

**Skriptum zur Vorlesung**

# **Mathematische Modellierung**

**Wintersemester 2015/2016**

**Martin Burger**

Institut für Numerische und Angewandte Mathematik

[martin.burger@uni-muenster.de](mailto:martin.burger@uni-muenster.de)

<http://imaging.uni-muenster.de>

# Inhaltsverzeichnis

<b>1 Einleitung</b>	<b>4</b>
<b>2 Grundprinzipien der Mathematischen Modellierung</b>	<b>8</b>
2.1 Modellierungszyklus . . . . .	8
2.2 Dimensionlose Variable und Skalierung . . . . .	10
2.3 Sensitivitätsanalyse . . . . .	13
2.4 Modellvereinfachung: Ballwurf . . . . .	14
2.5 Modellhierarchien: Chemische Reaktionskinetik . . . . .	15
<b>3 Diffusion und Drift</b>	<b>22</b>
3.1 Diskrete Sprungprozesse - Random Walks . . . . .	22
3.2 Diffusion und Wärmeleitung im Kontinuum . . . . .	25
3.3 Eigenschaften von Diffusionsgleichungen . . . . .	28
3.4 Fokker-Planck Gleichungen . . . . .	30
3.5 Reaktions-Diffusions Gleichungen . . . . .	32
<b>4 Transport und Strömung</b>	<b>35</b>
4.1 Grundlegendes zur Kontinuumsmechanik . . . . .	35
4.2 Euler und Navier-Stokes . . . . .	37
4.3 Inkompressible Navier-Stokes Gleichungen . . . . .	41
<b>5 Wellen</b>	<b>44</b>
5.1 Die akustische Wellengleichung . . . . .	44
5.2 Die Helmholtz-Gleichung . . . . .	46
5.3 Die Maxwell-Gleichungen . . . . .	48
5.4 Zeitharmonische Wellen . . . . .	50
5.5 Potentialgleichung und Transversalwellen . . . . .	50
<b>6 Von Newton zu Boltzmann</b>	<b>52</b>
6.1 Die Newton'schen Gesetze . . . . .	52
6.2 Strassenverkehr . . . . .	55
6.3 Der Übergang zum Kontinuum . . . . .	58
6.4 Billards und Boltzmann . . . . .	59
6.5 Hydrodynamik und zurück zu Euler . . . . .	60
6.6 Diffusive und Konvektive Skalierung . . . . .	62

<b>7 Schneeflocken und Entmischung</b>	<b>64</b>
7.1 Phasenübergänge: Wasser, Eis und Schnee . . . . .	64
7.2 Phasenseparation: Entmischung . . . . .	66
<b>8 Kristallisation</b>	<b>69</b>
8.1 Materialeigenschaften . . . . .	72
<b>9 Märkte und Stochastische Differentialgleichungen</b>	<b>73</b>
9.1 Langevin Gleichungen - Wiener Prozesse . . . . .	73
9.2 Der Wert einer Option: Das Black-Scholes Modell . . . . .	76

# 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 Teilespekte davon interessiert, ist es meist wichtig, die Bedeutung und Struktur der zu Grunde liegenden mathematischen Modelle zu verstehen.

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). Für tatsächliche Vorhersagen 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 Stömungs- und Wärmeleitungsmodellen unerlässlich. Die Kunst der mathematischen Modellierung besteht geradezu darin, ein möglichst einfaches Modell zu finden, dass eine reale Fragestellung möglichst gut erklärt.

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

- *Diskrete Modelle* bestehen aus einer endlichen Anzahl von Partikeln (Atome, Moleküle, Zellen, Händler, Autofahrer, ...), deren Eigenschaften (Position, Geschwindigkeit, Spin, Meinung, Investitionsverhalten, ...) durch das Modell beschrieben werden.
- *Kontinuumsmodele* beschreiben die Dichten der Variablen, normalerweise als Funktionen von Ort und Zeit.

Wir werden in dieser Vorlesung beide Arten von Modellen kennenlernen und auch den Übergang von diskreten zu kontinuierlichen Modellen diskutieren. Typischerweise haben diskrete Modelle eine Zufallskomponente, da man immer Ungenauigkeiten in der Beschreibung berücksichtigen muss (von der Unschärferelation der Quantenmechanik bis zu unplanbaren Eigenheiten von Händlern oder Autofahrern). Der Übergang zum Kontinuumsmodell besteht dann typischerweise aus dem Grenzwert *Anzahl gegen unendlich*, kann also vor allem für sehr viele Teilchen als vernünftige Näherung angenommen werden. Da bei diesem Grenzwert meist auch ein Gesetz der grossen Zahl auftritt, verschwindet die zufällige Komponente im Kontinuumsmodell.

Diese Vorlesung wird sich von vielen Lehrveranstaltungen (vor allem jenen des Grundstudiums) 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.

Mathematische Modelle werden heute in Gebieten verwendet, wo man es kaum vermuten würde, die Zunahme von Rechenleistung macht die quantitative Untersuchung immer neuer Phänomene möglich und attraktiv. Ein paar Beispiele von Gebieten, in denen mathematische Modelle eine Rolle spielen (und die wir teilweise auch in dieser Vorlesung / Übung kennenlernen werden), sind:

- *Physik*: die klassischste Form der mathematischen Modellierung, die theoretische Physik beschäftigt sich mit kaum anderen Themen als der Erstellung mathematischer Modelle für physikalische Prozesse.
- *Chemie*: von der einfachen Reaktionskinetik bis zur Quantenchemie werden heute unzählige chemische Prozesse mit mathematischen Modellen untersucht.
- *Biologie*: Die mathematischen Modelle in der Populationsbiologie haben bereits eine lange Geschichte und werden immer noch weiter entwickelt, etwa bezüglich nachhaltiger

Rohstoffnutzung oder der Ausbreitung von Viren und Krankheiten. Die mathematische Modellierung spielt auch in der Molekularbiologie eine zunehmend wichtige Rolle.

- *Medizin:* Diagnoseverfahren in der Medizin basieren auf der Lösung inverser Probleme, dahinter stecken natürlich wiederum mathematische Modelle. Dabei spielen natürlich viele physikalische, chemische, und biologische Effekte eine wichtige Rolle, z.B. elektrische Effekte beim EKG und EEG oder radioaktiver Zerfall in der Nuklearmedizin. Ein immer stärkerer Trend geht auch zur quantitativen Modellierung und Simulation in der Medizin, etwa des Blutflusses oder anderer physiologischer Prozesse. Auch Medikamente werden heute basierend auf mathematischen Modellen aus der Biomedizin designed.
- *Wirtschaft:* In den Wirtschaftswissenschaften werden schon lange relativ einfache mathematische Modelle verwendet, etwa zur Charakterisierung von Marktgleichgewichten. Verstärkt werden auch kompliziertere und realistische Modelle untersucht, zum Beispiel zur Verteilung von Wohlstand in Gesellschaften.
- *Finanz:* Die moderne Finanzwelt ist mittlerweile voll von komplexen stochastischen Modellen und nichtlinearen partiellen Differentialgleichungen. Vor allem zur Berechnung der Preise von Finanzderivaten werden solche Modelle häufig eingesetzt.
- *Technik:* Von mechanischen Eigenschaften von Festkörpern über Strömungssimulation bis zu mikroelektronischen Bauteilen - die mathematische Modellierung und Simulation ist mit technischem Fortschritt heute untrennbar verbunden.
- *Transport:* In der Logistik hat die mathematische Optimierung basierend auf einfachen wirtschaftlichen Modellen eine lange Tradition, schon das klassische *travelling salesman problem* fällt in diese Kategorie. In der Verkehrsplanung hat die mathematische Modellierung im letzten Jahrzehnt grosse Erfolge erzielt, einige dieser Modelle werden wir auch in dieser Vorlesung kennen lernen.
- *Architektur:* In der Berechnung statischer Eigenschaften sind Architekten stets bemüht modernste mathematische Modelle der Mechanik zu verwenden. Neuerdings findet sich komplizierte Mathematik aber auch als Vorlage für künstlerisches Design und Architekten beginnen sich zunehmend mit mathematischen Modellen zur Evakuierungssimulation zu beschäftigen.
- *Sicherheit:* Durchleuchtungen auf Flughäfen basieren auf ähnlichen Verfahren und damit auch analogen mathematischen Modellen wie in der medizinischen Bildgebung. Seit 9/11 werden vor allem in den USA auch viele andere mathematische Modelle zur Terrorismusbekämpfung untersucht. Auch in der Kriminalitätsbekämpfung beginnt man mathematische Modelle einzusetzen, so wird derzeit z.B. in Los Angeles die Entstehung von Vierteln mit hoher Kriminalität modelliert.
- *Kunst:* da die Tonübertragung durch Akustik ein klassisches Thema der Physik ist, spielt die Mathematik in der Musik schon länger eine Rolle. Seit kurzem wird auch der Kompositionsstil klassischer Musiker und der Stil berühmter Maler mit mathematischen Modellen untersucht, letzteres vor allem zur Unterscheidung zu Fälschungen. Auch bei der Restoration antiker Kunstwerke spielt die Mathematik eine mittlerweile eine wichtige Rolle.

- *Unterhaltung:* Durch computergenerierte Special Effects in Hollywood-Filmen hat die Mathematik starken Einzug gehalten. Dabei gibt es eine etwas andere Anforderung als in den meisten anderen Anwendungsgebieten - die aus den Modellen entstehenden Simulationen sollen keine Realität abbilden, sondern vor allem realistisch aussehen. Andererseits sollte sich die Simulation der Modelle mit möglichst geringem Rechenaufwand realisieren lassen, um ainnvoll in einen Film integriert werden zu können.
- *Sport:* Mathematische Modelle sind heute in hochtechnologisierten Sportarten wie Formel 1 oder America's Cup Segeln (im zweimaligen Siegerteam der Alinghi sind auch Mathematiker der EPFL Lausanne vertreten) nicht mehr wegzudenken. Aber auch die Bewegungsanalyse und Trainingsplanung in anderen Sportarten basiert heute auf mathematischen Modellen. Die eventuelle Überschneidung zum Medikamentendesign wollen wir hier einmal ignorieren.

## 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 [22, 33].

### 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.

Mathematische Modellierung ist 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.

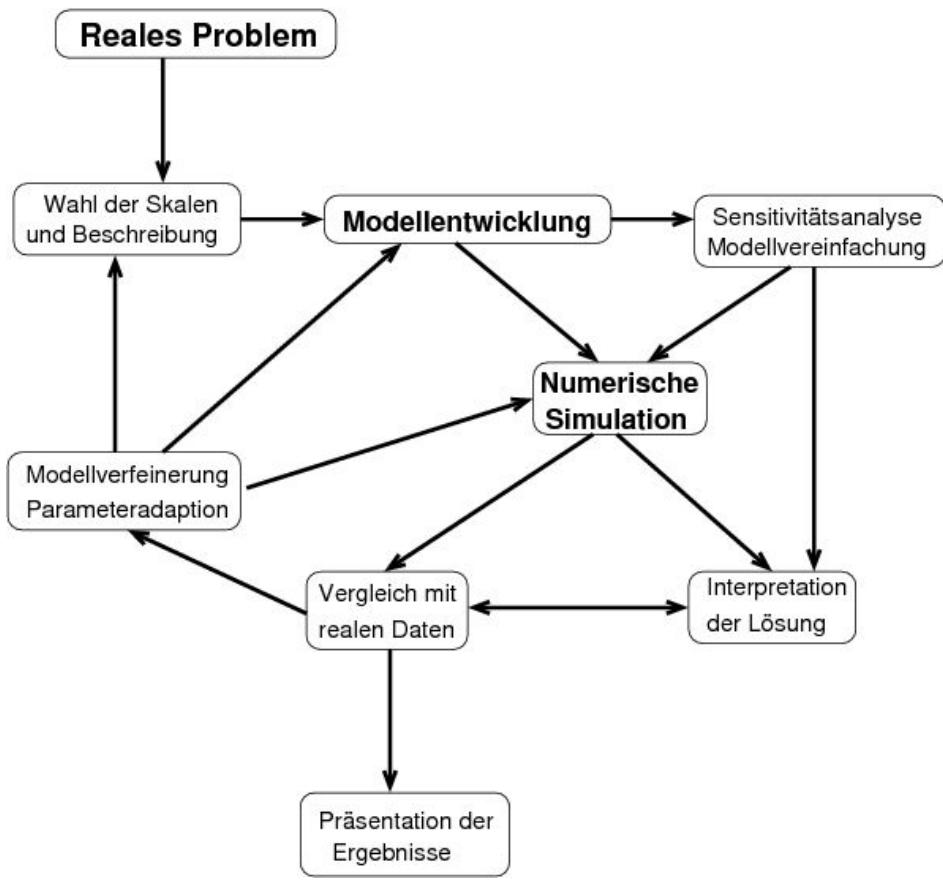


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung des Modellierungszyklus.

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 aufzuspüren 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 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 dimensionlose 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  $\tau$  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  $\ell_i$  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 zurücklegen. Die dimensionslosen Anfangsbedingungen sind nun einfach

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

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  $\tau$  zu wählen und können dies so realisieren, dass  $\alpha = 1$  gilt. Daraus erhalten wir dann mit den obigen Gleichungen für  $\ell_i$

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

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  $\Delta p$  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

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

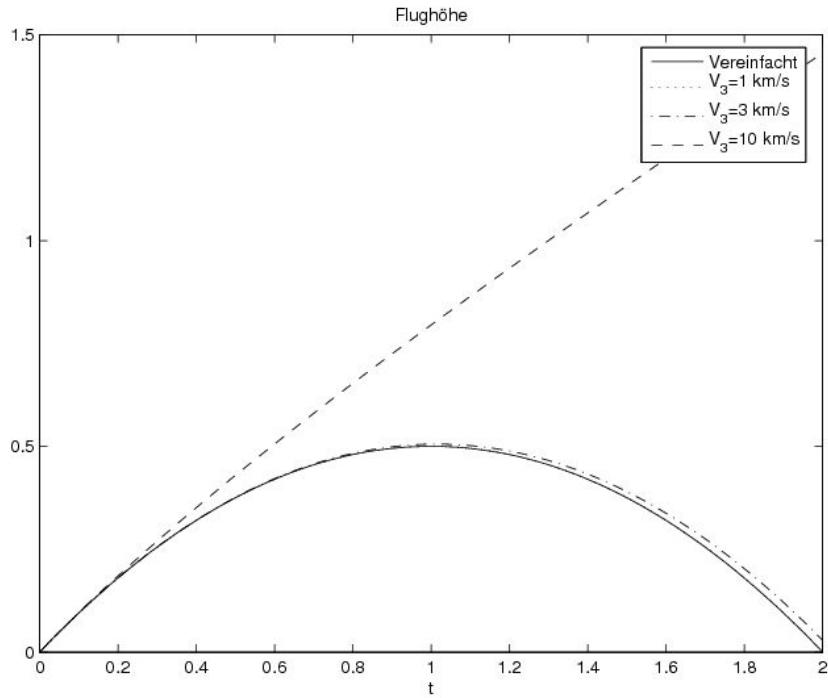


Abbildung 2.2: Lösung in Beispiel 2.1 für verschiedene Werte von  $\beta$ .

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: Ballwurf

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  $\beta$  und  $\gamma$  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  $\beta$  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.

## 2.5 Modellhierarchien: Chemische Reaktionskinetik

Wir betrachten nun ein klassisches Beispiel aus der Chemie, nämlich die Modellierung von Reaktionen. Wir betrachten zwei Stoffe A und B (z.B. O und CO) und einen Stoff AB, der aus den beiden besteht. Zwei Moleküle von A und B können sich zu AB verbinden, umgekehrt kann AB aber wieder zu A und B zerfallen. Die Modellierung der Reaktion basiert meist auf Poisson-Prozessen, d.h. die Wahrscheinlichkeit dass ein Molekül A und ein Molekül B in einem infinitesimalen Zeitintervall  $(t, t+dt)$  reagieren, ist  $k_+ dt$  für eine Reaktionsrate  $k_+$ . Umgekehrt ist die Wahrscheinlichkeit für den Zerfall eines Moleküls AB in diesem Zeitintervall gleich  $k_- dt$ . Damit hat man auch gleich ein erstes mikroskopisches Modell, da alle Möglichkeiten als stochastische Prozesse eindeutig beschrieben sind. Zur Vorhersage von Dichten scheint so ein Modell jedoch ziemlich unbrauchbar, da es mit einem enormen Simulationsaufwand verbunden ist.

Als nächstgrößeren Schritt in der Modellhierarchie werden wir asymptotisches Modell betrachten, das wieder in natürlicher Weise auf partielle Differentialgleichungen führt. Wir werden versuchen die Evolution der Wahrscheinlichkeit  $p(\ell, m, n, t)$  zu berechnen, die das Ereignis zum Zeitpunkt  $t$  genau  $\ell$  Teilchen A,  $m$  Teilchen B und  $n$  Teilchen AB zu finden beschreibt. Dies erscheint auf den ersten Blick genauso schwer wie das mikroskopische stochastische Modell, da man ausgehend von einem Zustand zum Anfangszeitpunkt (als  $t = 0$  gewählt) alle möglichen Reaktionen betrachten müsste, die zum Zustand  $(\ell, m, n)$  zum Zeitpunkt  $t$  führen. Wir werden jedoch zwei Eigenschaften verwenden, die ein gängiges Modellierungsprinzip darstellen, und in natürlicherweise auf Differentialgleichungen führen:

- Die *Markov-Eigenschaft* von Poisson-Prozessen, d.h. der Zustand zur Zeit  $t + \Delta t$  hängt nur vom Zustand zur Zeit  $t$  ab, und von den möglichen Reaktionen in einem Zeitintervall der Länge  $\Delta t$ . Dies erlaubt den Prozess auf einem nur sehr kurzen Zeitintervall zu betrachten.
- Ein geeigneter Grenzwert  $\Delta t \rightarrow 0$ , der es erlaubt die vielen Möglichkeiten von Reaktionen dramatisch zu verringern. Die Wahrscheinlichkeit einer Reaktion in einem solchen Zeitintervall ist proportional zu  $\Delta t$ , während die Wahrscheinlichkeit für zwei oder mehr Reaktionen schon von der Ordnung  $\Delta^2$  ist und damit typischerweise vernachlässigt werden kann.
- Eine kontinuierliche Asymptotik in  $\ell$ ,  $m$ , und  $n$ , die eine Taylor-Entwicklung und wieder die Vernachlässigung von Termen höherer Ordnung erlaubt. Hier spielt wieder die Skalierung eine wichtige Rolle, da man ja kaum einen Ausdruck wie  $p(\ell+1, m+1, n-1)$  um  $(\ell, m, n)$  entwickeln wird und dann auch noch Restglieder vernachlässigen kann. Man

wird eher zu einer skalierten Funktion

$$q\left(\frac{\ell}{N}, \frac{m}{N}, \frac{2n}{N}, t\right) = p(\ell, m, n, t)$$

übergehen, wobei  $N$  die Gesamtzahl der beteiligten Moleküle (bzw. eine typische Grösse dafür) ist. Ein Schritt der Grösse eins in  $p$  entspricht dann einem Schritt der Grösse  $\frac{1}{N}$  in  $q$ . Und da bei chemischen Reaktionen die Anzahl der Moleküle immer gross, in den meisten Anwendungen extrem gross ist, machen sowohl die kontinuierliche Näherung als auch die Taylor-Entwicklung Sinn.

Wir betrachten nun die Wahrscheinlichkeit den Zustand  $(\ell, m, n)$  zur Zeit  $t + \Delta t$  zu finden. Es gibt drei Übergänge vom Zeitpunkt  $t$ , die mit weniger als zwei Reaktionen und damit einer Wahrscheinlichkeit niedrigerer Ordnung als  $\Delta t^2$  möglich sind:

- Der Zustand  $(\ell + 1, m + 1, n - 1)$  bei einer Reaktion von  $A$  und  $B$  zu  $AB$ . Da wir dann  $(\ell + 1)(m + 1)$  Möglichkeiten zur Auswahl zweier solcher Moleküle haben, ist die Wahrscheinlichkeit für diesen Übergang

$$P(\{(\ell + 1, m + 1, n - 1) \rightarrow (\ell, m, n)\}) = (\ell + 1)(m + 1)k_+ \Delta t + \mathcal{O}(\Delta t)^2$$

- Der Zustand  $(\ell - 1, m - 1, n + 1)$  beim Zerfall eines  $AB$  Moleküls. Da wir  $n + 1$  solche Moleküle zur Verfügung haben, ist die Wahrscheinlichkeit für diesen Übergang

$$P(\{(\ell - 1, m - 1, n + 1) \rightarrow (\ell, m, n)\}) = (n + 1)k_- \Delta t + \mathcal{O}(\Delta t)^2$$

- Der Zustand  $(\ell, m, n)$  auch zur Zeit  $t$ , und keine Reaktion im Zeitintervall  $(t, t + \Delta t)$ . Die Wahrscheinlichkeit dafür ist

$$P(\{(\ell, m, n) \rightarrow (\ell, m, n)\}) = 1 - \ell m k_+ \Delta t - n k_- \Delta t + \mathcal{O}(\Delta t)^2$$

Also folgern wir

$$\begin{aligned} p(\ell, m, n, t + \Delta t) &= p(\ell + 1, m + 1, n - 1, t)(\ell + 1)(m + 1)k_+ \Delta t + \\ &\quad p(\ell - 1, m - 1, n + 1, t)(n + 1)k_- \Delta t + \\ &\quad p(\ell, m, n, t)(1 - \ell m k_+ \Delta t - n k_- \Delta t) + \mathcal{O}(\Delta t)^2. \end{aligned}$$

Einfaches Umstellen impliziert

$$\begin{aligned} \frac{p(\ell, m, n, t + \Delta t) - p(\ell, m, n, t)}{\Delta t} &= p(\ell + 1, m + 1, n - 1, t)(\ell + 1)(m + 1)k_+ + \\ &\quad p(\ell - 1, m - 1, n + 1, t)(n + 1)k_- - \\ &\quad p(\ell, m, n, t)(\ell m k_+ + n k_-) + \mathcal{O}(\Delta t) \end{aligned}$$

und damit die sogenannte *Master-Gleichung* im Grenzwert  $\Delta t \rightarrow 0$

$$\begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial t}(\ell, m, n, t) &= p(\ell + 1, m + 1, n - 1, t)(\ell + 1)(m + 1)k_+ + \\ &\quad p(\ell - 1, m - 1, n + 1, t)(n + 1)k_- - \\ &\quad p(\ell, m, n, t)(\ell m k_+ + n k_-) \end{aligned}$$

Nun approximieren wir die Differenzenoperatoren im Ort noch durch partielle Ableitungen um eine asymptotische Differentialgleichung zu erhalten. Dazu verwenden wir die reskalierte Dichte  $q$  und wählen  $N = \ell + m + 2n$ . Da die Gesamtzahl der Moleküle  $A$  und  $B$  erhalten bleibt, ist  $N$  konstant in der Zeit. Als neue Variable wählen wir die Konzentrationen  $x = \frac{\ell}{N}$ ,  $y = \frac{m}{N}$  und  $z = \frac{2n}{N}$ . Es gilt dann

$$\begin{aligned} \frac{\partial q}{\partial t}(x, y, z, t) &= q(x + \frac{1}{N}, y + \frac{1}{N}, z - \frac{1}{N}, t)(x + \frac{1}{N})(y + \frac{1}{N})N^2 k_+ + \\ &\quad q(x - \frac{1}{N}, y - \frac{1}{N}, z + \frac{1}{N}, t)(z + \frac{1}{N})Nk_- - \\ &\quad q(x, y, z, t)(xyN^2 k_+ + zNk_-). \end{aligned}$$

zur neuen Zeitvariable  $\frac{t}{N}$ , die wir wieder als  $t$  bezeichnen. Der folgende Grenzwert macht nur Sinn, wenn  $\tilde{k}_+ := Nk_+$  ungefähr in der selben Größenordnung wie  $\tilde{k}_- = \frac{k_-}{2}$  ist, andernfalls ist eine andere Skalierung zu suchen. Es gilt dann mit Taylor-Entwicklung in den Ortsvariablen

$$\begin{aligned} \frac{\partial q}{\partial t}(x, y, z, t) &= \frac{\partial}{\partial x}((\tilde{k}_+xy - \tilde{k}_-z)q(x, y, z, t)) + \frac{\partial}{\partial y}((\tilde{k}_+xy - \tilde{k}_-z)q(x, y, z, t)) - \\ &\quad \frac{\partial}{\partial z}((\tilde{k}_+xy - \tilde{k}_-z)q(x, y, z, t)) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N}\right). \end{aligned}$$

Wir betrachten also die durch Vernachlässigung der Ordnung  $\frac{1}{N}$ -Terme entstehende Gleichung für die reskalierte Wahrscheinlichkeitsdichte  $q$ , in kompakter Form geschrieben als

$$\frac{\partial q}{\partial t} = \nabla \cdot ((\tilde{k}_+xy - \tilde{k}_-z) q (1, 1, -1)^T), \quad (2.2)$$

wobei  $\nabla \cdot$  die Divergenz bezeichnet. Eine Gleichung dieser Form, nämlich

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \nabla \cdot (q\mathbf{v}) = 0, \quad (2.3)$$

mit einem Vektorfeld  $\mathbf{v}$  (die Geschwindigkeit) werden wir später noch als kanonische Form einer Kontinuitätsgleichung für Dichten kennen lernen. Im allgemeinen kann jedoch die Existenz einer Wahrscheinlichkeitsdichte nicht angenommen werden, und sollte eher für ein zeitabhängiges Wahrscheinlichkeitsmaß  $\mu_t$  formuliert werden. Dies ist über die schwache Formulierung von (2.3) möglich, die man durch Multiplikation mit einer stetig differenzierbaren Testfunktion  $\varphi$  mit kompaktem Träger und anschliessender partieller Integration (bzw. Anwendung des Gauss'schen Satzes) erhält:

$$-\int_0^T \int_{\mathbb{R}^3} q \left( \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \varphi \right) d\mathbf{x} dt = 0. \quad (2.4)$$

Dies ist der Spezialfall eines Maßes mit Wahrscheinlichkeitsdichte  $q$ , der für ein allgemeines Maß direkt zu

$$-\int_0^T \int_{\mathbb{R}^3} \left( \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \varphi \right) d\mu_t(\mathbf{x}) dt = 0. \quad (2.5)$$

Die Gleichung für die Wahrscheinlichkeitsdichte liegt in der Modellhierarchie schon eine Stufe unter dem ursprünglichen stochastischen Prozess. Eine numerische Simulation erscheint

mit realistischem Aufwand möglich, allerdings ist die Berechnung der Wahrscheinlichkeitsverteilung noch relativ unbefriedigend. Vor allem wenn die Varianz der Variablen relativ klein ist (was man für grosses  $N$  wegen einem Gesetz der grossen Zahl erwarten würde), erscheint die Berechnung der Verteilung unnötig und man würde lieber direkt den Erwartungswert berechnen. Wir betrachten also die Evolution der Erwartungswerte

$$X(t) := \int_{\mathbb{R}^3} q(x, y, z, t)x \, dx \, dy \, dz = E \left[ \frac{\ell(t)}{N} \right] + \mathcal{O} \left( \frac{1}{N^2} \right) \quad (2.6)$$

$$Y(t) := \int_{\mathbb{R}^3} q(x, y, z, t)y \, dx \, dy \, dz = E \left[ \frac{m(t)}{N} \right] + \mathcal{O} \left( \frac{1}{N^2} \right) \quad (2.7)$$

$$Z(t) := \int_{\mathbb{R}^3} q(x, y, z, t)z \, dx \, dy \, dz = E \left[ \frac{n(t)}{N} \right] + \mathcal{O} \left( \frac{1}{N^2} \right). \quad (2.8)$$

Es gilt

$$\begin{aligned} \frac{dX}{dt}(t) &= \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\partial q}{\partial t}(x, y, z, t)x \, dx \, dy \, dz \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \nabla \cdot ((\tilde{k}_+xy - \tilde{k}_-z) q(x, y, z, t) (1, 1, -1)^T) x \, dx \, dy \, dz \\ &= - \int_{\mathbb{R}^3} (\tilde{k}_+xy - \tilde{k}_-z) q(x, y, z, t) \, dx \, dy \, dz \\ &= -\tilde{k}_+ \int_{\mathbb{R}^3} q(x, y, z, t)xy \, dx \, dy \, dz + \tilde{k}_- Z(t) \end{aligned}$$

und analoge Gleichungen für  $Y(t)$  und  $Z(t)$ . Leider erhält man kein geschlossenes System für  $X$ ,  $Y$  und  $Z$ , es tritt auch das Integral über  $xyq$  auf, d.h. der Erwartungswert des Produkts der entsprechenden Zufallsvariablen. Um ein geschlossenes System zu erhalten benötigt man nun eine Abschlussrelation, ein klassisches Problem bei der Reduktion in Modellhierarchien. Die einfachste Abschlussrelation ist natürlich Unkorreliertheit der Zufallsvariablen, d.h.

$$\int_{\mathbb{R}^3} q(x, y, z, t)xy \, dx \, dy \, dz = X(t)Y(t).$$

Damit erhalten wir das System von gewöhnlichen Differentialgleichungen

$$\frac{dX}{dt}(t) = -\tilde{k}_+ X(t)Y(t) + \tilde{k}_- Z(t) \quad (2.9)$$

$$\frac{dY}{dt}(t) = -\tilde{k}_+ X(t)Y(t) + \tilde{k}_- Z(t) \quad (2.10)$$

$$\frac{dZ}{dt}(t) = \tilde{k}_+ X(t)Y(t) - \tilde{k}_- Z(t). \quad (2.11)$$

Diese Abschlussrelation ist tatsächlich exakt, wenn die Dichte konzentriert, d.h. deterministisch ist:

$$q(x, y, z, t) = \delta(x - X(t))\delta(y - Y(t))\delta(z - Z(t)). \quad (2.12)$$

Die Dirac  $\delta$ -Distribution ist dabei durch folgende Eigenschaft definiert

$$\int_{\mathbb{R}} \delta(x - a)\psi(x) \, dx = \psi(a),$$

für jede stetige Funktion  $\psi$  - die  $\delta$ -Distribution ist also eigentlich ein Maß und keine Funktion. Wie wir in den Übungen sehen werden, ist (2.12) tatsächlich eine (schwache) Lösung von (2.2). Wenn wir also den Anfangswert ohne (stochastische) Ungewissheit kennen, bleibt die Verteilung für alle Zeiten deterministisch. Damit haben wir also im Grenzwert  $N \rightarrow \infty$  tatsächlich jegliche Stochastizität der Evolution eliminiert.

Wir erhalten als einfaches Modell nun das obige System aus gewöhnlichen Differentialgleichungen bzw. die Reskalierung zu den ursprünglichen Variablen - der Anzahl der Moleküle

$$L(t) = NX(t), \quad M(t) = NY(t), \quad \tilde{N}(t) = 2NZ(t).$$

Der Einfachheit halber werden wir im Folgenden  $N(t)$  statt  $\tilde{N}(t)$  schreiben. Die Evolution der Anzahl ist dann beschrieben durch

$$\frac{dL}{dt}(t) = -k_+L(t)M(t) + k_-N(t) \quad (2.13)$$

$$\frac{dM}{dt}(t) = -k_+L(t)M(t) + k_-N(t) \quad (2.14)$$

$$\frac{dN}{dt}(t) = k_+L(t)M(t) - k_-N(t). \quad (2.15)$$

Es ist dabei zu beachten, dass es sich bei der Lösung nur um Erwartungswerte für die Molekulanzahl handelt, die im allgemeinen nicht ganzzahlig sind.

Da es sich hier um ein System ohne weiter äußere Beeinflussung handeln, erwartet man dass sich nach gewisser Zeit ein Gleichgewicht einstellt. Mathematisch bedeutet dies, dass im Grenzwert  $t \rightarrow \infty$  die Zeitableitungen gegen Null gehen. Das Gleichgewicht ist dann durch

$$k_+L_\infty M_\infty = k_-N_\infty \quad (2.16)$$

beschrieben. Wir sehen sofort, dass die stationäre Lösung nicht eindeutig sein kann, da wir nur eine Gleichung für drei Unbekannte zur Verfügung. Im Zusammenhang mit der stationären Lösung stellen sich zwei mathematische Fragen, die wir im folgenden etwas näher beleuchten werden: die Frage der Eindeutigkeit und die Frage der Stabilität. Wir werden diese Fragen anhand einer allgemeinen (autonomen) gewöhnlichen Differentialgleichung

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt}(t) = F(\mathbf{x}(t)), \quad (2.17)$$

mit  $\mathbf{x} : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}^M$  und  $F : \mathbb{R}^M \rightarrow \mathbb{R}^M$ .

## Eindeutigkeit von Lösungen

Die Frage der Eindeutigkeit von Lösungen ist ein klassisches mathematisches Problem, das auch aus Sicht der Modellierung wichtig ist. Für die gewöhnliche Differentialgleichung (2.17) garantiert der Satz von Picard-Lindelöf die Eindeutigkeit bei gegebenem Anfangswert  $\mathbf{x}(0)$ , wenn  $F$  nur lokal Lipschitz-stetig ist. Dies ist offensichtlich auch bei unserem chemischen Reaktionsmodell der Fall, sodass die Eindeutigkeit für das System (2.13) - (2.15) gilt. Dies ist typisch für ein zeitabhängiges Modell, die Dynamik ist aus dem Anfangszustand bei einem sinnvollen Modell eindeutig festgelegt.

Was passiert aber im stationären Fall  $F(\mathbf{x}_\infty) = 0$ ? Wir sehen schon aus (2.16), dass keine Eindeutigkeit vorliegt. Welchen stationären Zustand werden wir also beobachten? Die

Antwort dafür liegt wieder in der Dynamik bzw. in den Eigenschaften des Anfangswerts. In den meisten Fällen gibt es *Erhaltungsgrößen*, d.h. gewisse Kombinationen der Variablen die während der Dynamik unverändert bleiben. Im Fall der obigen chemischen Reaktion sehen wir sofort, dass  $L + N$  und  $M + N$  erhalten bleiben (d.h. die Gesamtzahl der  $A$  bzw.  $B$  Moleküle), da

$$\frac{d}{dt}(L(t) + N(t)) = \frac{d}{dt}(M(t) + N(t)) = 0 \quad (2.18)$$

gilt. Damit werden bei gegebenem Anfangszustand nur Lösungen in Frage kommen, die

$$L_\infty + N_\infty = L(0) + N(0), \quad M_\infty + N_\infty = M(0) + N(0) \quad (2.19)$$

erfüllen. Dies reicht zusammen mit (2.16) bereits aus, um gleich viele Gleichungen wie Unbekannte zu bekommen.

Im allgemeinen Fall wäre eine Erhaltungsgröße von der Form  $E_i(\mathbf{x})$  mit  $E_i : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$ . Die Erhaltungsbedingung ist dann

$$0 = \frac{d}{dt}E_i(\mathbf{x}(t)) = \nabla E_i(\mathbf{x}(t)) \cdot \frac{d\mathbf{x}}{dt}(t) = \nabla E_i(\mathbf{x}(t)) \cdot F(\mathbf{x}(t)).$$

Also sind Erhaltungsgrößen auf jenen Flächen  $E_i(\mathbf{x}) = c$ , die  $F$  als Normalenrichtung haben ( $\nabla E_i$  ist die Tangentenrichtung).

In den meisten Fällen findet man aber nicht genug Erhaltungsgleichungen, um ein eindeutiges Gleichgewicht zu charakterisieren. Hat man mehrere mögliche Gleichgewichtszustände, kommt es meist auch auf lokale Eigenschaften an, d.h. im wesentlichen die Nähe zum Anfangswert und auch die Stabilitätseigenschaften der Gleichgewichtszustände. Diese werden wir im nächsten Abschnitt kurz diskutieren.

## Langzeitverhalten und Lineare Stabilität

Wir haben oben die Eindeutigkeit von stationären (Gleichgewichts-) Zuständen untersucht, allerdings die Frage offen gelassen, ob solch ein Zustand überhaupt auftreten wird. Dies ist eine interessante Frage bei einem dynamischen Modell, die oft schwierig zu charakterisieren ist. Wenn eine solche Charakterisierung gelingt, stellt sich natürlich die Frage mit welcher Geschwindigkeit so ein Zustand angenähert wird, d.h. man sucht eine monoton gegen Null fallende Funktion  $f : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}_+$  mit

$$\|\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}_\infty\| \leq f(t).$$

Bevor man sich der schwierigen Frage des allgemeinen Langzeitverhaltens widmet, sollte man zunächst das lokale Verhalten um einen stationären Zustand  $\mathbf{x}_\infty$  betrachten. Hier kann eine Vereinfachung mittels linearer Stabilitätsanalyse durchgeführt werden. Der Ansatz dabei ist einen Anfangszustand der Form  $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_\infty + \epsilon \mathbf{y}(0)$  mit  $\epsilon \ll 1$  zu betrachten. Dann suchen wir eine Lösung der Form

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}_\infty + \epsilon \mathbf{y}(t) + \mathcal{O}(\epsilon^2)$$

und mittels Taylor-Entwicklung erhalten wir

$$\epsilon \frac{d\mathbf{y}}{dt}(t) = \frac{d\mathbf{x}}{dt}(t) = F(\mathbf{x}_\infty + \epsilon \mathbf{y}(t)) = \underbrace{F(\mathbf{x}_\infty)}_{=0} + \epsilon \nabla F(\mathbf{x}_\infty) \mathbf{y}(t) + \mathcal{O}(\epsilon^2).$$

Nach Vernachlässigung von Termen höherer Ordnung erhalten wir die linearisierte Differentialgleichung

$$\mathbf{y}(t) = A\mathbf{y}(t), \quad A = \nabla F(\mathbf{x}_\infty),$$

die als Basis für die lineare Stabilitätsanalyse dient. Das Verhalten der Störung  $y$  wird also von der Matrix  $A$  bestimmt, und deshalb ist es natürlich die Eigenwerte von  $A$  zu betrachten.

Im skalaren Fall ist  $A$  gleich seinem einzigen Eigenwert und die Lösung der linearisierten Gleichung durch

$$\frac{d\mathbf{y}}{dt}(t) = e^{At}\mathbf{y}(0)$$

gegeben. Für  $A < 0$  fällt die Störung mit exponentieller Geschwindigkeit ab, wir sprechen dann von linearer Stabilität. Für  $A > 0$  wird die Störung exponentiell verstärkt, es tritt also lineare Instabilität auf. Daraus sehen wir, dass das Vorzeichen der Eigenwerte entscheidend ist, im allgemeinen Fall wird dies das Vorzeichen des Realteils betreffen. Sei  $\lambda \in \mathbb{C}$  ein Eigenwert von  $A$  und  $v \in \mathbb{C}^M$  ein zugehöriger Eigenvektor. Dann gilt für die Lösung der Gleichung mit Anfangswert  $y(0) = \alpha(0)v$  mit  $\alpha(t)$  in  $\mathbb{C}$ :

$$\frac{d\alpha}{dt}(t)v = \lambda\alpha(t)v,$$

d.h.  $\alpha(t) = e^{\lambda t}\alpha(0)$ . Es gilt

$$|\alpha(t)| = |e^{\lambda t}| |\alpha(0)| = e^{\operatorname{Re}(\lambda)} |\alpha(0)|.$$

Wir sehen also, dass für Eigenwerte mit negativen Realteil die entsprechenden Frequenzanteile abgedämpft werden, während für Eigenwerte mit positivem Realteil die Störungen exponentiell verstärkt werden. Damit erhalten wir

$$\operatorname{Re}(\lambda) < 0 \quad \text{für alle Eigenwerte } \lambda \text{ von } \nabla F(\mathbf{x}_\infty)$$

als Bedingung für lineare Stabilität. Es lässt sich in diesem Fall beweisen, dass für alle Anfangswerte  $\mathbf{x}(0)$  in einer Umgebung von  $\mathbf{x}_\infty$  die Lösung  $\mathbf{x}(t)$  gegen  $\mathbf{x}_\infty$  konvergiert für  $t \rightarrow \infty$ . Ist der Realteil auch nur eines Eigenwerts positiv, erhält man potentielle Instabilität, da Störungen in Richtung des entsprechenden Eigenvektors verstärkt werden.

Das globale Langzeitverhalten lässt sich nicht in dieser Allgemeinheit charakterisieren. Wir werden später bei einigen Modellen noch spezieller darauf zurück kommen.

# Kapitel 3

## Diffusion und Drift

Im folgenden werden wir uns mit den wichtigen Konzepten von Diffusion und Drift beschäftigen. Dazu werden wir zwei verschiedene Ansätze betrachten: die Asymptotik aus einem diskreten Sprungprozess und eine direkte Herleitung im Kontinuum. Diffusion und Brown'sche Bewegung haben vielfältige Anwendungen, von der Wärmeleitung bis zur Modellierung von Aktienpreisen und Derivaten auf Finanzmärkten, die wir ebenfalls noch kurz diskutieren wollen.

### 3.1 Diskrete Sprungprozesse - Random Walks

Wir werden nun im folgenden einfache Random Walks betrachten auf einem Gitter der Form  $h\mathbb{Z}^2$ , mit einer Schrittweite  $h > 0$ , die eine Skalierung des Gitters bedeutet. Wir nehmen an, dass wir in einem kleinen Zeitschritt  $\tau > 0$  nur einen Gitterpunkt weiter springen dürfen und dass die Wahrscheinlichkeit dies zu tun klein sind, bzw. ihre Summe sinnvollerweise kleiner oder gleich eins.

Wir spezifizieren im Folgenden die Wahrscheinlichkeiten für Sprünge in einem Zeitintervall der Länge  $\tau$ :

- Die Wahrscheinlichkeit von  $(x, y)$  nach  $(x + h, y)$  zu springen, sei  $\alpha$ .
- Die Wahrscheinlichkeit von  $(x, y)$  nach  $(x - h, y)$  zu springen, sei  $\beta$ .
- Die Wahrscheinlichkeit von  $(x, y)$  nach  $(x, y + h)$  zu springen, sei  $\gamma$ .
- Die Wahrscheinlichkeit von  $(x, y)$  nach  $(x, y - h)$  zu springen, sei  $\delta$ .
- Die Wahrscheinlichkeit bei  $(x, y)$  zu bleiben, ist folglich  $1 - (\alpha + \beta + \gamma + \delta)$ .

Damit haben wir schon implizit eine Markov-Eigenschaft angenommen, d.h. die Sprungwahrscheinlichkeit ist nur abhängig vom aktuellen Zustand  $(x, y, t)$ , nicht aber von der Geschichte. Im Fall konstanter Übergangsraten  $\alpha, \beta, \gamma$  und  $\delta$  ist die Sprungwahrscheinlichkeit sogar unabhängig vom aktuellen Zustand. Wir beschreiben den Prozess nun wieder durch die Wahrscheinlichkeit  $P(x, y, t)$  zur Zeit  $t$  im Punkt  $(x, y)$  zu sein.

Es gilt dann

$$\begin{aligned} P(x, y, t + \tau) = & P(x, y, t)(1 - (\alpha + \beta + \gamma + \delta)) + \\ & P(x + h, y, t)\alpha + P(x - h, y, t)\beta + \\ & P(x, y + h, t)\gamma + P(x, y - h, t)\delta. \end{aligned}$$

Um eine Kontinuumsgleichung zu erhalten, werden wir nun wieder annehmen, dass wir im Grenzwert eine kontinuierliche Dichte  $\rho(x, y, t)$  für  $(x, y) \in \mathbb{R}^2$  und  $t \in \mathbb{R}_+$  erhalten. Dann können wir für kleine  $h$  und  $\tau$  eine Taylor-Entwicklung durchführen und wieder entsprechende Terme höhere Ordnung vernachlässigen. Es gilt dann

$$\begin{aligned}\rho(x, y, t + \tau) &= \rho(x, y, t) + \partial_t \rho(x, y, t)\tau + \mathcal{O}(\tau^2) \\ \rho(x + h, y, \tau) &= \rho(x, y, t) + \partial_x \rho(x, y, t)h + \frac{1}{2} \partial_{xx} \rho(x, y, t)h^2 + \mathcal{O}(h^3) \\ \rho(x - h, y, \tau) &= \rho(x, y, t) - \partial_x \rho(x, y, t)h + \frac{1}{2} \partial_{xx} \rho(x, y, t)h^2 + \mathcal{O}(h^3) \\ \rho(x, y + h, \tau) &= \rho(x, y, t) + \partial_y \rho(x, y, t)h + \frac{1}{2} \partial_{yy} \rho(x, y, t)h^2 + \mathcal{O}(h^3) \\ \rho(x, y - h, \tau) &= \rho(x, y, t) - \partial_y \rho(x, y, t)h + \frac{1}{2} \partial_{yy} \rho(x, y, t)h^2 + \mathcal{O}(h^3).\end{aligned}$$

Eingesetzt in die obige Gleichung für  $P$  erhalten wir dann nach dem Kürzen entsprechender Terme (und Vernachlässigung Terme höherer Ordnung)

$$\begin{aligned}\partial_t \rho \tau &= \partial_x \rho(\alpha - \beta)h + \partial_y \rho(\gamma - \delta)h + \\ &\quad \partial_{xx} \rho(\alpha + \beta) \frac{h^2}{2} + \partial_{yy} \rho(\gamma + \delta) \frac{h^2}{2}.\end{aligned}$$

Wir sehen, dass die höchste Ordnung normalerweise durch die ersten Ableitungen beschrieben wird. Dies ändert sich, wenn der Random Walk keine links-rechts bzw. oben-unten Präferenz hat, d.h.  $\alpha = \beta$  und  $\gamma = \delta$ . Dann fallen die Terme erster Ordnung weg und wir erhalten

$$\partial_t \rho = D_1 \partial_{xx} \rho + D_2 \partial_{yy} \rho.$$

mit den Diffusionskoeffizienten

$$\begin{aligned}D_1 &= (\alpha + \beta) \frac{h^2}{2\tau} \\ D_2 &= (\gamma + \delta) \frac{h^2}{2\tau}.\end{aligned}$$

Ist  $D_1 = D_2$  so erhalten wir nach Reskalierung der Zeit den einfachsten Fall einer Diffusionsgleichung (oft wegen der entsprechenden Anwendung auch Wärmeleitungsgleichung genannt)

$$\partial_t \rho = \Delta \rho. \tag{3.1}$$

Sind  $\alpha - \beta$  und  $\gamma - \delta$  sehr klein im Vergleich zu  $\alpha + \beta$  und  $\gamma + \delta$  (sodass man davon ausgehen kann, dass ein Faktor der Ordnung  $h$  dazwischen ist) wird es wichtig auch Drift-Terme zu berücksichtigen, d.h. wir erhalten eine Gleichung der Form

$$\partial_t \rho = C_1 \partial_x \rho + C_2 \partial_y \rho + D_1 \partial_{xx} \rho + D_2 \partial_{yy} \rho \tag{3.2}$$

mit

$$\begin{aligned}C_1 &= (\alpha - \beta) \frac{h}{\tau} \\ C_2 &= (\gamma - \delta) \frac{h}{\tau}.\end{aligned}$$

Ein Drift-Term bedeutet eine Bevorzugung einer gewissen Richtung. Ist z.B.  $\alpha > \beta$ , so werden Sprünge nach rechts bevorzugt, es entsteht also ein Drift nach rechts (und umgekehrt für  $\alpha < \beta$ ). Analog entsteht Drift in der  $y$ -Richtung. Die Gleichung (3.2) ist der einfachste Fall einer sogenannten Fokker-Planck Gleichung. Die allgemeinere Form einer linearen Fokker-Planck Gleichung in  $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}_+$  (falls die Sprungraten auch vom Ort abhängen) ist

$$\partial_t \rho = \nabla \cdot (\mathbf{D}(\nabla \rho + \rho \nabla V)). \quad (3.3)$$

Dabei ist  $\mathbf{D} : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^{d \times d}$  ein Diffusionstensor (allgemeine Form eines Diffusionskoeffizienten) und  $V : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$  ein potential (entsprechend einer potentiellen Energie). Gleichung (3.2) lässt sich in dieser Form schreiben mit

$$\begin{aligned} \mathbf{D} &= \begin{pmatrix} D_1 & 0 \\ 0 & D_2 \end{pmatrix} \\ V &= \frac{C_1}{D_1}x + \frac{C_2}{D_2}y. \end{aligned}$$

Im Fall eines sehr grossen Unterschieds  $\alpha - \beta$  und  $\gamma - \beta$  (von ähnlicher Größenordnung wie  $\alpha + \beta$  und  $\gamma + \beta$ ) sind natürlich nur die Terme erster Ordnung wichtig. Dann erhalten wir im Grenzwert die Transportgleichung

$$\partial_t \rho = C_1 \partial_x \rho + C_2 \partial_y \rho, \quad (3.4)$$

also wieder einen Spezialfall von (4.1) mit dem Geschwindigkeitsfeld  $u = -(C_1, C_2)^T$ . In diesem Fall sind die Lösungen tatsächlich nur durch den Drift gegeben, es lässt sich leicht zeigen, dass die Lösung durch

$$\rho(x, y, t) = \rho(x + C_1 t, y + C_2 t, 0)$$

gegeben ist.

Wir bemerken auch, dass man auch die allgemeine Fokker-Planck Gleichung wieder als Spezialfall von (4.1) schreiben kann, mit dem Geschwindigkeitsfeld

$$u = -\mathbf{D}\left(\frac{1}{\rho} \nabla \rho + \nabla V\right) = -\mathbf{D} \nabla(\log \rho + V). \quad (3.5)$$

Die letzte Form ist auch nützlich, um die stationäre Lösung zu bestimmen. Es gilt im statio-nären Fall  $u = \text{konstant}$ , d.h.

$$\log \rho + V = c_0$$

oder

$$\rho = c e^{-V},$$

wobei die Konstante  $c$  aus der Integralbedingung  $\int \rho dx = 1$  zu bestimmen ist.

Die stationäre Lösung minimiert das zugehörige Entropie-Energiefunktional

$$E(\rho) = \int \rho \log \rho dx + \int \rho V dx \quad (3.6)$$

über der Mannigfaltigkeit der Wahrscheinlichkeitsmaße. Dabei bezeichnet der erste Term eine klassische logarithmische Entropie, während der zweite Term einer potentiellen Energie (mit

Potential  $V$  entspricht). Die Analogie zum Fall der Teilchenmechanik erhält man dabei über eine empirische Dichte

$$\rho^N = \frac{1}{N} \sum_j \delta(x - x_j).$$

Dann gilt

$$\int \rho^N V \, dx = \frac{1}{N} \sum_j V(x_j),$$

d.h. wir erhalten ein externes Potential. Der Fall der Wechselwirkung ist schwieriger zu beschreiben - wir haben ja auch bisher nur ein Teilchen betrachtet. Der obige Zugang lässt sich verallgemeinern, in dem man für jedes Teilchen den Random Walk betrachtet und den Drift-Term entsprechend abhängig von den anderen Teilchen betrachtet. Eine exakte Analyse ist wieder extrem kompliziert, da man für  $N$  Teilchen wieder alle möglichen Konfigurationen betrachten müsste. Vereinfachte Modelle erhält man wieder durch eine entsprechende Abschlussrelation, dieses Mal schon für den Random Walk. Die einfachste solche Relation ist eine *Mean-Field* Annahme, die sich wieder aus der Kraft im Teilchenmodell motivieren lässt.

### 3.2 Diffusion und Wärmeleitung im Kontinuum

Im Rahmen der kinetischen Gastheorie (cf. [7, 8]) kann Wärmeleitung als Energietransport durch die Teilchen interpretiert werden. Neben dem Energietransport können auch Masse und Impuls transportiert werden, diese Effekte haben wir ja schon im Falle von Strömungen gesehen.

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

$$h, u : \Omega \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}_+. \quad (3.7)$$

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

$$\int_D (\partial_t h - \operatorname{div} \mathbf{q} - f) \, dx = 0. \quad (3.8)$$

Da das Teilgebiet  $D$  beliebig gewählt war, erhalten wir aus der schwachen Form (3.8) eine starke Form, nämlich die Differentialgleichung

$$\partial_t h - \operatorname{div} \mathbf{q} = f \quad (3.9)$$

in  $\Omega \times \mathbb{R}_+$ . Man nennt (3.9) 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 (3.9), die wir nur aus dem fundamentalen Prinzip der Energieerhaltung hergeleitet haben, sind Materialgesetze jeweils abhängig von den speziellen Situationen, die betrachtet werden.

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

$$h(x, t) = \rho c u(x, t), \quad (3.10)$$

wobei  $\rho$  die Dichte und  $c$  die spezifische Wärmekapazität des betrachteten Materials darstellen. Im einfachsten Fall sind  $\rho$  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 Wärmeausgleich 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*)

$$\mathbf{q}(x, t) = \lambda \nabla u(x, t), \quad (3.11)$$

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

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

$$\mathbf{q}(x, t) = \Lambda \nabla u(x, t), \quad (3.12)$$

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

## Die Wärmeleitungsgleichung

Wir betrachten nun den Fall konstanter skalarer Werte von  $\rho$ ,  $c$  und  $\lambda$ . Dann erhalten wir die Differentialgleichung

$$\partial_t u - D \Delta u = f, \quad \text{in } \Omega \times \mathbb{R}^+ \quad (3.13)$$

wobei  $D = \frac{\lambda}{c\rho}$  der (*Temperatur-*) Leitwert ist. Die lineare Wärmeleitungsgleichung (3.13) 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

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad x \in \Omega, \quad (3.14)$$

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  $\Omega$  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

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = -\alpha (u - u^*) \quad (3.15)$$

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

$$\lambda \partial_{\mathbf{n}} u = -\alpha (u - u^*). \quad (3.16)$$

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

- Für  $\beta \rightarrow 0$  erhalten wir eine homogene Neumann-Randbedingung  $\frac{\partial u}{\partial n} = 0$ , 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

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

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

$$\lambda \partial_{\mathbf{n}} u = -\sigma \epsilon (u^4 - (u^*)^4), \quad (3.17)$$

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

## Skalierung

Nun können wir die Wärmeleitungsgleichung (3.13) skalieren und in eine dimensionslose Form bringen. Der Einfachheit halber ignorieren wir innere Wärmequellen ( $f = 0$ ). Dazu wählen wir eine typische Länge  $\ell$  für das Gebiet  $\Omega$  und Zeitskala  $\tau$  (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  $\Delta T$  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,  $\tau$  so zu wählen, dass der Diffusionskoeffizient gleich eins ist, d.h.,  $\tau = \frac{\ell^2}{D}$ . Damit erhalten wir

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \Delta_x u$$

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

### 3.3 Eigenschaften von Diffusionsgleichungen

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

$$\begin{aligned} \partial_t u &= \Delta u && \text{in } \Omega \times \mathbb{R}_+ \\ \partial_{\mathbf{n}} u &= -\beta(u - u^*) && \text{auf } \partial\Omega \times \mathbb{R}_+ \\ u &= u_0 && \text{in } \Omega \times \{0\} \end{aligned} \tag{3.18}$$

und betrachten einige ihrer Eigenschaften.

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

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

erhalten. Wir können nun den ersten Term als

$$\int_{\Omega} \partial_t u \ u \ dx = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} u^2 \ dx$$

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  $u(., t) \rightarrow 0$  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  $\Omega$  unter den obigen Randbedingungen lösen. Es lässt sich dann (ebenso wie oben) leicht der exponentielle Abfall des Funktionalen  $s \mapsto V(s) := \int_{\Omega} (u - \hat{u})^2 dx|_{t=s}$  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  $\Omega$  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  $\Omega$  entspricht. Dies haben wir ja auch schon in den ersten stochastischen Herleitungen von Diffusionsgleichungen gesehen. Dann können wir den Erwartungswert der Entropie in  $\Omega$  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.

Ähnliche Dissipationsrelationen für die Entropie lassen sich auch für allgemeine Fokker-Planck Gleichungen zeigen und sogar für nichtlineare Diffusionsgleichungen. Wir betrachten dazu den Fall eines Diffusionskoeffizienten abhängig von  $u$ , d.h.

$$\partial_t u = \nabla \cdot (D(u) \nabla u).$$

Definieren wir eine Funktion  $f : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$  mit  $f'(s) = \frac{D(s)}{s}$ , dann gilt (beachte  $f(s) = \log s$  im linearen Fall)

$$\partial_t u = \nabla \cdot (u \nabla f(u)).$$

Unter der sinnvollen Annahme, dass  $D$  nichtnegativ ist, gilt  $f' \geq 0$  auf  $\mathbb{R}_+$ , d.h.  $f$  ist monoton. Die entsprechende Entropie ist gegeben durch

$$E(u) = \int F(u(x, t)) dx, \quad (3.19)$$

mit der konvexen Funktion  $F : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$  definiert durch  $F'(s) = f(s)$ . Man sieht leicht

$$\frac{d}{dt} E(u) = \int f(u) \partial_t u dx = \int f(u) \nabla \cdot (u \nabla f(u)) dx = - \int u |\nabla f(u)|^2. \quad (3.20)$$

### 3.4 Fokker-Planck Gleichungen

Aus der diskreten Herleitung haben wir gesehen, dass reine Diffusion nur aus einer völlig ungerichteten Bewegung entsteht. Ein Modell, das den Drift berücksichtigt, ist die Fokker-Planck Gleichung

$$\partial_t u = \nabla \cdot (\nabla u + u \nabla V), \quad (3.21)$$

wobei  $V$  ein Potential ist. Die Potentialunterschiede im Ort implizieren dann einen Drift in eine Richtung. In der Herleitung aus einem zweidimensionalen Sprungprozess ist das Potential gegeben durch

$$V(x, y) = (C_1 x, C_2 y). \quad (3.22)$$

Natürliche Randbedingungen für die Fokker-Planck Gleichung am Rand eines Gebiets ist ein verschwindender Fluss, d.h. eine spezielle Robin-Randbedingung

$$n \cdot (\nabla u + u \nabla V) = 0. \quad (3.23)$$

In diesem Fall kann man leicht eine stationäre Lösung der Fokker-Planck Gleichung berechnen, man erhält aus

$$\nabla u_\infty = -u_\infty \nabla V$$

eine Lösung der Form

$$u_\infty = ce^{-V}, \quad (3.24)$$

wobei die Konstante  $c$  wieder aus der Masse zu bestimmen ist. Da  $\int_{\Omega} u dx$  konstant ist, muss gelten

$$c \int_{\Omega} e^{-V} dx = \int_{\Omega} u_\infty dx = \int_{\Omega} u_0 dx.$$

Im Fall der Fokker-Planck Gleichung ist es nicht mehr möglich mehrere Energien zu finden, es gibt nur ein klassisches Entropiefunktional, das man aus der Umformulierung

$$\partial_t u = \nabla \cdot (u \nabla (\log u + V)) = \nabla \cdot (u \nabla E'(u)) \quad (3.25)$$

erkennt. Um  $\log u + V$  als Ableitung eines Entropiefunktional zu erhalten, müssen wir

$$E(u) = \int_{\Omega} (u \log u + uV) dx \quad (3.26)$$

wählen. Dafür gilt tatsächlich auch eine Entropiedissipation der Form

$$\frac{d}{dt} E(u(t)) = - \int_{\Omega} u |\nabla(\log u + V)|^2 dx, \quad (3.27)$$

und die stationäre Lösung  $u_\infty$  ist das eindeutige Minimum der Entropie bei gegebener Masse.

In manchen Modellen, etwa um eine Dichte elektrisch geladener Teilchen zu berechnen, ist es wichtig die stationäre Fokker-Planck Gleichung

$$\nabla \cdot (\nabla u + u \nabla V) = 0, \quad (3.28)$$

mit anderen Randbedingungen zu betrachten, etwa mit vorgegebenen Dirichlet-Werten. Dann lässt sich die Lösung nicht mehr als Exponentialfunktion des Potentials berechnen, dennoch ist eine solche Transformation (analog zur Variation der Konstanten bei gewöhnlichen Differentialgleichungen) nützlich. Definieren wir die neue Variable  $v = ue^V$  (oft auch Slotboom-Variablen genannt), so gilt

$$\nabla \cdot (e^{-V} \nabla v) = 0, \quad (3.29)$$

man erhält also eine einfachere Gleichung in Divergenzform, für die z.B. Existenz und Eindeutigkeit direkt aus der Standard-Theorie elliptischer Gleichungen geklärt ist. Dazu existiert etwa bei Dirichlet-Randwerten auch eine Variationsformulierung über eine Dirichletenergie

$$D(\varphi) = \int_{\Omega} e^{-V} |\nabla \varphi|^2 dx, \quad (3.30)$$

die von der stationären Lösung bei gegebenen Randwerten minimiert wird.

Aus der stationären Lösung bzw. der Verwendung von  $e^{-V}$  ergibt sich auch allgemein eine Möglichkeit, die Fokker-Planck Gleichung symmetrisch zu formulieren. Dazu verwenden wir ein gewichtetes Skalarprodukt

$$\langle \varphi_1, \varphi_2 \rangle_{2,V} := \int_{\Omega} e^V \varphi_1 \varphi_2 dx. \quad (3.31)$$

Dann gilt für eine Testfunktion  $\varphi$  mit passenden Randwerten

$$\langle \partial_t u, \varphi \rangle_{2,V} = - \int_{\Omega} e^{-V} \nabla(e^V u) \cdot \nabla(e^V \varphi) dx. \quad (3.32)$$

Diese Formulierung ist auch nützlich um das Langzeitverhalten genauer zu verstehen. Ist  $u_\infty$  eine stationäre Lösung, so kann man die durch das gewichtete Skalarprodukt induzierte Norm verwenden und erhält

$$\frac{d}{dt} \frac{1}{2} \int_{\Omega} e^V (u - u_\infty)^2 dx = - \int_{\Omega} e^{-V} \nabla |(e^V (u - u_\infty))|^2 dx. \quad (3.33)$$

Verwenden man nun ein mit  $e^{-V}$  gewichtetes Skalarprodukt und die Poincare-Ungleichung für  $e^V (u - u_\infty)$ , so folgt direkt die exponentielle Konvergenz der Lösung gegen den stationären Zustand.

### 3.5 Reaktions-Diffusions Gleichungen

In vielen Fällen tritt Diffusion nicht alleine auf, sondern gemeinsam mit Reaktionskinetik wie im Kapitel zuvor. Kombiniert man die beiden Prozesse für verschiedene Teilchendichten  $u_i$ , so erhält man ein Gleichungssystem der Form

$$\partial_t u_i = \nabla \cdot (D_i \nabla u_i) + F_i(u_1, \dots, u_m), \quad i = 1, \dots, m. \quad (3.34)$$

Wir sehen dabei erstmals die Kopplung einer lokalen Kinetik (die Reaktionen laufen in jedem Ortspunkt ab) mit einer globalen Dynamik durch Diffusion, die zu einer schnellen Ausbreitung im Ort führt.

Besonders interessant an Reaktions-Diffusionsgleichungen ist die Möglichkeit der Musterbildung. Wir sehen sofort an einfachen Beispielen, dass konstante stationäre Lösungen  $\bar{u}_i$  nicht mehr nur durch die Anfangsmasse bestimmt sind, sondern im wesentlichen aus den Reaktionstermen, es muss gelten

$$F_i(\bar{u}_1, \dots, \bar{u}_m) = 0. \quad (3.35)$$

Da die  $F_i$  nichtlinear sein können, erwarten wir im allgemeinen bereits mehrere Lösungen dieser nichtlinearen Gleichung, d.h. auch mehrere stationäre Lösungen. Der relevante Fall für Musterbildung entsteht jedoch, wenn die konstanten stationären Lösungen linear instabil sind. Wie im Fall der Reaktionskinetik können wir kleine Störungen der Form

$$u_i(x, t) = \bar{u}_i + \epsilon v_i(x, t) + \mathcal{O}(\epsilon^2) \quad (3.36)$$

betrachten, und nach Vernachlässigung von Termen höherer Ordnung in  $\epsilon$  erhalten wir daraus

$$\partial_t v_i = \nabla \cdot (D_i \nabla v_i) + (v_1, \dots, v_m) \cdot \nabla F_i(\bar{u}_1, \dots, \bar{u}_m), \quad i = 1, \dots, m, \quad (3.37)$$

also ein System linearer Reaktions-Diffusionskoeffizienten für die Störung.

Im Fall konstanter Diffusionskoeffizienten  $D_i$  kann die Stabilitätsanalyse wieder auf einfache gewöhnliche Differentialgleichungen zurückgeführt werden. Dazu betrachten wir das Eigenproblem des Laplace-Operators  $(\lambda_k, \varphi_k)$  definiert durch die nichttrivialen normierten Lösungen von

$$\lambda_k \varphi_k = -\Delta \varphi_k \quad (3.38)$$

mit homogenen Randbedingungen. Da die Eigenfunktionen ein vollständiges Orthogonalsystem in  $L^2(\Omega)$  bilden, können wir  $v$  darin entwickeln, d.h.

$$v_i(x, t) = \sum_{k=1}^{\infty} V_i^k(t) \varphi_k(x) \quad (3.39)$$

und eingesetzt in die Gleichung ergeben sich daraus die gewöhnlichen Differentialgleichungen

$$\frac{dV_i^k}{dt}(t) = -\lambda_k D_i V_i^k + (V_1^k, \dots, V_m^k) \cdot \nabla F_i(\bar{u}_1, \dots, \bar{u}_m). \quad (3.40)$$

Wir können also die Stabilitätsanalyse in jeder Komponente einzeln durchführen und müssen also die Eigenwerte der Matrix

$$A_k = -\lambda_k \operatorname{diag}(D_1, \dots, D_m) + (\nabla F_1(\bar{u}_1, \dots, \bar{u}_m), \dots, \nabla F_m(\bar{u}_1, \dots, \bar{u}_m))^T \quad (3.41)$$

analysieren. Da die Eigenwerte  $\lambda_1 \leq \lambda_2 \dots$  des Laplace-Operators alle positiv sind und gegen unendlich konvergieren, dominiert für grosses  $k$  der Term  $-\lambda_k I_m$  und die Realteile von  $A_k$  sind somit negativ. Eine Instabilität kann somit höchstens im niedrigfrequenten Bereich auftreten (für kleine Eigenwerte), höhere Frequenzen werden von der Diffusion ausgeglättet.

Für kleine Eigenwerte kann insbesondere eine Instabilität auftreten, wenn die Reaktion selbst schon instabil ist, was nicht weiter überraschend ist. Dies passiert schon im Fall einer einzelnen Gleichung wie etwa der Allen-Cahn Gleichung

$$\partial_t u = \epsilon^2 \Delta u - (u^2 - 1)u, \quad (3.42)$$

für  $\epsilon$  klein und  $\bar{u} = 0$ . Interessant dabei ist, dass durch die Instabilität räumliche Muster bilden. Im Fall der Allen-Cahn Gleichung mit einer kleinen Störung des Anfangswerts  $u = 0$  bilden sich sehr schnell Muster zwischen den stabilen stationären Lösungen  $u = 1$  und  $u = -1$ . In der stationären Lösung treten diese Muster z.b. in der massenerhaltenden Form der Allen-Cahn Gleichung auf, die die Form

$$\partial_t u = \epsilon^2 \Delta u - (u^2 - 1)u + \mu(t) \quad (3.43)$$

hat, wobei  $\mu$  so gewählt ist, dass das Integral von  $u$  gleich Null bleibt. Wegen des verschwindenden Integrals kann sich als stationäre Lösung weder  $u \equiv 1$  noch  $u \equiv -1$  einstellen, und wir erwarten deshalb eine örtlich nicht konstante stationäre Lösung (ein stationäres Muster). Tatsächlich bilden sich hier für kleines  $\epsilon$  zwei Bereiche in denen  $u$  entweder fast gleich  $+1$  oder  $-1$  ist. Wir werden solche Phänomene später noch bei Modellen für Phasenübergänge und Phasenseparation sehen.

Ein noch überraschender Effekt ist die *Turing-Instabilität*, die man auch *diffusionsinduziert* nennt. Diese tritt bei manchen Systemen auf, in denen die Reaktion linear stabil ist, d.h.

$$A_0 = (\nabla F_1(\bar{u}_1, \dots, \bar{u}_m), \dots, \nabla F_m(\bar{u}_1, \dots, \bar{u}_m))^T \quad (3.44)$$

hat nur Eigenwerte mit negativem Realteil. Da die Diffusion ja auch immer glättend zu einer konstanten Lösung, d.h. stabilisierend, wirkt, würde man auf den ersten Blick keine Instabilität erwarten. Eine solche kann jedoch auftreten, wenn die Diffusionskoeffizienten  $D_i$  sehr unterschiedlich sind. Dies sieht man schon im Falle eines Systems mit zwei Komponenten, wobei wir die Skalierung so wählen können, dass  $D_1 = 1$  gilt und vereinfacht  $D_2 = D$  schreiben. Wir betrachten also eine Matrix der Form

$$A(\lambda) = \begin{pmatrix} -\lambda + a & b \\ c & -D\lambda + d \end{pmatrix} \quad (3.45)$$

wobei  $A(0)$  zwei Eigenwerte mit negativen Realteilen hat. O.B.d.A. können wir  $\lambda = 1$  annehmen. Die Eigenwerte von  $A(\lambda)$  sind

$$\mu = \frac{a+d-D-1}{2} + \sqrt{\frac{(a-1+D-d)^2}{4} + bc} \quad \nu = \frac{a+d-D-1}{2} - \sqrt{\frac{(a-1+D-d)^2}{4} + bc}.$$

Für  $D$  gross ist

$$\frac{(a-1+D-d)^2}{4} + bc \approx \frac{D^2}{4} + \frac{D((a+d-1)}{2}$$

und damit in jedem Fall positiv.  $\mu$  ist dann positiv, wenn

$$\frac{(a+d-D-1)^2}{4} < \frac{(a-1+D-d)^2}{4} + bc.$$

Da

$$\frac{(a+d-D-1)^2}{4} \approx \frac{D^2}{4} - \frac{D(a+d-1)}{2}$$

Für  $D$  hinreichend gross ist dies der Fall, wenn  $a+d > 1$  ist.

## Kapitel 4

# Transport und Strömung

In diesem Kapitel werden wir uns mit der mathematischen Modellierung der Kontinuumsmechanik beschäftigen, insbesondere von Strömungen. Dabei werden wir einige recht universelle Techniken bei der Herleitung von Kontinuumsmodellen kennen lernen bzw. nach der Herleitung der Wärmeleitung weiter vertiefen, die über die klassische Strömungsmechanik hinaus von Bedeutung sind.

### 4.1 Grundlegendes zur Kontinuumsmechanik

Im Folgenden werden wir die fundamentale Gleichungen der Kontinuumsmechanik herleiten. Dabei werden wir besonderes Augenmerk auf die Gleichungen der Strömungsdynamik legen, für detaillierte Modelle der Festkörpermechanik verweisen wir auf [34].

Bei Strömungen handelt es sich um physikalische Massekontinua, d.h. Körper im euklidischen Raum, die als Menge ihrer Massenpunkte 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  $\Omega$  zum Zeitpunkt  $t$  gegeben ist durch

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

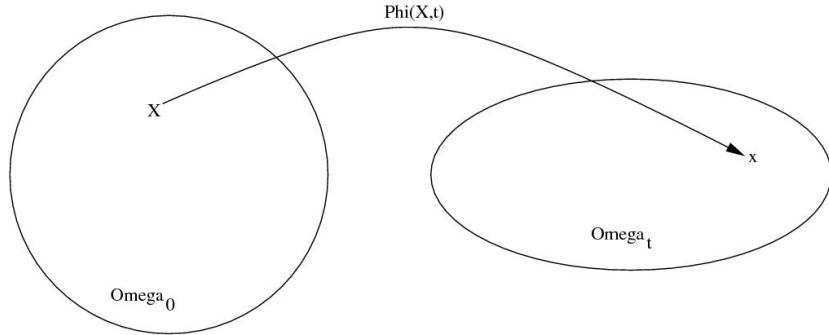
- Masse wird weder produziert noch vernichtet.
- Die Impulsänderung eines Fluidbereiches ist gleich den anliegenden Kräften (Newton's 2. Gesetz)
- Energie wird weder produziert noch vernichtet.

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 *Euler-schen* 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.

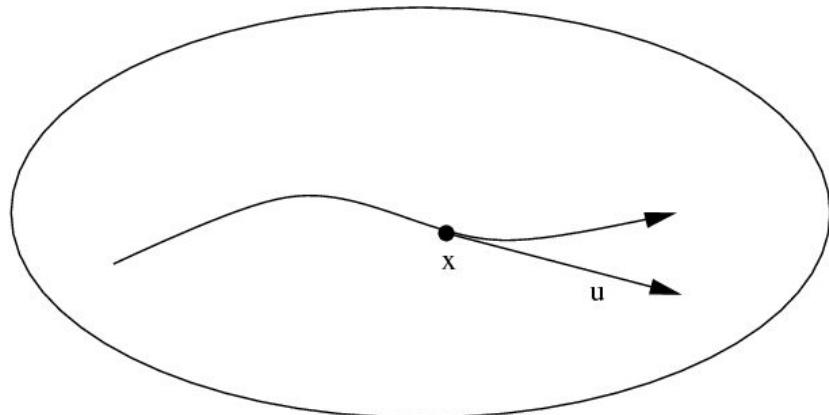
Bei stationären Strömungen fallen Bahnlinie und Stromlinie zusammen.

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

## 4.2 Euler und Navier-Stokes

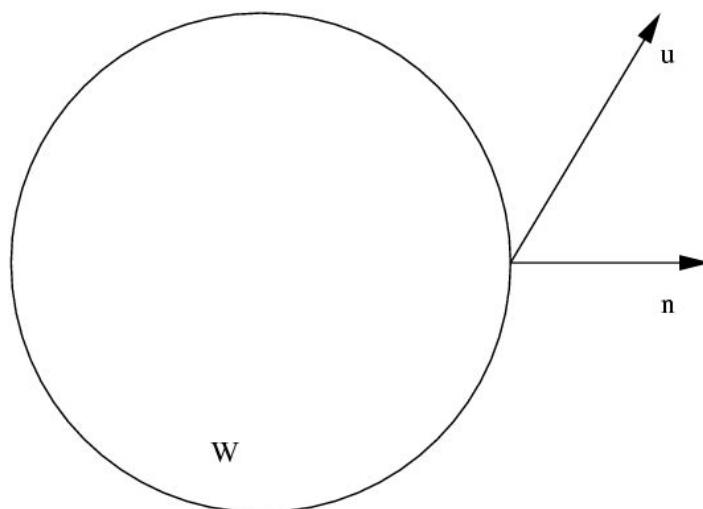
### Massenerhaltung

In diesem Abschnitt sollen 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  $\partial W$  den Rand von  $W$  und sei  $n$  die äußere Einheitsnormale, sowie  $dS$  das Flächenelement auf  $\partial\Omega$ .



Der Volumenstrom durch  $\partial W$  pro Einheitsfläche ist  $u \cdot n$  und der zugehörige Massenstrom ist  $\rho u \cdot n$ . Der Gesamtmassenstrom durch  $\partial W$  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  $\partial W$  (nach Innen gerichtet) ist, oder anders 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 *Kontinuitäts-Gleichung* oder *Transportgleichung*

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u) = 0, \quad (4.1)$$

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

Ausgehend von der Funktion  $\phi$  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:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{W_t} F(x, t) \, dx &= \int_{W_t} \frac{DF}{Dt} + F \operatorname{div} u \, dx \\ &= \int_{W_t} \frac{\partial F}{\partial t} + \operatorname{div}(F \cdot u) \, dx \end{aligned} \quad (4.2)$$

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

Mit (4.2) 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

$$\frac{d}{dt} \int_{W_t} \rho F \, dx = \int_{W_t} \rho \frac{DF}{Dt} \, dx \quad (4.3)$$

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

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 Erhaltungsform

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

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

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

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

hat, wobei  $\lambda$  (Volumenviskosität) und  $\mu$  (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 Nablkalkül

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

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  $\sigma = \sigma(D)$ .

### 4.3 Inkompressible Navier-Stokes Gleichungen

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

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

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

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

Nun gilt

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

und

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

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.

## 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

$$\begin{aligned}
u_t + (u \cdot \nabla)u &= -\frac{1}{\rho_0} \nabla p + \nu \Delta u \\
\operatorname{div} u &= 0
\end{aligned} \tag{4.4}$$

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 (4.4) ein und benutzen die Kettenregel, folgt

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

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

Ferner können zwei verschieden 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  $\nu$
- *Strömung 2:* mit Radius  $r = 1\text{m}$ , mit der Geschwindigkeit  $U_\infty = 1000 \frac{\text{km}}{\text{h}}$

Dann gilt

$$Re_1 = \frac{1(\frac{\text{km}^2}{\text{h}})}{\nu} = Re_2$$

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

$$Re = 10^6.$$

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

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

sodass viskose Effekte dominant sind.

# Kapitel 5

## Wellen

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 [21].

### 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 *isentrope* 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  $\rho = \rho_0 + \rho_1$  ( $\rho_1$  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  $\rho_1$  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  $\rho_0$  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  $\rho_1(., 0)$  und  $\frac{\partial \rho_1}{\partial t}(., 0)$  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 kinetischen 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  $\rho$

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

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  $\rho$  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  $\rho_0$  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  $\ell$  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  $\ell$  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:

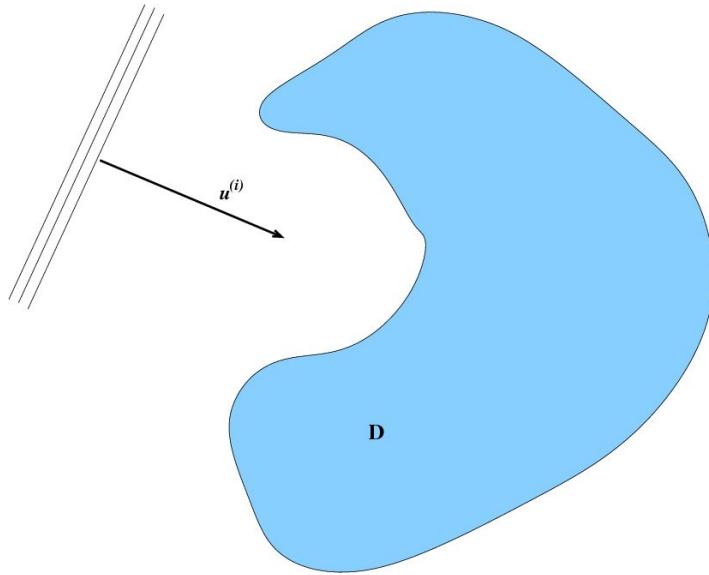


Abbildung 5.1: Streuung an einem Hindernis.

- **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  $\eta$  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  $\alpha$ , 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  $\mathbf{E}$ , das 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  $\rho$  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  $\epsilon$  die Permittivität bezeichnet. In ähnlicher Weise verknüpft man das magnetische Feld und die magnetische Flußdichte durch

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

wobei  $\mu$  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

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

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

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

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.

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

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

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

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  $\rho$  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

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

weiters 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 ( $\hat{H} = 0$ ) 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  $\phi$  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 erst 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  $\mu$  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  $H_z(x, y)$ .

# Kapitel 6

## Von Newton zu Boltzmann

Im Folgenden werden wir uns mit Modellen für viele Teilchen (in sehr allgemeinem Sinn) beschäftigen, die auf einer mikroskopischen Skala im wesentlichen durch die Newton'schen Bewegungsgleichungen beschrieben werden.

### 6.1 Die Newton'schen Gesetze

In der klassischen 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

$$p_i(t) = m_i r'_i(t) \tag{6.1}$$

$$f_i(t) = p'_i(t) = m_i r''_i(t). \tag{6.2}$$

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

$$\begin{aligned} \text{abstoßende Wechselwirkungen: } &H_{ij}(.) > 0 \\ \text{anziehende Wechselwirkungen: } &H_{ij}(.) < 0. \end{aligned}$$

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

$$m_i \frac{dr_i}{dt}(t) = p_i(t) \quad (6.3)$$

$$\frac{dp_i}{dt}(t) = \sum_j \frac{r_i(t) - r_j(t)}{|r_i(t) - r_j(t)|} H_{ij}(|r_i(t) - r_j(t)|) + F_i(r_i(t), t). \quad (6.4)$$

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 (6.4) 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

$$\frac{dL}{dt} = M$$

d.h., die Änderung des Drehimpulses ist gleich dem Drehmoment (siehe Übung).

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  $|.|$  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.

In einigen Fällen sind die obigen Annahmen basierend auf energiehaltenden Kräften zu einfach und es treten dissipative Kräfte (Reibung) auf. Dies werden wir im folgenden Abschnitt an einem Beispiel mit weniger physikalischen Kräften näher diskutieren.

## 6.2 Straßenverkehr

Wir betrachten in diesem Abschnitt die Modellierung des Verkehrs auf einer langen einspurigen Strasse (vermeiden also schwierigere Aspekte wie Überholmanöver oder Kreuzungen, die man ebenfalls modellieren kann, siehe [18]). Durch die Bewegung von Gaspedal bewirkt der Fahrer im wesentlichen eine Änderung der Beschleunigung, also hat man auch hier einen natürlichen Ansatz über die Newton'schen Bewegungsgleichungen - das Auto kann als starrer Körper vorausgesetzt werden. Die folgenden Beobachtungen sind wesentlich für die Erstellung des Modells

- Abhängig von äusseren Gegebenheiten hat jeder Fahrer eine *Wunschgeschwindigkeit*  $v^0(x, t)$ , d.h. er würde ohne weiteren Verkehr an der Stelle  $x$  zur Zeit  $t$  mit dieser Geschwindigkeit fahren. Die Wunschgeschwindigkeit wird nur bestimmt durch äussere Einflüsse wie Straßenverkehrsordnung (Tempolimit), Leistungsfähigkeit seines Wagens und eigene Einschätzungen wie Sicherheit.
- Abhängig von anderen Verkehrsteilnehmern wird diese Wunschgeschwindigkeit angepasst. Die Abhängigkeit passiert dabei vor allem vom Fahrzeug vor ihm, eventuell noch von weiteren Fahrzeugen davor. Die Fahrzeuge hinter dem jeweiligen Fahrer spielen dabei kaum eine Rolle.
- Jeder Fahrer versucht einen gewissen Wunschabstand zum Fahrzeug vor ihm zu halten, dieser Abstand wächst mit der Geschwindigkeit.

Diese Beobachtungen lassen sich sehr leicht in ein mathematisches Modell übersetzen. Wir numerieren die  $N$  Fahrzeuge entlang der Strasse so, dass Fahrzeug  $i + 1$  jeweils genau nach Fahrzeug  $i$  fährt. Die Position des Fahrzeugs identifizieren wir mit dem Punkt  $x_i(t)$  (seinem Mittelpunkt), die Geschwindigkeit mit  $v_i$ . Es gilt natürlich

$$\frac{dx_i}{dt}(t) = v_i(t), i = 1, \dots, N. \quad (6.5)$$

Die weiteren Beobachtungen können wir nun recht allgemein als

$$\frac{dv_i}{dt}(t) = F_i(v_i(t) - v_i^0(x_i(t), t), x_{i+1}(t) - x_i(t) - d_i(v_i(t))) \quad (6.6)$$

formulieren, wobei  $d_i$  den geschwindigkeitsabhängigen Sicherheitsabstand bezeichnet. Die meisten Abhängigkeiten kann man dabei linear approximieren, z.B. ist für den Sicherheitsabstand ein Ansatz

$$d_i(v_i(t)) = a_i v_i(t) + b_i \quad (6.7)$$

mit Konstanten  $a_i$  und  $b_i$  realistisch. Eine wirklich nichtlineare Abhängigkeit ist nur für die Abhängigkeit vom Abstand (relativ zum Sicherheitsabstand) wichtig. Bei sehr kleinem Abstand wird man natürlich extrem bremsen, während man bei grossem Abstand nur sehr langsam und sanft abbremsen wird. Es bietet sich also eine Wahl der Form

$$F_i(v, x) = -\frac{v}{\tau_i} - c_i x^{-e_i} \quad (6.8)$$

mit  $e_i > 0$  an. Dies führt dann auf die Bewegungsgleichung

$$\frac{dv_i}{dt}(t) = -\frac{v_i(t) - v_i^0(x_i(t), t)}{\tau_i} - c_i (x_{i+1}(t) - x_i(t) - d_i(v_i(t)))^{-e_i} \quad (6.9)$$

Wir sehen aus der Analyse von (6.9), dass  $\tau_i$  die Dimension einer Zeit hat, dieser Wert wird auch als Relaxationszeit bezeichnet. In Situationen in denen keine (vernachlässigbare) Interaktion mit dem Fahrzeug davor stattfindet, ist  $\tau_i$  eine typische Zeitskala bis die Geschwindigkeit  $v_i^0$  (fast) angenommen wird: es gilt dann (mit  $v_i^0$  konstant)

$$v_i(t) = v_i^0(1 - e^{-t/\tau_i}) + v_i(0)e^{-t/\tau_i}.$$

Wir betrachten nun noch kurz die Skalierung der Bewegungsgleichung. Dazu wählen wir eine typische Länge  $L$  und eine typische Geschwindigkeit  $V$ , woraus sich eine typische Zeit  $T = \frac{L}{V}$  ergibt (oder umgekehrt). Wir skalieren Ort und Zeit zu

$$\tilde{x}_i = \frac{x_i}{L}, \quad \tilde{t} = \frac{t}{T}, \quad \tilde{v}_i = \frac{v_i}{V}.$$

Mit dieser Wahl bleibt sinnvollerweise die Definition der Geschwindigkeit gleich, d.h.

$$\frac{d\tilde{x}_i}{d\tilde{t}} = \tilde{v}_i.$$

Für die Bewegungsgleichung erhalten wir

$$\frac{d\tilde{v}_i}{d\tilde{t}}(\tilde{t}) = -\frac{\tilde{v}_i(\tilde{t}) - \tilde{v}_i^0}{(\tau_i/T)} - \tilde{c}_i (\tilde{x}_{i+1}(\tilde{t}) - \tilde{x}_i(\tilde{t}) - \tilde{d}_i)^{-e_i}$$

mit reskalierte Wunschgeschwindigkeit  $\tilde{v}_i^0$  und einer dimensionslosen Konstante  $\tilde{c}_i$ .

Um das Verhalten auf einer relativ grossen Zeitskala zu betrachten, führen wir nun den Grenzwert  $T \rightarrow \infty$  durch. Im dimensionslosen Fall bedeutet dies, wir betrachten  $\epsilon = \frac{\tau_0}{T} \rightarrow 0$ , wobei  $\tau_0$  ein typischer Wert für die Relaxationszeiten  $\tau_i$  ist. Aus der ursprünglichen Skalierung ist zu beachten, dass die Konstante  $\tilde{c}_i$  proportional zu  $T$  bzw.  $\frac{1}{\epsilon}$  ist. Wir definieren also  $\tilde{C}_i = \frac{\tilde{c}_i}{\epsilon}$ , und schreiben die Bewegungsgleichung zu

$$\epsilon \frac{d\tilde{v}_i}{d\tilde{t}}(\tilde{t}) = -\frac{\tilde{v}_i(\tilde{t}) - \tilde{v}_i^0}{(\tau_i/\tau_0)} - \tilde{C}_i (\tilde{x}_{i+1}(\tilde{t}) - \tilde{x}_i(\tilde{t}) - \tilde{d}_i)^{-e_i}.$$

Wir sehen also, dass im Grenzwert  $\epsilon \rightarrow 0$  nur die Gleichung

$$\tilde{v}_i(t) = \tilde{v}_i^0 - \frac{\tau_i}{\tau_0} \tilde{C}_i \left( \tilde{x}_{i+1}(t) - \tilde{x}_i(t) - \tilde{d}_i \right)^{-e_i}$$

übrig bleibt. Ignorieren wir zunächst die Abhängigkeit des Sicherheitsabstands  $d_i$  von der Geschwindigkeit  $v_i$ , so haben wir also eine explizite Relation für die Geschwindigkeit (andernfalls ist noch eine algebraische Gleichung für  $v_i$  zu lösen). Wir können diese Relation in die erste Differentialgleichung einsetzen und erhalten das asymptotische Modell

$$\frac{d\tilde{x}_i}{dt} = \tilde{v}_i^0 - \frac{\tau_i}{\tau_0} \tilde{C}_i \left( \tilde{x}_{i+1}(t) - \tilde{x}_i(t) - \tilde{d}_i \right)^{-e_i}, \quad (6.10)$$

also ein geschlossenes System von Differentialgleichungen nur für die Positionen der Teilchen.

### Langzeitverhalten von Bewegungsgleichungen

Wir betrachten nun in etwas allgemeinerer Form den obigen Grenzwert, für (dimensionslose) Bewegungsgleichungen mit Dämpfungsterm (Reibung)

$$\frac{dx_i}{dt} = v_i \quad \frac{dv_i}{dt} = -\epsilon v_i - \frac{1}{m_i} \frac{\partial U}{\partial x_i}(\mathbf{x}) \quad (6.11)$$

mit  $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_N)$  und einer potentiellen Energie  $U$ . In diesem Fall gilt wegen der Dämpfung keine Energieerhaltung, sondern die Dissipationsrelation

$$\frac{d}{dt} \left( \sum_i \frac{1}{2} m_i v_i^2 + U(\mathbf{x}) \right) = -\epsilon \sum_i m_i v_i^2.$$

Die Reskalierung für lange Zeit erhält man mit der neuen Zeitvariable  $\tau = \epsilon t$  und der Geschwindigkeit  $w_i = \epsilon v_i$ . Das reskalierte Problem ist dann

$$\frac{dx_i}{d\tau} = w_i \quad \epsilon^2 \frac{dw_i}{d\tau} = -w_i - \frac{1}{m_i} \frac{\partial U}{\partial x_i}(\mathbf{x}) \quad (6.12)$$

Der naheliegende Grenzwert ist also

$$\begin{aligned} w_i &= -\frac{1}{m_i} \frac{\partial U}{\partial x_i}(\mathbf{x}) \\ \frac{dx_i}{d\tau} &= -\frac{1}{m_i} \frac{\partial U}{\partial x_i}(\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (6.13)$$

Diese Reduktion gilt natürlich nur für sinnvoll lange Zeit, d.h. für  $\tau \gg \epsilon$ . Bei einem allgemeinen Anfangswert für  $v_i$  kann in einer anfänglichen (schnellen) Zeitskala der Ordnung  $\epsilon$  eine völlig andere Dynamik auftreten, die sich dann zur Lösung von (6.13) einschwingt. Die reduzierte Dynamik (6.13) ist ein sogenannter Gradientenfluss für die potentielle Energie. Es gilt

$$\frac{d}{dt} U(\mathbf{x}) = - \sum_i m_i \left( \frac{dx_i}{dt} \right)^2 = - \sum_i \frac{1}{m_i} \left( \frac{\partial U}{\partial x_i}(\mathbf{x}) \right)^2.$$

Damit wird die potentielle Energie während der Evolution monoton reduziert und stoppt in lokalen Minima der potentiellen Energie. Dies kann eventuell auch auf einer sehr grossen

Zeitskala eine Abweichung von der Dynamik der Newton'schen Bewegungsgleichungen ergeben. Durch die zusätzliche kinetische Energie ist es dort nämlich möglich auch lokale Minima der potentiellen Energie wieder zu verlassen. Diese Eigenschaft kann durch zusätzliche stochastische Störungen modelliert werden, die ähnlich den zufälligen Sprüngen bei Random Walks sind.

### 6.3 Der Übergang zum Kontinuum

Im Folgenden wollen wir als letzten Schritt noch den Übergang zum Kontinuum diskutieren, ein klassisches Problem der kinetischen Theorie. Wir betrachten dazu ein Teilchensystem

$$\begin{aligned}\frac{dx_i}{dt} &= v_i \\ \frac{dv_i}{dt} &= -\lambda v_i + \frac{1}{N} \sum_{j \neq i} K(x_i - x_j)\end{aligned}$$

mit einem Interaktionskern  $K$  und einem Reibungskoeffizienten  $\lambda$ .

In diesem Fall können wir als Grenzwert die sogenannte Vlasov-Gleichung für die Dichte  $f(x, v, t)$  der Teilchen in  $x$  mit Geschwindigkeit  $v$  zur Zeit  $t$  herleiten. Eine einfache deterministische Herleitung basiert auf der Betrachtung der *empirischen Dichte*

$$f^N(x, v, t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(x - x_i(t)) \delta(v - v_i(t)). \quad (6.14)$$

Um eine Gleichung für  $f^N$  herzuleiten betrachten wir die schwache Form, d.h. für eine stetig differenzierbare Testfunktion  $\varphi(x, v)$ , die schnell bei Unendlich abfällt

$$\langle f^N(., ., t), \varphi \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \varphi(x_i(t), v_i(t)). \quad (6.15)$$

Es gilt dann

$$\begin{aligned}\langle \partial_t f^N(., ., t), \varphi \rangle &= \frac{d}{dt} \langle f^N(., ., t), \varphi \rangle \\ &= \frac{d}{dt} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \varphi(x_i(t), v_i(t)) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left( \nabla_x \varphi(x_i(t), v_i(t)) \cdot \frac{dx_i}{dt} + \nabla_v \varphi(x_i(t), v_i(t)) \cdot \frac{dv_i}{dt} \right) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left( \nabla_x \varphi(x_i(t), v_i(t)) \cdot \frac{dx_i}{dt} + \nabla_v \varphi(x_i(t), v_i(t)) \cdot \frac{dv_i}{dt} \right) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\nabla_x \varphi(x_i(t), v_i(t)) \cdot v_i(t) - \lambda \nabla_v \varphi(x_i(t), v_i(t)) \cdot v_i(t)) \\ &\quad + \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} \nabla_v \varphi(x_i(t), v_i(t)) \cdot K(x_i(t) - x_j(t))\end{aligned}$$

Benutzen wir die Definition von  $f^N$ , so lässt sich dies umschreiben zu

$$\begin{aligned}\langle \partial_t f^N(.,.,t), \varphi \rangle &= \langle f^N, \nabla_x \varphi \cdot v - \lambda \nabla_v \varphi \cdot v \rangle \\ &\quad + \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} \nabla_v \varphi(x_i(t), v_i(t)) \cdot K(x_i(t) - x_j(t))\end{aligned}$$

umschreiben Um den letzten Term zu behandeln benutzen wir zunächst

$$\int_{j=1} f^N(y, v, t) dv = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \delta(y - x_j(t))$$

und die Definition der  $\delta$ -Distribution um

$$\sum_{j=1}^N K(x_i(t) - x_j(t)) = \int \int K(x_i(t) - y) f^N(y, v, t) dv dy =: (K * f^N)(x_i(t))$$

zu erhalten. Nun können wir analog zu oben den letzten Term umschreiben:

$$\begin{aligned}&\frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} \nabla_v \varphi(x_i(t), v_i(t)) \cdot K(x_i(t) - x_j(t)) \\ &= \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \nabla_v \varphi(x_i(t), v_i(t)) \cdot K(x_i(t) - x_j(t)) \\ &\quad - \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N \nabla_v \varphi(x_i(t), v_i(t)) \cdot K(0) \\ &= \langle f^N, \nabla_v \varphi \cdot (K * f^N) \rangle - \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N \nabla_v \varphi(x_i(t), v_i(t)) \cdot K(0).\end{aligned}$$

Ist  $K(0)$  beschränkt, so ist der letzte Term von der Ordnung  $\frac{1}{N}$  und kann im Grenzwert  $N \rightarrow \infty$  vernachlässigt werden. Wir erhalten also

$$\langle \partial_t f^N, \varphi \rangle = \langle f^N, \nabla_x \varphi \cdot v + \nabla_v \varphi \cdot (-\lambda v + (K * f^N)) \rangle + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N}\right) \quad (6.16)$$

und damit im Grenzwert  $N \rightarrow \infty$  die schwache Form der *Vlasov-Gleichung*

$$\langle \partial_t f, \varphi \rangle = \langle f, \nabla_x \varphi \cdot v + \nabla_v \varphi \cdot (-\lambda v + (K * f)) \rangle. \quad (6.17)$$

Durch (formale) partielle Integration erhalten wir am Ende die starke Form der Vlasov-Gleichung

$$\partial_t f + v \cdot \nabla_x f + \nabla_v \cdot (f(K * f) - \lambda v) = 0. \quad (6.18)$$

## 6.4 Billards und Boltzmann

Bei der Herleitung der Vlasov-Gleichung berücksichtigt man nur Interaktionen der Teilchen über ein Feld  $K$ . Bei der Modellierung von kleinen Teilchen mit relativ hoher Geschwindigkeit,

wie z.B. in der kinetischen Gastheorie, muss man auch noch direkte Interaktionen wie Stöße zwischen den Teilchen modellieren. Hier muss man berücksichtigen, dass die Teilchen gestreut werden, d.h. wenn zwei Teilchen mit Geschwindigkeiten  $v$  bzw.  $w$  im Punkt  $x$  kollidieren, so fliegen sie mit geänderten Geschwindigkeiten  $v'$  und  $w'$  weiter.

Die Modellierung realisiert man in der Boltzmann-Gleichung, in der man die Änderung der Dichte auch noch durch einen Stoß-Operator  $Q$  modelliert

$$\partial_t f + v \cdot \nabla_x f + \nabla_v \cdot (f(K * f) - \lambda v) = Q(f, f). \quad (6.19)$$

Man schreibt meistens  $Q$  mit zwei (gleichen) Argumenten, da die Abhängigkeit von  $f$  quadratisch ist (wegen der Interaktion von zwei Teilchen). Der Stoß-Operator besteht aus zwei Teilen, einem Gewinn- und einem Verlustterm, d.h.

$$Q(f, f) = Q_+(f, f) - Q_-(f, f). \quad (6.20)$$

Der Verlustterm modelliert, dass die Dichte an Teilchen mit Geschwindigkeit  $v$  kleiner wird, wenn die aus dem Stoß resultierenden Geschwindigkeiten  $v'$  und  $w'$  gendert sind. Da alle Geschwindigkeiten zufällig sind, erhält man

$$Q_-(f, f) = \int \int \int R(x, v, w, v', w') f(x, v) f(x, w) dw dv' dw', \quad (6.21)$$

wobei  $R$  die Wahrscheinlichkeit pro Zeit ist, dass zwei Teilchen die mit Geschwindigkeiten  $v$  und  $w$  in  $x$  kollidieren, zu den Geschwindigkeiten  $v'$  und  $w'$  gestreut werden. Analog kann man den Gewinnterm als

$$Q_+(f, f) = \int \int \int R(x, v', w', v, w) f(x, v') f(x, w') dw dv' dw' \quad (6.22)$$

modellieren. Die genaue Form von  $R$  hängt von der Art der Teilchen ab. Meist kann man bereits durch elementare Impuls- und Energierhaltung (dividiert durch die Masse)

$$\begin{aligned} v + w &= v' + w' \\ \frac{1}{2}|v|^2 + \frac{1}{2}|w|^2 &= \frac{1}{2}|v'|^2 + \frac{1}{2}|w'|^2 \end{aligned}$$

den Träger von  $R$  auf eine niedrigere Dimension reduzieren. Damit vermeidet man auch das neundimensionale Integral oben, es bleiben aber immer noch fünf Dimensionen übrig, was die numerische Berechnung sehr aufwändig macht.

## 6.5 Hydrodynamik und zurück zu Euler

Die Beschreibung mit Hilfe der Vlasov- oder Boltzmann Gleichung bezeichnet man oft als *messoskopisch*. Die detaillierte mikroskopische Information über die einzelnen Teilchen ist zwar verloren gegangen, jedoch haben wir immer noch eine Verteilung die nicht nur Aussagen über die vorhandenen Teilchen, sondern auch deren Geschwindigkeiten macht. Ein echt makroskopisches erhält man indem man die rein örtliche Dichte der Teilchen betrachtet. Diese erhält man durch Integration über die Geschwindigkeit als

$$\rho(x, t) = \int f(x, v, t) dv. \quad (6.23)$$

Zur einfacheren Handhabung werden wir im Folgenden von der Vlasov-Gleichung (6.18) ausgehen, die wir auch als

$$\partial_t f + v \cdot \nabla_x f + \nabla_v \cdot (f(K * \rho) - \lambda v) = 0. \quad (6.24)$$

mit

$$(K * \rho)(x, t) = \int K(x - y) \rho(y, t) dy \quad (6.25)$$

schreiben können.

Berechnet man die Zeitableitung von  $\rho$  so sieht man sofort

$$\begin{aligned} \partial_t \rho &= \int \partial_t f dv \\ &= - \int \nabla_x \cdot (vf) dv - \int \nabla_v \cdot (f(-\lambda v + K * \rho)) dv \\ &= -\nabla_x \cdot \int vf dv, \end{aligned}$$

wobei das zweite Integral verschwindet da  $f$  für  $|v| \rightarrow \infty$  gegen Null abfällt. Definiert man nun eine makroskopische Geschwindigkeit  $u(x, t)$  als den Mittelwert der mesoskopischen,

$$u(x, t) = \frac{\int vf(x, v, t) dv}{\int f(x, v, t) dv}, \quad (6.26)$$

dann erhält man wieder die Transportgleichung

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho u) = 0. \quad (6.27)$$

Als nächsten Schritt leiten wir nun eine Gleichung für  $u$  her, dafür berechnen wir die Zeitableitung von  $\rho u$  als

$$\begin{aligned} \partial_t(\rho u) &= \int v \partial_t f dv \\ &= - \int v \nabla_x \cdot (vf) dv - \int v \nabla_v \cdot (f(-\lambda v + K * \rho)) dv \\ &= -\nabla_x \cdot \int v \otimes vf dv + \int f(-\lambda v + K * \rho) dv \end{aligned}$$

Setzen wir die Transportgleichung ein und dividieren durch  $\rho$ , so folgt

$$\partial_t \rho + \frac{1}{\rho} \left( \nabla_x \cdot \int v \otimes vf dv - u \nabla \cdot (\rho u) \right) - \lambda u + K * \rho = 0.$$

Nun wäre der nächste Schritt Gleichungen für die zweiten Momente herzuleiten, was dann wieder auf Terme mit den dritten Momenten führt und immer so weiter. Um ein unendliches System zu vermeiden, muss man eine geeignete Abschlussrelation verwenden, die sich unter geeigneten Voraussetzungen als asymptotischer Grenzwert ergibt. Die einfachste Abschlussrelation ist hier

$$\int v \otimes vf dv = u \otimes u \rho.$$

Setzt man diese oben ein, so erhält man eine Version der Euler-Gleichungen

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho u) = 0 \quad (6.28)$$

$$\partial_t \rho + u \nabla \cdot u - \lambda u + K * \rho = 0. \quad (6.29)$$

## 6.6 Diffusive und Konvektive Skalierung

Als letzten Schritt diskutieren wir noch die Herleitung einfacherer Gleichungen für die Dichten als geeignete Skalierungslimiten. Wir werden dabei die klassischen Fälle konvektiver und diffusiver Grenzwerte betrachten.

Im konvektiven Fall betrachten wir eine gerichtete Interaktion (ähnlich der Verkehrsmodellierung) der Form

$$K(x - y) = G(x - y)\omega, \quad (6.30)$$

mit einer skalaren Funktion  $G$  und einem Richtungsvektor  $\omega$ . Wir reskalieren Ort und Zeit konvektiv, also in der gleichen Ordnung

$$\tilde{t} = \epsilon t, \quad \tilde{x} = \epsilon x, \quad (6.31)$$

und erhalten in den neuen Variablen (die wir zur Vereinfachung wieder als  $x$  und  $t$  schreiben)

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho u) = 0 \quad (6.32)$$

$$\epsilon \partial_t \rho + \epsilon u \nabla \cdot u - \lambda u + K_\epsilon * \rho = 0. \quad (6.33)$$

Hier bezeichnet  $K_\epsilon$  den sich auch den reskalierten Variablen ergebenden Interaktionskern

$$K_\epsilon(x) = \frac{1}{\epsilon^d} G\left(\frac{x}{\epsilon}\right) \omega. \quad (6.34)$$

Ist  $G$  eine positive symmetrische Funktion mit Maximum bei  $x = 0$ , dann konvergiert

$$K_\epsilon * \rho \rightarrow c \rho \omega \quad (6.35)$$

und damit erhalten wir durch Ignorieren der Terme der Ordnung  $\epsilon$  das reduzierte Modell

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho u) = 0, \quad u = \frac{c}{\lambda} \rho \omega, \quad (6.36)$$

die sogenannte Burgers-Gleichung, ein Standardmodell für Erhaltungsgleichungen erster Ordnung.

Im Fall einer Potentialinteraktion, d.h.

$$K(x - y) = -\nabla G(x - y) \quad (6.37)$$

verwenden wir eine diffusive Skalierung, d.h.

$$\tilde{t} = \epsilon^2 t, \quad \tilde{x} = \epsilon x. \quad (6.38)$$

Da Zeit und Ort hier verschieden skaliert werden, müssen wir natürlich auch die Geschwindigkeit zu

$$\tilde{u} = \frac{1}{\epsilon} u \quad (6.39)$$

umskalieren. Dies liefert in den Euler-Gleichungen nach Division durch  $\epsilon$

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho u) = 0 \quad (6.40)$$

$$\epsilon \partial_t \rho + \epsilon^2 u \nabla \cdot u - \lambda u - \nabla(G_\epsilon * \rho) = 0, \quad (6.41)$$

mit

$$G_\epsilon(x) = \frac{1}{\epsilon^d} G\left(\frac{x}{\epsilon}\right). \quad (6.42)$$

Ist  $G$  wie oben, dann gilt  $G_\epsilon * \rho \rightarrow c\rho$  und damit reduzieren sich die Euler-Gleichungen zur nichtlinearen Diffusionsgleichung

$$\partial_t \rho = \nabla \cdot (c\rho \nabla \rho). \quad (6.43)$$

Hierbei ist auch zu beachten, dass wir  $G$  also positiv vorausgesetzt haben und damit effektiv eine abstossende Interaktion verwenden. Bei umgekehrtem Vorzeichen, also einer anziehenden Interaktion erhalten wir asymptotisch eine Rückwärtsdiffusionsgleichung ( $c < 0$ ), die keine Lösung in vernünftigen Räumen besitzt. Dies ist auch naheliegend, da man bei reiner Anziehung ja auch eine Konzentration in einem Punkt, also keine klassischen Dichten, erwarten würde.

# Kapitel 7

## Schneeflocken und Entmischung

Im Folgenden diskutieren wir einige Modelle für Phasenübergänge, insbesondere von flüssigen zu festen Zuständen. Dazu

### 7.1 Phasenübergänge: Wasser, Eis und Schnee

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  $\Omega$  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

$$u = 0 \quad \text{auf } \Sigma(t). \quad (7.1)$$

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

$$h(x, t) = \begin{cases} c\rho u - L & \text{in } \Omega_1(t) \\ c\rho u & \text{in } \Omega_2(t) \end{cases} \quad (7.2)$$

Wir definieren nun als  $\chi$  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

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\Delta u + \frac{L}{\rho c} \frac{\partial \chi}{\partial t}. \quad (7.3)$$

Mit (7.1) und (7.3) haben wir nun zwei Gleichungen für die Unbekannten  $u$  und  $\Sigma(t)$ .

Zum besseren Verständnis des Terms  $\frac{\partial \chi}{\partial t}$  in (7.3) 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

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

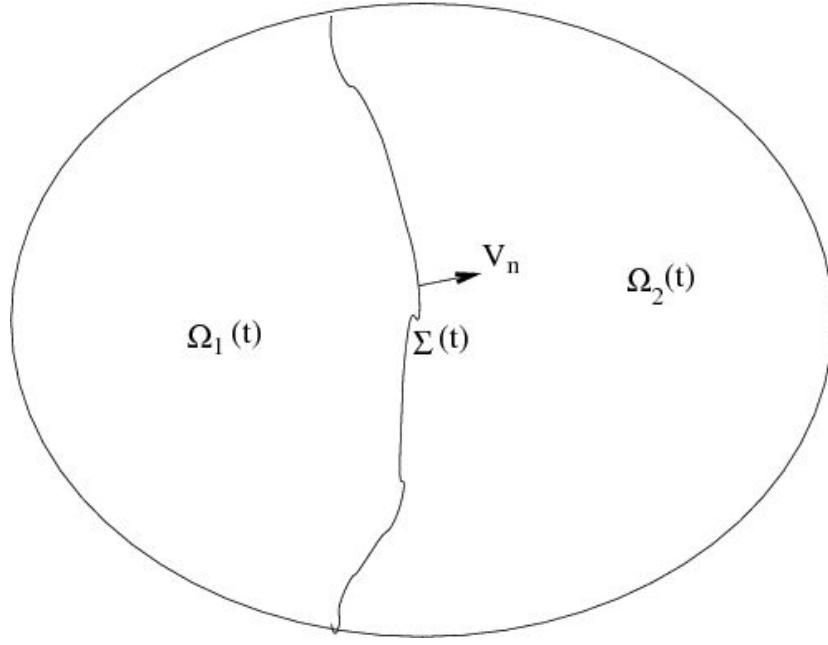


Abbildung 7.1: Schematische Darstellung des Stefan-Problems.

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

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

benutzen. 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  $2\epsilon$  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  $\chi$

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

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 [.] 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

$$V_n = \frac{D\rho c}{L} \left[ \frac{\partial u}{\partial n} \right], \quad (7.4)$$

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

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\Delta u \quad \text{in } \Omega \setminus \Sigma(t) \quad (7.5)$$

mit Dirichlet-Bedingung (7.1) auf dem Interface, und der zusätzlichen Gleichung (7.4) für die Bewegung von  $\Sigma(t)$  schreiben.

Neben dem einfachen Übergang von Wasser zu Eis kann es auch zur Bildung von Schneeflocken (Schneekristallen) kommen. Der dafür verantwortliche Effekt heißt Unterkühlung. Durch einen zu starken Abfall der Umgebungstemperatur kann die Temperatur  $u = 0$  am Übergang zwischen fester und flüssiger Phase nicht realisiert werden, die thermale Energie muss durch kinetische Energie und Oberflächenenergie kompensiert werden. Dies führt zu einer Randbedingung der Form

$$u = -\sigma\kappa - \beta V_n, \quad (7.6)$$

wobei  $\kappa$  die mittlere Krümmung der Übergangsfläche und  $V_n$  die Normalgeschwindigkeit ist (der erste Term rechts entspricht der Variation der Oberflächenenergie, der zweite der kinetischen). Dadurch kommt es (insbesondere wenn  $\beta$  grösser wird) zum typischen dendritischen Wachstum wie bei Schneeflocken. Modelliert man auch noch die Kristallstruktur der Materialien, d.h. es gibt bevorzugte Richtungen entsprechend der starren atomaren Anordnung, dann werden  $\sigma$  und  $\beta$  auch noch Funktionen abhängig von der Normalenrichtung an die Oberfläche. Damit erhält man tatsächlich realistische Formen von Schneekristallen, siehe z.B. [3].

## 7.2 Phasenseparation: Entmischung

Ein anderer interessanter Aspekt bei vielen Materialien ist Entmischung, auch dies kann man leicht in Experimenten, sogar in der Küche, beobachten. Als klassisches Beispiel dafür diskutieren wir das Allen-Cahn Modell und nehmen dazu an wir haben zwei Typen von Teilchen, die sich einerseits durch Diffusion bewegen und andererseits ineinander umgewandelt werden können. Nehmen wir gleiche Diffusionskoeffizienten (zu eins skaliert) an und nennen die Dichten der Teilchen  $u_1$  bzw.  $u_2$  so erhalten wir unmittelbar ein Reaktions-Diffusionsmodell der Form

$$\partial_t u_1 = \Delta u_1 + f_1(u_1, u_2) - f_2(u_1, u_2), \quad (7.7)$$

$$\partial_t u_2 = \Delta u_2 - f_1(u_1, u_2) + f_2(u_1, u_2). \quad (7.8)$$

Dabei ist  $f_1$  die Rate mit der Teilchen von Typ 2 zu Typ 1 umgewandelt werden und  $f_2$  umgekehrt die Rate der Umwandlung von 1 zu 2. Ein interessanter Fall ist z.B. dass ein Teilchen vom Typ  $j$  umgewandelt wird wenn es mit zwei Teilchen vom Typ  $i$  zusammentrifft, d.h.

$$f_1(u_1, u_2) = u_1^2 u_2, \quad f_2(u_1, u_2) = u_2^2 u_1. \quad (7.9)$$

Nehmen wir an, dass zur Zeit  $t = 0$  das ganze Gebiet mit den zwei Arten gefüllt ist, d.h.  $u_1(x, 0) + u_2(x, 0) = 1$  für alle  $x \in \Omega$ , so gilt auch

$$u_1(x, t) + u_2(x, t) = 1 \quad \forall x \in \Omega, \quad (7.10)$$

da nach Addition der Gleichung gilt

$$\partial_t(u_1 + u_2) = \Delta(u_1 + u_2),$$

für die die Konstante eins die eindeutige Lösung mit obigem Anfangswert ist.

Damit können wir das System in der neuen Variable  $u = u_1 - u_2$  formulieren und erhalten (mit  $u_1 = \frac{1}{2}(1+u)$  und  $u_2 = \frac{1}{2}(1-u)$ )

$$\partial_t u = \Delta u - \frac{1}{2}u(u^2 - 1). \quad (7.11)$$

Dies ist die klassische Allen-Cahn Gleichung, die wir nun noch auf eine makroskopische Orts-skala  $\frac{1}{\epsilon}$  reskalieren und als

$$\partial_t u = \epsilon^2 \Delta - W'(u) \quad (7.12)$$

schreiben, mit dem *double-well Potential*

$$W(u) = \frac{1}{8}(u-1)^2(u+1)^2. \quad (7.13)$$

Damit ist die Allen-Cahn Gleichung ein Gradientenfluss

$$\partial_t u = -\epsilon E'(u) \quad (7.14)$$

für das Energiefunktional

$$E_\epsilon(u) = \int_{\Omega} \left( \frac{\epsilon}{2} |\nabla u|^2 + \frac{1}{\epsilon} W(u) \right) dx. \quad (7.15)$$

Da  $W$  zwei globale Minima bei  $+1$  und  $-1$  hat, erwarten wir im Langzeitverhalten eine Phasenseparation, d.h. entweder  $u(x) \approx 1$  oder  $u(x) \approx -1$ . In der Asymptotik  $\epsilon = 0$  haben wir

$$\partial_t u = -W'(u)$$

und man sieht leicht, dass für die Lösung dieser Gleichung  $u(x, t) \rightarrow 1$  falls  $u(x, 0) > 0$  und  $u(x, t) \rightarrow -1$  falls  $u(x, 0) < 0$ .

Wir sehen also eine Entmischung in Bereiche mit Teilchen von Typ 1 und 2. Für längere Zeit geht der Entmischungsprozess dann noch in einem als Vergrößerung bezeichneten Effekt weiter. Reskalieren wir die Zeit mit  $\epsilon^2$ , so haben wir

$$\partial_t u = -\epsilon^{-1} E'(u) = \Delta u - \frac{1}{2\epsilon^2} u(u^2 - 1). \quad (7.16)$$

Nun können wir die Dynamik von Übergängen zwischen  $+1$  und  $-1$  auf dieser Zeitskala studieren. Dazu betrachten wir eine Grenzfläche  $\Gamma(t)$  die durch  $u = 0$  definiert ist und die dazu gehörige Distanzfunktion

$$d(x, t) = \begin{cases} \text{dist}(x, \Gamma(t)) & \text{für } u(x, t) > 0, \\ -\text{dist}(x, \Gamma(t)) & \text{für } u(x, t) < 0. \end{cases}$$

Da der Übergang entsprechend der Diffusion auf einer Längenskala  $\epsilon$  passiert, suchen wir lokal eine Lösung der Form

$$u(x, t) = \Phi(x, \frac{d(x, t)}{\epsilon}, t). \quad (7.17)$$

Zu höchster Ordnung ( $\epsilon^{-2}$ ) gilt

$$\partial_{zz}\Phi - W'(\Phi) = 0. \quad (7.18)$$

Multiplizieren wir mit  $\partial_z\Phi$  und integrieren so folgt

$$\frac{1}{2}(\partial_z\Phi)^2 - W(\Phi) = c(x, t).$$

Für grosse Werte von  $z$  erwarten wir  $\Phi \rightarrow 1$  und  $\partial_z\Phi \rightarrow 0$ , sodass die Integrationskonstante  $c$  gleich Null ist. Da wir per Konstruktion wissen, dass  $\Phi$  monoton in  $z$  ist, erhalten wir

$$\partial_z\Phi = \sqrt{2W(\Phi)} = \sqrt{2}(1 - \Phi^2).$$

Die Lösung dieser Gleichung ist eine Sigmoid-Funktion, die den erwarteten Übergang von  $+1$  nach  $-1$  beschreibt.

Betrachten wir nun die Terme nächster Ordnung ( $\epsilon^{-1}$ ) und erhalten

$$\partial_z\Phi\partial_t d = \partial_z\Phi\Delta d,$$

d.h.

$$\partial_t d = \Delta d$$

auf  $\Gamma(t)$ . Da  $\partial_t d$  die Normalgeschwindigkeit von  $\Gamma(t)$  und  $\Delta d$  die mittlere Krümmung ist, bewegen sich die Grenzflächen entsprechend des mittleren Krümmungsflusses. Dabei verschwinden insbesondere geschlossene Gebiete, die durch  $\Gamma(t)$  begrenzt werden, in endlicher Zeit. Es kommt also zu einer Vergrößerung und man erwartet für lange Zeit nur wenige Bereiche, die alle einen nichtleeren Schnitt mit  $\partial\Omega$  haben.

# Kapitel 8

## Kristallisation

In diesem Abschnitt werden wir uns mit der Modellierung von Kristallisationsprozessen bei mikroskopisch gekörnten Materialien, wie zum Beispiel bei Polymeren oder Stahl beschäftigen. Im Gegensatz zu anderen Materialien gibt es hier einen Übergangsbereich zwischen der festen und der flüssigen Phase, in der sich kleine Körner bilden (auch Kristalle genannt, obwohl meist eher rund) und wachsen. Dieser Bereich passiert zwischen einer Glasübergangstemperatur  $T_g$  und einer Schmelztemperatur  $T_s$ . In Temperaturbereichen über  $T_s$  ist das Material flüssig, wird die Glasübergangstemperatur unterschritten bildet sich aus der flüssigen sofort ein festes Material, das Eigenschaften ähnlich wie Glas hat (insbesondere leicht brüchig). Man kann letzteres leicht beobachten wenn man Kunststoff wie PET stark erwärmt und dann schnell, z.B. in kaltem Wasser, abkühlt. Man erhält dann völlig andere Materialeigenschaften als zuvor, insbesondere bricht der Kunststoff leichter bei geringer Verformung.

Um gute Materialeigenschaften zu erhalten ist es wichtig eine gute Korngrößenverteilung zu erzielen. Dazu schmilzt man bei der Herstellung (und auch beim Recycling) das gesamte Material bei relativ hoher Temperatur, giesst es in die gewünschte Form und kühlt dann auf eine Temperatur  $T \in (T_g, T_s)$  ab, die man danach konstant zu halten versucht. Nun beginnt ein Kristallisationsprozess, d.h. durch zufällige Fluktuationen bilden sich kleine Körner, die ab einer gewissen Grösse stabil werden und dann zu wachsen beginnen. Die zufällige Entstehung von Körnern mit kritischer Grösse nennt man auch Nukleation. Wartet man lange genug ist irgendwann die ganze Form mit solchen Körnern ausgefüllt. Je nach Dichte und Temperatur passieren Nukleation und Wachstum mit verschiedenen Raten und man erhält verschiedene Strukturen, insbesondere verschiedene Verteilung von Korngrößen.

Um diesen Prozess zu modellieren, müssen wir drei Effekte behandeln:

- **Nukleation:** Der erste Schritt ist eine stochastische Modellierung der Nukleation. Dazu gibt es verschiedene mikroskopische Modelle für die Fluktuationen kleiner Cluster, aus denen sich eine Rate mit der ein Korn kritischer Grösse entsteht, im Prinzip berechnen lässt. Die für die makroskopische Modellierung wesentliche Aussage ist jedoch, dass die Nukleation makroskopisch als Poisson Punktprozess in Raum und Zeit modellierbar ist. Dies bedeutet, dass die Nukleation ein Markov-Prozess ist, sodass für ein kleines Volumen  $dV$  und ein kleines Zeitintervall  $dt$  die Wahrscheinlichkeit einer Nukleation gegeben ist durch

$$\mathcal{P}(\text{Nukleation in } dV \times (t, t + dt)) = N |dv| dt, \quad (8.1)$$

mit einer Nukleationsrate  $N$ , die typischerweise abhängig von Temperatur und Dichte

ist (manchmal auch von der Temperaturänderung im Falle sogenannter athermaler Nukleationsprozesse). Da wir Temperatur und Dichte als konstant ansetzen, können wir auch von einer konstanten Nukleationsrate ausgehen.

- **Wachstum:** Auch hier passiert mikroskopisch eine zufällige Anlagerung von Teilchen an die Körner, die jedoch makroskopisch einfach zu behandeln sind. Gehen wir von einer konstanten Dichte aus, so lagert sich an jedem Punkt des Randes ein Teilchen in einem fixen Zeitintervall mit der selben Wahrscheinlichkeit an. In einer makroskopischen Beschreibung des Systems mit sehr vielen Teilchen bedeutet das einfach, dass jedes Korn mit einer Geschwindigkeit  $G$  in Normalenrichtung wächst. Unter der vernünftigen Annahme, dass die kritische Korngrösse sehr klein im Vergleich zur später durch Wachstum erreichten Korngrösse ist, können wir auch von einem punktförmigen Korn bei Nukleation ausgehen, und damit ist ein  $x_0$  zur Zeit  $t_0$  entstandenes Korn, das frei wächst, zur Zeit  $t$  einfach die Kugel mit Mittelpunkt  $x_0$  und Radius  $G(t - t_0)$ .
- *Wachstumsbegrenzung:* Eine zusätzliche Schwierigkeit in der Modellierung ergibt sich daraus, dass die Körner nicht beliebig lange frei wachsen können, sondern irgendwann an benachbarte Körner anstoßen. An der Grenzfläche zwischen den beiden Körnern ist kein Material mehr vorhanden, deshalb wird das Wachstum gestoppt.

Mit den obigen Prinzipien ist es relativ einfach eine stochastische Simulation des Prozesses durchzuführen (auch wenn man für eine saubere statistisch unabhängige Realisierung der Nukleation etwas arbeiten muss). Eine Realisierung eines solchen Prozesses in einem Gebiet  $\Omega$  liefert ein Teilgebiet  $\Sigma(t)$ , das als Zufallsvariable anzusehen ist, die Analyse solcher Prozesse ist deshalb eine grundlegende Frage der stochastischen Geometrie.

Um jedoch Aussagen über makroskopische Eigenschaften zu treffen, ist dieser Ansatz im Allgemeinen zu aufwändig, weshalb direkte Modelle für die makroskopischen Eigenschaften entwickelt wurden. Die ersten Arbeiten dazu entstanden bereits in den 1930er Jahren unabhängig von Avrami und Kolmogorov, weshalb diese auch Avrami-Kolmogorov Theorie genannt werden. Die Grundvariable dieser Ansätze ist der Kristallisationsgrad  $\xi(t)$ , der den zur Zeit  $t$  von Körnern überdeckten Volumensanteil in  $\Omega$  beschreibt. Dieser wird in Bezug gebracht mit dem sogenannten freien Volumen  $V_f(t)$ , d.h. das (erwartete) Volumen das die bei Körner bei völlig unabhängiger Nukleation und unbeschränktem Wachstum zur Zeit  $t$  einnehmen würden. Im Gegensatz zu  $\xi$  ist das freie Volumen  $V_f$  quasi direkt berechenbar. Dazu müssen wir nur (unter der Konvention dass der Prozess zur Zeit  $t = 0$  beginnt)

$$\begin{aligned} V_f(t) &= \frac{1}{|\Omega|} \int_0^t \int_{\Omega} (\text{Volumen von Korn entstanden bei } x \text{ zur Zeit } s) \mathcal{P}(\text{Nukleation in } dV(x) \times (s, s + dt)) \\ &= \frac{1}{|\Omega|} \int_0^t \int_{\Omega} \frac{4\pi}{3} G^3 (t-s)^3 N \, dx \, dt \end{aligned}$$

berechnen und erhalten somit

$$V_f(t) = \frac{\pi}{3} G^3 N t^4. \quad (8.2)$$

Nun stellt sich die Frage, wie man das freie Volumen am besten mit dem Kristallisationsgrad in Verbindung bringen kann. Dazu gibt es in der Ingenieursliteratur bis heute einige, zum Teil recht kuriose Vorschläge. Der richtige Ansatz wurde jedoch bereits von Avrami formuliert, nämlich

$$\xi'(t) = (1 - \xi(t)) V'_f(t). \quad (8.3)$$

Die Idee dahinter ist, dass sich das tatsächliche Volumen dort wo noch keine Körner sind genauso ändert wie das freie Volumen, während sich der Kristallisationsgrad in den belegten Bereichen nicht weiter ändert. Deshalb ist der Vergleich zwischen  $\xi'$  und  $V'_f$  naheliegend und der Faktor  $(1 - \xi)$  ist genau der unbedeckte Volumensanteil. Mit der oft auch Avrami-Formel genannten Beziehung (8.3) lässt sich der Kristallisationsgrad durch Lösen einer gewöhnlichen Differentialgleichung berechnen, wir erhalten

$$\frac{d}{dt} \log(1 - \xi(t)) = -V'_f(t)$$

und damit wegen  $\xi(0) = 0$

$$\xi(t) = 1 - e^{-\frac{\pi}{3} G^3 N t^4}. \quad (8.4)$$

Wir werden diese Formel im Folgenden über einen systematischeren Ansatz herleiten, nämlich unter Betrachtung des sogenannten *kausalen Kegels*. Letzterer entspricht der Umkehrung des Wachstumskegels, d.h. für eine Nukleation bei  $x_0$  zur Zeit  $t_0$  ist das weiter wachsende Korn durch

$$K_{\text{Wachstum}}(y, s) = \cup_{t \geq s} \{ x \mid |x - y| \leq G(t - s) \}$$

gegeben. Wie schon bei der Herleitung von Diffusionsgleichungen ist auch bei diesem Wachstumsprozess ist auch hier eine Umkehrung der Zeitrichtung nützlich. Wir fragen uns also unter welchen Umständen der Punkt  $x$  zur Zeit  $t$  von einem Korn überdeckt ist und definieren

$$K_{\text{Kausal}}(x, t) = \{ (y, s) \mid (x, t) \in K_{\text{Wachstum}}(y, s) \} = \cup_{s \leq t} \{ y \mid |y - x| \leq G(t - s) \}.$$

Die Betrachtung des kausalen Kegels ist eine elegante Möglichkeit das Problem mit den Überdeckungen zu umgehen. Wir müssen nun nicht mehr unterscheiden ob das Wachstum irgendwelcher Körner gestoppt wurde, da wir wissen das genau dann  $x$  zur Zeit  $t$  überdeckt ist, sobald zumindest eine Nukleation im kausalen Kegel stattgefunden hat. Noch einfacher zu betrachten ist das Gegenereignis, d.h. wir wissen auch das  $x$  zur Zeit  $t$  nicht überdeckt ist, genau dann wenn im kausalen Kegel keine Nukleation stattgefunden hat. Wir können auch die Markov-Eigenschaft verwenden und den kausalen Kegel schreiben als disjunkte Vereinigung

$$\begin{aligned} K_{\text{Kausal}}(x, t + dt) &= K_{\text{Kausal}}(x, t) \cup \{ (y, s) \mid G(t - s) \leq |x - y| \leq G(t + dt - s) \} \\ &\cup \{ (y, s) \mid s \in (t, t + dt], |x - y| \leq G(t + dt - s) \} \end{aligned}$$

Keine Nukleation in  $K_{\text{Kausal}}(x, t + dt)$  hat nur dann stattgefunden, wenn keine Nukleation in  $K_{\text{Kausal}}(x, t)$  und in den beiden restlichen Mengen, die wir im Folgenden  $A$  und  $B$  nennen, stattgefunden hat. Damit folgt

$$1 - \xi(t + dt) = (1 - \xi(t)) \mathcal{P}(\text{keine Nukleation in } A) \mathcal{P}(\text{keine Nukleation in } B), \quad (8.5)$$

bzw.

$$\frac{(1 - \xi(t + dt)) - (1 - \xi(t))}{dt} = (1 - \xi(t)) \frac{\mathcal{P}(\text{keine Nukleation in } A) \mathcal{P}(\text{keine Nukleation in } B) - 1}{dt}.$$

Wegen des infinitesimalen Volumens von  $A$  und  $B$  folgt weiter

$$\mathcal{P}(\text{keine Nukleation in } A) = 1 - \mathcal{P}(\text{Nukleation in } A) = 1 - \int_0^t (4\pi G^3 (t-s)^2 dt) ds = \frac{4\pi}{3} G^3 t^3 dt$$

und

$$\mathcal{P}(\text{keine Nukleation in B}) = 1 - \mathcal{P}(\text{Nukleation in B}) = 1 - N \frac{\pi}{3} G^3 dt^4.$$

Ignorieren wir nun Terme höherer Ordnung in  $dt$ , so folgt

$$\frac{d}{dt}(1 - \xi(t)) = -\frac{4\pi}{3} G^3 t^3 = -V'_f(t), \quad (8.6)$$

wir haben also die Avrami-Formel hergeleitet.

## 8.1 Materialeigenschaften

Die Beschreibung durch den Kristallinitätsgrad ist nützlich um das Fortschreiten des Prozesses zu simulieren, bietet jedoch wenig Information über die Morphologie des am Ende entstandenen Materials, wenn der Prozess lange genug dauert erwarten wir ja einfach  $\xi \approx 1$ . Wesentlich mehr Information dazu bietet etwa die Dichte der Korngrenzen, in der stochastischen Geometrie auch *Kontaktdichte* genannt. Wenn wir davon ausgehen, dass die ganze Form am Ende mit Körnern gefüllt ist, dann sind die Korngrenzen genau der Rand von  $\Omega$  und die jeweiligen Überschneidungen von Körnern. Klarerweise ist die Kontaktdichte umso höher, umso kleiner die Körner sind. Ignorieren wir den trivialen Anteil durch  $\partial\Omega$ , so ist die Kontaktdichte gegeben als die erwartete Oberfläche der Korngrenzen im Gebiet normiert mit dem Volumen von  $\Omega$ . Um zu komplizierte geometrische Betrachtungen zu vermeiden, beschränken wir uns im Folgenden auf den eindimensionalen Fall, hier ist entsprechend  $V_f(t) = NGt^2$ . Die lokale Kontaktdichte ist dann

$$\rho(x, t) dx = \frac{1}{|\Omega|} \mathcal{P}(\text{Korngrenze in } (x - dx, x + dx)). \quad (8.7)$$

Zur Bestimmung der Kontaktdichte können wir analog wie beim kausalen Kegel vorgehen. Ein Punkt  $x$  gehört zu einer Korngrenze, wenn für eine Zeit  $t$  dort zwei Körner aufeinandergetroffen sind. Dies bedeutet es gab zumindest zwei unterschiedliche Nukleationen im Mantel

$$\partial K_{\text{Kausal}}(x, t) = \cup_{s \leq t} \{ y \mid |y - x| = G(t - s) \}$$

des kausalen Kegels. Wir wählen nun  $dx = G dt$  und berechnen

$$\rho(x, t + dt) dx = \rho(x, t) dx + \frac{1}{|\Omega|} \mathcal{P}(x \text{ nicht überdeckt zur Zeit } t) \mathcal{P}(2 \text{ disjunkte Nukleationen in } C(x, t)),$$

wobei

$$C(x, t) = \{ (y, s) \mid G(t - s) \leq |y - x| \leq G(t - s + 2dx) \}.$$

Wir erhalten nach der Definition von  $\xi$

$$\mathcal{P}(x \text{ nicht überdeckt zur Zeit } t) = (1 - \xi(t)) |\Omega|.$$

Im eindimensionalen passieren zwei disjunkte Nukleationen wenn eine für  $y < x - G(t - s)$  und eine für  $y > x + G(t - s)$  auftritt, also ist

$$\mathcal{P}(2 \text{ disjunkte Nukleationen in } C(x, t)) = \left( \int_0^t (2NG dt) ds \right)^2 = 4N^2 G^2 t^2 (dt)^2.$$

Damit ist wieder

$$\partial_t \rho(x, t) G dt^2 = (1 - \xi(t)) 4N^2 G^2 t^2 (dt)^2,$$

also

$$\partial_t \rho = 4N^2 G e^{-NGt^2} t^2. \quad (8.8)$$

# Kapitel 9

## Märkte und Stochastische Differentialgleichungen

### 9.1 Langevin Gleichungen - Wiener Prozesse

In diesem Abschnitt werden wir erneut Diffusionsgleichungen und Fokker-Planck Gleichungen herleiten, dieses Mal jedoch mit einem etwas anderen Ansatz. Wir verwenden dazu kein Gitter, sondern betrachten direkt einen stochastischen Prozess basierend auf der Zufallsvariable  $W : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ . Dabei spezifizieren wir eine Verteilung für die Updates von  $W$ . Für kleine Zeitschritte  $\tau$  soll der Unterschied  $W(t+\tau) - W(t)$  bis auf Terme höherer Ordnung in  $\tau$  normalverteilt mit Mittelwert 0 und Varianz  $\tau$ . Dazu nehmen wir natürlich wieder eine Markov-Eigenschaft an. Man beachte dabei, dass die Varianz eine quadratische Variable ist, die Standardabweichung wächst damit mit  $\sqrt{\tau}$ . Der Grenzwert der Zufallsvariable für  $\tau \rightarrow 0$  ist sehr irregulär, eine sogenannte *Brown'sche Bewegung* bzw. *Wiener Prozess*.

Wir betrachten wiederum die Wahrscheinlichkeitsdichte von  $W(t)$ , bezeichnet durch  $\rho(x, t)$ , wobei  $\rho(x, t)dxdt$  der Wahrscheinlichkeit entspricht, dass  $W$  im Zeitintervall  $(t, t+dt)$  im Intervall  $(x, x+dx)$  ist. Es gilt dann

$$\rho(x, t + \tau) = \int_{\mathbb{R}} \rho(y, t) \frac{1}{\sqrt{2\pi\tau}} e^{-\frac{(x-y)^2}{2\tau}} dy + \mathcal{O}(\tau^{3/2}), \quad (9.1)$$

da wir alle  $y$  und die Wahrscheinlichkeit einer Änderung von  $y$  nach  $x$  betrachten müssen. Um eine Formel im Grenzwert zu erhalten, führen wir eine Variablentransformation von  $y$  zu  $z = \frac{y-x}{\sqrt{\tau}}$  durch. Es gilt dann

$$\rho(x, t + \tau) = \int_{\mathbb{R}} \rho(x + \sqrt{\tau}z, t) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{z^2}{2}} dz + \mathcal{O}(\tau^{3/2}).$$

Da  $\tau$  klein ist, können wir wieder eine Taylor-Entwicklung durchführen. Dies ist deshalb gerechtfertigt, da wir eigentlich nur  $z$  der Ordnung eins (genauer der Ordnung  $\sqrt{-\log \tau} \ll \frac{1}{\sqrt{\tau}}$ ) betrachten müssen, für grosse  $z$  fällt der exponentielle Term  $e^{-\frac{z^2}{2}}$  schnell genug ab. Also

gilt

$$\begin{aligned}\rho(x, t + \tau) &= \int_{\mathbb{R}} \rho(x, t) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{z^2}{2}} dz + \\ &\quad \int_{\mathbb{R}} \partial_x \rho(x, t) \sqrt{\tau} z \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{z^2}{2}} dz + \\ &\quad \int_{\mathbb{R}} \partial_{xx} \rho(x, t) \frac{\tau z^2}{2} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{z^2}{2}} dz + \mathcal{O}(\tau^{3/2}).\end{aligned}$$

Diese Identität lässt sich über die Momente einer Standard-normalverteilten Zufallsvariable  $Z$  ausdrücken:

$$\rho(x, t + \tau) = \rho(x, t) E[Z^0] + \partial_x \rho(x, t) E[Z^1] \sqrt{\tau} + \partial_{xx} \rho(x, t) E[Z^2] \frac{\tau}{2} + \mathcal{O}(\tau^{3/2}).$$

Für eine Standard-Normalverteilung gilt

$$E[Z^0] = 1, \quad E[Z^1] = 0, \quad E[Z^2] = 1.$$

Also erhalten wir (mit Taylor-Entwicklung in  $t$

$$\rho(x, t) + \partial_t \rho(x, t) \tau = \rho(x, t) + \partial_{xx} \rho(x, t) \frac{\tau}{2} + \mathcal{O}(\tau^{3/2}),$$

also im Grenzwert wiederum die Diffusionsgleichung

$$\partial_x \rho = \frac{1}{2} \partial_{xx} \rho. \tag{9.2}$$

Die Normalverteilung der Abstände ist ein klassisches Modell für molekulare Bewegung - die sogenannte Brown'sche Bewegung. Im realistischeren Fall modelliert man solche mit den Newton'schen Bewegungsgleichungen, dabei entsteht eine Störung des externen Kraftfelds durch Temperatur-abhängige Bewegung und eine Dämpfung. Man hat dann formal

$$\frac{dx}{dt} = v, \quad \frac{dv}{dt} = F(x) - \lambda v + \sqrt{D} \frac{dW}{dt}, \tag{9.3}$$

bzw. als Grenzwert in der Langzeit-Skalierung

$$\frac{dx}{dt} = -\frac{1}{\lambda} \left( F(x) + \sqrt{D} \frac{dW}{dt} \right). \tag{9.4}$$

Die Schreibweise  $\frac{dW}{dt}$  ist dabei problematisch, da  $W$  eben nicht differenzierbar ist. Die Updates von  $W$  verhalten sich ja eher wie die Standardabweichung, für den Differenzenquotienten wäre dann mit hoher Wahrscheinlichkeit

$$\frac{W(t + \tau) - W(t)}{\tau} \sim \frac{1}{\sqrt{\tau}}$$

zu erwarten. Deshalb verwendet man eher die Schreibweise

$$dX = a(X, t) dt + b(X, t) dW \tag{9.5}$$

und nennt (9.5) eine *stochastische Differentialgleichung*. Die Theorie stochastischer Differentialgleichungen ist sehr ähnlich zu der gewöhnlicher Differentialgleichungen, es gelten analoge

Aussagen wie z.B. der Satz von Picard-Lindelöf (wenn  $a$  und  $b$  Lipschitz-stetig sind). Die technische Schwierigkeit besteht dabei nur die Lösung nicht mehr als Funktion von  $\mathbb{R}$  nach  $\mathbb{R}_+$  zu betrachten, sondern als Zufallsvariable auf  $\mathbb{R}_+$ . Da eine Normalverteilung (und damit auch der Wiener Prozess) symmetrisch um Null ist, würden wir bei Änderung des Vorzeichens die selbe Lösung erhalten. Deshalb kann man ohne Einschränkung der Allgemeinheit annehmen, dass  $b \geq 0$  gilt.

Wie bei gewöhnlichen Differentialgleichungen möchte man auch bei stochastischen Differentialgleichungen oft die Evolution von Funktionalen der Lösung, d.h.  $\phi(X(t), t)$  mit  $\phi : \mathbb{R} \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$  betrachten. Dazu benötigt man ein Analogon der Kettenregel, das sogenannte *Ito-Lemma*. Um dieses herzuleiten betrachten wir (unter der Annahme, dass  $\phi$  glatt ist) den Update

$$\begin{aligned}\phi(X(t + \tau), t + \tau) - \phi(X(t), t) &= \partial_t \phi(X(t), t) \tau + \partial_x \phi(X(t), t)(X(t + \tau) - X(t)) \\ &\quad + \partial_{xx} \phi(X(t), t) \frac{(X(t + \tau) - X(t))^2}{2} + \\ &\quad \partial_t \phi(X(t), t) + \mathcal{O}(\tau^{3/2}),\end{aligned}$$

wobei wir für das Restglied wieder verwendet haben, dass sich der Update wie die Standardabweichung verhält. Setzen wir nun noch die stochastische Differentialgleichung ein, so gilt

$$\begin{aligned}\phi(X(t + \tau), t + \tau) - \phi(X(t), t) &= \partial_t \phi(X(t), t) \tau \\ &\quad + \partial_x \phi(X(t), t)(a(X(t), t) \tau + b(x, t)(W(t + \tau) - W(t))) + \\ &\quad \partial_{xx} \phi(X(t), t) \frac{(a(X(t), t) \tau + b(x, t)(W(t + \tau) - W(t)))^2}{2} + \\ &\quad \mathcal{O}(\tau^{3/2}) \\ &= (\partial_t \phi(X(t), t) + \partial_x \phi(X(t), t)a(X(t), t) + \\ &\quad \partial_{xx} \phi(X(t), t)b(X(t), t)^2 \frac{(W(t + \tau) - W(t))^2}{2\tau})\tau + \\ &\quad \partial_x \phi(X(t), t)b(X(t), t)(W(t + \tau) - W(t)) + \mathcal{O}(\tau^{3/2})\end{aligned}$$

In der letzten Formel haben wir oben die Terme erster Ordnung in  $\tau$  gesammelt und unten den Term von Ordnung  $\tau^{1/2}$ . Dieser letzte Term macht keine Schwierigkeiten, da er im Grenzwert einfach ein Vielfaches eines Wiener-Prozesses  $dW$  wird. Es bleibt nur noch der Grenzwert von  $\frac{(W(t+\tau)-W(t))^2}{\tau} \approx \frac{dW^2}{dt}$  zu verstehen. Der Erwartungswert dieses Terms ist genau die Varianz einer Standard-Normalverteilung, also gleich eins. Die Standardabweichung dieses Terms ist wieder von der Ordnung  $\sqrt{\tau}$  und da er auch noch mit  $\tau$  multipliziert wird, sind die stochastischen Effekte von der Ordnung  $\mathcal{O}(\tau^{3/2})$ . Es erscheint daher gerechtfertigt, diese im Vergleich zum zweiten stochastischen Term (mit Standardabweichung  $\sqrt{\tau}$ ) und den deterministischen Termen der Ordnung  $\tau$  zu vernachlässigen. Formal haben wir also  $dW^2 = dt$  und dies liefert die *Ito-Formel*

$$\begin{aligned}d\phi(X(t), t) &= (\partial_t \phi(X(t), t) + \partial_x \phi(X(t), t)a(X(t), t) + \partial_{xx} \phi(X(t), t) \frac{b(X(t), t)^2}{2})dt + \\ &\quad \partial_x \phi(X(t), t)b(X(t), t)dW.\end{aligned}\tag{9.6}$$

In der Finanzmathematik verwendet man typischerweise *geometrische Brown'sche Bewegungen* der Form

$$dX = \mu X dt + \sigma X dW\tag{9.7}$$

um die Entwicklung eines Aktienwerts (zumindest für relativ kurze Zeit) zu modellieren. Dabei ist zu beachten, dass Drift und Diffusion von  $X$  abhängen, d.h. sowohl Schwankungen als auch deterministische Änderungen steigen mit  $X$ . Ein positiver Nebeneffekt dieser Modellierung ist, dass der Wert  $X$  immer positiv bleibt - auch bei sehr grossen negativen Schwankungen des Wiener Prozesses. Der Drift entspricht dem einfachen deterministischen Fall einer Verzinsung

$$dX = rXdt, \quad (9.8)$$

mit Zinsrate  $r > 1$ . Der Faktor  $\sigma$  wird üblicherweise als *Volatilität* bezeichnet, und ist ein Maß für die typischen Schwankungen einer Achse. Die Schätzung der Volatilität aus Daten ist ein wichtiger Aspekt in der Praxis, um das Risiko beim Kauf einer Aktie bewerten zu können. Ein typisches Funktional von  $X(t)$ , das man in diesem Zusammenhang betrachtet, ist der Wert von Derivaten wie Optionen auf diese Aktie, deren Modellierung wir noch genauer diskutieren werden.

Die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Lösung einer stochastischen Differentialgleichung der Form (9.7) kann wiederum über eine Drift-Diffusionsgleichung der Form

$$\partial_t \rho = -\partial_x(a\rho) + \partial_x x \left( \frac{b^2}{2} \rho \right) \quad (9.9)$$

berechnet werden. Man beachte dabei, dass der resultierende Diffusionskoeffizient immer positiv (oder gleich null im deterministischen Fall) ist - eine wichtige Eigenschaft für die sinnvolle Lösbarkeit einer Diffusionsgleichung. Mit einfachen Transformationen kann (9.9) wieder als Fokker-Planck Gleichung geschrieben werden.

Für den Anfangswert zur Zeit  $t = 0$  ist zu unterscheiden, ob der Anfangswert von  $X$  zufällig oder deterministisch gewählt wurde. Im zufälligen Fall ist  $\rho(x, 0) = \rho_0(x)$ , wobei  $\rho_0$  die Wahrscheinlichkeitsdichte für den Anfangswert angibt. Im deterministischen Fall  $X(0) = x_0$  ist  $\rho(x, 0) = \delta(x - x_0)$ . Da aber bei einer Normalverteilung auch beliebig grosse Änderungen eine positive Wahrscheinlichkeit haben, gilt dennoch  $\rho(x, t) > 0$  für alle  $x$ , sobald  $t > 0$  ist (unter der Annahme, dass  $b \neq 0$  gilt). Durch die Glättungseigenschaften einer Diffusionsgleichung existiert für  $t > 0$  auch immer eine beschränkte Wahrscheinlichkeitsdichte. Am einfachsten ist dies wieder im Fall der Brown'schen Bewegung zu sehen. Dort erhält man bei deterministischem Anfangswert die Fundamentallösung

$$\rho(x, t) = \mathcal{F}(x, t; x_0) := \frac{1}{\sqrt{2\pi t}} e^{-(x-x_0)^2/2t}. \quad (9.10)$$

Im Fall eines stochastischen Anfangswert erhält man die Überlagerung der Fundamentallösung mit der Wahrscheinlichkeit für den jeweiligen Anfangszustand als Lösung, d.h.

$$\rho(x, t) = \int_{\mathbb{R}} \mathcal{F}(x, t; x_0) \rho_0(x) dx. \quad (9.11)$$

## 9.2 Der Wert einer Option: Das Black-Scholes Modell

In diesem Abschnitt werden wir die obige Modellierung von Diffusionsprozessen auf die Bewertung von Optionen anwenden. Eine Option ist ein Recht eine Aktie zu einem gewissen Zeitpunkt  $T$  zu einem gewissen Preis  $K$  (Strike-Preis) zu kaufen (Call-Option) oder zu verkaufen (Put-Optionen). Es stellt sich dabei die Frage wieviel man zu einer gewissen Zeit  $t$

abhängig vom aktuellen Preis der zugrunde liegenden Aktie (Underlying)  $X(t)$  für eine Option bezahlen sollte? Dies bezeichnet man als Wert  $u(X(t), t)$  der Option. Wir betrachten hier den einfachsten Fall einer europäischen Call-Option. Dabei kann man wirklich nur zum Zeitpunkt  $T$  kaufen und wird die Kaufentscheidung von folgender Überlegung abhängig machen:

- Ist  $K < S(t)$  so kann man die Option ausüben, die Aktie zum Preis  $K$  kaufen und könnte sie sofort wieder zum Marktwert  $S(t)$  verkaufen. Damit hat man einen Gewinn von  $S(t) - K$ .
- Ist  $K \geq S(t)$  wird man die Option nicht ausüben, dann man würde die Aktie auf dem Markt ja günstiger erhalten.

Es gibt noch verschiedene andere Optionen (Amerikanische, Asiatische ...), die sich durch den Ausübungsmechanismus unterscheiden. So kann etwa man bei einer amerikanischen Option die Aktie auch schon zu jeder beliebigen Zeit  $t < T$  kaufen (early Exercise).

Aus der obigen Überlegung erhalten wir den Wert der Option zum Zeitpunkt  $T$  als

$$u(S, T) = \max\{S - K, 0\}. \quad (9.12)$$

Um den Wert der Aktie für  $t < T$  zu bestimmen, konstruieren wir ein Portfolio aus einer Call-Option und einer (eventuell negativen) Anzahl von Aktien (des Underlyings). Damit ist der Wert des Portfolios zum Zeitpunkt  $t$  gegeben durch

$$\Pi = u(X(t), t) - \alpha X(t).$$

Wir nehmen an, dass  $X(t)$  wie oben durch eine geometrische Brown'sche Bewegung gegeben ist. Um die Veränderung des Werts in der Zeit zu berechnen, verwenden wir Ito's Lemma (9.6) und erhalten

$$\begin{aligned} d\Pi &= dU - \alpha dX \\ &= (\partial_t u + \mu x \partial_x u + \frac{\sigma^2 x^2}{2} \partial_{xx} u - \alpha \mu x) dt + (\partial_x u - \alpha) \sigma x \, dW. \end{aligned}$$

Wir sehen, dass für  $\alpha = \partial_x$  der stochastische Teil wegfällt. In diesem Fall ist  $\Pi$  ein Portfolio ohne Risiko, und man nimmt üblicherweise an, dass sich ein Portfolio ohne Risiko wie ein Sparbuch verhält, d.h. einfach mit dem Zinssatz  $r$  verzinst wird (Vollständige Markt Hypothese). Also folgt

$$\partial_t u + \frac{\sigma^2 x^2}{2} \partial_{xx} u) dt = d\Pi = r\Pi dt = r(u - \partial_x u x) dt,$$

und wir erhalten die Black-Scholes Gleichung für die Bewertung einer europäischen Option

$$\partial_t u = -\frac{\sigma^2 x^2}{2} \partial_{xx} u - rx \partial_x u + ru. \quad (9.13)$$

Man beachte, dass die Lösung nicht vom Drift  $\mu$  abhängt, sondern nur von der Volatilität  $\sigma$  und der Zinsrate  $r$ . In diesem Fall haben wir einen negativen Diffusionskoeffizienten erhalten, allerdings ist zu beachten, dass wir für den Optionswert einen End- und keinen Anfangswert zur Verfügung haben. Durch eine Transformation der Zeit zu  $s = T - t$  erhalten wir

$$\partial_s u = \frac{\sigma^2 x^2}{2} \partial_{xx} u + rx \partial_x u - ru. \quad (9.14)$$

mit dem Anfangswert  $u(x, 0) = \max\{x - K, 0\}$ .

Auch in diesem Fall benötigen wir Randbedingungen. Zunächst erscheint klar, dass  $u(0, t) = 0$  gelten sollte, da eine Option auf eine wertlose Aktie ebenfalls keinen Wert haben kann (man beachte dass dann nach dem Optionsmodell auch  $dX = 0$  gilt). Für sehr grosse Werte von  $X(t) \gg K$  ist es sehr wahrscheinlich, dass man einen Gewinn bei Ausübung der Option erhalten wird, man rechnet also mit  $u(X, t) \sim X - K$  für  $X \rightarrow \infty$  bzw. mit  $\partial_x u(x, t) \rightarrow 1$  für  $x \rightarrow \infty$ .

# Literaturverzeichnis

- [1] G.Allaire, F.Golse, *Transport et diffusion*, Lecture Notes, Ecole Polytechnique, 2010.
- [2] G.Bao, L.Cowsar, W.Masters, eds., *Mathematical Modeling in Optical Science*, SIAM, Philadelphia, 2001.
- [3] J.W.Barrett, H.Garcke, R.Nürnberg, *Numerical computations of faceted pattern formation in snow crystal growth*, Physical Review E 86 (2012), 011604.
- [4] D.Benson, *Music: A Mathematical Offering*, Cambridge University Press, 2006
- [5] X.Blanc, C.Le Bris, P.L.Lions, *From molecular models to continuum mechanics*, Arch. Ration. Mech. Anal. **164** (2002), 341-381.
- [6] H.J.Bungartz, S.Zimmer, M.Buchholz, D.Pflüger, *Modellbildung und Simulation: Eine anwendungsorientierte Einführung*, Springer, Heidelberg, 2009.
- [7] C.Cercignani, *Mathematical Methods in Kinetic Theory*, Plenum Press, New York, 1990.
- [8] C.Cercignani, *The Boltzmann Equation and its Applications*, Springer, New York 1988.**M-FH: 11862**
- [9] C.Cercignani, R.Illner, M.Pulvirenti, *The Mathematical Theory of Dilute Gases*, Springer, New York, 1994.
- [10] A.J.Chorin, J.E.Marsden, *A Mathematical Introduction to Fluid Mechanics* (Springer, New York, 1979).
- [11] C.Eck, H.Garcke, P.Knabner, *Mathematische Modellierung*, Springer, Berlin, 2008.
- [12] L. Edelstein-Keshet, *Mathematical Models in Biology*, McGraw Hill, New York, 1988.
- [13] A.Friedman, W.Littman, *Industrial Mathematics: A Course in Solving Real-World Problems* (SIAM, Philadelphia, 1994).
- [14] A.Friedman, D.Ross, *Mathematical Models in Photographic Science*, Springer, Berlin, 2003.
- [15] H.Garcke, *Einführung in die Mathematische Modellierung* (Vorlesungsskript, Universität Regensburg, 2002).
- [16] F.Golse, *On the mean-field limit for large particle systems*, Journees E.D.P. Forges-les-Eaux, Univ. de Nantes, 2003.

- [17] F.Hausser, Y.Luchko, *Mathematische Modellierung mit MATLAB: Eine praxisorientierte Einführung*, Spektrum Verlag, Heidelberg, 2010.
- [18] D.Helbing, *Traffic and related self-driven many-particle systems*, Reviews of Modern Physics 73, 1067-1141.
- [19] D.Helbing, I.Farkas, T.Vicsek, *Simulating dynamical features of escape panic*, Nature 407 (2000), 487-490.
- [20] R.Illner, *Mathematical Modelling: A Case Studies Approach*, SIAM, Providence, 2005.
- [21] D.S.Jones, *Acoustic and Electromagnetic Waves*, Clarendon Press, Oxford, 1986.
- [22] C.C.Lin, L. A. Segel, *Mathematics Applied to Deterministic Problems in the Natural Sciences*, MacMillan, New York, 1974.
- [23] P.L.Lions, *Mathematical Topics in Fluid Mechanics 1: Incompressible Models*, Oxford University Press, Oxford, 1996.
- [24] P.L.Lions, *Mathematical Topics in Fluid Mechanics 2: Compressible Models*, Oxford University Press, Oxford, 1998.
- [25] A.McAdams, S.Osher, J.Teran, *Crashing Waves, Awesome Explosions, Turbulent Smoke and Beyond: Applied Mathematics and Scientific Computing in the Visual Effects Industry*, Notices of the AMS 57 (2010), 614-623.
- [26] A.McAdams, K.Ward, E.Sifakis, A.Selle, J.Teran, *Detail Preserving Continuum Hair Simulation*, ACM Transactions on Graphics (SIGGRAPH 2009), 28(3), pp.385-392, 2009.
- [27] N.Parolini, A.Quarteroni, *Modelling and Numerical Simulation for Yacht Engineering*, Proceedings of the 26th Int. Symp. On Naval Hydrodynamics, published by Strategic Analysis, Inc., Arlington, VA, USA, 2007.
- [28] A.Quarteroni, *Mathematics in the Wind*, SIAM series WhyDoMath, 2008, <http://dev.whydomath.org/node/americascup/index.html>
- [29] A.Quarteroni, *Mathematics for Sports*, Zurich Intelligencer, International Congress on Industrial and Applied Mathematics, Zurich 2007.
- [30] B.Perthame, *Growth, reaction, movement and diffusion from biology*, Lecture Notes, University Paris 6, 2012.
- [31] B.Perthame, *Transport Equations in Biology*, Birkhäuser, Frontiers in Mathematics 2007.
- [32] R.Pinna, *Numerische Strömungsmechanik* (Vorlesungsskript, TU Darmstadt, 2002).
- [33] L.A.Segel, *Simplification and scaling*, SIAM Review 14 (1972), 547-571.
- [34] A.B.Taylor, *Mathematical Models in Applied Mechanics*, Clarendon Press, Oxford, 1986.
- [35] W.Weidlich, *Sociodynamics: A Systematic Approach to Mathematical Modelling in the Social Sciences*, Harwood Academic Publishers, Amsterdam, 2000.