

## 5 Bilanzgleichungen. Töpfe und Schläuche (pots and tubes)

### 5.1 Einführung. Motivation. Zeitableitung

#### 5.1.1 Einführung

- Eine Bilanzgleichung bilanziert eine physikalische Größe, d.h., beschreibt die zeitliche Änderung durch Zugang und Abgang.
- Eine Bilanzgleichung ist eine phänomenologische Gleichung. Wir beschreiben das, was wir beobachten, ohne uns detailliert über die möglichen Gründe Gedanken zu machen.
- Bilanzgleichungen sind effektive Gleichungen. Sie beschreiben keine Details (wie Reibung o.ä.) sondern das Gesamtergebnis.
- Bilanzieren kann man nur extensive Größen, die kontinuierliche Werte annehmen können.
- Die IG sind am Ende ausgeglichen.
- Der Prozeß läuft von allein ab, d.h., es gibt eine innere Triebkraft für die Bewegung. Wir nehmen an, daß es der Wunsch der IG ist, sich auszugleichen.

Folglich gibt es auch keinen Energieerhaltungssatz. Im Gegenteil, wir beschreiben den Prozeß, der vor dem Ruhen im Minimum einer geeigneten Energie stattfindet, also die Bewegung in dieses Minimum aus einem instabilen Zustand heraus.

- Für ein instationäres Problem ist das Fließen von Wasser gut geeignet, weil man tatsächlich etwas fließen sieht. Man sieht, daß sich etwas zeitlich ändert. Das Massen-Federn-Problem ist als Startproblem für ein dynamisches Problem zu kompliziert.
- Bei instationären Problemen kann es sein, daß Größen erhalten bleiben, sich mit der Zeit nicht ändern. Das sollte sogar immer der Fall sein, wenn die zeitliche Änderung einer EG beschrieben wird.
- Eine andere – und manchmal viel intuitivere – Sicht auf die Erhaltung der Summe ist folgende: Wir betrachten eine Gesamtmasse, die mit der Zeit nur unterschiedlich aufgeteilt wird. Klar, daß diese Größe erhalten bleibt.
- Mikroskopische Modellierung ist das Gegenteil davon. Man beschreibt detailliert mikroskopische Zusammenhänge und versucht aus dem Ergebnis die gewünschten makroskopischen Größen abzuleiten.

#### 5.1.2 Die Gleichung des radioaktiven Zerfalls

Das Modell des radioaktiven Zerfalls selbst ist ein mikroskopisches Teilchenmodell. Man nimmt an, daß es diskrete Atome gibt (Atommodell), die unter bestimmten Bedingungen instabil werden und zerfallen (oder sich in andere Atome unter Aussendung von Strahlung umwandeln). Wir wollen eine Gleichung herleiten, die die Veränderung (Abnahme) der Stoffmenge (extensive Größe) mit der Zeit beschreibt.

Es sei  $M(t)$  die Stoffmenge (z.B. die Masse des zerfallenden Stoffs). Es seien  $t_1$  und  $t_2$  zwei Zeitpunkte,  $\Delta t = t_2 - t_1$  ihre Differenz, ein Zeitintervall.

Wir erhalten die bekannte Gleichung  $\dot{M}(t) = -\alpha M(t)$  (hier ist  $1/\alpha$  die Halbwertszeit) schrittweise

$$\begin{aligned} M(t_2) &= M(t_1) - aM(t_1) \\ M(t_2) &= M(t_1) - \alpha \Delta t M(t_1) \\ \frac{M(t_2) - M(t_1)}{\Delta t} &= -\alpha M(t_1) \\ \dot{M}(t) &= -\alpha M(t) \end{aligned}$$

In jedem Schritt werden Annahmen über die Menge des zerfallenden Stoffs (z.B. "Atome pro Zeiteinheit") gemacht (z.B. proportional zum Zeitintervall). Im letzten Schritt wird zum Grenzwert  $\Delta t \rightarrow 0$  übergegangen, was zur Zeitableitung führt.

Man kann sich einfach klarmachen, daß dieser Grenzübergang unphysikalisch ist. Je kleiner der Zeitintervall wird, desto weniger Atome zerfallen pro Zeiteinheit und für  $\Delta t \rightarrow 0$  zerfallen Bruchteile von Atomen, was Unsinn ist. Man kann diesen Grenzübergang retten, indem man annimmt, daß man einen homogenen, kontinuierlichen und beliebig teilbaren Stoff hat, etwa soetwas wie eine Länge. Natürlich kann man ein Ortintervall durch ein Zeitintervall teilen und letzteres gegen 0 gehen lassen. Bei diskreten Atomen geht das nicht. Die Idee eines "homogenen, kontinuierlichen und beliebig teilbaren Stoffs" heißt sich aber imt der Idee des radioaktiven Zerfalls, die nur für diskrete Atome sinnvoll ist.

### 5.1.3 Die Zeitableitung

Es gibt verschiedene Objekte, die alle Zeitableitung genannt werden.

Die Änderung einer Menge  $\Delta M$  (extensive Größe), geteilt durch ein Zeitintervall  $\Delta T$  (extensive Größe), ist eine intensive Größe, der Strom  $s$  (Materiestrom, Stoffstrom). Mathematisch entspricht diesem Quotienten die Radon-Nikodym-Ableitung. Die extensiven Größen liegen in einem Raum von Maßen  $\mathcal{X}^*$ , die intensive in einem Raum von Funktionen  $\mathcal{X}$ . Diese Konstruktion  $s = \Delta M / \Delta T$  hat nur für konstante Ströme und ausreichende große extensive Größen Sinn.  $\Delta t \rightarrow 0$  ist hier nicht möglich.

Die mathematische definierte Zeitableitung einer zeitabhängigen Größe ist ein mathematisches Konstrukt, das es in der Natur a-priori nicht gibt, dem aber oft ein physikalischer Sinn zugewiesen werden kann. Die Zeitableitung (Grenzwert einer Linearkombination) einer Größe liegt deshalb im selben Raum. Das sieht man auch an der Gleichung des radioaktiven Zerfalls  $\dot{M}(t) = -\alpha M(t)$ . Die Zeitableitung von  $M$  ist ein Anteil von  $M$ , beides sind extensive Größen.

## 5.2 Zwei Töpfe und ein Schlauch

### 5.2.1 Herleitung der Gleichung

Wir betrachten den einfachsten Fall, zwei Töpfe, die mit einem Schlauch verbunden sind.

Wir konzentrieren uns auf einen der beiden Töpfe (Topf 1) zu zwei Zeitpunkten:  $t$  (vorher) und  $t + \tau$  nachher. Nehmen wir an, die Wassermenge nachher ist geringer als vorher. Das entspricht der Intuition, daß das Wasser aus dem Topf mit höherem Wasserspiegel in den mit niedrigerem Wasserspiegel fließt.

Da die Wassermenge insgesamt erhalten bleibt (extensive Größe), muß ein Teil (das sei  $\tau F$ , wir nehmen wieder an, daß diese Menge proportional zum Zeitintervall  $\tau$  ist) des Wassers ausgeflossen sein (wegen der Experimentalanordnung kann es nur in den anderen Topf geflossen sein).

Wir haben also folgende Gleichungen:

$$\begin{aligned} V_1(t + \tau) &= V_1(t) - \tau F \\ V_2(t + \tau) &= V_2(t) + \tau F \end{aligned}$$

oder nach Übergang zum Grenzwert  $\tau \rightarrow 0$

$$\begin{aligned} \dot{V}_1(t) &= -F \\ \dot{V}_2(t) &= +F \end{aligned}$$

Das sind Bilanzgleichungen. Eine extensive Größe (Wassermenge) wird zu unterschiedlichen Zeiten bilanziert. Das ergibt:

*Menge nachher = Menge vorher ± Änderung*

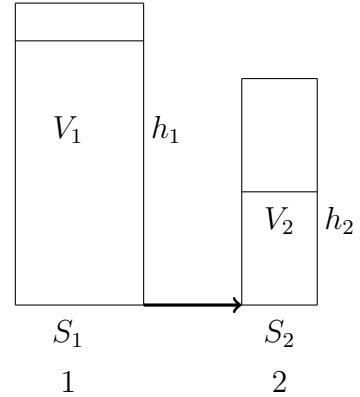
Warum hat sich das Wasser aber überhaupt in Bewegung gesetzt? Aus phänomenologischer Sicht – also ohne sich über mögliche tieferliegende Gründe Gedanken zu machen – ist der Grund der “Wunsch” des Wassers, die Höhendifferenz der Wasserspiegel auszugleichen. Abstrakt gesprochen ist der Grund für die Änderung die räumliche (die Töpfe 1 und 2 befinden sich in verschiedenen Raumpunkten) Uneigengleichheit einer intensiven Größe. Die Höhe tritt hier als intensive Größe auf. Tatsächlich ist es der Druck im Topf, der aber auf Grund der Experimentalanordnung proportional zur Höhe ist.

Wir nehmen als einfachsten Fall an, daß der Fluß  $F$  proportional zur Höhendifferenz ist. Der Proportionalitätsfaktor sei  $a$  und beschreibt die Materialeigenschaft des Schlauches (je größer  $a$ , desto mehr Wasser kann pro Zeiteinheit hindurchfließen). Das ergibt schließlich folgendes Gleichungssystem:

$$\begin{aligned} \dot{V}_1(t) &= -a(h_1(t) - h_2(t)) \\ \dot{V}_2(t) &= +a(h_1(t) - h_2(t)) \end{aligned}$$

Wir haben zur Herleitung folgendes fundamentales Naturgesetz verwendet:

*Die zeitliche Änderung einer extensiven Größe wird getrieben vom räumlichen Unterschied einer intensiven Größe.*



Dieses Gleichungssystem können wir so noch nicht lösen, da verschiedene Variablen, eine intensive Größe  $h$  und eine extensive Größe  $V$  miteinander gekoppelt sind, deren Zusammenhang wir noch nicht berücksichtigt haben. Es gilt natürlich für  $i = 1, 2$  (Volumen = Fläche mal Höhe).

$$V_i(t) = S_i h_i(t)$$

Mit Hilfe dieses Zusammenhangs könnte eine Sorte Variable im System durch die andere ersetzt werden. Das ergibt (häufig ist das nicht sinnvoll, in diesem Fall aber doch), wenn man  $h_i = V_i/S_i$  einsetzt

$$\begin{aligned}\dot{V}_1 &= -a(h_1 - h_2) = -a\left(\frac{V_1}{S_1} - \frac{V_2}{S_2}\right) \\ \dot{V}_2 &= a(h_1 - h_2) = a\left(\frac{V_1}{S_1} - \frac{V_2}{S_2}\right)\end{aligned}$$

Anfangswerte:  $V_1(0) = V_1^0$ ,  $V_2(0) = V_2^0$

### 5.2.2 Die Gleichung in Matrixschreibweise

Wir können das erhaltene Gleichungssystem in Matrixschreibweise umformulieren, was in diesem einfachen Fall allerdings keiner mache würde. Wir machen es, weil sich kompliziertere Gleichungen am besten in Matrixschreibweise herleiten und verstehen lassen.

$$\begin{pmatrix} \dot{V}_1 \\ \dot{V}_2 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} (a) \begin{pmatrix} 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h_1 \\ h_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -a(h_1 - h_2) \\ +a(h_1 - h_2) \end{pmatrix}$$

Wir haben das Gleichungssystem dargestellt als Produkt dreier Matrizen, die auf den Vektor der Höhen  $h$  wirken, also

$$\dot{V}(t) = -\mathbf{D}^* \mathbf{A} \mathbf{D} h(t), \quad V(0) = V_0$$

### 5.2.3 Summe der Gleichungen. Erhaltungssatz

Intuitiv wissen wir, daß das Wasservolumen insgesamt erhalten bleibt. Das sollte sich auch in den Gleichungen widerspiegeln. Tatsächlich ergibt die Addition der Gleichungen

$$\dot{V}_1 + \dot{V}_2 = \frac{d}{dt}(V_1(t) + V_2(t)) = 0$$

Das Gesamtvolumen sei  $V$ . Es ist also

$$V_1(t) + V_2(t) = V_1^0 + V_2^0 = V$$

In vielen Aufgaben gibt es Erhaltungsgrößen (Energie, Masse, Impulse, ...). Eine gute Modellierung sollte diese Erhaltungsgrößen unbedingt berücksichtigen. Ist das nicht der Fall, ist das Modell falsch.

Das Gleiche gilt für weitere Eigenschaften, die ein reales System besitzt und die vom Modell unbedingt wiedergespiegelt werden müssen. Oft ist der Test dafür nicht so einfach wie der eben durchgeführte Test der Volumenerhaltung. Typische weitere physikalische Eigenschaften sind Positivität (die Volumina müssen natürlich positiv bleiben) und Dissipativität (streben in der Zeit in einen Gleichgewichtszustand).

### 5.2.4 Lösung der Gleichungen

Durch die Erhaltungsgleichung können wir  $V_2$  durch  $V_2 = V - V_1$  ersetzen. Das ergibt für die Gleichung bezüglich  $V_1$

$$\Rightarrow \dot{V}_1 := -a \frac{V_1}{S_1} + a \frac{V - V_1}{S_2} = a \frac{V}{S_2} - a \left( \frac{1}{S_1} + \frac{1}{S_2} \right) V_1$$

Wir setzen

$$\frac{1}{S} := \frac{1}{S_1} + \frac{1}{S_2} \quad (33)$$

$S$  kann man sich als effektiven Flächeninhalt vorstellen. Das ergibt

$$\dot{V}_1 = a \frac{a}{S_2} - \frac{a}{S} V_1 = \frac{a}{S} \left( \frac{S}{S_2} V - V_1 \right)$$

Das ist die Gleichung des beschränkten Wachstums. Man kann sie mit der bekannten Lösungsformel lösen:

$$V_1(t) = \frac{S}{S_2} V + \left( V_1^0 - \frac{S}{S_2} V \right) e^{-\frac{a}{S} t}$$

Die Lösungsformel ist richtig, aber wenig aussagekräftig. Weiteres Umformen ergibt

$$\frac{V_1}{S} = \frac{V}{S_2} + \left( \frac{V_1^0}{S} - \frac{V}{S_2} \right) e^{-\frac{a}{S} t}$$

Multiplizieren wir diese Gleichung mit  $S$ , ergibt das

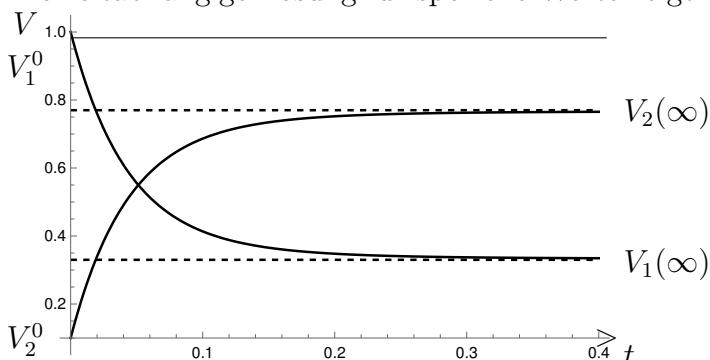
$$V_1(t) - V_1^\infty = \left( V_1(0) - V_1^\infty \right) e^{-\frac{a}{S} t}$$

Wir ersetzen hier wieder die eingeführten Größen  $S$  aus (33) (aber nicht im Exponenten) und  $V$  (aber auf zwei verschiedene Weisen,  $V = V_1 + V_2$  bzw.  $V = V_1^0 + V_2^0$ ). Anschließend ersetzen wir noch  $V_i/S_i$  durch die Höhe  $h_i$ .

$$\begin{aligned} V_1 \left( \frac{1}{S_1} + \frac{1}{S_2} \right) &= \frac{V_1 + V_2}{S_2} + \left( V_1^0 \left( \frac{1}{S_1} + \frac{1}{S_2} \right) - \frac{V_1^0 + V_2^0}{S_2} \right) e^{-\frac{a}{S} t} \\ \left( \frac{V_1}{S_1} - \frac{V_2}{S_2} \right) &= \left( \frac{V_1^0}{S_1} - \frac{V_2^0}{S_2} \right) e^{-\frac{a}{S} t} \\ (h_1(t) - h_2(t)) &= (h_1^0 - h_2^0) e^{-\frac{a}{S} t} \end{aligned}$$

Das ist das exponentielle Abklingen der Höhendifferenz!

Die zeitabhängige Lösung für spezielle Werte zeigt das folgende Bild:



### 5.2.5 Stationäre Lösung

$$\begin{aligned}
 V_i &= hS_i \\
 \frac{1}{S} &= \frac{1}{S_1} + \frac{1}{S_2} \\
 S &= \frac{S_1 S_2}{S_1 + S_2} \\
 \frac{S}{S_2} &= \frac{S_1}{S_1 + S_2} \\
 h &= \frac{V_1 + V_2}{S_1 + S_2} = h_1 \oplus h_2 \\
 V_1^\infty &= S_1 \frac{V_1 + V_2}{S_1 + S_2} = \frac{S_1 V}{S_1 + S_2} = \frac{S}{S_2} V
 \end{aligned}$$

## 5.3 Das allgemeine Modell. Pots and Tubes

Eine Bilanzgleichung beschreibt

*die zeitliche Änderung einer extensiven Größe, hervorgerufen durch eine Triebkraft, deren Ursache die räumlichen Änderung einer intensiven Größe ist.*

### 5.3.1 Aufgabenstellung und Herleitung der Gleichung

(Siehe auch die ausführlichere Herleitung im Abschnitt 5.4 ab Seite 131.)

Wir betrachten  $n$  pots, die mit  $m = \binom{n}{2}$  tubes verbunden seien – über die sie vollständig geleert werden könnten – und mit Wasser bis zu einer Höhe  $h_i$  gefüllt seien.

Es sei  $\mathcal{X} = \mathbb{R}_n$ ,  $\mathcal{Y} = \mathbb{R}_m$  mit  $m = \binom{n}{2}$ ,  $h, g \in \mathcal{X}$ ,  $U \in \mathcal{Y}$ . Wir indizieren  $\mathcal{X}$  mit  $i = 1, \dots, n$  und  $\mathcal{Y}$  mit  $(ij)$  mit  $1 \leq i < j \leq n$ .  $\mathbf{Q}_U : \mathcal{Y} \rightarrow \mathcal{Y}^*$  sei ein Diagonaloperator.

Ziel ist es, einen Zusammenhang zwischen der Änderung der extensiven Größen in der Knoten, also der Zeitableitung der Volumina  $\dot{V}$ , und den räumlich unausgeglichenen intensiven Größen (Triebkräften) in den Kanten zu finden. Diese werden im einfachsten Fall als Differenzen von Höhen gebildet, also als  $\mathbf{D}h$  mit der uns bekannten Inzidenzmatrix  $\mathbf{D}$ .

Wir starten mit den Höhen:

- $\eta = \mathbf{D}h$  Die Inzidenzmatrix erzeugt aus den Höhen Triebkräfte (Höhendifferenzen).
- $J = \mathbf{Q}_U \eta$  Die Triebkräfte werden mit Materialparametern  $U$  (Schlauchdicke, ...) multipliziert  $J_k = U_k \eta_k$ ,  $\mathbf{Q}_U$  ist eine Diagonalmatrix.
- $\dot{V} = -\mathbf{D}^* J$  Die Änderung der Volumina wird durch das Hinein-/Herausströmen von Wasser bewirkt. Die Zusammenfassung der Ströme (mit negativem Vorzeichen) übernimmt die transponierte der Inzidenzmatrix  $\mathbf{D}^*$ .

Das ergibt folgende Gleichung:

$$\dot{V}(t) = -\mathbf{D}^* \mathbf{Q}_U \mathbf{D}h(t) \quad (34)$$

Diese Gleichung (in  $\mathcal{X}$ ) ist nicht abgeschlossen. Um sie abzuschließen muß ein Zusammenhang zwischen Volumen  $V$  und Höhe  $h$  jedes Topfes angegeben werden.

Es sei  $S(h)$  die Fläche des Querschnittes (Niveaufläche) eines gegebenen Topfes in der Höhe  $h$ . Dann ist das Volumen in Abhängigkeit von der Höhe nach dem Prinzip des Cavalieri  $V(h) = \int_0^h S(h') dh'$ . Wir nehmen an, daß die Töpfe alle auf gleicher Höhe 0 stehen und fordern natürlicherweise  $S(h) > 0$  für alle  $h$ . Wir setzen für den Topf mit dem Index  $i$

$$V_i(h_i) = \int_0^{h_i} S_i(h') dh' =: \varphi_i(h_i)$$

Da  $S_i(h) > 0$  ist offenbar  $\varphi_i$  streng monoton wachsend und stetig. Wir setzen

$$\psi_i = \varphi_i^{-1}, \quad h_i = \psi_i(V_i) \iff V_i = \varphi_i(h_i)$$

$\psi_i$  ist ebenfalls streng monoton wachsend und stetig und es gilt

$$\varphi_i(0) = \psi_i(0) = 0$$

Damit haben wir folgendes System

$$\dot{V}(t) = -\mathbf{D}^* \mathbf{Q}_U \mathbf{D} h(t) \quad (35)$$

$$V_i(t) = \varphi_i(h_i(t)) \quad (36)$$

oder ineinander eingesetzt

$$\dot{V}(t) = -\mathbf{D}^* \mathbf{Q}_U \mathbf{D} \psi(V) \quad (37)$$

(hier sei  $\psi(V)$  der Vektor mit den Komponenten  $\psi_i(V_i)$ ). Für dieses System ist der Anfangswert  $V_i(0)$  vorzugeben. Das Gesamtvolumen am Anfang sei  $V_0 = \sum_i V_i(0)$ .

### 5.3.2 Das System in schwacher Form

Mit Gleichung (36) haben wir eine Gleichung zwischen Vektoren hergeleitet. Im allgemeinen – das wird bei der Herleitung der Diffusionsgleichung deutlich – werden stets Zusammenhänge zwischen skalaren Größen – sogenannte schwache Gleichungen – hergeleitet. Aus denen man in einem zweiten Schritt unter zusätzlichen Bedingungen eine Gleichung für Vektoren (oder Funktionen) herleitet. Im vorliegenden endlichdimensionalen Fall ist das eigentlich unerheblich. Aber wie wir sehen werden ermöglicht uns die schwache Formulierung von Gleichung (36) auf einfache Weise eine komponentenweise Gleichung zu erzeugen.

Die schwache Gleichung lautet

$$\frac{d}{dt} \langle V(t), g \rangle_{\mathcal{X}} = -\langle \mathbf{D}^* \mathbf{Q}_U \mathbf{D} h(t), g \rangle_{\mathcal{X}} = -\langle \mathbf{Q}_U \mathbf{D} h(t), \mathbf{D} g \rangle_{\mathcal{Y}}, \quad g \in \mathcal{X} \quad (38)$$

Diese Gleichung ist zur starken Gleichung (36) äquivalent in folgendem Sinn: Falls die Skalare Gleichung (38) für alle  $g \in \mathcal{X}$  gilt, dann gilt (36). Und umgekehrt, falls (36) gilt, kann man sie mit einem beliebigen  $g \in \mathcal{X}$  dual paaren.

Im allgemeinen (im unendlich dimensionalen Raum, wenn der Operator  $\mathbf{D}^* \mathbf{Q}_U \mathbf{D}$  unbeschränkt ist) ist die schwache Gleichung allgemeiner in dem Sinn, daß sie eine Lösung haben kann, auch wenn die starke Gleichung keine hat.

### 5.3.3 Das System in Komponentenschreibweise

Die linke Seite von Gleichung (38) ist eine duale Paarung im  $\mathbb{R}_n$ , also  $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{X}} = \sum_{i=1}^n \dots$ , wogegen die rechte Seite von Gleichung (38) eine duale Paarung im  $m = \binom{n}{2}$  dimensionalen Raum ist, den wir mit einem  $(ij)$  mit  $1 \leq i < j \leq n$  indizieren. Es ist also  $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{Y}} = \sum_{i < j} \dots$ , was als Doppelsumme zu verstehen ist.

Damit ist  $\mathbf{D}g \in \mathcal{Y}$  und komponentenweise  $(\mathbf{D}g)_{ij} = g_i - g_j$ . Damit läßt sich Gleichung (38) leicht (was in der Form (36) nicht so leicht wäre) in Komponentenschreibweise schreiben als (für  $i > j$  setzen wir  $U_{ij} = U_{ji}$ ).

$$\frac{d}{dt} \sum_{i=1}^n V_i(t) g_i = - \sum_{1 \leq i < j \leq n} U_{ij} (h_i - h_j) (g_i - g_j) = \sum_{i=1}^n g_i \left( \sum_{j=1}^n U_{ij} (h_i - h_j) \right)$$

Damit erhält man

$$\dot{V}_i(t) = - \sum_{j=1}^n U_{ij} (h_i(t) - h_j(t)) \quad (39)$$

Während  $\mathbf{Q}_U$  in  $\mathcal{Y}$  ein Diagonaloperator ist, ist  $\mathbf{U} = (U_{ij})$  in  $\mathcal{X}$  eine vollbesetzte Matrix (siehe das Beispiel mit 4 pots and 6 tubes).

### 5.3.4 Eigenschaften des Modells

Wir haben eine Gleichung (System (35,36) für ein Problem hergeleitet. Als erstes müssen wir uns vergewissern, daß die Gleichung ein gutes Modell für unser Problem ist. Was könnten dafür Kriterien sein?

- (1) **Existenz einer Lösung.**
- (2) **Lösung muß physikalisch sinnvoll sein.**

D.h.  $V_i(t) \geq 0$ ,  $\sum_i V_i(t) = V_0$  (Massenerhaltung.)

Die letzte Eigenschaft ist nicht für jedes Modell erfüllt. Es könnte Quellen und Senken geben. Man sollte aber – zumindest am Anfang – immer in einem Modell alle Effekte berücksichtigt haben, damit die extensive Größe, die man betrachtet, erhalten bleibt.

- (3) **Stationärer Zustand.** Wir beobachten, daß es Fälle gibt, bei denen sich zeitlich nichts ändert. Das sind stationäre Zustände. Die sollten vom Modell als Grenzfall auch beschrieben werden.
- (4) Gibt es eine Größe (Energie, freie Energie, potentielle Energie, Entropie), deren Minimum der stationäre Zustand ist. Wenn ja, dann würde unser zeitabhängiges Modell irgendwie mit einem statischen Modell zusammenhängen.
- (5) Klingt diese Energie mit der Zeit ab?
- (6) Konvergiert die Energie mit der Zeit gegen das Minimum?
- (7) Konvergiert die Lösung mit der Zeit gegen den stationären Zustand. In diesem Fall wäre es ein Gleichgewichtszustand.

Diese Eigenschaften sind allgemeingültig. Jeder physikalische Prozeß, der mit einer Bilanzgleichung modelliert wird, sollte diese Eigenschaften besitzen.

### 5.3.5 Eigenschaften für unser spezielles Modells

Einige Bemerkungen zu den Eigenschaften können für unser pots-and-tubes Modell bereits hier gemacht werden:

- (1) **Existenz einer Lösung.** Die Existenz einer globalen Lösung für beliebige Anfangswerte folgt aus der allgemeinen Theorie für Systeme gewöhnlicher Differentialgleichung und wird im weiteren vorausgesetzt.
- (2) Die **Positivität der Lösung** folgt ebenfalls aus der allgemeinen Theorie, was im allgemeinen aber oft schwer zu beweisen ist.

Die **Massenerhaltung** folgt aus Gleichung (38), wenn wir  $g = \mathbb{1}$  setzen. Das ergibt

$$\frac{d}{dt} \sum_{i=1}^n V_i(t) = \frac{d}{dt} \langle V(t), \mathbb{1} \rangle_x = -\langle \mathbf{Q}_U \mathbf{D} h(t), \mathbf{D} \mathbb{1} \rangle_y = 0$$

da  $\mathbb{1}$  im Kern von  $\mathbf{D}$  liegt.

Aus  $\frac{d}{dt} \sum_{i=1}^n V_i(t) = 0$  folgt  $\sum_{i=1}^n V_i(t) = \sum_{i=1}^n V_i(0) = V_0$

- ③ Aus Gleichung (35) folgern wir (ebenfalls, weil  $\mathbb{1}$  im Kern von  $\mathbf{D}$  liegt), daß  $h(t) = c\mathbb{1}$  zu  $\dot{V}(t) = 0$  führt. Konstante Höhen (und entsprechende Volumina) bilden also einen stationärer Zustand.

### 5.3.6 Die freie Energie

Um Eigenschaft ④ zu untersuchen, nehmen wir an, daß es ein geeignetes Energie-Funktional  $E(V)$  gibt. Insbesondere sollte es auf der Lösung abklingen. Das heißt, wenn wir die Lösung  $V(t)$  in  $E(V)$  einsetzen, dann sollte die reelle Funktion  $e(t) := E(V(t))$  abklingen. Dazu berechnen wir  $\dot{e}(t)$  unter Benutzung der Gleichung (37):

$$\frac{d}{dt}E(V(t)) = \langle E'(V), \dot{V}(t) \rangle = -\langle E'(V), \mathbf{D}^* \mathbf{Q}_U \mathbf{D} \psi(V) \rangle = -\langle \mathbf{D} E'(V), \mathbf{Q}_U \mathbf{D} \psi(V) \rangle \quad (40)$$

(wobei  $E'$  die Gateauxableitung von  $E$  ist). Da  $\mathbf{Q}_U$  ein positiver Operator ist, ist die rechte Seite offensichtlich für  $E'(V) = \psi(V)$  negativ, was zu  $\frac{d}{dt}E(V(t)) \leq 0$  führt. Das wäre gerade Eigenschaft ⑤. Wir wollen deshalb eine Energie als

$$E(V) = \sum_{i=1}^n G_i(V_i) \quad (41)$$

mit  $G'_i = \psi_i$  einführen. Offensichtlich ist  $G_i$  als Stammfunktion einer monotonen Funktion konvex. Zur Eindeutigkeit legen wir den Wert  $G_i(0) = 0$  fest. Auch das abstrakte Funktional  $E(V)$  ist konvex, da seine zweite Gateauxableitung  $\partial^2 E(V)$ , die Hessematrix, positiv ist. Es ist  $\partial^2 E(V) = \mathbf{Q}_{\psi'}$  eine Diagonalmatrix mit positiver Diagonalen.

Die eben definierte freie Energie ist für die Aufgabe geeignet, wenn die Eigenschaften ④ und ⑥ erfüllt sind (④ ist wie erwähnt nach Konstruktion erfüllt).

### 5.3.7 Das Minimum der freie Energie

Wir beweisen Eigenschaft ④. Dazu müssen wir das Minimum von  $E(V)$  unter der Zusatzbedingung  $\sum_i V_i = V_0$  bestimmen. Wir betrachten die Lagrangefunktion

$$L(V, \lambda) = E(V) - \lambda (\langle V, \mathbb{1} \rangle - V_0) = \sum_{i=1}^n G_i(V_i) - \lambda \left( \sum_{i=1}^n V_i - V_0 \right)$$

Es ist

$$\partial_V L(V, \lambda) = \partial E(V) - \lambda \mathbb{1}$$

(mit der Gateauxableitung  $\partial E = \psi(V) : \mathcal{X}^* \rightarrow \mathcal{X}$ , die ein monotoner Operator ist) oder komponentenweise

$$\frac{\partial}{\partial V_i} L(V, \lambda) = G'_i(V_i) - \lambda = \psi_i(V_i) - \lambda$$

Die Lösung von  $\psi_i(V_i) - \lambda = 0$  sei  $V_i^s$ . Abstrakt ist  $V^s = (\partial E)^{-1}(\lambda \mathbb{1}) = \varphi(\lambda \mathbb{1})$ . Wir erhalten  $V_i^s = \varphi_i(\lambda)$  und damit  $V_0 = \sum_i V_i^s = \sum_i \varphi_i(\lambda)$ . Es sei  $\varphi_0 = \sum_i \varphi_i$ . Diese Funktion ist als Summe monotoner Funktionen ebenfalls monoton. Wir setzen  $\psi_0 := \varphi_0^{-1}$ . Das ergibt

$$\lambda = \psi_0(V_0)$$

und damit

$$V_i^s = \varphi_i(\psi_0(V_0))$$

Für die entsprechenden Höhen erhalten wir

$$h_i^s = \psi_i(V_i^s) = \psi_i(\varphi_i(\psi_0(V_0))) = \psi_0(V_0) = \lambda$$

D.h., im Extremfall (wir wissen noch nicht, ob es ein Minimum ist) sind die Höhen konstant und gerade der Lagrangemultiplikator. Das ist der bereits gefundene stationäre Zustand. Es ist also  $h^s = \lambda \mathbb{1}$ .

Wir beweisen, daß  $E(V) \geq E(V^s)$ , d.h., daß der stationäre Zustand das globale Minimum der Energie bildet. Das ist eine universelle Eigenschaft die sich am leichtesten abstrakt beweisen läßt.

Es sei  $E^*(h)$  die Legendretransformierte von  $E(V)$ . Dann gilt nach der Youngschen Ungleichung

$$E(V) \geq \langle V, h \rangle - E^*(h), \quad \forall h \in \mathcal{X}, \quad V \in \mathcal{X}^*$$

Wir setzen der speziellen Wert  $h = \lambda \mathbb{1}$  ein. das ergibt

$$E(V) \geq \langle V, \lambda \mathbb{1} \rangle - E^*(\lambda \mathbb{1}), \quad \forall V \in \mathcal{X}^*$$

Wie bekannt gilt für  $V = \psi(\lambda \mathbb{1}) = V^s$  Gleichheit, also

$$E(V^s) = \langle V^s, \lambda \mathbb{1} \rangle - E^*(\lambda \mathbb{1})$$

Wir setzten diesen Ausdruck in die Ungleichung ein und erhalten

$$E(V) \geq E(V^s) + \langle V, \lambda \mathbb{1} \rangle - \langle V^s, \lambda \mathbb{1} \rangle = E(V^s) + \lambda(\langle V, \mathbb{1} \rangle - \langle V^s, \mathbb{1} \rangle)$$

Für die uns interessierenden  $V$ , die die Nebenbedingung erfüllen gilt  $V_0 = \langle V, \mathbb{1} \rangle = \langle V^s, \mathbb{1} \rangle$  und damit  $E(V) \geq E(V^s)$ .

$E(V^s)$  ist also tatsächlich das Minimum von  $E(V)$ .

### 5.3.8 Konvergenz der Energie ins Minimum. Idee

Aus  $\frac{d}{dt}E(V(t))$  folgt im allgemeinen nicht die Konvergenz  $E(V(t)) \rightarrow E(V^s)$ . Dazu sind weitere Annahmen erforderlich. Wir betrachten dazu als erstes eine Idee, wie man so eine Konvergenz beweisen könnte. Wir setzen  $e(t) = E(V(t)) - E(V^s)$ . Wie eben gezeigt ist  $e(t) \geq 0$ . Offensichtlich ist  $\frac{d}{dt}e(t) = \frac{d}{dt}E(V(t))$ , da  $E(V^s)$  nicht von  $t$  abhängt.

Gleichung (40) läßt sich dann prinzipiell als

$$\frac{d}{dt}e(t) = -a(t) \tag{42}$$

schreiben (mit  $a(t) = \langle \mathbf{D}\psi(V(t)), \mathbf{Q}_U \mathbf{D}\psi(V(t)) \rangle$ , wobei wir  $E' = \psi$  benutzt haben). Angenommen, es ist ein Zusammenhang zwischen  $e$  und  $a$  der Form  $a = \alpha e$  bekannt, dann läßt sich Differentialgleichung (42) lösen. Wir erhalten  $e(t) = e(0)e^{-\alpha t}$  folgt. Hieraus folgt natürlich  $e(t) \rightarrow 0$  und damit  $E(V(t)) \rightarrow E(V^s)$ .

Ein Zusammenhang  $a = \alpha e$  ist im allgemeinen nicht zu erwarten. Oft läßt sich aber eine Ungleichung der Form

$$a \geq \alpha e \tag{43}$$

beweisen, aus der die Differentialungleichung

$$\frac{d}{dt}e(t) \leq -\alpha e(t) \quad (44)$$

folgt. Sollte sich hieraus eine Abschätzung der Form

$$e(t) \leq e(0)e^{-\alpha t} \quad (45)$$

ergeben, dann folgt zusammen mit  $e \geq 0$  ebenfalls  $E(V(t)) \rightarrow E(V^s)$ .

Ungleichungen der Form (46) heißen Poincareungleichungen. Wir werden im weiteren für unsere Aufgabe eine Poincareungleichung herleiten, wollen davor aber beweisen, daß aus einer Ungleichung der Form (46) über (44) eine Ungleichung der Form (45) folgt. Dieser Schluß heißt Grönwallsches (oder Gronwallsches) Lemma.

Ist dieser Schluß anwendbar, dann folgt zusammen mit der Poincareungleichung – die wir noch herleiten werden – die gewünschte Konvergenz  $E(V(t)) \rightarrow E(V^s)$ .

### 5.3.9 Grönwallsches Lemma

Es Sei  $e(t) \geq 0$ ,  $e(0) = e_0 > 0$ ,  $a > 0$  und

$$\dot{e}(t) \leq -ae(t)$$

Dann gilt

$$0 \leq e(t) \leq e_0 e^{-at} .$$

Es ist klar, daß hieraus  $e(t) \rightarrow 0$  für  $t \rightarrow \infty$  folgt.

**Beweis:** Wir setzen

$$X(t) := \log e(t) - \log e_0 + at$$

Offensichtlich ist  $X(0) = 0$  und aus der obigen Ungleichung folgt

$$\dot{X}(t) = \frac{\dot{e}(t)}{e(t)} + a \leq \frac{-ae(t)}{e(t)} + a = -a + a = 0$$

Aus  $X(0) = 0$  und  $\dot{X}(t) \leq 0$  folgt  $X(t) \leq 0$  für alle  $t$ , also

$$0 \geq \log e(t) - \log e_0 + at \iff \log e(t) \leq \log e_0 - at$$

Hieraus folgt die Behauptung, da  $\log$  eine monoton wachsende Funktion ist.

### 5.3.10 Poincareungleichung

Wir schreiben Gleichung (40) komponentenweise, benutzen (39) und setzen  $e(t) = E(V(t)) - E(V^s)$

$$\frac{d}{dt}e(t) = -\langle \mathbf{D}\psi(V), \mathbf{Q}_U \mathbf{D}\psi(V) \rangle = -\sum_{i < j}^n U_{ij}(\psi_i(V_i) - \psi_j(V_j))^2 \quad (46)$$

Andererseits versuchen wir  $E(V) - E(V^s)$  (hier wird die Zeitabhängigkeit von  $V$  nicht gebraucht, die Ungleichung, die wir jetzt herleiten, gilt allgemein) nach oben abzuschätzen. Wir haben

$$\begin{aligned}
 E(V) - E(V^s) &= \sum_{i=1}^n G_i(V_i) - \sum_{i=1}^n G_i(V_i^s) = \sum_{i=1}^n \left( G_i(V_i) - G_i(V_i^s) \right) \leq \\
 &\leq \sum_{i=1}^n (V_i - V_i^s) \psi_i(V_i) = \frac{1}{V_0} \sum_{i=1}^n (V_i V_0 - V_i^s V_0) \psi_i(V_i) = \\
 &= \frac{1}{V_0} \sum_{i=1}^n \left( V_i \left( \sum_{j=1}^n V_j^s \right) - V_i^s \left( \sum_{j=1}^n V_j \right) \right) \psi_i(V_i) = \\
 &= \frac{1}{V_0} \sum_{i,j=1}^n (V_i V_j^s - V_i^s V_j) \psi_i(V_i) = \\
 &= \frac{1}{V_0} \left( \sum_{i,j=1}^n V_i V_j^s \psi_i(V_i) - \sum_{i,j=1}^n V_i^s V_j \psi_i(V_i) \right) = \\
 &= \frac{1}{V_0} \left( \sum_{i,j=1}^n V_i V_j^s \psi_i(V_i) - \sum_{i,j=1}^n V_j^s V_i \psi_j(V_j) \right) = \\
 &= \frac{1}{V_0} \sum_{i,j=1}^n V_i V_j^s (\psi_i(V_i) - \psi_j(V_j)) = \\
 &= \frac{1}{V_0} \sum_{i < j}^n (V_i V_j^s - V_j V_i^s) (\psi_i(V_i) - \psi_j(V_j)) = \\
 &= \sum_{i < j}^n \frac{(V_i V_j^s - V_j V_i^s)}{V_0 (\psi_i(V_i) - \psi_j(V_j))} (\psi_i(V_i) - \psi_j(V_j))^2
 \end{aligned}$$

Bei den Umformungen haben wir benutzt:

- Für jede konvexe Funktion  $f$  und damit für alle  $G_i$  gilt

$$f(x) - f(x_0) \leq (x - x_0) f'(x), \quad \forall x, x_0$$

- $G'_i(V) = \psi_i(V)$
- $V_0 = \sum_{j=1}^n V_j = \sum_{j=1}^n V_j^s$
- $\sum_{i,j=1}^n = \sum_{j,i=1}^n$
- $\sum_{i,j=1}^n a_{ij} = \sum_{i < j}^n (a_{ij} + a_{ji})$  falls  $a_{ii} = 0$ .

Den erhaltenen Ausdruck kann man jetzt mit (46) vergleichen. Es gilt  $\frac{d}{dt} e(t) \leq -\alpha e(t)$ , falls

$$\sum_{i < j}^n \frac{(V_i V_j^s - V_j V_i^s)}{V_0 (\psi_i(V_i) - \psi_j(V_j))} (\psi_i(V_i) - \psi_j(V_j))^2 \leq \alpha \sum_{i < j}^n U_{ij} (\psi_i(V_i) - \psi_j(V_j))^2$$

gilt. Offensichtlich gilt sie, wenn

$$\frac{(V_i V_j^s - V_j V_i^s)}{V_0 (\psi_i(V_i) - \psi_j(V_j))} \leq \alpha U_{ij}, \quad \forall i, j$$

gilt. Das kann man erreichen, wenn man

$$M = \max_{i,j} \frac{(V_i V_j^s - V_j V_i^s)}{V_0 (\psi_i(V_i) - \psi_j(V_j))} \quad (47)$$

$$m = \min_{i,j} U_{ij} \quad (48)$$

$$\alpha = \frac{M}{m}$$

wählt.  $\alpha > 0$  muß erfüllt sein, was bei  $m > 0$  und  $M < \infty$  der Fall ist.  $m > 0$  ist sicher erfüllt, wenn  $U_{ij} > 0$  gilt, d.h., wenn keiner der Schläuche verstopft ist.  $M < \infty$  ist nicht offensichtlich, da der Nenner 0 werden kann. Dann ist aber auch der Zähler 0. Am einfachen Zylinder-Beispiel sieht man, daß  $M < \infty$  erfüllt ist. Im allgemeinen gilt das auch, wenn an die  $\psi_i$  leicht zu erfüllende Bedingungen gestellt werden. (**genauer!**)

Die Wahl dieses  $\alpha$  ist allerdings häufig sehr grob. D.h., das exponentielle Abklingen ist üblicherweise viel schneller, als  $e^{-\alpha t}$ . Im konkreten Fall kann es sicher sein, daß sich das System ins Gleichgewicht bewegt, auch wenn einige (nicht zu viele) der  $U_{ij} = 0$  sind.

Im unendlich dimensionalen Fall kann  $m = 0$  und  $M = \infty$  gelten (ist eigentlich typisch). Trotzdem kann man häufig exponentielles Abklingen beweisen (siehe Poincareungleichung für die Diffusionsgleichung).

### 5.3.11 Konvergenz der Lösung in den stationären Zustand

Aus

$$0 \leq E(V) - E(V^s) \leq \sum_{i=1}^n (V_i - V_i^s) \psi_i(V_i) \rightarrow 0$$

folgt für positive und bis  $V_0$  beschränkte  $\psi_i$   $V_i(t) - V_i^s \rightarrow 0$  für jede Komponente.

## 5.4 Pots and Tubes (4 x 6). Zylindrischer Fall

### 5.4.1 Aufgabenstellung

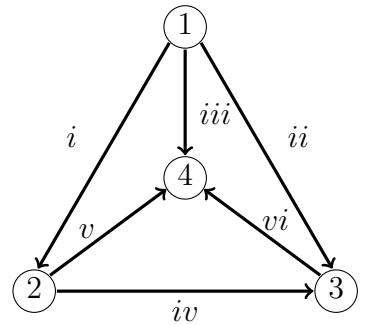
Wir wollen hier für den allgemeinen Fall von  $n$  Töpfen und  $m$  Schläuchen ein Gleichungssystem herleiten. Töpfe und Schläuche bilden einen Graphen, bei dem die Töpfe die Knoten und die Schläuche die Kanten darstellen. Im Unterschied zu einem abstrakten Graphen, der nur durch den Zusammenhang von Knoten und Kanten beschrieben wird, gibt es in unserer realen Situation noch Materialparameter der Töpfe (Grundfläche) und Schläuche (z.B. Dicke).

Wir illustrieren die Herleitung am konkreten Fall von vier Töpfen und sechs Schläuchen. Dieser Fall ist – im Gegensatz zum Fall von drei Töpfen und drei Schläuchen – fürs Verständnis kompliziert genug. Wir setzen voraus, daß klar ist, wofür wir uns interessieren (die Wasservolumina in den Töpfen) und was der Grund für Bewegung ist (Höhdifferenz der Wasserspiegel).

Wir legen als erstes die Stromrichtung in den Schläuchen fest. Intuitiv würde man richtigerweise annehmen, daß der reale Wasserstrom von oben nach unten fließt. Aber über die Wasserhöhen wissen wir höchstens am Anfang Bescheid.

Es stellt sich aber (zum Glück) heraus, daß diese Festlegung willkürlich ist, aber über die gesamte Rechnung festgehalten werden muß. Im Gegensatz zum Volumen kann der Strom positiv oder negativ sein. Das bedeutet nur eine verschiedene Stromrichtung. Eine negative Stromrichtung kann man interpretieren als eine negative Wassermenge, die in positiver Richtung fließt.

Wir legen deshalb fest: Wenn ein Pfeil von  $h_i$  nach  $h_j$  zeigt, betrachten wir den Strom als proportional zu  $h_i - h_j$ .



### 5.4.2 Vier Vektorräume

Die Matrizen kann man als Abbildungen zwischen linearen Räumen betrachten. Die Räume mit \* enthalten extensive, die Räume ohne \* intensive Größen. Für uns ist wichtig, welche Matrix  $\mathbf{A}$  die Knoten auf die Kanten abbildet. Direkt  $\mathbf{A}$  zu erraten ist schwer. Aber  $\mathbf{A}$  läßt sich leicht über den Umweg über die Kanten als Produkt der Matrizen  $\mathbf{D}^* \mathbf{Q}_U \mathbf{D}$  bestimmen.

Wir betrachten folgende Räume:

$$\begin{aligned}\mathcal{X} &= \mathbb{R}_n, \quad \mathcal{Y} = \mathbb{R}_m \\ h &\in \mathcal{X}, \quad \eta \in \mathcal{Y}, \quad V, S \in \mathcal{X}^*, \quad J, U \in \mathcal{Y}^*\end{aligned}$$

und Matrizen

$$\begin{aligned}\mathbf{D} : \mathcal{X} &\rightarrow \mathcal{Y}^*, \quad \mathbf{D}^* : \mathcal{Y} &\rightarrow \mathcal{X}^* \\ \mathbf{Q}_U : \mathcal{Y} &\rightarrow \mathcal{Y}^*, \quad \mathbf{Q}_U^{-1} : \mathcal{Y}^* &\rightarrow \mathcal{Y} \\ \mathbf{Q}_S : \mathcal{X} &\rightarrow \mathcal{X}^*, \quad \mathbf{Q}_S^{-1} : \mathcal{X}^* &\rightarrow \mathcal{X}\end{aligned}$$

$$\begin{array}{ccccc} \mathbf{A} = \mathbf{D}^* \mathbf{Q}_U \mathbf{D} & & & & \mathcal{X}^* \ni V, S \\ \xleftarrow{\mathbf{Q}_S^{-1}} & & & & \uparrow \mathbf{D}^* \\ h \in \mathcal{X} & \xleftrightarrow{\mathbf{D}} & \eta \in \mathcal{Y} & \xleftrightarrow{\mathbf{Q}_U} & \mathcal{Y}^* \ni J, U \end{array}$$

### 5.4.3 Von den Töpfen (Knoten) zu den Schläuchen (Kanten)

Als nächstes müssen wir aus den Höhen Triebkräfte machen. Triebkräfte sind Höhendifferenzen. Die Triebkräfte sollen natürlich in Richtung der Ströme zeigen, d.h. z.B., daß in der Kante  $i$  die Triebkraft  $h_1 - h_2$  wirkt.

In Matrixschreibweise bedeutet das, daß wir mit einer *Inzidenzmatrix* den 4-dim. Vektor der Höhen auf einen 6-dim. Vektor von Triebkräften (die nennen wir  $\eta$ ) abbilden:

$$\eta = \begin{pmatrix} \eta_i \\ \eta_{ii} \\ \eta_{iii} \\ \eta_{iv} \\ \eta_v \\ \eta_{vi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} +1 & -1 & 0 & 0 \\ +1 & 0 & -1 & 0 \\ +1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & +1 & -1 & 0 \\ 0 & +1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & +1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h_1 \\ h_2 \\ h_3 \\ h_4 \end{pmatrix} =: \mathbf{D}h$$

Die Inzidenzmatrix  $\mathbf{D}$  enthält in jeder Zeile genau eine  $+1$  und genau eine  $-1$ , der Rest sind Nullen.

Die Triebkräfte beschreiben nur die potentielle Möglichkeit für das Wasser zu fließen. Sie ergeben noch keinen physischen Strom. Was tatsächlich durch die Schläuche fließt hängt von den physikalischen Eigenschaften der Schläuche ab, z.B. vom Querschnitt. Durch einen dicken Schlauch kann mehr als durch einen dünnen Schlauch fließen. Wir wollen hier nicht auf Details des Schlauches eingehen und nehmen an, daß zu jedem Schlauch eine Materialkonstante  $U_j$  gehört, die die gesamten Materialeigenschaften zusammenfaßt. Diese extensive Größe verhält sich additiv. Man kann sich deshalb darunter einen effektiven Querschnitt vorstellen. Je größer  $U_j$ , desto mehr kann hindurch fließen.

Die Ströme bezeichnen wir mit  $J$ . Es ist also  $J_j = U_j \eta_j$ . In Matrixschreibweise ist das

$$J = \begin{pmatrix} J_i \\ J_{ii} \\ J_{iii} \\ J_{iv} \\ J_v \\ J_{vi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_i & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & U_{ii} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & U_{iii} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & U_{iv} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & U_v & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & U_{vi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_i \\ \eta_{ii} \\ \eta_{iii} \\ \eta_{iv} \\ \eta_v \\ \eta_{vi} \end{pmatrix} = \mathbf{Q}_U \eta$$

Hier bezeichnen wir mit  $\mathbf{Q}_U$  die Diagonalmatrix erzeugt mit dem Vektor  $U = (U_i, \dots, U_{vi})$ .

### 5.4.4 Von den Schläuchen (Kanten) wieder zurück zu den Töpfen (Knoten)

Als nächstes müssen wir ermitteln, wie die Ströme eine Veränderung der Volumina bewirken. Betrachten wir z.B. Topf 2. Topf 2 erhält Wasser aus den Töpfen 1, 3 und 4 durch die Schläuche  $i$ ,  $iv$  bzw.  $v$ , wobei die Stromrichtung zu beachten ist. Strom  $i$  fließt in Topf 2 hinein, die Ströme  $iv$  und  $v$  fließen aus ihm heraus. Das ergibt für die Volumenänderung

$$\dot{V}_2 = +J_i - J_{iv} - J_v$$

Für das Vorzeichen ist nur die am Anfang festgelegte Stromrichtung wichtig. Es ist völlig unerheblich, in welche Richtung das reale Wasser fließt. Die Stromrichtung sagt, aus Topf 1 fließt über Schlauch  $i$  etwas in Topf 2 hinein. Das kann positives oder negatives Wasser sein. Negatives Wasser kann man als "es fließt heraus" interpretieren.

Analog erhält man die Änderungen der andern Volumina. In Matrixschreibweise bedeutet das

$$\dot{V}(t) = \begin{pmatrix} \dot{V}_1 \\ \dot{V}_2 \\ \dot{V}_3 \\ \dot{V}_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ +1 & 0 & 0 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & +1 & 0 & +1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & +1 & 0 & +1 & +1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_i \\ J_{ii} \\ J_{iii} \\ J_{iv} \\ J_v \\ J_{vi} \end{pmatrix} = -\mathbf{D}^* J$$

Es stellt sich heraus, daß die Matrix, die die Ströme auf die Töpfe verteilt, gerade die transponierte Matrix  $\mathbf{D}^*$  mit negativem Vorzeichen ist. Das hat einen tieferen Sinn.  $\mathbf{D}^*$  macht in einem physikalischen Sinn das rückgängig, was  $\mathbf{D}$  vorher angerichtet hat.  $\mathbf{D}$  verteilt das Wasser der Töpfe auf die Ströme und  $\mathbf{D}^*$  sammelt die Ströme wieder für jeden Topf ein, allerdings in umgekehrter Richtung, daher das andere Vorzeichen<sup>4</sup>

**Achtung:** Das darf nicht mit der inversen Matrix einer Matrix verwechselt werden. Das "rückgängig machen" bedeutet nicht die Umkehrung!

Zusammengefaßt erhalten wir folgende Gleichung:

$$\dot{V}(t) = -\mathbf{D}^* \mathbf{Q}_U \mathbf{D} h(t) =: -\mathbf{A} h(t) \quad (49)$$

#### 5.4.5 Nummerierung der Schläuche (Kanten)

Im Extremfall ist jedes Knotenpaar mit einer Kante verbunden (vollständiger Graph). Das sind genau  $\binom{n}{2} = n(n - 1)/2$  Kanten. Es ist sinnvoll, sie anstelle mit römischen Ziffern mit einem Paar von Indizes zu bezeichnen. Es seien  $J_{ij}$  bzw.  $U_{ij}$  Ströme durch und Materialkonstante an der Kante, die vom Knoten  $i$  zum Knoten  $j$  zeigt. Wie wir wissen, ist die Festlegung der Stromrichtung unerheblich. Wir werden deshalb alle Kanten von Knoten  $i$  zum Knoten  $j$  mit  $i < j$  zeigen lassen. Damit erhalten wir für die Kanten  $\binom{n}{2}$  Indizes  $ij$  mit  $i < j$ .

Gleichung (87) lautet ausgeschrieben

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \dot{V}_1 \\ \dot{V}_2 \\ \dot{V}_3 \\ \dot{V}_4 \end{pmatrix} &= - \begin{pmatrix} +1 & +1 & +1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & +1 & +1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & 0 & +1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{12} & & & & 0 \\ & \ddots & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & U_{34} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} +1 & -1 & 0 & 0 \\ +1 & 0 & -1 & 0 \\ +1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & +1 & -1 & 0 \\ 0 & +1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & +1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h_1 \\ h_2 \\ h_3 \\ h_4 \end{pmatrix} = \\ &= - \begin{pmatrix} U_{12} + U_{13} + U_{14} & -U_{12} & -U_{13} & -U_{14} \\ -U_{12} & U_{12} + U_{23} + U_{24} & -U_{23} & -U_{24} \\ -U_{13} & -U_{23} & U_{13} + U_{23} + U_{34} & -U_{34} \\ -U_{14} & -U_{24} & -U_{34} & U_{14} + U_{24} + U_{34} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h_1 \\ h_2 \\ h_3 \\ h_4 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Die Matrix  $\mathbf{A}$  bestimmt das Verhalten des Systems und ist Hauptgegenstand der weiteren Untersuchung. Die Modellierung hat über verschiedene Schritte zur Bestimmung der Systemmatrix  $\mathbf{A}$  geführt.

---

<sup>4</sup> $\mathbf{D}$  schiebt das Wasser los, von den Knoten in die Kanten.  $\mathbf{D}^*$  schiebt das Wasser auch los, von den Kanten in die Knoten. Es muß das Wasser in die Knoten aber "eingesaugt" werden, daher  $-\mathbf{D}^*$ .

### 5.4.6 Die Zustandsgleichung

Wir betrachten als Beispiel den einfachen Fall als, daß  $S_i(h) = S_i$  unabhängig von  $h$  ist. D.h., die Töpfe sind (allgemeine) Zylinder mit gegebener Grundfläche  $S_i$ . Dann hängt  $V_i$  linear von  $h_i$  ab

$$\begin{aligned} V_i &= \varphi_i(h_i) = h_i S_i \\ h_i &= \psi_i(V_i) = \frac{V_i}{S_i} \\ F_i(h_i) &= \frac{1}{2} h_i^2 S_i \\ G_i(V_i) &= \frac{1}{2} \frac{V_i^2}{S_i} \end{aligned}$$

Wir setzen noch  $S_0 = \sum_i S_i$ , die Gesamtgrundfläche aller Zylinder.

In (39) eingesetzt ergibt das

$$\dot{V}_j = - \sum_{j \neq i=1}^n \left( U_{ij} \frac{V_j}{S_j} - U_{ji} \frac{V_i}{S_i} \right) = - \sum_{j \neq i=1}^n U_{ij} \left( \frac{V_j}{S_j} - \frac{V_i}{S_i} \right)$$

### 5.4.7 Stationärer Zustand

Analog zum allgemeinen Fall erhalten wir

$$\begin{aligned} V_i^s &= \varphi_i(\lambda) = \lambda S_i \\ V_0 &= \sum_i V_i^s = \sum_i \varphi_i(\lambda) = \lambda S_0, \quad \Rightarrow \quad \varphi_0(\lambda) = \lambda S_0, \quad \Rightarrow \quad \psi_0(V) = \varphi_0^{-1}(V) = \frac{V}{S_0} \\ h_0 &= \lambda = \psi_0(V_0) \end{aligned}$$

### 5.4.8 Poincareungleichung

Wir setzen wieder  $e(t) = E(V(t)) - E(V^s)$ .

$$\frac{d}{dt} e(t) = - \sum_{i < j}^n U_{ij} (\psi_i(V_i) - \psi_j(V_j))^2 = - \sum_{i < j}^n U_{ij} (h_i(t) - h_j(t))^2$$

Andererseits gilt

$$\begin{aligned} E(V) - E(V^s) &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n h_i^2 S_i - \frac{1}{2} h_0^2 S_0 = \frac{1}{2S_0} \sum_{j=1}^n S_j \sum_{i=1}^n h_i^2 S_i - \frac{1}{2S_0} (h_0 S_0)(h_0 S_0) = \\ &= \frac{1}{2S_0} \sum_{j=1}^n S_j \sum_{i=1}^n h_i^2 S_i - \frac{1}{2S_0} \left( \sum_{j=1}^n h_j S_j \right) \left( \sum_{i=1}^n h_i S_i \right) = \\ &= \frac{1}{2S_0} \left( \sum_{i,j=1}^n h_i^2 S_i S_j - \sum_{i,j=1}^n h_i h_j S_i S_j \right) = \frac{1}{2} \sum_{i < j} \frac{S_i S_j}{S_0} (h_i - h_j)^2 \end{aligned}$$

Hier haben wir  $S_0 = \sum_{i=1}^n S_i$  und  $h_0 S_0 = V_0 = \sum_{i=1}^n V_i = \sum_{i=1}^n h_i S_i$  benutzt.

Damit gilt

$$\frac{1}{2} \sum_{i < j}^n U_{ij} (h_i - h_j)^2 \geq \alpha \frac{1}{2} \sum_{i < j} \frac{S_i S_j}{S_0} (h_i - h_j)^2$$

falls

$$\frac{1}{2} U_{ij} \geq \alpha \frac{1}{2} \frac{S_i S_j}{S_0}$$

gilt, also z.B. für

$$0 < \alpha \leq \min_{i,j} \frac{U_{ij} S_0}{S_i S_j}$$

**Bemerkung:** Setzt man die speziellen Ausdrücke in (47) ein, erhält man

$$\frac{(V_i V_j^s - V_j V_i^s)}{V_0 (\psi_i(V_i) - \psi_j(V_j))} = \frac{h_i S_i \cdot h_0 S_j - h_j S_j \cdot h_0 S_i}{h_0 S_0 (h_i - h_j)} = \frac{S_i S_j}{S_0}$$

Es fehlt der Faktor  $\frac{1}{2}$  im Vergleich zum obigen Ausdruck. Warum?

Ausdruck (47) haben wir erhalten, indem wir die Ungleichung  $f(x) - f(x_0) \leq (x - x_0)f'(x)$  benutzt haben. Für quadratische Funktionen  $f(x) = \frac{1}{2}x^2$  bedeutet das  $\frac{1}{2}x^2 - \frac{1}{2}x_0^2 \leq (x - x_0)x$ . In der obigen Umformung haben wir aber nirgends eine Ungleichung verwendet. Tatsächlich haben wir die Identität

$$\frac{1}{2}x^2 - \frac{1}{2}x_0^2 = (x - x_0)\frac{1}{2}(x + x_0) = (x - x_0)x - \frac{1}{2}(x - x_0)^2$$

benutzt, die wegen des negativen quadratischen Ausdrückes auf der rechten Seite natürlich exakter ist als die Ungleichung. Das macht gerade den Faktor  $\frac{1}{2}$  aus. Um den Ausdruck (47) zu verbessern, hätten wir eine Identität anstelle von  $f(x) - f(x_0) \leq (x - x_0)f'(x)$  benutzen müssen, was im allgemeinen aber sehr aufwändig und für unsere Zwecke auch überflüssig wäre.

#### 5.4.9 Eine Gleichung für die Kanten

Anstelle einer Gleichung für die Knoten, lässt sich auch eine Gleichung für die Kanten aufstellen. Diese Gleichung ist aber nicht so intuitiv, denn die zeitliche Änderung der Volumina (extensive Größe in den Knoten) lässt sich besser beobachten als zeitliche Änderung der Ströme (extensive Größe in den Kanten). Wir können aber eine Gleichung für  $\dot{J}$  formal mathematisch leicht herleiten.

Wir suchen eine Gleichung für  $\dot{J}$ . Dazu differenzieren wir die Gleichung  $\mathbf{J} = \mathbf{Q}_U \eta$  nach der Zeit und erhalten  $\dot{J} = \mathbf{Q}_U \dot{\eta}$ . Hier wurde benutzt, daß sich die Materialparameter  $U$  in der Zeit nicht ändern sollen.

$\dot{\eta}$  ersetzen wir, indem wir die Gleichung  $\eta = \mathbf{D}h$  nach der Zeit differenzieren. Das ergibt  $\dot{\eta} = \mathbf{D}\dot{h}$ .  $\dot{h}$  ersetzen wir, indem wir die Zustandsgleichung  $V = \mathbf{Q}_S h$  in der Form  $h = \mathbf{Q}_S^{-1}V$  nach der Zeit differenzieren. Das ergibt  $\dot{h} = \mathbf{Q}_S^{-1}\dot{V}$ .

$\dot{V}$  kenne wir bereits, das ist  $\dot{V} = -\mathbf{D}^* J$ .

Alle Gleichungen zusammengefaßt ergeben

$$\dot{J} = -\mathbf{Q}_U \mathbf{D} \mathbf{Q}_S^{-1} \mathbf{D}^* J \tag{50}$$

Zu dieser Gleichung müssen noch Anfangswerte bestimmt werden. Sie lassen sich aus  $h_0$  oder  $V_0$  als  $J_0 = \mathbf{Q}_U \mathbf{D} h_0 = \mathbf{Q}_U \mathbf{D} \mathbf{Q}_S^{-1} V_0$  bestimmen.

### 5.4.10 Stationäre Zustände

Wegen  $\mathbf{D}\mathbb{1} = 0$  ist konstantes  $h$  ein stationärer Zustand. Aus  $\mathbf{D}\mathbb{1} = 0$  folgt  $\eta = 0$  und damit  $J = \mathbf{Q}_U\eta = 0$ . D.h., im stationären Zustand gibt es keine Ströme.

Betrachten wir umgekehrt die Kantengleichung (50).  $\dot{J} = 0$  gilt für – ebenfalls wegen  $\mathbf{D}\mathbb{1} = 0$  – für  $\mathbf{Q}_S^{-1}\mathbf{D}^*J = \mathbb{1}$ , was zu  $\mathbf{D}^*J = \mathbf{Q}_S\mathbb{1} = S$  äquivalent ist. D.h., ein stationärer Zustand ist möglich, wenn  $\mathbf{D}^*J = S$  gilt, was nicht  $J = 0$  bedeutet. Es ist also möglich, daß Ströme fließen, ohne daß sich an den Höhen und Volumina etwas ändert. Das kann man sich z.B. bei 3 Töpfen, die mit 3 Schläuchen verbunden sind, vorstellen. Solche Zustände werden häufig Fließgleichgewichte genannt.

### 5.4.11 Zusammenhänge der Gleichungen

Wir haben vier sich zeitlich verändernde physikalische Größen,  $V(t), h(t), S(t), \eta(t)$ , die in vier verschiedenen Räumen liegen und miteinander zusammenhängen. Diese Zusammenhänge werden in folgender Übersicht dargestellt (die explizite Zeitabhängigkeit wird weggelassen, wenn sie nicht nötig ist):

Die Gleichungen zwischen den Räumen werden in der Reihenfolge ihres Auftretens bei der Modellierung angeführt.

Knoten	$\mathcal{X}, \mathcal{X}^* = \mathbb{R}^n$	Kanten	$\mathcal{Y}, \mathcal{Y}^* = \mathbb{R}^m$
$\eta = \mathbf{D}h$		$\dot{J} = \mathbf{Q}_U\dot{\eta}$	
$J = \mathbf{Q}_U\eta$		$\dot{\eta} = \mathbf{D}\dot{h}$	
$\dot{V} = -\mathbf{D}^*J$		$\dot{h} = \mathbf{Q}_S^{-1}\dot{V}$	
$h = \mathbf{Q}_S^{-1}V$		$\dot{V} = -\mathbf{D}^*J$	
$\dot{V} = -\mathbf{D}^*\mathbf{Q}_U\mathbf{D}\mathbf{Q}_S^{-1}V$		$\dot{J} = -\mathbf{Q}_U\mathbf{D}\mathbf{Q}_S^{-1}\mathbf{D}^*J$	
$V_0 = \mathbf{Q}_S h_0$		$J_0 = \mathbf{Q}_U\mathbf{D}h_0$	
$\dot{h} = -\mathbf{Q}_S^{-1}\mathbf{D}^*\mathbf{Q}_U\mathbf{D}h$		$\dot{\eta} = -\mathbf{D}\mathbf{Q}_S^{-1}\mathbf{D}^*\mathbf{Q}_U\eta$	
$h_0 = h_0$		$\eta_0 = \mathbf{D}h_0$	

Ausgehend von den Knotengrößen, lassen sich die Kantengrößen bestimmen. Es sei  $V$  gegeben ( $h$  ist analog, da fällt  $\mathbf{Q}_S^{-1}$  weg):

$$\begin{aligned} h &= \mathbf{Q}_S^{-1}V \\ \eta &= \mathbf{D}h = \mathbf{D}\mathbf{Q}_S^{-1}V \\ J &= \mathbf{Q}_U\eta = \mathbf{Q}_U\mathbf{D}\mathbf{Q}_S^{-1}V \end{aligned}$$

Umgekehrt lassen sich aus den Kantengrößen die Knotengrößen nicht ohne weiteres bestimmen. Es sei  $J$  gegeben.  $V$  läßt sich aus  $\dot{V} = -\mathbf{D}^*J$  bestimmen, was auch eine Differentialgleichung ist. Das ergibt

$$V(t) = V_0 - \int_0^t \mathbf{D}^*J(t')dt' \tag{51}$$

Hieraus ergibt sich  $h(t)$ . Analoges gilt für gegebenes  $\eta$ .

### 5.4.12 Allgemeine Eigenschaften

- Die Eigenwerte sind stets reell und positiv (falls alle Materialparameter positiv sind).
- Ein Eigenwert von  $\mathbf{D}^* \mathbf{Q}_U \mathbf{D} \mathbf{Q}_S^{-1}$  ist 0. Ihm entspricht der Eigenvektor  $h = \text{const.}$ , also gleiche Höhen, was auch der stationäre Wert ist.
- $\sigma(\mathbf{D}^* \mathbf{Q}_U \mathbf{D}) = \sigma(\mathbf{D} \mathbf{D}^* \mathbf{Q}_U)$  **Beweis!**
- $\sigma(\mathbf{D} \mathbf{Q}_S^{-1} \mathbf{D}^*) = \sigma(\mathbf{D}^* \mathbf{D} \mathbf{Q}_S^{-1})$  **Beweis!**
- $\langle \mathbf{Q}_S^{-1} \mathbf{D}^* J, \mathbf{D}^* J \rangle \geq c \langle \mathbf{Q}_U^{-1} J, J \rangle$
- $\langle \mathbf{Q}_U \mathbf{D} \mathbf{Q}_S^{-1} V, \mathbf{D} \mathbf{Q}_S^{-1} V \rangle \geq c \langle \mathbf{Q}_S^{-1} V, V \rangle$
- 
- 

### 5.4.13 Lösungsexistenz

Setzt man die Zustandsgleichung in die Bilanzgleichung ein, erhält man

$$\dot{V}_i(t) = \sum_{j=1}^n a_{ij} \left( \frac{V_j}{S_j} - \frac{V_i}{S_i} \right)$$

Wie man leicht sieht, ist der Operator  $\mathbf{G}$  mit der Matrix  $\mathbf{G}_{ij} = \frac{a_{ij}}{S_j}$  der adjungierte eines Markowgenerators. Aus der Theorie der Markowhalbgruppen folgt, daß diese Gleichung eine eindeutige zeitlich-globale Lösung hat, und die Positivität und die  $C^*$ -Norm (also die Summe der  $V_i$ ) erhalten bleiben.

### 5.4.14 Volumenerhaltung

Die Gesamtmenge  $V_0 = \sum V_i$  an Wasser bleibt erhalten. Das sollte sich in der Gleichung widerspiegeln. Es gilt

$$\begin{aligned} \dot{V}(t) &= \frac{d}{dt} \sum_i V_i(t) = \sum_i \dot{V}_i(t) = \sum_{ij}^n a_{ij} (h_j - h_i) = \sum_{ij}^n a_{ij} h_j - \sum_{ij}^n a_{ij} h_i = \\ &= \sum_{ij}^n a_{ij} h_j - \sum_{ji}^n a_{ji} h_j = \sum_{ij}^n (a_{ij} - a_{ji}) h_j = 0 \end{aligned}$$

### 5.4.15 Gleichgewichtslösung

Das Wasser kommt zur Ruhe, wenn sich alle  $h_i = h_0$  ausgeglichen haben. Dann ist  $h_i = h_j$  und die rechte Seite der Gleichung und damit auch die linke Seite = 0.

Diese Gleichgewichtslösung läßt sich leicht aus der Gesamtmenge berechnen. Es ist

$$V_0 = \sum_{i=1}^n V_i = \sum_{i=1}^n V_i^s = \sum_{i=1}^n S_i h_0 = h_0 \sum_{i=1}^n S_i = h_0 S_0$$

Das ergibt

$$h_0 = \frac{V_0}{S_0} = \frac{V_1 + \dots + V_n}{S_1 + \dots + S_n} = \frac{V_1}{S_1} \oplus \dots \oplus \frac{V_n}{S_n} = h_1 \oplus \dots \oplus h_n$$

wie es für intensive Größen sein muß.

### 5.4.16 Konvergenz der Lösung

Es gilt

$$\begin{aligned}
 E(V(t)) - E(V^s) &= E(V(t)) - \frac{1}{2}h_0V_0 = E(V(t)) - h_0V_0 + \frac{1}{2}h_0V_0 = \\
 &= \frac{1}{2} \sum_i \frac{1}{S_i} V_i^2 - \sum_i \frac{1}{S_i} V_i V_i^s + \frac{1}{2} \sum_i \frac{1}{S_i} (V_i^s)^2 = \\
 &= \frac{1}{2} \sum_i \frac{1}{S_i} (V_i(t) - V_i^s)^2
 \end{aligned}$$

Das heißt, die Differenz der Energiefunktionale bildet gerade eine Norm im  $L_2$  mit den Gewichten  $1/S_i$ , die sämtlich positiv sind. Damit ist gezeigt, daß  $V(t)$  in dieser Norm (und damit punktweise, weil der Raum endlichdimensional ist) gegen  $V^s$  konvergiert.

## 5.5 Drift-Diffusionsgleichungen (heuristische Herleitung)

### 5.5.1 Die Diffusionsgleichung

Im letzten Semester haben wir eine Diffusionsgleichung mit konstantem Diffusionskoeffizienten aus mikroskopischen Überlegungen (In einem diskreten Raum mit diskreter Zeit Sprünge eines Teilchen in seine Nachbarpunkte und anschließendem Grenzwerte Zeit- und Ortsschritt gegen 0) und der Markowannahme (Lösung wird durch eine Halbgruppe beschrieben) hergeleitet.

Jetzt wollen wir eine Diffusionsgleichung auf phänomenologische Weise als Bilanzgleichung herleiten. Wir betrachten in einem Gebiet  $\Omega \subset \mathbb{R}^3$  eine Stoffmenge. Zu einem Zeitpunkt  $t$  sei in einer Teilmenge  $C \subset \Omega$  diese Menge  $p_C(t)$ . Wir bilanzieren die zeitliche Änderung dieser Menge. Wir nehmen an, daß sich diese Stoffmenge nur darurch ändern kann, weil Stoff durch die Oberfläche dieser Menge fließt. Es sei deshalb

$$\frac{d}{dt} p_C(t) = - \int_{\partial C} [n, J] d\gamma$$

Hier sei  $n$  die äußere Normale an  $C$ ,  $d\gamma$  das Flächenelement,  $[., .]$  das euklidische Skalarprodukt und  $J$  ein noch genauer zu bestimmender Strom. Das Minuszeichen vor dem Oberflächenintegral ergibt sich aus der Definition der Normalen als "äußere". Wir nehmen natürlicherweise an, daß sich die (positive) Stoffmenge im Innern verringert, wenn der Strom nach außen gerichtet ist.

Als nächsten müssen wir den Strom definieren. Die Triebkraft des Stromes sei die Änderung der Konzentration der Stoffmenge. Diese Konzentration sei  $u(x, t)$ . Die Triebkraft des Stromes sei seine Änderung, also  $-\nabla u$ . Das negative Vorzeichen bedeutet, daß die Konzentration sich in Richtung viel  $\rightarrow$  wenig ausgleicht, also gegen den Gradienten gerichtet ist, der in Richtung des Konzentrationsanstieges zeigt. Um aus der Triebkraft  $-\nabla u$  den Strom  $j$  zu erhalten multiplizieren wir die Triebkraft mit einer – möglicherweise ortsabhängigen – Materialfunktion  $d(x)$ , die die Fähigkeit des Materials, indem der Stofftransport stattfindet, beschreibt – dem (positiven) Diffusionskoeffizienten. Damit erhalten wir  $J = -d(x)\nabla u$ . Das ist die einfachste Beschreibung eines linearen Diffusionsstromes. Das ergibt für die Gleichung

$$\frac{d}{dt} p_C(t) = - \int_{\partial C} [n, J] d\gamma = \int_{\partial C} [n, d(x)\nabla u] d\gamma$$

Diese Gleichung muß durch eine Zustandsgleichung abgeschlossen werden. Dazu hemmen wir einfach an, daß die Stoffmenge in der Menge  $C$  das Integral über die Konzentration ist:

$$p_C(t) = \int_C u(x, t) dx$$

Mathematisch bedeutet diese Annahme, daß die Stoffmenge  $p$ , die im allgemeinen als extensive Größe ein Maß ist, eine Dichte  $u$  bezüglich des Lebesguemaßes hat.

Außerdem nehmen wir an, daß der Gaußsche Satz anwendbar ist, mit dem sich die ein Oberflächenintegral als Volumenintegral darstellen läßt. Damit erhält man

$$\frac{d}{dt} p_C(t) = \frac{d}{dt} \int_C u(x, t) dx = \int_{\partial C} [n, d(x)\nabla u] d\gamma = \int_C \operatorname{div}(d(x)\nabla u(x, t)) dx$$

Weiter nehmen wir an, daß sich die Zeitableitung unters Integral ziehen läßt und aus der Beliebigkeit der Menge  $C$  die punktweise Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} u(x, t) = \operatorname{div}(d(x)\nabla u(x, t))$$

folgt. Am Rand von  $\Omega$  nehmen wir an, daß kein Stoff das Gebiet verlassen kann. Das bedeutet homogene Neumannbedingungen

$$[n, d(x)\nabla u(x, t)]|_{x \in \partial\Omega} = \frac{\partial}{\partial n}(d(x)u(x, t))|_{x \in \partial\Omega} = 0$$

### Bemerkungen:

- $d(x)$  steht in der Mitte, nicht wie in der KCE unter der 2. Ableitung.
- Früher: Diff.gl. durch mikrosk. Hoppingmechanismus.  $u$  war die Dichte einer Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Der Gedanke, daß die Ursache der Bewegung der Gradient so einer Dichte wäre ist Unsinn.
- $\operatorname{div}$  ist gerade  $-\nabla^*$ .
- Lösbarkeit und Positivität folgt aus der allgemeinen Theorie der Halbgruppen.
- Es stellt sich heraus, daß  $\int_{\Omega} u^2(x, t)$  abklingt. Wenn  $d(x) \geq d_{min} > 0$  sogar exponentielles Abklingen.

### 5.5.2 Kontinuitätsgleichungen

Eine Gleichung der Form

$$\begin{aligned}\dot{u}(t) &= -\operatorname{div} J \\ J &= u \cdot v\end{aligned}$$

wird häufig **Kontinuitätsgleichung** genannt. Hier ist  $u \in \mathbb{R}$  die Konzentration (Dichte) eines Stoffes, der von einem Strom  $J \in \mathbb{R}^n$  transportiert wird. Der Strom ist das Produkt der Dichte und einer gegebenen oder anderweitig zu berechnenden Geschwindigkeit  $v \in \mathbb{R}^n$  ist.

Die Triebkraft der zeitlichen Änderung ist hier eine Geschwindigkeit, die verschwindet, wenn die Geschwindigkeit 0 ist. Aus der Kontinuitätsgleichung läßt sich die Diffusionsgleichung durch den Geschwindigkeitsansatz

$$u = d(x)\nabla \log u = d(x)\frac{\nabla u}{u}$$

herleiten. Implizit wird hier angenommen, daß die zum Ausgleich strebende implizite Größe der Log der Konzentration ist und das Materialgesetz  $d(x)/u(x)$  ist.