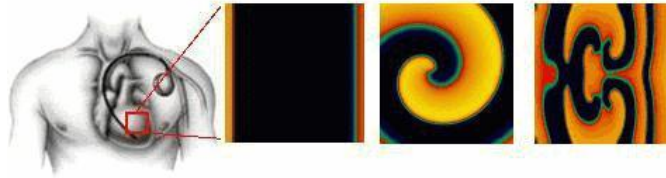
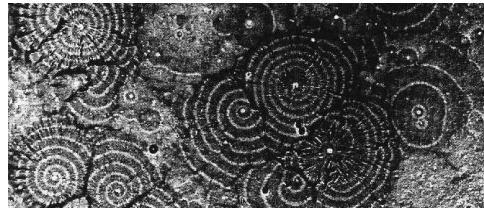


Entstehen und Vergehen von Strukturen durch Flüsse und Quellen

Mathematische Modellierung mit Differentialgleichungen



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



Diskrete und kontinuierliche Modelle

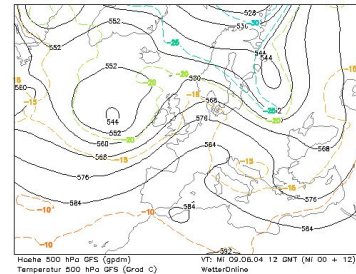
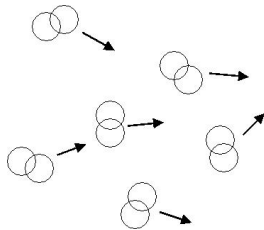
Viele Phänomene in der Natur behandeln das Verhalten von einer großen Anzahl individueller Objekte, die miteinander interagieren.

Beispiele:

Meteorologie:

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

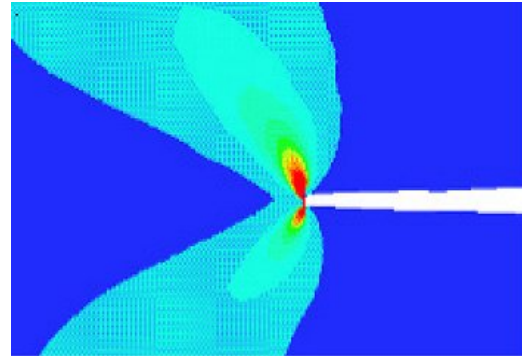
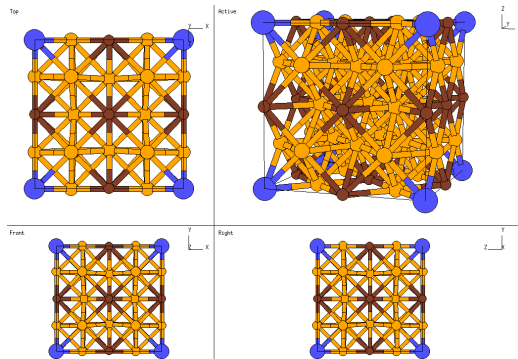
Wettervorhersagemodelle beinhalten nur gemittelte Größen wie Temperatur, Druck, Feuchtigkeit, Windgeschwindigkeit



Bauwesen:

Bindungskräfte zwischen einzelnen Atomen

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



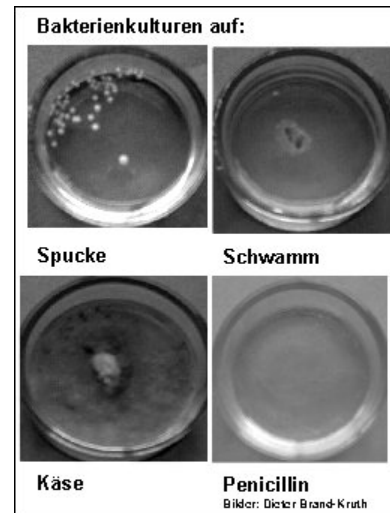
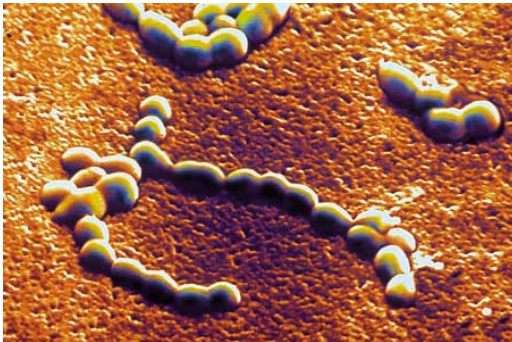
Kristallgitter Stahl — Bruch mit inneren Spannungen

Biologie

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

Entwicklung und Ausbreitung ganzer Populationen (Kulturen),

Räuber-Beute-Modelle, ...

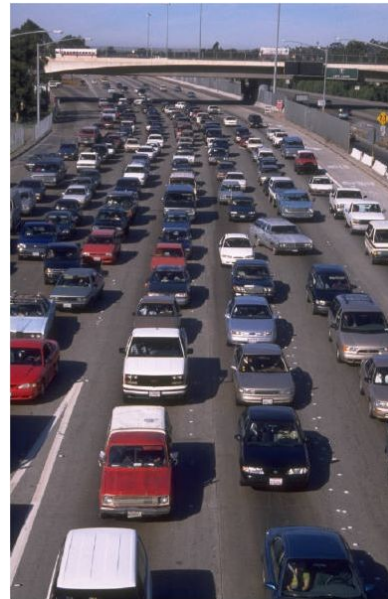


einzelne Bakterien — Petrischalen mit Kolonien

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

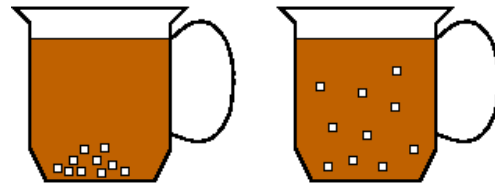
Einfachste kontinuierliche Modelle beinhalten eine **Dichte**, einen **Flussvektor** und ein **Bilanzgesetz**.

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

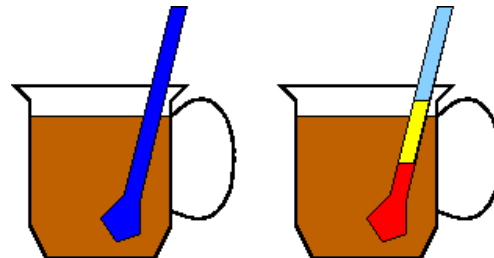
Warum ist das sinnvoll/nötig?

Beispiele:

- Zucker im Kaffee (Konzentration)



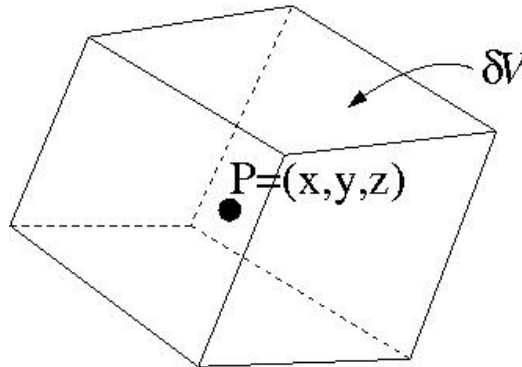
- Temperatur im Kaffeelöffel oder Kochtopf (Wärmedichte)



anschaulich am einfachsten: **Massendichte**

Massendichte („Dichte“ eines physikalischen Materials)

Zu einem Punkt $P = (x, y, z)$ im Raum betrachten wir ein (kleines)
Volumenelement δV um P (zum Beispiel einen kleinen Würfel)

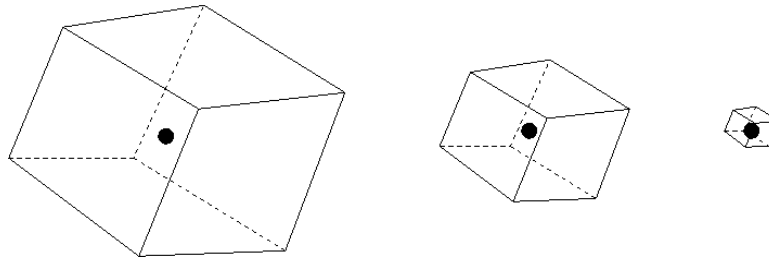


Volumenelement δV um P

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

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

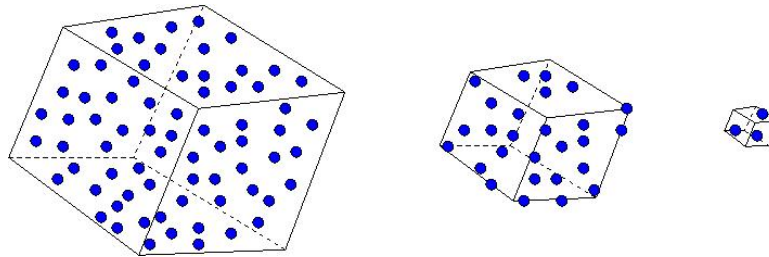
Lässt man δV immer kleiner werden, so ergibt sich im Grenzwert die **Massendichte** $\rho(P, t)$ im Punkt P zur Zeit t .



In Wirklichkeit kann man das Volumenelement **nicht beliebig klein** werden lassen, ohne auf Probleme zu stoßen:

Wenn δV 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**.



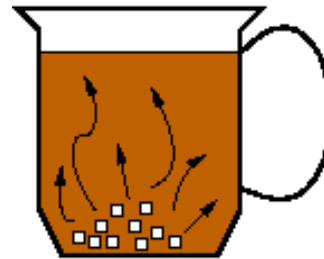
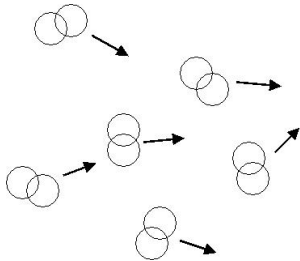
Da 1cm^3 Wasser aber z.B. etwa 10^{23} Moleküle enthält, kann man δV schon ziemlich klein machen und erhält immer noch vernünftige Mittelwerte.

Analog zur Massendichte:

- elektrische Ladungsdichte (Elektronenüberschuss)
- Energiedichte $e(\mathbf{P}, t)$ (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



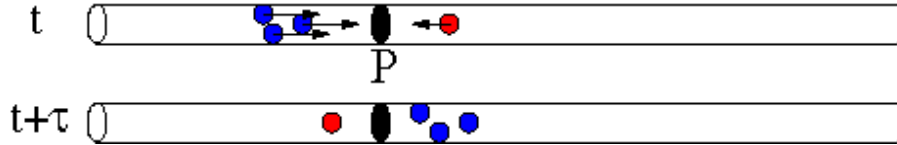
Die Rate und Richtung der **gemittelten Bewegung** wird als **Flussvektor** $\vec{q}(P, t)$ im Punkt P zur Zeit t zusammengefasst.

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:

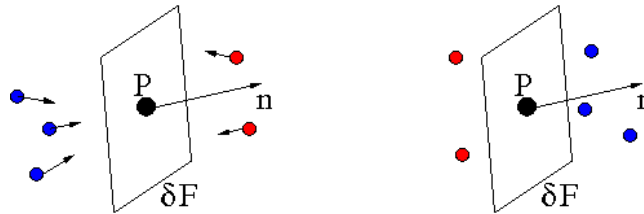
$$q(P, \delta t) = \frac{\text{in } \delta I \text{ durch } P \text{ rechts bewegte Masse}}{\Delta t}$$

Lässt man Δt 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 P wird ein **Flächenelement** δF mit Einheitsnormalenvektor $\vec{n}_{\delta F}$ betrachtet, und die Anzahl der Objekte, die sich in δI durch dieses Flächenelement von der einen auf die andere Seite bewegen:



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

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

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 P zur Zeit t an.

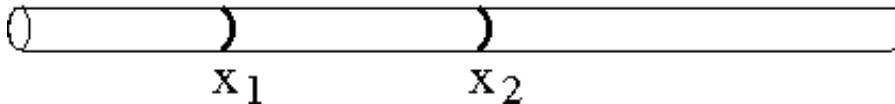
Energieerhaltung

Eindimensionales Beispiel:

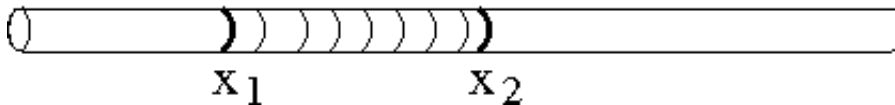
Energie (z.B. Wärme) in einem Stab



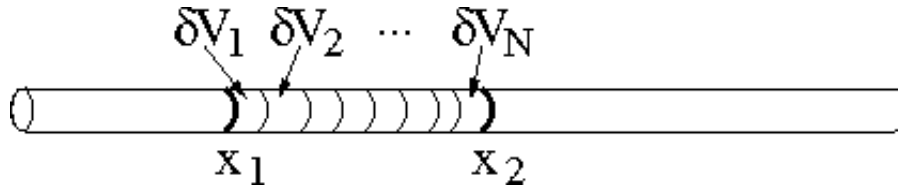
Wir betrachten einen (beliebigen) Abschnitt $[x_1, x_2]$ aus einem Stab



Abschnitt zerlegen in **Volumenelemente**



Wie beim Riemann-Integral:



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

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

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

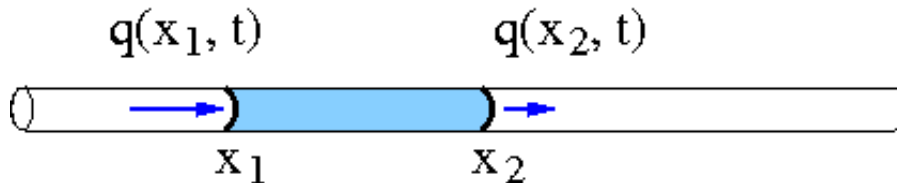
$$E_{[x_1, x_2]}(t) = \int_{x_1}^{x_2} e(x, t) dx$$

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 .

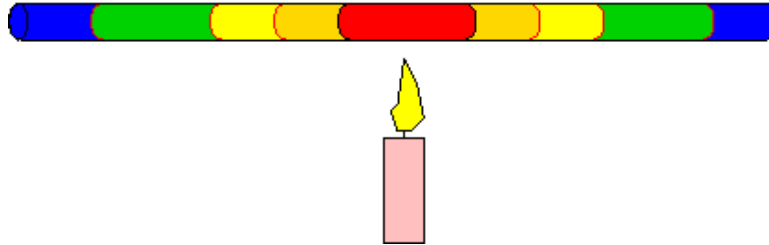
Erhaltungsgleichung:

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

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** ($f < 0$)

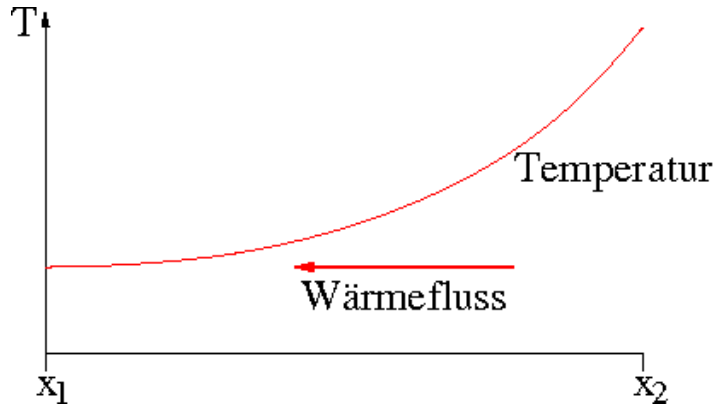
Quellen und Senken in anderen Modellen:

- **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

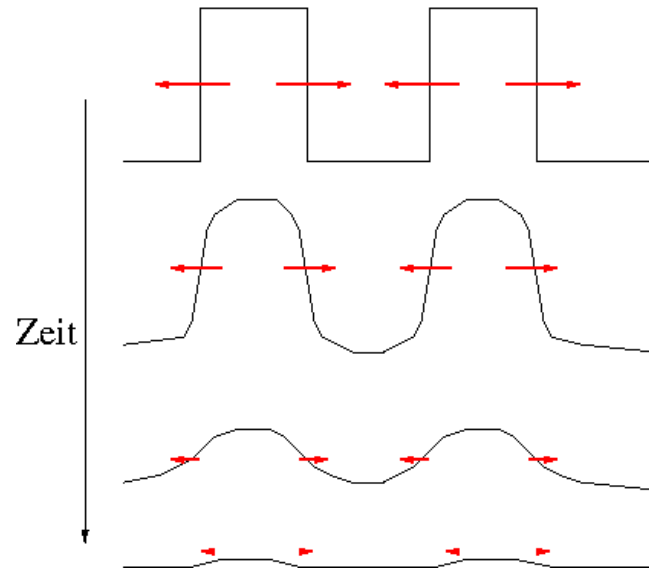


Fourier-Gesetz: Wärmefluss ist proportional zum Temperaturunterschied (also zur negativen Ableitung):

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

$K > 0$ 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:

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

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, $i = 1, 2, \dots, N$

Konzentrationsausgleich durch Diffusion

Strukturen vergehen!

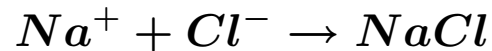
Fick'sches Gesetz: Massefluss der i -ten Komponente ist proportional zum Konzentrationsunterschied (Ableitung):

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

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

Chemische Reaktion erzeugt Quellen und Senken:

Einfaches Beispiel: Kochsalzreaktion:



Allgemein:



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:

$$\frac{d}{dt}c_A(x, t) = \frac{d}{dx} \left(D_A \frac{d}{dx} c_A(x, t) \right) - k c_A(x, t) c_B(x, t)$$

$$\frac{d}{dt}c_B(x, t) = \frac{d}{dx} \left(D_B \frac{d}{dx} c_B(x, t) \right) - k c_A(x, t) c_B(x, t)$$

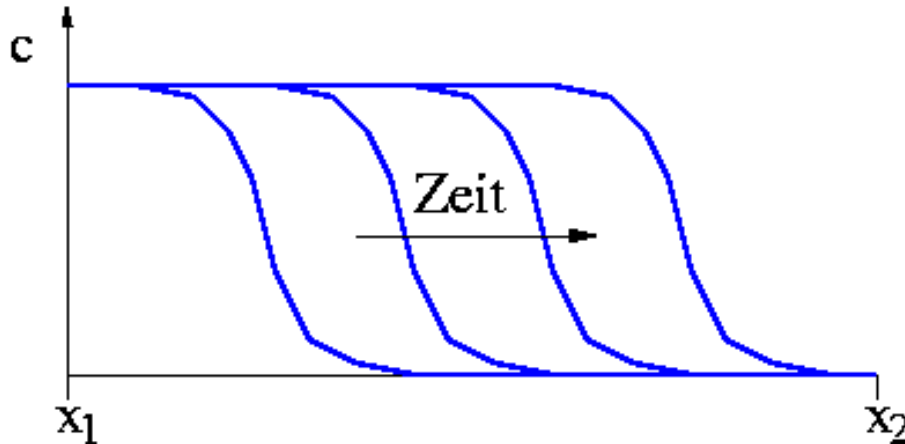
$$\frac{d}{dt}c_C(x, t) = \frac{d}{dx} \left(D_C \frac{d}{dx} c_C(x, t) \right) + k c_A(x, t) c_B(x, t)$$

Strukturen entstehen!

Beispiel: Reaktions-Diffusions-Spiralen

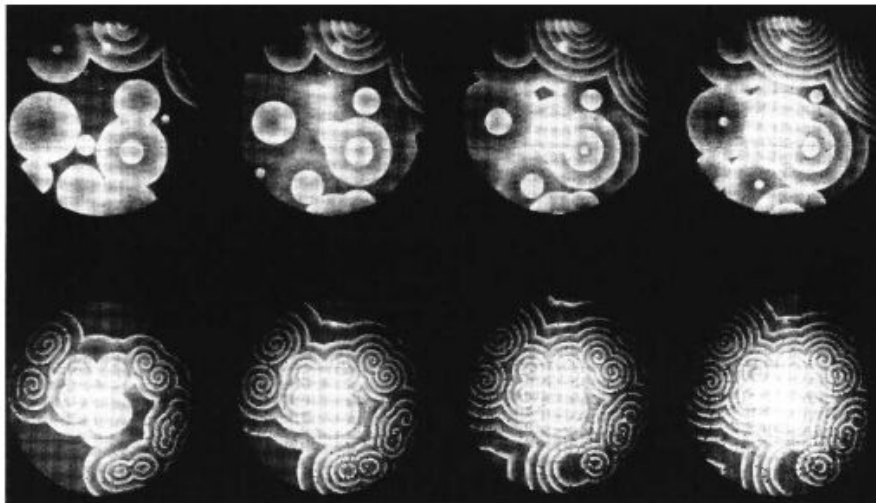
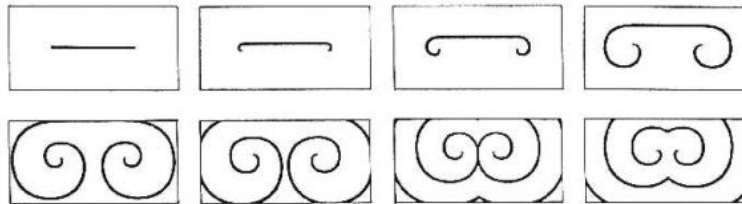
Beispiel: Reaktions-Diffusions-Fronten bei komplizierteren Reaktionen

In einer Raumdimension wandern **Reaktionsfronten** durch das Gebiet:

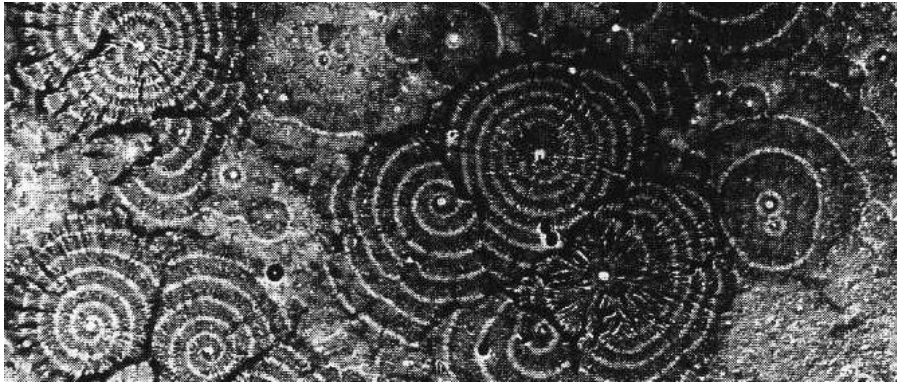


Front hat konstante Geschwindigkeit,
abhängig von Reaktions- und Diffusionsraten.

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

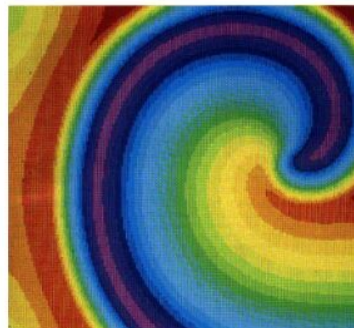
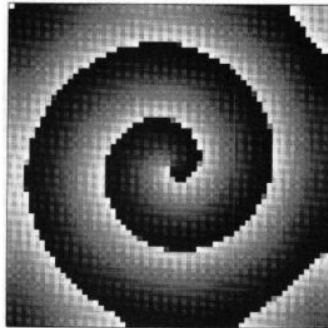


Zeitliche Entwicklung jeweils von links nach rechts

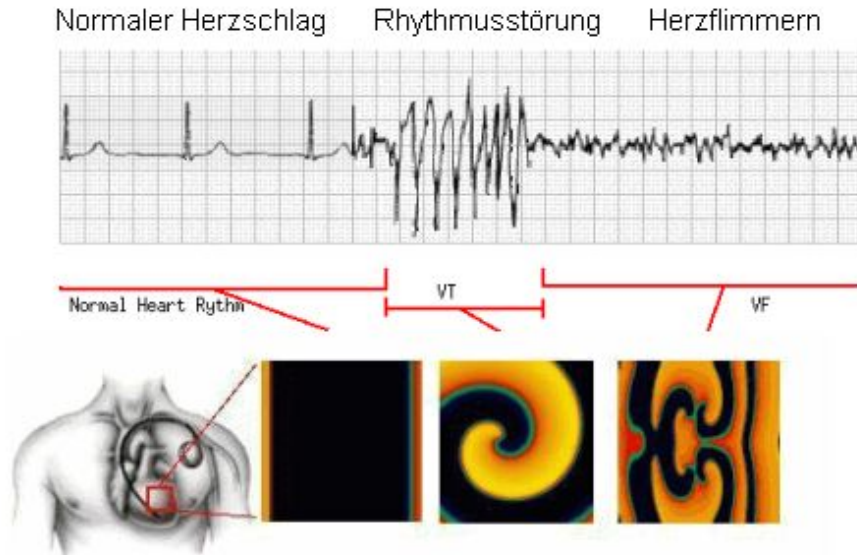


Spiralenförmige Muster auf Steinen

Spiralen in numerischen Simulationen:



Ähnliche Modelle für die Ausbreitung elektrischer Impulse zur Herz-Kontraktion



Center for Arrhythmia 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!**

