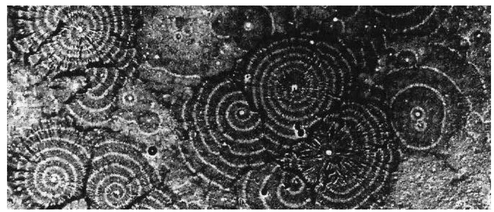
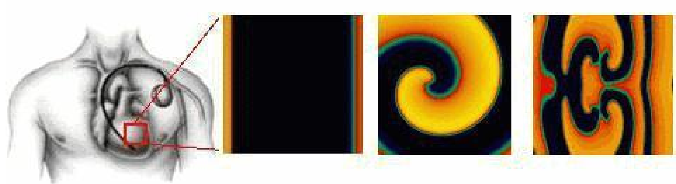
# Entstehen und Vergehen von Strukturen durch Flüsse und Quellen

## Mathematische Modellierung mit Differentialgleichungen





Prof. Dr. Michael Böhm, Prof. Dr. Alfred Schmidt

Universität Bremen

Zentrum für Technomathematik

# Diskrete und kontinuierliche Modelle

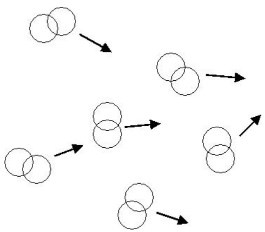
Viele Phänomene in der Natur behandeln das Verhalten von einer großen Anzahl individueller Objekte, die miteinander interagieren.

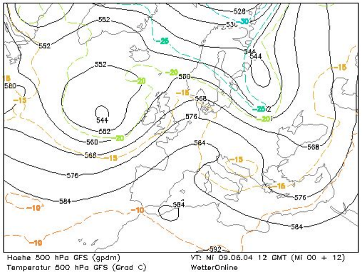
**Beispiele:**

## Meteorologie:

Interaktion von Luft- (Sauerstoff, Stickstoff, ...) und Wassermolekülen

Wettervorhersagemodelle beinhalten nur gemittelte Größen wie Temperatur, Druck, Feuchtigkeit, Windgeschwindigkeit



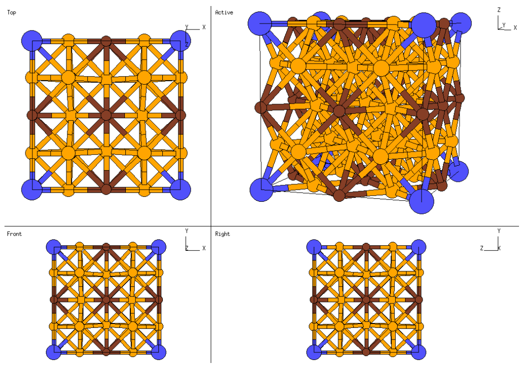


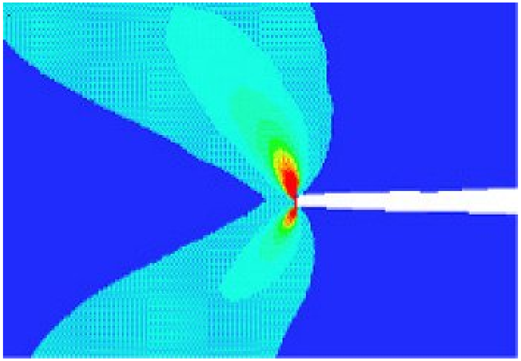

Luft-Moleküle — Wetterkarte mit Isobaren

## Bauwesen:

Bindungskräfte zwischen einzelnen Atomen

interessant sind elastisches Verhalten und Belastbarkeit von Materialien (z.B. Stahl, Beton)



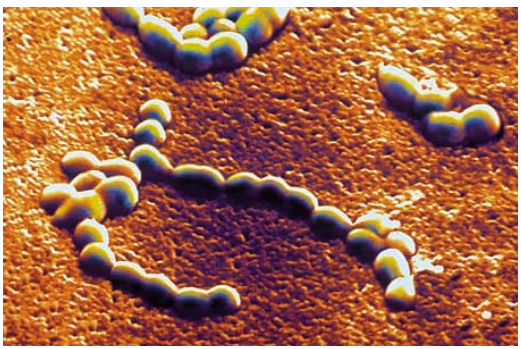



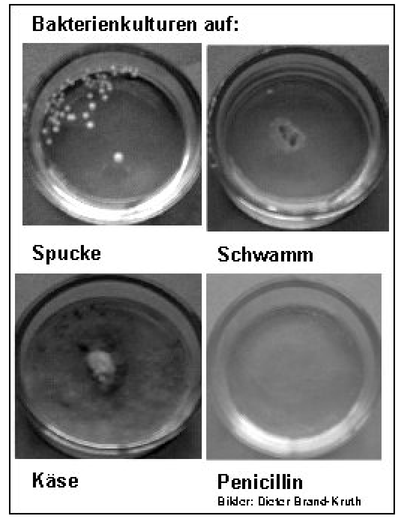
Kristallgitter Stahl — Bruch mit inneren Spannungen

## Biologie

Wachstum und Bewegung einzelner Individuen (z.B. Bakterien)

Entwicklung und Ausbreitung ganzer Populationen (Kulturen), Räuber-Beute-Modelle, ...






einzelne Bakterien — Petrischalen mit Kolonien

## Verkehr

Verhalten einzelner Autos bzw. Fahrer

Interessant ist Entstehung bzw. Vermeidung von Staus (mit vielen Fahrzeugen)


**Ziel:**

Betrachtung gemittelter Größen über viele benachbarte Objekte, also makroskopische / kontinuierliche Größen

Modelle / Theorien für gemittelte Dichte (von Individuen) und deren Veränderung, zugehörige Flüsse (Bewegung)

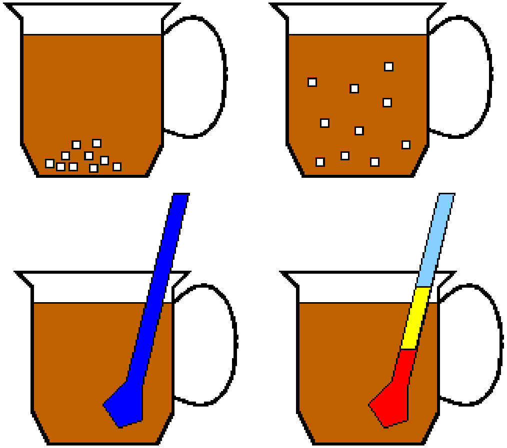
# Dichten und Flüsse

Einfachste kontinuierliche Modelle beinhalten eine Dichte, einen Flussvektor und ein Bilanzgesetz.

Wir betrachten im folgenden im Ort aufgelöste Größen,
die sich in der Zeit verändern können

Warum ist das sinnvoll/nötig?
Beispiele:

- Zucker im Kaffee (Konzentration)

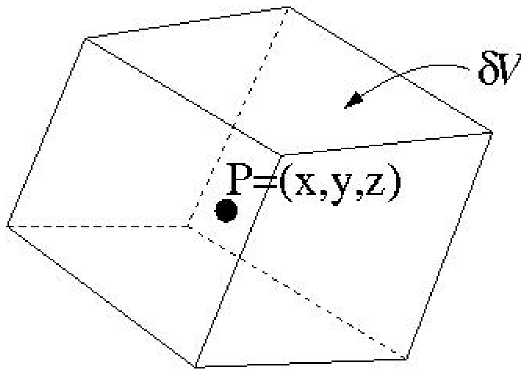


- Temperatur im Kaffeelöffel
  oder Kochtopf (Wärmedichte)

anschaulich am einfachsten: Massendichte

Massendichte („Dichte“ eines physikalischen Materials)

Zu einem Punkt $\boldsymbol{P = (x, y, z)}$ im Raum betrachten wir ein (kleines) Volumenelement $\boldsymbol{\delta V}$ um $\boldsymbol{P}$ (zum Beispiel einen kleinen Würfel)

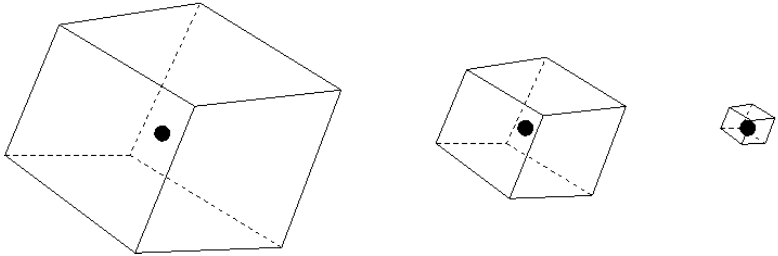



Volumenelement $\boldsymbol{\delta V}$ um $\boldsymbol{P}$

Die mittlere Massendichte $\boldsymbol{\rho}$ in $\boldsymbol{\delta V}$ zur Zeit $\boldsymbol{t}$ ergibt sich als die in $\boldsymbol{\delta V}$ eingeschlossene Masse (prop. Anzahl der Moleküle), dividiert durch das Volumen $|\boldsymbol{\delta V}|$ des Volumenelements:

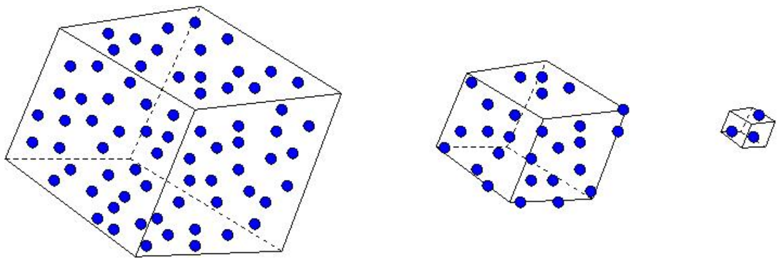
$$\boldsymbol{\rho(\delta V, t)} = \frac{\text{Masse in } \boldsymbol{\delta V} \text{ zur Zeit } \boldsymbol{t}}{|\boldsymbol{\delta V}|}$$

Lässt man $\boldsymbol{\delta V}$ immer kleiner werden, so ergibt sich im Grenzwert die Massendichte $\boldsymbol{\rho(P, t)}$ im Punkt $\boldsymbol{P}$ zur Zeit $\boldsymbol{t}$.



In Wirklichkeit kann man das Volumenelement nicht beliebig klein werden lassen, ohne auf Probleme zu stoßen:
Wenn $\delta V$ sehr klein ist, dann sind nur noch ganz wenige (oder meist sogar gar keine) Moleküle mehr im Volumenelement.

Die Massendichte im Punkt ist also eher eine theoretische Eigenschaft, eine Idee.



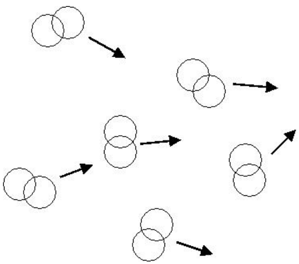
Da $1cm^3$ Wasser aber z.B. etwa $10^{23}$ Moleküle enthält, kann man $\delta V$ schon ziemlich klein machen und erhält immer noch vernünftige Mittelwerte.

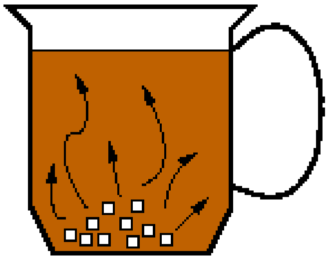
Analog zur Massendichte:

- elektrische Ladungsdichte (Elektronenüberschuss)
- Energiedichte $\boldsymbol{e(P,t)}$ (z.B. thermische Energie / Temperatur)
- Populationsdichte (biologische Organismen)
- chemische Konzentrationen
  (z.B. von verschiedenen Komponenten in einer Mischung)

## Flüsse

Die einzelnen Objekte (Moleküle, Organismen, ...) können sich bewegen

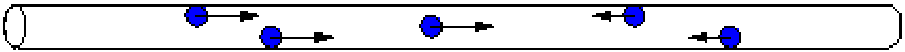


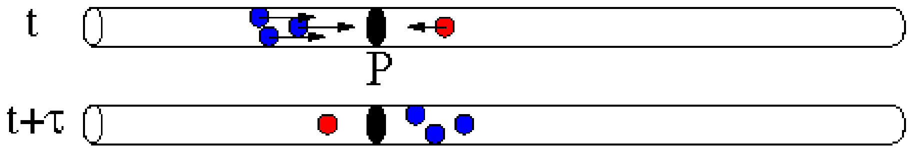


Die Rate und Richtung der gemittelten Bewegung wird als Flussvektor $\vec{q}(P,t)$ im Punkt $P$ zur Zeit $t$ zusammengefasst.

Der Fluss kann wieder durch einen Grenzprozess definiert werden.

Erstmal eindimensional:
Wärmefluss im Stab, Massenfluss einer Flüssigkeit im Rohr






Der Massenfluss $q(P, \delta I)$ ist die gesamte Masse, die sich im Zeitintervall $\delta I = [t, t + \Delta t)$ von links nach rechts durch den Punkt $P$ bewegt, geteilt durch die Länge $|\delta I| = \Delta t$ des Zeitintervalls:

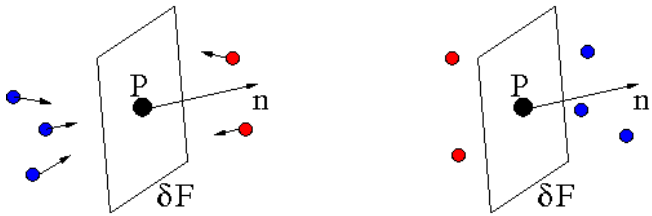
$$q(P, \delta t) = \frac{\text{in } \delta I \text{ durch } P \text{ rechts bewegte Masse}}{\Delta t}$$

Lässt man $\Delta t$ immer kleiner werden, ergibt sich im Grenzwert die Massenflussrate $q(P, t)$ durch $P$ zur Zeit $t$

$q(P, t)$ ist negativ, wenn sich mehr Masse von rechts nach links bewegt. Das Vorzeichen gibt in 1D also die Richtung der Bewegung an.

## Mehrdimensional:

Im Punkt $\boldsymbol{P}$ wird ein Flächenelement $\boldsymbol{\delta F}$ mit Einheitsnormalenvektor $\vec{\boldsymbol{n}}_{\delta F}$ betrachtet, und die Anzahl der Objekte, die sich in $\boldsymbol{\delta I}$ durch dieses Flächenelement von der einen auf die andere Seite bewegen:



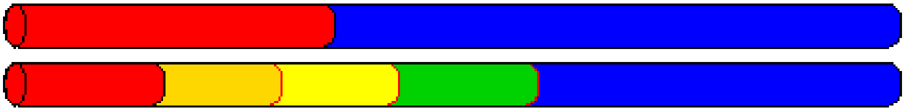

Dann ist die Flussrate in Richtung $\vec{\boldsymbol{n}}_{\delta F}$

$$\vec{q}(\delta F, \delta I) \cdot \vec{n}_{\delta F} = \frac{\text{Anzahl der in } \delta I \text{ durch } \delta F \text{ bewegten Objekte}}{|\delta F| \ \Delta t}$$

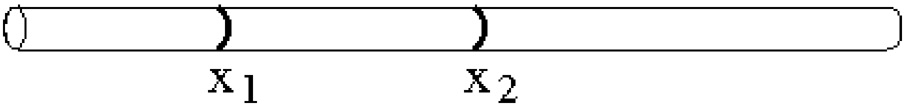
Lassen wir die Flächengröße und die Zeitspanne gegen Null gehen, ergibt sich im Grenzwert die Flussrate $\vec{q}(P, t) \cdot \vec{n}$.
Dabei ist $\vec{q}(P, t)$ der Flussvektor, er gibt Richtung und Stärke des Flusses in $\boldsymbol{P}$ zur Zeit $\boldsymbol{t}$ an.

# Energieerhaltung

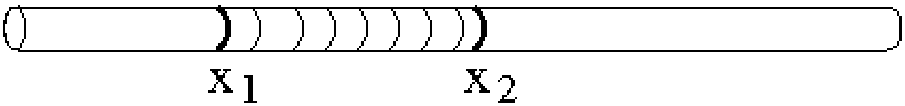
Eindimensionales Beispiel:
Energie (z.B. Wärme) in einem Stab



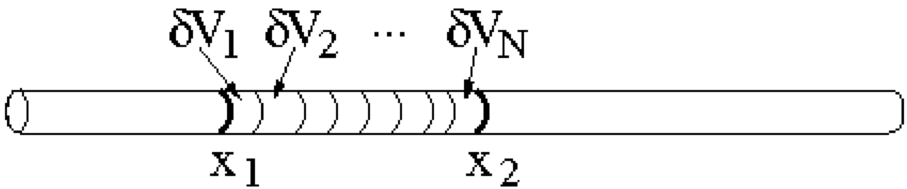
Wir betrachten einen (beliebigen) Abschnitt $[x_1, x_2]$ aus einem Stab




Abschnitt zerlegen in Volumenelemente



Wie beim Riemann-Integral:




Die Gesamtenergie im Abschnitt zur Zeit $t$ ist die Summe über alle Einzelenergien in den Volumenelementen $\delta V_1, \ldots, \delta V_N$:

$$E_{[x_1,x_2]}(t) \;=\; \sum_{i=1}^{N} E(\delta V_i, t) = \sum_{i=1}^{N} |\delta V_i| \underbrace{\frac{E(\delta V_i, t)}{|\delta V_i|}}_{\text{Energiedichte } e(\delta V_i, t)}$$

Im Grenzprozess $|\delta V| \longrightarrow 0$ wird die Summe zum Integral

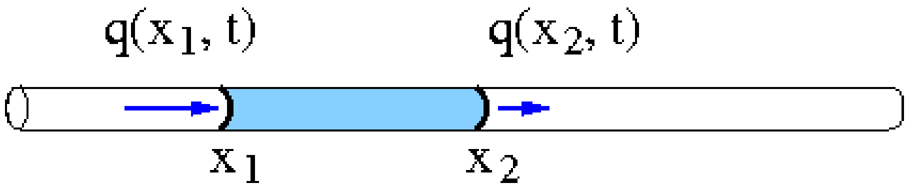
$$E_{[x_1,x_2]}(t) = \int_{x_1}^{x_2} e(x,t)\, dx$$

**Energieerhaltungsgesetz:** (ohne innere Energie-Quellen / -Senken)

Die zeitliche Änderung der Gesamtenergie im Abschnitt ist gleich dem Zu- bzw. Abfluss über die Ränder des Abschnitts!

Energiefluss aus dem Abschnitt über die Intervall-Grenzen:

- in $x_1$ fließt $q(x_1, t)$ nach rechts (in den Abschnitt hinein),
- in $x_2$ fließt $q(x_2, t)$ nach rechts (aus dem Abschnitt heraus), also $-q(x_2, t)$ nach links (in den Abschnitt hinein)




Also:

$$\frac{d}{dt} E_{[x_1,x_2]}(t) = q(x_1, t) - q(x_2, t)$$

$$\frac{d}{dt}E_{[x_1,x_2]}(t) = q(x_1,t) - q(x_2,t)$$

Trick:

Ist $q$ eine differenzierbare Funktion bezüglich $x$, so gilt

$$q(x_2,t) - q(x_1,t) = \int_{x_1}^{x_2} \frac{d}{dx}q(x,t)\,dx$$

und mit

$$\frac{d}{dt}E_{[x_1,x_2]}(t) = \frac{d}{dt}\int_{x_1}^{x_2} e(x,t)\,dx = \int_{x_1}^{x_2} \frac{d}{dt}e(x,t)\,dx$$

folgt

$$\int_{x_1}^{x_2} \frac{d}{dt}e(x,t)\,dx = -\int_{x_1}^{x_2} \frac{d}{dx}q(x,t)\,dx$$

Zusammenfassen der Integrale ergibt

$$\int_{x_1}^{x_2} \left( \frac{d}{dt} e(x,t) + \frac{d}{dx} q(x,t) \right) dx = 0$$

Dies soll für alle Stababschnitte $[x_1, x_2]$ gelten, dann muss aber der Integrand verschwinden:

$$\frac{d}{dt} e(x,t) + \frac{d}{dx} q(x,t) = 0$$

in jedem Punkt $x$ und für jede Zeit $t$.

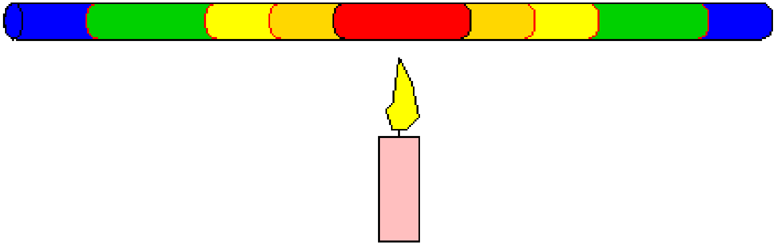
**Erhaltungsgleichung:**

$$\boxed{\frac{d}{dt} e(x,t) = -\frac{d}{dx} q(x,t)}$$

Die zeitliche Änderung der Energiedichte ist gleich minus der räumlichen Änderung des Flusses.

## Quellen und Senken

Wärmequellen (Heizung, z.B. Mikrowelle, Kerze unter dem 1D Stab) können zusätzliche Energie produzieren:



Im Modell: zusätzlicher Quellterm $f$ auf der rechten Seite:

zeitliche Änderung = räumliche Fluss-Änderung **+ Produktion**

$$\frac{d}{dt}e(x,t) = -\frac{d}{dx}q(x,t) + f(x,t)$$

Abkühlen (z.B. durch Wasser) erzeugt eine Wärmesenke ($f < 0$)

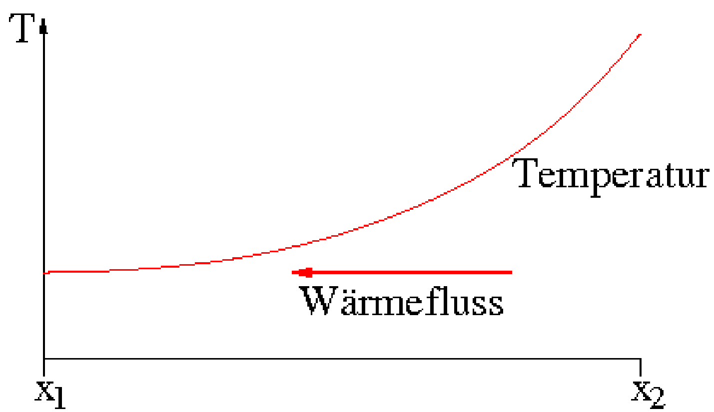
Quellen und Senken in anderen Modellen:

- Chemie:
  Produktion und Verbrauch von Stoffen durch chemische Reaktionen
- Biologie:
  Entstehung neuer biologischer Individuen (z.B. Vermehrung von Bakterien) oder deren Absterben,
  Dezimierung durch Fressen bei Räuber-Beute-Modellen
- Verkehr:
  Ein- und Ausfahrten auf der (1D) Autobahn
- ...

# Flussgesetze

Wärmeleitung: Temperatur $T$

Prinzip: Temperaturausgleich durch Wärmefluss

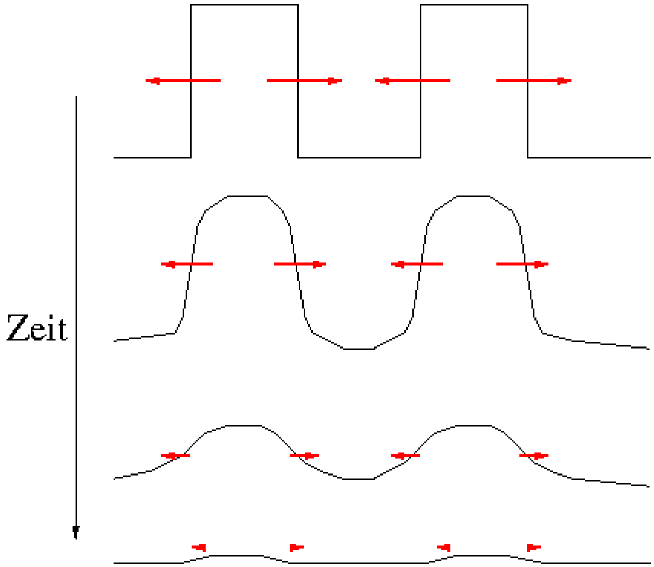



Fourier-Gesetz: Wärmefluss ist proportional zum Temperaturunterschied (also zur negativen Ableitung):

$$q(x,t) = -K \frac{d}{dx} T(x,t)$$

$K > 0$ Wärmeleitfähigkeit des Materials

Temperaturausgleich durch Wärmefluss (ohne Quellen):




Strukturen vergehen!

In drei Raumdimensionen:

Fourier-Gesetz für den Flussvektor:

$$\begin{aligned}\vec{q}(x,y,z,t) &= \begin{pmatrix} -K\,\frac{d}{dx}T(x,y,z,t) \\ -K\,\frac{d}{dy}T(x,y,z,t) \\ -K\,\frac{d}{dz}T(x,y,z,t) \end{pmatrix} \\ &= -K\,\nabla T(x,y,z,t)\end{aligned}$$

Erhaltungsgesetz:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}e(x,y,z,t) &= -\mathrm{div}\,\vec{q}(x,y,z,t) + f(x,y,z,t) \\ &= -\left(\frac{d}{dx}q_1 + \frac{d}{dy}q_2 + \frac{d}{dz}q_3\right) + f\end{aligned}$$

# Mathematik

Die Erhaltungsgleichung

$$\frac{d}{dt}e(x,t) = -\frac{d}{dx}q(x,t) + f(x,t)$$

muss ergänzt werden durch

- Anfangsbedingungen (zur Zeit $t = 0$) und
- Randbedingungen (z.B. Fluss über den Rand des Gebietes, Temperatur am Rand, o.ä.).

**Mathematik:**

- Existenz: kann es überhaupt eine Lösung des Problems geben? In welchem Sinne?
- Eindeutigkeit: kann es zwei verschiedene Lösungen geben?
- Regularität: wie glatt sind solche Lösungen? (z.B. in Abhängigkeit von der Glattheit des Gebietsrandes oder des Quellterms)

# Chemische Reaktionen

Ähnlich wie Wärmeleitung:
Durchmischung von Stoffgemischen (z.B. Flüssigkeiten):
Konzentrationen $c_i$ verschiedener Bestandteile, $i = 1, 2, ..., N$
Konzentrationsausgleich durch Diffusion

**Strukturen vergehen!**
Fick'sches Gesetz: Massefluss der $i$-ten Komponente ist proportional zum Konzentrationsunterschied (Ableitung):

$$q_i(x,t) = -D_i \frac{d}{dx} c_i(x,t)$$

$D_i > 0$ Diffusionskoeffizienten der $i$-ten Komponente im Medium

## Chemische Reaktion erzeugt Quellen und Senken:

Einfaches Beispiel: Kochsalzreaktion:

$$Na^+ + Cl^- \rightarrow NaCl$$

Allgemein:

$$A + B \rightarrow C$$

Reaktion vernichtet $A$ und $B$, erzeugt $C$. Also:
Quellraten für $A$ und $B$ negativ: $f_A, f_B < 0$ negativ, für $C$ positiv: $f_C > 0$.

## Quellrate für $C$:

proportional zur Konzentration $c_A$,
und proportional zur Konzentration $c_B$, also:

$$f_c(x,t) = k\, c_A(x,t)\, c_B(x,t)$$

Erhaltungsgleichungen sind ein
System von Diffusions-Reaktions-Gleichungen:

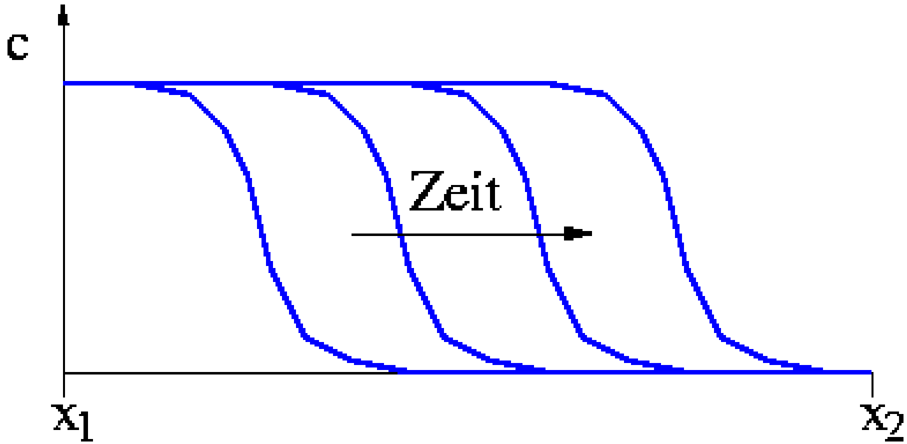
$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} c_A(x,t) &= \frac{d}{dx}\left(D_A \frac{d}{dx} c_A(x,t)\right) - k\, c_A(x,t)\, c_B(x,t) \\
\frac{d}{dt} c_B(x,t) &= \frac{d}{dx}\left(D_B \frac{d}{dx} c_B(x,t)\right) - k\, c_A(x,t)\, c_B(x,t) \\
\frac{d}{dt} c_C(x,t) &= \frac{d}{dx}\left(D_C \frac{d}{dx} c_C(x,t)\right) + k\, c_A(x,t)\, c_B(x,t)
\end{aligned}$$

**Strukturen entstehen!**

Beispiel: Reaktions-Diffusions-Spiralen

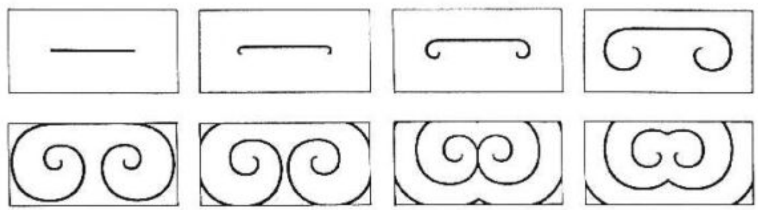
Beispiel: Reaktions-Diffusions-Fronten bei komplizierteren Reaktionen

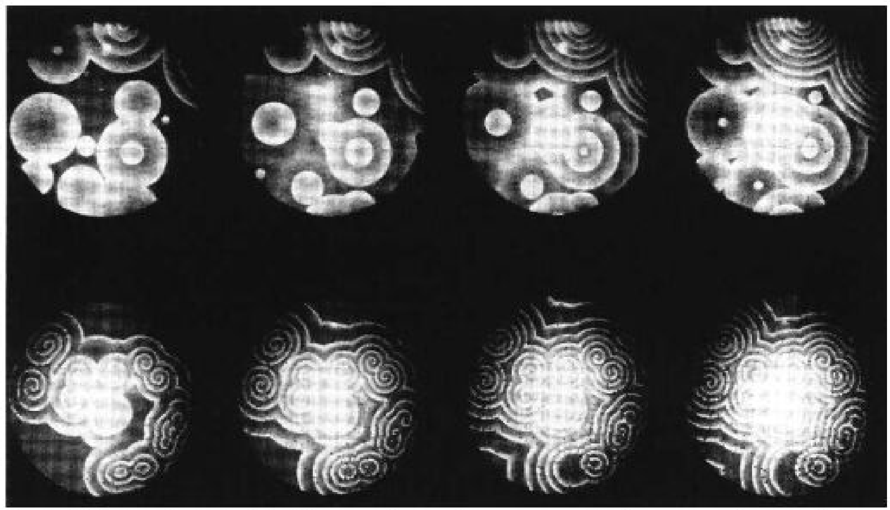
In einer Raumdimension wandern Reaktionsfronten durch das Gebiet:



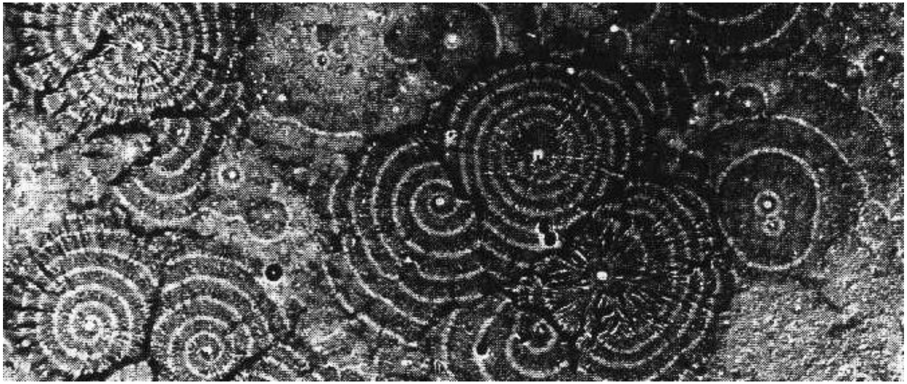

Front hat konstante Geschwindigkeit,
abhängig von Reaktions- und Diffusionsraten.

In 2 oder 3 Raumdimensionen sind eventuell entsprechende ebene Fronten nicht stabil, es entwickeln sich Spiralen:



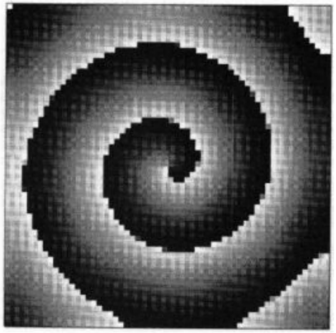


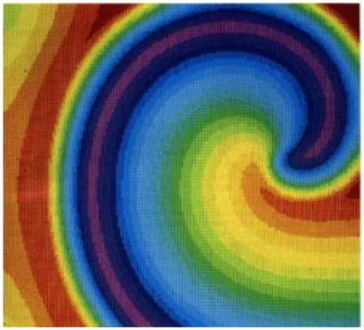
Zeitliche Entwicklung jeweils von links nach rechts



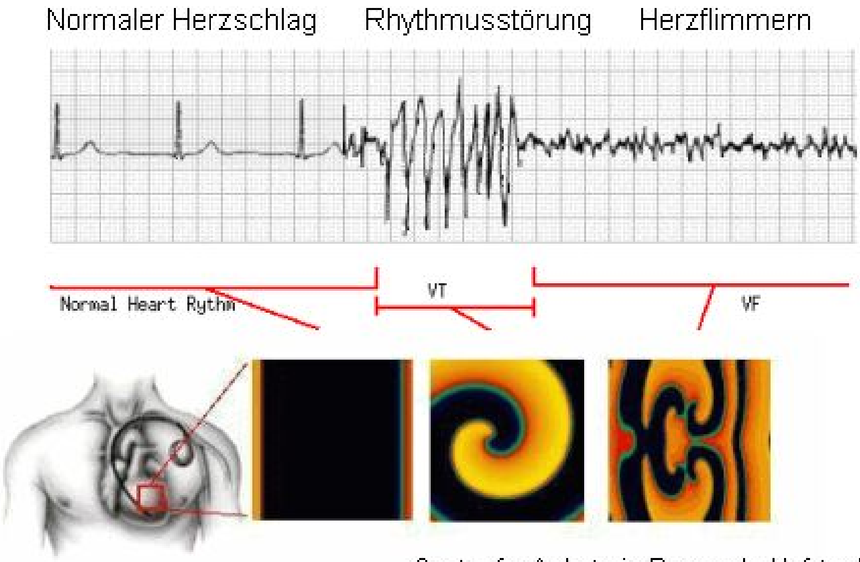
Spiralenförmige Muster auf Steinen

Spiralen in numerischen Simulationen:





Ähnliche Modelle für die Ausbreitung elektrischer Impulse zur Herz-Kontraktion




Center for Arrhytmia Research, Hofstra University, USA

Regelmäßige Signale beim normalen Herzschlag,
Störung des Systems kann Herzflimmern auslösen

# Verkehr

Etwas anders: Verkehr auf der Autobahn, Fluss von Autos

Eine Erhaltungsgleichung gilt, aber kein Ausgleich durch Diffusion!

Bestreben der Autofahrer ist nicht, eine gleichmäßige Verteilung zu erreichen, sondern möglichst schnell das Ziel zu erreichen.

Zusätzliche Quellen und Senken durch Ein- und Ausfahrten.

Daher: bei hoher Verkehrsdichte entstehen Staus!