulsänderung eines Fluidbereiches ist gleich den anliegenden Kräften (Newton's 2. Gesetz)
- Energie wird weder produziert noch vernichtet.

Diese Annahmen werden als *Kontinuumshypothese* sowie als *Erhaltung von Masse, Impuls und Energie* bezeichnet.

Sei nun $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, $d = 2, 3$ das vom Fluid eingenommene Gebiet. Sei $x \in \Omega$ und wir betrachten den Fluidpartikel X , der sich zur Zeit t durch x bewegt. Man nennt x die *Eulerschen* Koordinaten zur Beschreibung des Massekontinuums und X die *Lagrangeschen* oder *materiellen* Koordinaten.

Sei nun $W_0 \subset \Omega$ ein Teilgebiet zum Zeitpunkt $t = 0$. Die Funktion $\phi : W \times \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^3$ beschreibt die Änderung der Partikelposition

$$W_t := \{\phi(X, t) : X \in W_0\} = \phi(W_0, t).$$



Für die Beschreibung der Strömung erweisen sich die folgenden Begriffe als nützlich:

- Die *Bahnlinie* ist die Menge der Raumpunkte $x(X_0, t)$, welche von einem Teilchen X_0 zu verschiedenen Zeiten t eingenommen wird.
- Die *Stromlinie* ist die Kurve, deren Tangente jeweils in Richtung des jeweiligen Geschwindigkeitsvektors zeigt.

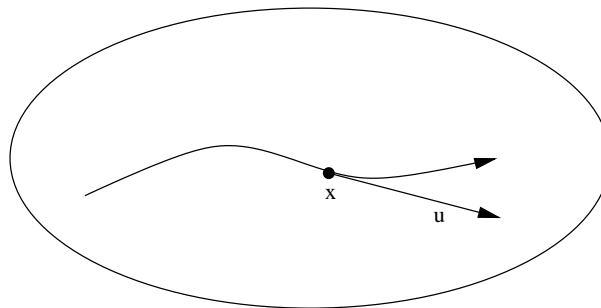
Bei stationären Strömungen fallen Bahnlinie und Stromlinie zusammen.

Wir bezeichnen die Geschwindigkeit des Partikels mit $u(x, t)$. Für feste Zeiten t ist $u(x, t)$ ein Vektorfeld auf Ω . Dann ist

$$\begin{aligned} x : \mathbb{R}^+ &\rightarrow \mathbb{R}^3 \\ t &\rightarrow \phi(X, t) \end{aligned}$$

die Partikelbahn und die Geschwindigkeit ist gegeben durch

$$u(x, t) = \frac{\partial \phi}{\partial t}(X, t), \quad \text{mit } x = \phi(X, t).$$



Die Beschleunigung a des Partikels kann mittels der Kettenregel berechnen:

$$\begin{aligned}
 a(x, t) &= \frac{d}{dt}u(x, t) = \frac{d}{dt}u(\phi(X, t), t) \\
 &= \frac{\partial}{\partial t}u(\phi(X, t), t) + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial u}{\partial x_i}(\phi(X, t), t) \underbrace{\frac{\partial \phi_i}{\partial t}(X, t)}_{=u_i(x, t)} \\
 &= \frac{\partial}{\partial t}u(x, t) + \sum_{i=1}^3 u_i(x, t) \frac{\partial u}{\partial x_i}(x, t) \\
 &= \frac{\partial u}{\partial t} + (u \cdot \nabla)u.
 \end{aligned}$$

Das Symbol

$$\frac{D}{Dt} := \frac{\partial}{\partial t} + u \cdot \nabla$$

heißt *Materialableitung*.

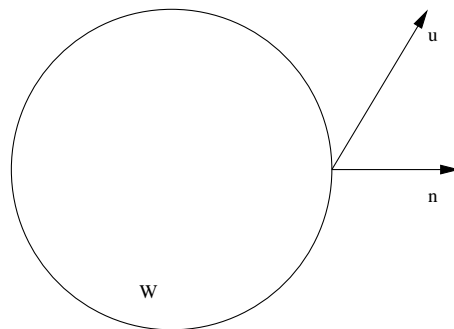
Massenerhaltung

In diesem Abschnitt sollen die die Folgerungen aus der Kontinuumshypothese und der Massenerhaltung untersucht werden.

Dafür fixieren wir ein Teilgebiet $W \subset \Omega$. Die Änderung der Masse in W ist

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt}m(W, t) &= \frac{d}{dt} \int_W \rho(x, t) \, dx \\
 &= \int_W \frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) \, dx
 \end{aligned}$$

Bezeichne mit ∂W den Rand von W und sei n die äußere Einheitsnormale, sowie dS das Flächenelement auf $\partial\Omega$.



Der Volumenstrom durch ∂W pro Einheitsfläche ist $u \cdot n$ und der zugehörige Massenstrom ist $\rho u \cdot n$. Der Gesamtmassenstrom durch ∂W ist dann

$$\int_{\partial W} \rho u \cdot n \, dS$$

Das Prinzip der Massenerhaltung besagt, dass die Änderung der Masse in W gleich dem Massenstrom über den Rand ∂W (nach Innen gerichtet) ist, oder in Formeln ausgedrückt.

$$\frac{d}{dt} \int_W \rho \, dV = - \int_{\partial W} \rho u \cdot n \, dS$$

Mit dem Satz von Gauß kann man dies schreiben als

$$\int_W \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u) \right) dx = 0$$

Und da dies für jedes Teilgebiet W gilt, erhalten wir die differentielle Form der *Kontinuitätsgleichung*

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u) = 0, \quad (4.7)$$

also dieselbe Identität die wir aus der Mittelung der Teilchenmechanik abgeleitet haben.

Ausgehend von der Funktion ϕ kann man die Massenerhaltung auch wie folgt in Formeln fassen

$$\int_{W_t} \rho(x, t) \, dx = \int_{W_0} \rho(X, 0) \, dx$$

Da der rechte Term unabhängig von t ist, ergibt sich

$$\frac{d}{dt} \int_{W_t} \rho(x, t) \, dx = 0$$

Doch nun kann man nicht mehr Differentiation und Integration vertauschen, da das Integrationsgebiet auch zeitabhängig ist. Dazu benötigen wir das folgende Resultat für F hinreichend glatt:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{W_t} F(x, t) \, dx &= \int_{W_t} \frac{DF}{Dt} + F \operatorname{div} u \, dx \\ &= \int_{W_t} \frac{\partial F}{\partial t} + \operatorname{div}(F \cdot u) \, dx \end{aligned} \quad (4.8)$$

Dies ist das höherdimensionale Analogon der Formel für die Ableitung eines eindimensionalen Integrals mit parameterabhängigen Integranden und Integrationsgrenzen.

Mit (4.8) erhält man

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{d}{dt} \int_{W_t} \rho(x, t) \, dx \\ &= \int_{W_t} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u) \, dx \end{aligned}$$

und da dies für beliebige $W_0 \subset \Omega$ gilt, erhalten wir wieder die differentielle Form der Kontinuitätsgleichung.

Ob man die differentielle oder die integrale Form der Massenerhaltung benutzt hängt stark von der Regularität der Lösungen ab. Wir wollen im folgenden annehmen, daß die Lösungen hinreichend regulär sind, so daß alle obigen Manipulationen erlaubt sind.

Eine Konsequenz der Massenerhaltung ist das *Transporttheorem*: Sei $F = F(x, t)$ eine reguläre Funktion. Dann gilt

$$\frac{d}{dt} \int_{W_t} \rho F \, dx = \int_{W_t} \rho \frac{DF}{Dt} \, dx \quad (4.9)$$

Strömungen, bei denen das Volumen eines bewegten Teilgebiets konstant in der Zeit ist, sind von besonderer Bedeutung: Ein Fluid heißt *inkompressibel*, falls

$$\frac{d}{dt} \int_{W_t} dx = 0.$$

Es gibt verschiedene äquivalente Kriterien, die die Inkompressibilität sicherstellen: Ein Fluid ist inkompressibel, genau dann wenn $\operatorname{div} u = 0$, oder auch $\frac{D\rho}{Dt} = 0$ gilt.

Impulserhaltung

Nun nutzen wir die Impulserhaltung zur Herleitung der zweiten Gleichung. Für den Impuls des Fluids verwenden wir das zweite Newton'sche Gesetz, d.h., die Impulsänderung ist gleich der Summe der wirkenden Kräfte.

Generell unterscheiden wir

Volumenkräfte:

$$\int_{W_t} \rho(x, t) f(x, t) \, dx,$$

für eine Kraftdichte $f = (f_1, f_2, f_3) \in \mathbb{R}^3$, z.B. Gravitation
und

Oberflächenkräfte:

$$\int_{\partial W_t} \underbrace{n \cdot \tau(x, t)}_{=\sum_{j=1}^3 u_j \tau_{ij}} \, dS,$$

wobei $\tau \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ der Spannungstensor ist, der die innere Reibung bzw. den Druck beschreibt. Ferner bezeichne $n \cdot \tau$ den am Flächenelement angreifende Spannungsvektor.

Mit Newton und dem Satz von Gauß ergibt sich

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{W_t} \rho u \, dx &= \int_{W_t} \rho f \, dx + \int_{\partial W_t} n \cdot \tau \, dS \\ &= \int_{W_t} \rho f \, dx + \int_{W_t} \operatorname{div} \tau \, dx \end{aligned}$$

mit der Zeilendivergenz $(\operatorname{div} \tau)_i := \sum_{j=1}^3 \frac{\partial \tau_{ji}}{\partial x_j}$.

Mit dem Transporttheorem folgt wieder

$$\int_{W_t} \left(\rho \frac{Du}{Dt} - \rho f - \operatorname{div} \tau \right) dx = 0$$

Oder in differentieller Form

$$\rho \frac{Du}{Dt} = \rho f + \operatorname{div} \tau$$

bzw.

$$\frac{D}{Dt}(\rho u) + \rho u \operatorname{div} u = \rho f + \operatorname{div} \tau$$

oder in Erhaltungssform

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \operatorname{div}(\rho u \otimes u) = \rho f + (\operatorname{div} \tau).$$

Nun wollen wir den Spannungstensor näher spezifizieren. Wir machen die Annahmen:

- $\tau = -pI + \sigma$, $p \in \mathbb{R}$, $I \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$, $\sigma \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$
- σ hängt linear von ∇u ab.
- σ ist invariant unter Verschiebung und Drehung
- σ ist symmetrisch

Die ersten beiden Annahmen implizieren, daß der Spannungstensor für ruhende Fluide immer kugelsymmetrisch ist. Der Druck p wirkt deshalb immer in Richtung der Einheitsnormalen. Die Annahme letzte Annahme folgt aus der Drehimpulserhaltung, die wir nicht näher betrachtet haben.

Aus den Annahmen kann man ableiten, daß σ die Form

$$\sigma = \lambda(\operatorname{div} u)I + 2\mu D$$

hat, wobei λ (Volumenviskosität) und μ (Scherviskosität) Viskositätskoeffizienten sind und $D = (D_{ij}) \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ den *Deformationstensor* beschreibt

$$D_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$$

oder im Nablakalkül

$$D = \frac{1}{2}(\nabla u + (\nabla u)^T).$$

Damit hat die Impulserhaltung die Form

$$\rho \frac{Du}{Dt} = \rho f - \nabla p + \mu_d \nabla(\operatorname{div} u) + \mu \Delta u$$

Der Term $\mu_d = \lambda + \frac{2}{3}\mu$ heißt *Druckviskosität*.

In der Festkörpermechanik betrachtet man sehr häufig stationäre Situationen ohne Druck, beschrieben durch die Gleichung

$$-\operatorname{div} \sigma = \rho f,$$

mit geeigneten Spannungs-Verzerrungsrelationen der Form $\sigma = \sigma(D)$.

Energiebilanz

Bis jetzt haben wir 4 Gleichungen (eine für die Massenerhaltung und 3 aus der Impulserhaltung) für 5 Unbekannte ρ , u und p hergeleitet. Um ein abgeschlossenes System zu bekommen, benötigen wir also eine weitere Gleichung, die uns mit der Energieerhaltung gegeben wird.

Sei E die totale Energie, die sich aus kinetischer Energie und innerer Energie (Enthalpie) zusammensetzt

$$E = \underbrace{\int_{W_t} \rho \frac{|u|^2}{2} dx}_{\text{kinetische E.}} + \underbrace{\int_{W_t} \rho e dx}_{\text{innere E.}}$$

wobei e die *innere Energie pro Masseneinheit* bezeichnet. Die Änderung der Energie entspricht der Summe aus Leistung der äußeren Kräfte und Wärmezufuhr.

Analog zum Impulssatz erhalten wir

$$\frac{d}{dt} \int_{W_t} \rho \left(\frac{|u|^2}{2} + e \right) dx = \underbrace{\int_{W_t} \rho f \cdot u dx}_{\text{Leistung der Volumen- kraft}} - \underbrace{\int_{\partial W_t} h dS}_{\text{Wärmezufuhr über den Rand}} + \underbrace{\int_{\partial W_t} n \cdot \tau \cdot u dS}_{\text{Leistung der Oberflächenkräfte}} \quad (4.10)$$

Mit dem Satz von Gauß gilt

$$\begin{aligned} \int_{\partial W_t} n \cdot \tau \cdot u dS &= \int_{\partial W_t} \sum_{j=1}^3 \sum_{i=1}^3 n_i \cdot \tau_j \cdot u_j dS \\ &= \int_{W_t} \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\sum_{j=1}^3 \tau_j \cdot u_j \right) dx \\ &= \int_{W_t} \text{div}(\tau u) dx \end{aligned}$$

Wie schon im Kapitel über Wärmeleitung diskutiert wurde, ist

$$h = n \cdot \mathbf{q},$$

wobei \mathbf{q} die Wärmeflußdichte bezeichnet.

Aufgrund des Transporttheorems folgt

$$\int_{W_t} \left(\rho \frac{D}{Dt} \left(\frac{|u|^2}{2} + e \right) \right) dx = \int_{W_t} (\rho f u - \text{div}(\mathbf{q} - \tau u)) dx$$

oder in differentieller Form

$$\rho \frac{D}{Dt} \left(\frac{|u|^2}{2} + e \right) = \rho f u - \text{div}(\mathbf{q} - \tau u),$$

was einer Verallgemeinerung der in Kapitel 3 diskutierten Wärmeleitungsgleichung darstellt.

Abschlußbedingungen

Insgesamt haben wir jetzt 5 skalare Gleichungen für die Unbekannten $\rho, p, e, \mathbf{q} = \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ q_3 \end{pmatrix}$ und

$u = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{pmatrix}$ hergeleitet. Dies sind jedoch 9 Unbekannte, so daß wir noch weitere Bedingungen

brauchen, um das System abzuschließen. Dies sind phänomenologisch gewonnene algebraische Gleichungen, die Dichte, Druck, Temperatur und innere Energie miteinander verbinden.

Eine solche Relation ist das bereits diskutierte Fick'sche Gesetz

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T,$$

wobei nun T die skalare Temperatur und λ die Wärmeleitfähigkeit ist. Dies eliminiert schon mal zwei Variablen.

Weitere Bedingungen kommen aus der Thermodynamik, zum Beispiel

- Ideales Gas: $p = R\rho T$, R ist die Gaskonstante
- Konstanz der spezifischen Wärme bei konstantem Volumen $c_v = \frac{de}{dT}$, d.h., wiederum

$$e = c_v T + \text{const.}$$

Dies genügt, um ein abgeschlossenes System zu erhalten. Doch können je nach Situation auch andere Abschlußbedingungen, wie z.B. konstante Dichte oder zu vernachlässigende Reibung, eine Rolle spielen.

Konstitutive Gleichungen sind auf viele verschiedene Arten entstanden. Manche sind Vereinfachungen der wahren Situation oder andere sind durch Experimente gerechtfertigt. In den wenigsten Fällen gibt es eine deduktive Herleitung aus dem mikroskopischen Verhalten.

4.5 Gleichungen der Strömungsmechanik

In diesem Kapitel wollen wir die hergeleiteten Gleichungen mit Leben füllen und uns einige interessante Strömungssituationen genauer anschauen. Es werden die Gleichungen für kompressible und inkompressible Fluide diskutiert und die für die jeweiligen Gleichungen adäquaten Randbedingungen vorgestellt. Dann werden die Gleichungen geeignet skaliert und abschließend der Wirbeltransport in Strömungen diskutiert.

Kompressible Fluide

Betrachtet man Strömungen, in denen die Dichteänderung nicht zu vernachlässigen ist, so muß man mit den vollen kompressiblen Gleichungen rechnen. Wir hatten schon im vorigen Abschnitt gesehen, daß man noch zusätzliche Bedingungen braucht, um ein geschlossenes System zu erhalten. Für ein ideales Gas gilt z.B.

$$\begin{aligned} p &= R\rho T, \\ e &= c_v T + \text{const} \end{aligned}$$

und ein verdünntes Gas erfüllt

$$\mu_d = 0 \quad \text{bzw.} \quad \lambda = -\frac{2}{3}\mu.$$

Ferner gelte das Fick'sche Abkühlungsgesetz

$$q = -\lambda \nabla T.$$

Navier-Stokes kompressibel

Falls man Reibungseffekte nicht vernachlässigen kann erhält man das folgende System von partiellen Differentialgleichungen.

$$\begin{aligned}\frac{D\rho}{Dt} + \rho \operatorname{div} u &= 0 \\ \rho \frac{Du}{Dt} &= \rho f - R \nabla(\rho T) + \frac{\mu}{3} \nabla(\operatorname{div} u) + \mu \Delta u \\ \rho \frac{D}{Dt} \left(\frac{|u|^2}{2} + c_v T \right) &= \rho f u + \operatorname{div}(\lambda \nabla T) + \mu \operatorname{div}((\nabla u + (\nabla u)^T)u) \\ &\quad - \frac{2}{3} \mu \operatorname{div}(u \operatorname{div} u)\end{aligned}$$

Randbedingungen

Um ein wohlgestelltes Problem zu bekommen, benötigen wir noch Zusatzbedingungen. Von größtem Interesse ist hier die geeignete Wahl von Randbedingungen. Angenommen, das Fluid befindet sich in einem Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^3$, das z.B. einen Behälter beschreibt. Eine gerechtfertigte Annahme ist, daß die Behälterwand undurchlässig ist; dies impliziert

$$u \cdot n = 0 \quad \text{auf } \partial\Omega,$$

wobei n die äußere Einheitsnormale bezeichnet.

Die Kontinuitätsgleichung für die Dichte ρ kann als lineare Differentialgleichung erster Ordnung betrachtet werden. Die Charakteristikenmethode zeigt, daß wegen $u \cdot n = 0$ auf $\partial\Omega$ keine Randbedingungen für die Dichte vorgegeben werden müssen.

Betrachtet man die Impulsgleichung genauer, erkennt man, daß die Bedingung an u noch nicht ausreicht. Angenommen, wir hätten sogar nur eine inkompressible Strömung ($\operatorname{div} u = 0$). Dann ist

$$\rho \frac{Du}{Dt} = \rho f - \nabla p + \mu \Delta u$$

eine parabolische Gleichung für u . Doch legt $u \cdot n = 0$ auf $\partial\Omega$ nur eine Komponente des Geschwindigkeitsvektors fest.

Die Frage nach der Randbedingung für die Geschwindigkeit eines Fluids, das sich in Kontakt mit einer starren Wand befindet, ist äußerst schwierig. Eine einfache und allgemein akzeptierte Antwort liefert die *Wandhaftbedingung*: $u = 0$ auf $\partial\Omega$.

D.h. zwischen dem Fluid und der starren Wand findet keine Relativbewegung statt. Letztlich kann die Energiebilanz als eine Gleichung für die Temperatur T aufgefaßt werden. Hier sind mithin alle für die Wärmeleitungsgleichung möglichen Randbedingungen denkbar, die in Kapitel 3 diskutiert wurden,

Ein mathematisch vollständig formuliertes Problem erhält man bei zusätzlicher Angabe von Anfangsbedingungen

$$\rho(0) = \rho_0, \quad u(0) = u_0, \quad T(0) = T_0 \quad \text{in } \Omega.$$

Euler-Gleichungen kompressibel

Falls man viskose Effekte durch innere Reibung gegenüber den Trägheitskräften vernachlässigen kann, reduziert sich der Spannungstensor zu $\tau = -p I$. Bei solchen Strömungen kann

die Kompression so stark sein, daß fast Unstetigkeiten auftreten, sogenannte Schocks oder Verdichtungsstöße. Man denke z.B. an einen Überschalljet.

Es empfiehlt sich in diesem Fall die Gleichungen in konservativer Form zu betrachten. Die Kontinuitäts- und die Impulsgleichung sind dann

$$\begin{aligned}\partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho u) &= 0 \\ \partial_t(\rho u) + \operatorname{div}(\rho u \otimes u) + \nabla p &= \rho f.\end{aligned}$$

Unter der Annahme eines idealen Gases erhalten wir

$$p = (\gamma - 1)\left(\rho e - \frac{1}{2}\rho|u|^2\right),$$

wobei $\gamma := c_p/c_V$. Die Energiegleichung hat dann die Form

$$\partial_t(\rho e) + \operatorname{div}(\rho e U + pu) = \rho f \cdot u + \rho h.$$

Im Falle fehlender Volumenkräfte und Wärmequellen, lassen sich diese Gleichungen als System von hyperbolischen Erhaltungsgleichungen schreiben. Wir definieren den Vektor $z = (\rho, \rho u, \rho e)^T$ und schreiben

$$\partial_t z + \operatorname{div}F(z) = 0,$$

mit der Flußfunktion

$$F(z) = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u \otimes u + pI \\ \rho e u + pu \end{pmatrix}.$$

In einem kompressiblen Fluid können sich Dichte- und Druckunterschiede nur mit endlicher Geschwindigkeit ausbreiten. Wir definieren die *Schallgeschwindigkeit*

$$c(p) := \sqrt{\frac{dp}{d\rho}}$$

und die lokale Machzahl

$$M := \frac{|u|}{c(p)}.$$

Für diese Art von Gleichungen benötigt man gesonderte numerische Methoden, die mit Unstetigkeiten durch Schocks umgehen können.

Inkompressible Fluide

Im Gegensatz zu Gasen lassen sich Flüssigkeiten nur unter Aufwendung von sehr großen Kräften zusammendrücken. Nehmen wir vereinfachend an, daß das Fluid inkompressibel ist. Dann gilt wie wir schon gesehen haben $\operatorname{div}u = 0$ und die Kontinuitätsgleichung wird zu einer Transportgleichung für die Dichte

$$\partial_t \rho + u \cdot \nabla \rho = 0.$$

Navier-Stokes inkompressibel

Zusätzlich zur Inkompressibilität nehmen wir an, daß die Dichte konstant ist ($\rho = \rho_0 \equiv 1$). Dies ist z.B. typisch für Wasser oder Öl. Dann lauten die **inkompressiblen Navier–Stokes Gleichungen**

$$\left. \begin{aligned} u_t + \underbrace{(u \cdot \nabla)u}_{\text{Konvektion}} &= f - \frac{1}{\rho_0} \nabla p + \underbrace{\nu \Delta u}_{\text{Diffusion}} \\ \operatorname{div} u &= 0 \end{aligned} \right\} \text{ in } \Omega$$

$$\begin{aligned} u &= 0 & \text{auf } \partial\Omega \\ u(0) &= u_0 & \text{in } \Omega \end{aligned}$$

mit $\nu = \mu/\rho_0$. Da die Dichte konstant ist, benötigen wir keine weiteren Gleichungen.

Doch wie verhält sich die kinetische Energie der Flüssigkeit? Es ist (mit $\rho \equiv 1$)

$$E_{\text{kin}}(t) := \frac{1}{2} \int_{\Omega} |u|^2 dx.$$

Wir berechnen im Fall von verschwindenden Volumenkräften

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} E_{\text{kin}}(t) &= \int_{\Omega} u u_t dx \\ &= \int_{\Omega} u (-(u \cdot \nabla)u - \nabla p + \nu \Delta u) dx \\ &= - \int_{\Omega} u (u \cdot \nabla)u dx - \int_{\Omega} u \nabla p dx + \nu \int_{\Omega} u \Delta u dx \end{aligned}$$

Nun gilt

$$\int_{\Omega} u \nabla p dx = - \int_{\Omega} \underbrace{\operatorname{div} u}_{=0} p dx + \int_{\partial\Omega} p \cdot \underbrace{u \cdot n}_{=0} dS = 0$$

und

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} u (u \cdot \nabla)u dx &= \frac{1}{2} \int_{\Omega} u \nabla(|u|^2) dx - \int_{\Omega} \underbrace{u \cdot (u \times \operatorname{rot} u)}_{=0} dx \\ &= -\frac{1}{2} \int_{\Omega} \underbrace{\operatorname{div} u}_{=0} |u|^2 dx + \frac{1}{2} \int_{\Omega} |u|^2 \underbrace{u \cdot n}_{=0} dS \\ &= 0 \end{aligned}$$

Insgesamt folgt

$$\frac{d}{dt} E_{\text{kin}}(t) = \nu \int_{\Omega} u \Delta u dx$$

bzw.

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} E_{\text{kin}}(t) &= \nu \int_{\Omega} u_1 \Delta u_1 \, dx + \nu \int_{\Omega} u_2 \Delta u_2 \, dx + \nu \int_{\Omega} u_3 \Delta u_3 \, dx \\
 &= \nu \sum_{i=1}^3 \left(- \int_{\Omega} |\nabla u_i|^2 \, dx + \underbrace{\int_{\partial\Omega} u_i (\nabla u_i \cdot n) \, dS}_{=0} \right) \\
 &= -\nu \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} |\nabla u_i|^2 \, dx \\
 &\leq 0
 \end{aligned}$$

Also ist die kinetische Energie monoton fallend, was Reibungsverlusten bei der viskosen Strömung entspricht.

Euler-Gleichungen inkompressibel

Können wir in der Strömung wieder die Viskosität vernachlässigen ($\mu = 0$), so erhalten wir die **inkompressiblen Eulergleichungen**

$$\begin{aligned}
 \frac{Du}{Dt} &= f - \nabla p \\
 \operatorname{div} u &= 0
 \end{aligned}$$

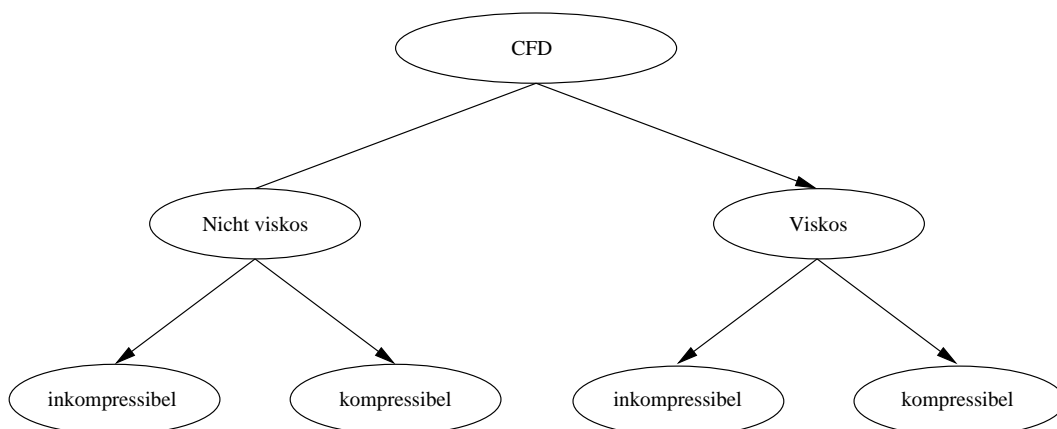
Da die zweite Ableitung an u wegfällt, können wir die Wandhaftbedingung $u = 0$ auf $\partial\Omega$ nicht mehr vorschreiben, sondern beschränken uns auf die Randbedingung

$$u \cdot n = 0 \quad \text{auf } \partial\Omega.$$

Die inkompressiblen Euler-Gleichungen haben wieder hyperbolischen Charakter, so daß ihre numerische Behandlung besonderer Verfahren bedarf, die auch die Berechnung von unstetigen Lösungen erlauben.

Modellhierarchie

Insgesamt erhalten wir das folgende Bild der Modellhierarchie



Eine weitere Unterscheidungen die getroffen wird ist

$$\text{laminar} \leftrightarrow \text{turbulent}$$

Laminare Strömungen (z.B. eine Kanalströmung bei geringer Geschwindigkeit, oder ein langsam laufender Wasserhahn) werden durch die Navier-Stokes Gleichungen beschrieben, während man für turbulente Strömungen (z.B. ein schnell laufender Wasserhahn) neue Modellgleichungen entwickeln muß.

Letztlich kann man noch Strömungen anhand der Strömungsgeschwindigkeit unterscheiden:

$$\text{Unterschall} \leftrightarrow \text{Überschall}$$

oder auch transsonische Strömungen.

Skalierung

Ausgehend von den dimensionsbehafteten inkompressiblen NSG wollen wir nun die Gleichungen durch eine geeignete Skalierung dimensionslos machen.

Wir starten mit den inkompressiblen Navier–Stokes Gleichungen

$$\begin{aligned} u_t + (u \cdot \nabla)u &= -\frac{1}{\rho_0} \nabla p + \nu \Delta u \\ \operatorname{div} u &= 0 \end{aligned} \tag{4.11}$$

und wählen eine charakteristische Länge L und eine charakteristische Geschwindigkeit U der Strömung. Eine sinnvolle Zeitskala ist dann durch $\tau = \frac{L}{U}$ gegeben.

Wir führen Variablen ein, die nun dimensionslos sind

$$\tilde{x} = \frac{x}{L}, \quad \tilde{t} = \frac{t}{\tau}, \quad \tilde{u} = \frac{u}{U}$$

Setzen wir dies in (4.11) ein und benutzen die Kettenregel, folgt

$$\begin{aligned} \frac{U}{\tau} \tilde{u}_t + \frac{U^2}{L} (\tilde{u} \cdot \tilde{\nabla}) \tilde{u} &= -\frac{1}{\rho_0} \frac{1}{L} \tilde{\nabla} p + \frac{\nu U}{L^2} \tilde{\Delta} \tilde{u}, \\ \frac{U}{L} \operatorname{div} \tilde{u} &= 0 \end{aligned}$$

Skalieren wir noch den Druck mit $\tilde{p} = \frac{1}{\rho_0 U^2} p$, erhält man nach Multiplikation mit $\frac{L}{U^2}$

$$\begin{aligned} u_t + (u \cdot \nabla)u &= -\nabla p + \frac{\nu}{LU} \Delta u \\ \operatorname{div} u &= 0, \end{aligned}$$

wobei wir die Tilde weggelassen haben.

Der dimensionslose Parameter

$$\operatorname{Re} = \frac{LU}{\nu}$$

heißt *Reynoldszahl* und gibt ein objektives Maß für die Viskosität der Strömung.

Man erkennt, daß die Aussage “ ν ist klein” noch lange nicht erlaubt viskose Effekte zu vernachlässigen, falls L und/ oder U klein sind. Dies darf man erst, wenn $\frac{1}{\operatorname{Re}}$ klein ist.

Ferner können zwei verschiedenen Strömungen dieselbe Reynoldszahl haben, d.h. sie werden durch dieselben Gleichungen beschrieben. Solche Strömungen nennt man *ähnlich*. Dieser Zusammenhang macht Tests in einem Windkanal erst möglich. Wir illustrieren dies Anhand der Umströmung von Kugeln mit den Beispielen

- *Strömung 1*: mit Radius $r = 10\text{m}$, mit der Geschwindigkeit $U_\infty = 100 \frac{\text{km}}{\text{h}}$ und Viskosität ν
- *Strömung 2*: mit Radius $r = 1\text{m}$, mit der Geschwindigkeit $U_\infty = 1000 \frac{\text{km}}{\text{h}}$

Dann gilt

$$\text{Re}_1 = \frac{1 \left(\frac{\text{km}^2}{\text{h}} \right)}{\nu} = \text{Re}_2$$

Bei der Luftströmung um ein Auto sind die Parameter

$$U = 10 \frac{\text{m}}{\text{s}}, \quad L = 1\text{m}, \quad \nu_{\text{Luft}} = 10^{-5} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$$

und damit erhält man

$$\text{Re} = 10^6.$$

D.h. man kann viskose Effekte vernachlässigen, natürlich nur solange man nicht am Widerstandsbeiwert des Autos interessiert ist.

Bei Kleinstlebewesen in Wasser hat man

$$U = 1 \frac{\text{mm}}{\text{s}}, \quad L = 1\text{mm}, \quad \nu_{\text{Wasser}} = 10^{-3} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$$

also

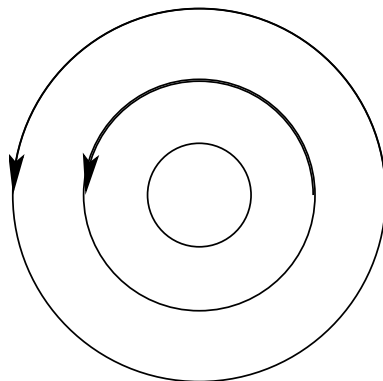
$$\text{Re} = 10^{-3},$$

sodass viskose Effekte dominant sind.

Wirbeltransportgleichung

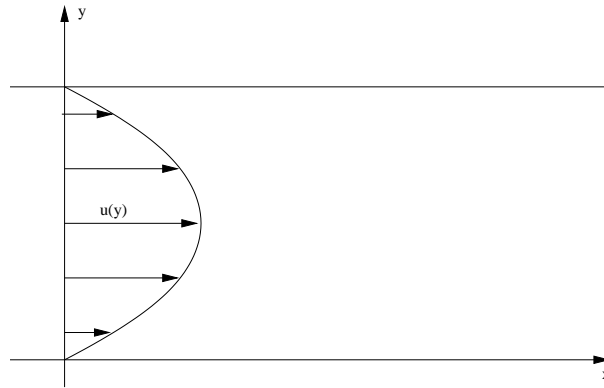
Wir wenden uns nun einer weiteren wichtigen Kenngröße einer Strömung zu, der *Wirbelstärke* $\omega := \text{rot } u$.

Bei deren Interpretation muß man allerdings vorsichtig sein: So ist die Kreisströmung



$$u(x, y) = \begin{pmatrix} \frac{-y}{\sqrt{x^2+y^2}} \\ \frac{x}{\sqrt{x^2+y^2}} \end{pmatrix}$$

wirbelfrei, während die Kanalströmung



wirbelbehaftet ist.

Mittels der Identität

$$u \cdot \nabla u = \frac{1}{2} \nabla |u|^2 - u \times \text{rot} u$$

folgt aus den inkompressiblen Euler-Gleichungen für rotationsfreie Fluide bei verschwindender Kraftdichte

$$\nabla \left(\frac{1}{2} \nabla |u|^2 + \frac{p}{\rho_0} \right) \equiv 0,$$

d.h. im gesamten Strömungsgebiet ist

$$\frac{1}{2} \nabla |u|^2 + \frac{p}{\rho_0} \equiv \text{const.}$$

Also geht eine lokale Erhöhung der Geschwindigkeit mit einer Verminderung des Drucks einher.

Ausgehend von den inkompressiblen Navier-Stokes Gleichungen wollen wir nun eine Gleichung für das Wirbelfeld ω herleiten. Dazu wenden wir den Rotationsoperator auf

$$u_t + (u \cdot \nabla)u = -\nabla p + \frac{1}{Re} \Delta u$$

an und erhalten

$$\omega_t + \text{rot}((u \cdot \nabla)u) = \frac{1}{Re} \Delta(\text{rot} u)$$

Dabei muss man beachten, dass die Gleichungen je nach Raumdimension verschiedenen sind:

- In 2d gilt:

$$\text{rot}((u \cdot \nabla)u) = (u \cdot \nabla)\omega \quad (\omega \text{ ist hier ein Skalar!})$$

- In 3d gilt:

$$\text{rot}((u \cdot \nabla)u) = (u \cdot \nabla)\omega - (\omega \cdot \nabla)u$$

In 2d lautet die Wirbeltransportgleichung

$$\begin{aligned} \omega_t + (u \cdot \nabla)\omega &= \frac{1}{Re} \Delta \omega \\ \Leftrightarrow \frac{D\omega}{Dt} &= \frac{1}{Re} \Delta \omega \end{aligned}$$

Wirbelstärke wird also durch Konvektion transportiert und dabei diffundiert. Man erkennt auch, daß in Eulergleichungen ($Re \rightarrow \infty$) Wirbelstärke nur transportiert wird; also erhalten bleibt.

In 3d lautet die Wirbeltransportgleichung

$$\frac{D\omega}{Dt} = (\omega \cdot \nabla)u + \frac{1}{Re}\Delta\omega$$

Hier wird die Wirbelstärke transportiert, gestreckt und diffundiert. Man sollte annehmen, daß für $\omega(t=0) = 0$ auch $\omega = 0$ für $t > 0$ gilt. Doch dies ist nicht der Fall, da aufgrund der Randbedingungen Wirbelstärke erzeugt werden kann.

Ein Vorteil der Wirbeltransportgleichung ist, daß der Druck eliminiert wurde. Dies macht diesen Zugang auch für die Numerik interessant. Eine Frage, die offen bleibt, ist wie man aus dem Wirbelfeld wieder zurück zum Geschwindigkeitsfeld kommt. Diese Frage ist alles andere als trivial und würde den Rahmen der Vorlesung sprengen. Wir verweisen auf [5].

Kapitel 5

Akustik und Elektromagnetik

In diesem Kapitel werden wir uns mit Wellenphänomenen beschäftigen, wie sie bei akustischen und elektromagnetischen Problemen auftreten. Wir beginnen mit akustischen Schallwellen, deren Bewegungsgleichung in der Mathematik meist einfach als *die Wellengleichung* bezeichnet wird. In deren Herleitung folgen wir [9].

5.1 Die akustische Wellengleichung

Ausgangspunkt der Modellierung von Schallwellen sind die Bilanzgleichungen der Kontinuumsmechanik, die wir in Kapitel 4 hergeleitet haben. Bei Schallwellen betrachten wir die *isentropen* Situation, d.h., der Druck hängt nur von der Dichte ab. Es genügt in diesem Fall die Massen- und Impulserhaltung zu betrachten, woraus man die Gleichungen

$$\begin{aligned}\frac{D\rho}{Dt} &= -\rho \operatorname{div} u \\ \frac{Du}{Dt} &= -\frac{a^2}{\rho} \nabla \rho,\end{aligned}$$

mit der *Schallgeschwindigkeit* $a^2 = \frac{dp}{d\rho}$.

Nun betrachten wir den Fall einer Flüssigkeit in Ruhe, d.h., $\rho = \rho_0$ ist konstant und $u = 0$, und führen eine kleine Störung zu $\rho = \rho_0 + \rho_1$ (ρ_1 klein) durch, sodass die Geschwindigkeit klein bleibt ($u = u_0 + u_1$, $u_0 = 0$ und u_1 klein). Daraus erhalten wir die Gleichungen

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \rho_0 \operatorname{div} u_1 &= -\operatorname{div}(\rho_1 u_1) \\ \frac{\partial u_1}{\partial t} + \frac{a(\rho_0)^2}{\rho_0} \nabla \rho_1 &= -c \nabla \rho_1 - \nabla \rho_1 \cdot u_1,\end{aligned}$$

mit $c = \frac{a(\rho_0 + \rho_1)^2}{\rho_0 + \rho_1} - \frac{a(\rho_0)^2}{\rho_0} \sim \rho_1$. Da ρ_1 und u_1 klein sind, können in erster Näherung die quadratischen Terme auf der rechten Seite vernachlässigt werden und wir erhalten

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \rho_0 \operatorname{div} u_1 &= 0 \\ \frac{\partial u_1}{\partial t} + \frac{a(\rho_0)^2}{\rho_0} \nabla \rho_1 &= 0.\end{aligned}$$

Kombiniert man diese Gleichungen so erhält man (da ρ_0 konstant ist) die sogenannte *lineare Wellengleichung*

$$\frac{\partial^2 \rho_1}{\partial t^2} = a(\rho_0)^2 \Delta \rho_1, \quad (5.1)$$

für die Abweichung der Dichte. Analog erhält man die vektorielle Gleichung

$$\frac{\partial^2 u_1}{\partial t^2} = a(\rho_0)^2 \nabla \operatorname{div} u_1, \quad (5.2)$$

für die Geschwindigkeit.

Als Randbedingung kann man nun entweder Dirichlet-Bedingungen (d.h. vorgegebene Dichte) oder Neumann-Bedingungen (d.h. vorgegebene Normalgeschwindigkeit) verwenden. Als Anfangsbedingung gibt man normalerweise Druck und Geschwindigkeit vor, wir können aber auch die Identität $\frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \rho_0 \operatorname{div} u_1$ zum Zeitpunkt $t = 0$ benutzen um direkt die Anfangswerte $\rho_1(\cdot, 0)$ und $\frac{\partial \rho_1}{\partial t}(\cdot, 0)$ zu erhalten, die man wegen der zwei Zeitableitungen in der Wellengleichungen zum Abschluss des Systems benötigt.

Die sogenannte *akustische Energie* setzt sich zusammen aus der ersten Näherung der kinetische Energie und der Dichte, d.h.

$$E = \frac{\rho_0}{2} \int_{\Omega} u_1^2 dx + \int_{\Omega} a^2 \frac{\rho_1^2}{\rho_0} dx.$$

Die Änderung der Energie ist dann

$$\frac{dE}{dt} = \rho_0 \int_{\Omega} u_1 \frac{\partial u_1}{\partial t} dx + \int_{\Omega} a^2 \frac{\rho_1}{\rho_0} \frac{\partial \rho_1}{\partial t} dx$$

und nach Einsetzen der obigen Gleichungen für die Änderung von u_1 und ρ

$$\frac{dE}{dt} = -a^2 \int_{\Omega} (u_1 \nabla \rho_1 + \rho_1 \operatorname{div} u_1) dx = -a^2 \int_{\Omega} \operatorname{div} (\rho_1 u_1) dx.$$

Mit Hilfe des Gauss'schen Satzes folgt

$$\frac{dE}{dt} = -a^2 \int_{\partial \Omega} \rho_1 u_1 \cdot \mathbf{n} dS,$$

d.h. die Energieänderung entspricht wieder dem Fluss über den Rand. Für ein geschlossenes System sollten dann klarerweise als Randbedingung entweder $\rho_1 = 0$ (konstante Dichte) oder $u_1 \cdot \mathbf{n} = 0$ (Wandhaftbedingung) gelten, und die Energie bleibt erhalten.

Um die Eigenschaften der Wellengleichung besser zu verstehen, betrachten wir den örtlich eindimensionalen Fall im ganzen Raum, d.h., $\Omega = \mathbb{R}$ und skalieren so, dass $\rho_0 = 1$ und $a^2 = 1$ gilt. Dann lauten die Gleichungen für Dichte ρ und Geschwindigkeit u einfach

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial u}{\partial x}, \quad \frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial \rho}{\partial x}.$$

Führen wir nun die Variablen $v = \rho + u$ und $w = \rho - u$ ein, so erhalten wir durch Addition bzw. Subtraktion der obigen Gleichungen

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial v}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial w}{\partial t} - \frac{\partial w}{\partial x} = 0.$$

Es ist nun leicht zu sehen, dass diese Erhaltungsgleichungen die Lösungen

$$v(x, t) = v_0(x - t) = \rho_0(x - t) + u_0(x - t)$$

und

$$w(x, t) = w_0(x + t) = \rho_0(x + t) - u_0(x + t)$$

haben, wobei ρ_0 und $u_0 = -\frac{\partial \rho_0}{\partial x}$ die Anfangswerte für Dichte und Geschwindigkeit sind. Damit können wir auch die exakte Lösung der Wellengleichung als

$$\rho(x, t) = \frac{1}{2} \left(\rho_0(x - t) - \frac{\partial \rho_0}{\partial x}(x - t) + \rho_0(x + t) + \frac{\partial \rho_0}{\partial x}(x + t) \right)$$

berechnen, dem sogenannten d'Alembert'schen Prinzip. Die im Punkt x zur Zeit t eintreffende Wellenfront ist also die Kombination zweier Elementarwellen, die zur Zeit $t = 0$ in den Punkten $x - t$ (in positiver Richtung) und $x + t$ (in negativer Richtung) starten.

Mit den üblichen Skalierungen von Zeit und Ort $t = \tau \tilde{t}$ und $x = \ell \tilde{x}$, sowie der Dichte $\rho = R_0 \tilde{\rho}$ erhalten wir in dimensionsloser Form

$$\frac{\partial^2 \tilde{\rho}}{\partial \tilde{t}^2} = \frac{a^2 \tau^2}{\ell^2} \Delta_{\tilde{x}} \tilde{\rho}.$$

Ist man an Effekten in der Grössenordnung ℓ interessiert, so erscheint es natürlich, als Zeitskala $\tau = \frac{\ell}{a}$ zu wählen, also jene Zeitskala auf der die Welle mit Geschwindigkeit a die Länge ℓ zurücklegt. Damit erhält man skaliert

$$\frac{\partial^2 \tilde{\rho}}{\partial \tilde{t}^2} = \Delta_{\tilde{x}} \tilde{\rho}.$$

Ändern wir nun die Skalierung zu $\hat{t} = c \tilde{t}$ und $\hat{x} = c \tilde{x}$, so erhalten wir exakt dieselbe Gleichung.

5.2 Die Helmholtz-Gleichung

Führt man in der Wellengleichung eine Separation der Variablen (t und x) durch, so erhält man Lösungen der Form

$$\rho_1(x, t) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} e^{i\lambda_n t/a} u_k(x),$$

wobei u_k die Eigenfunktion des Laplace Operators und $-\lambda_k^2 < 0$ die zugehörigen Eigenwerte sind (wir setzen $\lambda_{-k} = -\lambda_k$). Die Summanden, d.h., Lösungen der Wellengleichung der Form $\rho(x, t) = e^{i\lambda t/a} u(x)$ heissen *harmonische Wellen* und sind von besonderer Bedeutung. Setzt man $n = \frac{\lambda}{a}$, so erfüllt die komplexwertige Funktion u die Differentialgleichung

$$\Delta u + n^2 u = 0,$$

die sogenannte *Helmholtz-Gleichung*. Der Skalar n heisst *Brechungsindex*, in Medien mit nicht konstanter Wellengeschwindigkeit ist der Brechungsindex ebenfalls eine Funktion des Orts.

Für $n \in \mathbb{R}$ erhält man eine ungedämpfte Wellenausbreitung, während es für $n \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ zu einer Dämpfung der Schwingung kommt.

Als Randbedingungen verwendet man:

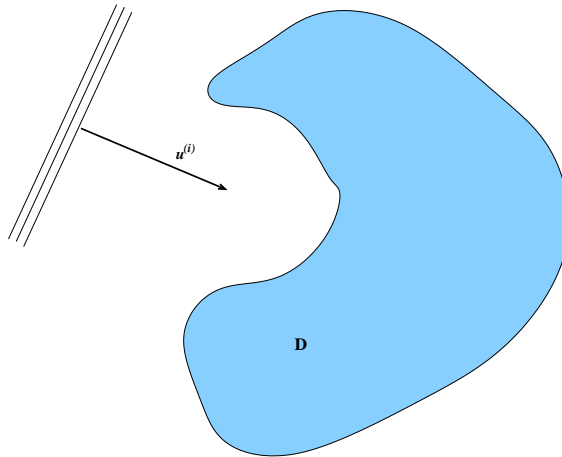


Abbildung 5.1: Streuung an einem Hindernis.

- **Schallharte** Randbedingung: $\frac{\partial u}{\partial n} = 0$ (entspricht der Wandhaftbedingung für die Wellengeschwindigkeit).
- **Schallweiche** Randbedingung: $u = 0$ (entspricht einer festen Dichte am Rand).
- **Impedanz**-Randbedingung: $\frac{\partial u}{\partial n} + i\eta nu = 0$. Der Wert η heisst (akustische) Impedanz.

Auf einem unbeschränkten Gebiet verwendet man die *Sommerfeld'sche Ausstrahlungsbedingung*,

$$\frac{\partial u}{\partial r} - inu = \mathcal{O}\left(r^{-\frac{1-d}{2}}\right), \quad r = |x|,$$

die den sinnvollen Abfall der Welle modelliert und die Eindeutigkeit der Lösung erzwingt.

Ein besonders interessanter Effekt, der durch die Helmholtz-Gleichung modelliert wird, ist die Streuung von Wellen. Dabei ist das Feld u eine Überlagerung einer (bekannten) einfallenden Welle $u^{(i)}$ und einer (unbekannten) gestreuten Welle $u^{(s)}$, d.h. $u = u^{(i)} + u^{(s)}$. Die Streuung passiert an einem Hindernis D , und die Welle breitet sich in $\mathbb{R}^d \setminus D$ aus. Damit erhält man ein *Aussenraumproblem* für die Helmholtzgleichung, d.h., eine Differentialgleichung auf einem unbeschränkten Gebiet mit Randproblemen auf dem Rand eines inneren Gebiets. Von besonderem Interesse als einfallende Wellen sind *ebene Wellen* der Form $u^{(i)} = e^{in\alpha \cdot x}$, mit einem normierten Vektor α , d.h. $|\alpha| = 1$. Die ebene Welle ist eine Lösung der Helmholtz-Gleichung, und damit erfüllt die gestreute Welle ebenfalls die Helmholtz-Gleichung

$$\Delta u^s + n^2 u^s = 0 \quad \text{in } \mathbb{R}^d \setminus D$$

und die einfallende Welle tritt nur mehr in der Randbedingung auf, z.B. bei einem schallweichen Hindernis ist

$$u^{(s)} = -u^{(i)} \quad \text{auf } \partial D.$$

5.3 Die Maxwell-Gleichungen

Elektromagnetische Wechselwirkungen passieren im allgemeinen zwischen geladenen Atomteilchen (Elektronen, Protonen) oder Molekülen (Ionen), und erfüllt die folgenden Eigenschaften

- Es gibt zwei Arten von Ladungen, positive und negative.
- Gleiche Ladungen stoßen sich ab.
- Ungleiche Ladungen ziehen sich an.
- Die Kraftwirkungen verschiedener Ladungen addieren sich.
- Ungeladene Körper erfahren eine Kraftwirkung durch Influenz.

Wir haben bereits im letzten Kapitel schematisch das *Coulomb'sche Gesetz* kennengelernt, dass die Wechselwirkung zwischen geladenen Teilchen beschreibt. Sei $\mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$, dann ist die Coulomb Kraft auf Teilchen 1 gegeben durch

$$F = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q_1 Q_2}{|\mathbf{r}_{12}|^3} \mathbf{r}_{12}$$

mit der Permittivität des Vakuums $\epsilon_0 = 8,8542 \times 10^{-12} \frac{\text{C}^2}{\text{Nm}^2}$, wobei $1\text{C} = 1\text{As}$

Die makroskopischen Größen, die zur Beschreibung elektromagnetischer Wellen verwendet werden, sind das elektrische Feld \mathbf{E} , die magnetische Flußdichte \mathbf{B} , die magnetische Feldstärke \mathbf{H} und die elektrische Verschiebungsdichte \mathbf{D} . Das elektrische Feld kann als Grenzwert der Kraft für verschwindende Elementarladung q gesehen werden, d.h.

$$\mathbf{E} = \lim_{q \rightarrow 0} \frac{F(q)}{q}.$$

Weiters benötigt man noch die Ladungsdichte ρ und die Stromdichte \mathbf{J} .

Die Verschiebungsdichte und das elektrische Feld sind durch ein Materialgesetz verbunden, im isotropen Fall verwendet man meist

$$\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E},$$

wobei ϵ die Permittivität bezeichnet. In ähnlicher Weise verknüpft man das magnetische Feld und die magnetische Flußdichte durch

$$\mathbf{B} = \mu \mathbf{H},$$

wobei μ die Permeabilität bezeichnet.

Kontinuitätsgleichungen erhält man nun aus physikalischen Gesetzen: Zunächst gilt das elektrische Gauss'sche Gesetz, d.h. der elektrische Fluß durch eine geschlossene Oberfläche ist gleich der im Inneren enthaltenen Ladungsmenge. Sei also W ein beliebiges Teilgebiet, dann gilt

$$\int_{\partial W} \mathbf{D} \cdot \mathbf{n} \, dS = \int_W \rho \, dx,$$

bzw. durch partielle Integration

$$\int_W (\text{div } \mathbf{D} - \rho) \, dx = 0.$$

Da das Teilgebiet beliebig gewählt war, folgern wir wieder eine differentielle Form

$$\text{div } \mathbf{D} = \rho.$$

Analog gibt es ein magnetisches Gauss'sches Gesetz, aus dem wir die differentielle Gleichung

$$\operatorname{div} \mathbf{B} = 0$$

erhalten.

Weiters gilt das Induktionsgesetz, d.h. der von einem Magnetfeld induzierte Strom ist gleich der zeitlichen Änderung des magnetischen Flusses, d.h.

$$U_{ind} = -\frac{d}{dt} \int_W \mathbf{B} \cdot d\mathbf{x},$$

wobei das negative Vorzeichen auf Grund der Lenz'schen Regel ("Der induzierte Strom ist so gerichtet, dass er der Ursache entgegenwirkt") gewählt wird. Nach dem Faraday'schen Gesetz ist der induzierte Strom gegeben durch das elektrische Feld entlang des Randes, d.h.

$$U_{ind} = \int_{\partial W} \mathbf{E} \cdot d\mathbf{S}.$$

Mit dem Stoke'schen Satz ist dann

$$U_{ind} = - \int_W \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \cdot d\mathbf{x} = \int_W \nabla \times \mathbf{E} \cdot d\mathbf{x}$$

und damit in differentieller Form

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0.$$

Mit einer ähnlichen Argumentation können wir auch eine Beziehung zwischen dem elektrischen Fluss, der Stromdichte und dem magnetischen Feld herleiten, und schliesslich erhalten wir die *Maxwell Gleichungen*

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0 \tag{5.3}$$

$$\nabla \times \mathbf{H} - \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = \mathbf{J} \tag{5.4}$$

$$\operatorname{div} \mathbf{D} = \rho \tag{5.5}$$

$$\operatorname{div} \mathbf{B} = 0. \tag{5.6}$$

Aus den Maxwell-Gleichungen erhalten wir auch wieder die Kontinuitätsgleichung für ρ und $\mathbf{J} = \rho \mathbf{v}$. Nehmen wir die Divergenz von (5.4), dann gilt da die Divergenz einer Rotation verschwindet

$$\operatorname{div} \mathbf{J} = -\frac{\partial}{\partial t} \operatorname{div} \mathbf{D} = -\frac{\partial \rho}{\partial t}.$$

5.4 Zeitharmonische Wellen

Wie schon im akustischen Fall sind zeitharmonische Wellen von besonderem Interesse, d.h., wir machen den Ansatz

$$\mathbf{E}(x, t) = \hat{\mathbf{E}}(x) e^{-i\omega t}, \quad \mathbf{H}(x, t) = \hat{\mathbf{H}}(x) e^{-i\omega t},$$

weitere verwenden wir die Relationen $\mathbf{D} = \epsilon\mathbf{E}$ und $\mathbf{B} = \mu\mathbf{H}$. Natürlich ist dies nur dann sinnvoll wenn auch die Quellterme zeitharmonisch sind, d.h., $\mathbf{J} = \hat{\mathbf{J}}e^{-i\omega t}$ und $\rho = \hat{\rho}e^{-i\omega t}$.

Damit erhalten wir die stationären harmonischen Maxwell-Gleichungen als

$$\nabla \times \hat{\mathbf{E}} - i\omega\mu\hat{\mathbf{H}} = 0 \quad (5.7)$$

$$\nabla \times \hat{\mathbf{H}} + i\omega\epsilon\hat{\mathbf{E}} = \hat{\mathbf{J}} \quad (5.8)$$

$$\operatorname{div}(\epsilon\hat{\mathbf{E}}) = \hat{\rho} \quad (5.9)$$

$$\operatorname{div}(\mu\hat{\mathbf{H}}) = 0. \quad (5.10)$$

Der zeitharmonische Fall bei den Maxwell-Gleichungen stellt das Analogon zum Übergang von der Wellengleichung auf die Helmholtz-Gleichung dar, und die Effekte sind sehr ähnlich. Falls jedoch keine Magnetisierung vorliegt ($\hat{\mathbf{H}} = 0$) und ein elektrisches Potential existiert, ändert sich das Verhalten grundlegend, wie wir im nächsten Kapitel sehen werden.

5.5 Potentialgleichung und Transversalwellen

Wir nehmen nun an, dass keine Magnetisierung vorliegt, d.h. $\hat{\mathbf{H}} = 0$ und dass $\nabla \times \hat{\mathbf{J}} = 0$ gilt. Dann können wir ein elektrisches Potential ϕ finden, sodass

$$\hat{\mathbf{J}} = -i\omega\epsilon\nabla\phi.$$

Die Kontinuitätsgleichung hat dann die Form

$$-i\omega \operatorname{div}(\epsilon\nabla\phi) = \operatorname{div}\hat{\mathbf{J}} = i\omega\hat{\rho}.$$

Das elektrische Feld wählen wir dazu als $\hat{\mathbf{E}} = -\nabla\phi$. Man erkennt, dass alle Maxwell-Gleichungen in diesem Fall automatisch erfüllt sind: die erste wegen $\nabla \times \nabla = 0$ und $\hat{\mathbf{H}} = 0$, die zweite wegen der Annahme an $\hat{\mathbf{J}}$ und $\hat{\mathbf{H}} = 0$, die dritte folgt aus der Kontinuitätsgleichung und die vierte wieder aus $\hat{\mathbf{H}} = 0$.

In diesem Fall reduziert sich das gesamte Maxwell-System auf die sogenannte *Potentialgleichung*

$$-\operatorname{div}(\epsilon\nabla\phi) = \hat{\rho},$$

eine elliptische Differentialgleichung zweiter Ordnung für das Potential. Vom ursprünglichen Wellencharakter der Maxwell-Gleichungen bleibt also wenig übrig.

Weitere interessante Spezialfälle der Maxwellgleichungen, die auf skalare Differentialgleichungen reduziert werden können, sind sogenannte *Transversalwellen*. Bei diesen verschwindet nicht das gesamte magnetische Feld, sondern die Komponenten in Ausbreitungsrichtung (d.h., die Polarisierung ist transversal). Man unterscheidet dabei in transvers elektrische (TE) Polarisierung, bei der das elektrische Feld normal zur Ausbreitungsrichtung ist, und transvers magnetische (TM) Polarisierung, bei der das magnetische Feld normal zur Ausbreitungsrichtung ist.

Wir betrachten dies näher im Fall einer Welle, die sich in der $x-y$ -Ebene ausbreitet, d.h., das elektrische und magnetische Feld sind unabhängig von z . Bei der TE-Polarisierung ist das elektrische Feld von der Form $\hat{\mathbf{E}} = (0, 0, E_z(x, y))$, was nur möglich ist für $\hat{\mathbf{J}} = (0, 0, J_z(x, y))$. Damit hat die erste Maxwell-Gleichung die Form

$$\left(\frac{\partial E_z}{\partial y}, -\frac{\partial E_z}{\partial x}, 0\right) = i\omega(H_x, H_y, H_z),$$

d.h., das magnetische Feld hat die Form

$$\hat{\mathbf{H}} = (H_x(x, y), H_y(x, y), 0).$$

Setzt man die erste in die zweite Maxwell-Gleichung ein, so erhält man die skalare Gleichung

$$\nabla^* \times \left(\frac{1}{\mu} \nabla \times E_z \right) + \epsilon \omega^2 E_z = -i\omega J_z,$$

wobei wir die Schreibweise $\nabla \times E_z = \left(\frac{\partial E_z}{\partial y}, -\frac{\partial E_z}{\partial x} \right)$ und $\nabla^* \times (A, B) = \frac{\partial B}{\partial x} - \frac{\partial A}{\partial y}$ verwenden. Ist μ konstant und $J_z = 0$, so kann man diese Gleichung zur Helmholtz-Gleichung

$$\Delta E_z + n^2 E_z = 0$$

reduzieren, mit $n = \sqrt{\mu\epsilon}\omega$. Eine analoge Reduktion ist im transvers magnetischen Fall möglich, dort erhält man eine Gleichung für $H_z(x, y)$.

Literaturverzeichnis

- [1] G.Bao, L.Cowsar, W.Masters, eds., *Mathematical Modeling in Optical Science* (SIAM, Philadelphia, 2001).
- [2] X.Blanc, C.Le Bris, P.L.Lions, *From molecular models to continuum mechanics*, Arch. Ration. Mech. Anal. **164** (2002), 341-381.
- [3] C.Cercignani, *Mathematical Methods in Kinetic Theory* (Plenum Press, New York, 1990).
- [4] C.Cercignani, *The Boltzmann Equation and its Applications* (New York, Springer, 1988). **M-FH: 11862**
- [5] A.J.Chorin, J.E.Marsden, *A Mathematical Introduction to Fluid Mechanics* (Springer, New York, 1979). **M-FH: 7716**
- [6] A.Friedman, W.Littman, *Industrial Mathematics: A Course in Solving Real-World Problems* (SIAM, Philadelphia, 1994), **M-FH: 13365**
- [7] A.Friedman, D.Ross, *Mathematical Models in Photographic Science* (Springer, Berlin, 2003). **M-FH: 16115**
- [8] H.Garcke, *Einführung in die Mathematische Modellierung* (Vorlesungsskript, Universität Regensburg, 2002).
- [9] D.S.Jones, *Acoustic and Electromagnetic Waves* (Clarendon Press, Oxford, 1986). **M-FH: 11416**
- [10] C.C.Lin, L. A. Segel, *Mathematics Applied to Deterministic Problems in the Natural Sciences* (MacMillan, New York, 1974). **M-FH: 8293**
- [11] R.Pinnau, *Numerische Strömungsmechanik* (Vorlesungsskript, TU Darmstadt, 2002).
- [12] L.A.Segel, *Simplification and scaling*, SIAM Review **14** (1972), 547-571.
- [13] A.B.Taylor, *Mathematical Models in Applied Mechanics* (Clarendon Press, Oxford, 1986). **M-FH: 10043 / 11402**