

Teil II

Mathematische Modellierung

Kapitel 4

Mathematische Modelle

Die¹ Herleitung, Analysis und numerische Simulation von mathematischen Modellen realer Prozesse ist die Grundaufgabe der Angewandten Mathematik. Selbst wenn man sich nur für Teilaspekte interessiert, ist es meist wichtig, die Bedeutung und Struktur der zu Grunde liegenden mathematischen Modelle zu verstehen. In dieser Vorlesung kann nur eine Einführung in die Mathematische Modellierung gegeben werden.

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

- qualitative Modelle, das heißt Modelle, die prinzipiell die Struktur eines Prozesses beschreiben sollen und gewisse qualitative Voraussagen (etwa über langfristige Geschwindigkeit von Wachstumsprozessen) ermöglichen sollen, die aber keine expliziten Werte für die Variablen des Systems liefern,
- quantitative Modell, das heißt Modelle, die für quantitative Voraussagen der Werte von gewissen Variablen genutzt werden sollen.

Qualitative Modell verwendet man oft in den Wirtschaftswissenschaften, zum Beispiel um die Dynamik der Preisbildung zu verstehen, und auch in manchen Naturwissenschaften wie der Ökologie. Dort kann ein qualitatives Modell genügen um zu verstehen, ob sich ein ökologisches Gleichgewicht ausbildet oder ob es zu einer möglichen Katastrophe kommt. Im Allgemeinen bevorzugt man in Naturwissenschaft und Technik jedoch quantitative Modelle. In der Vorlesung werden auch nur solche Modelle behandelt werden.

Bevor man ein mathematisches Modell entwickelt oder spezielle Modelle auf einen bestehenden Prozess anwendet, sollte man sich Klarheit über die Skalen (Orts- und Zeitskalen) verschaffen auf denen man den Prozess betrachtet, sowie auf jene Skalen, die einen Einfluss auf den Prozess besitzen. So werden etwa für die Beschreibung einer Straßenbeleuchtung quantenmechanische Effekte kaum von Bedeutung sein. Auf der anderen Seite wird die Dynamik turbulenter Strömungen stark von den kleinen Wirbeln beeinflusst. Die Reduktion auf die sogenannten relevanten Skalen ist wichtig, um das Modell in einer sinnvollen Größe zu halten, die dann auch numerische Simulationen in akzeptabler Zeit erlaubt. Ebenso ist es wichtig, nur jene Effekte zu modellieren, die den Prozess auch tatsächlich beeinflussen, um das Modell und die Rechenzeit klein zu halten. Zum Beispiel könnte man bei der Model-

¹nach [Bur07]

lierung einer Strömung auch die Wärmeleitung darin modellieren. Da kleine Temperaturschwankungen jedoch vernachlässigbare Auswirkungen besitzen, wird man oft darauf verzichten. Nur bei Prozessen mit starken Temperaturschwankungen, zum Beispiel in Gasturbinenbrennkammern, ist die Kopplung von Strömungs- und Wärmeleitungsmodellen unerlässlich.

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

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

Kapitel 5

Grundprinzipien der Mathematischen Modellierung

In¹ diesem Abschnitt werden die Grundprinzipien der Mathematischen Modellierung vorgestellt. Ausführlichere Darstellungen findet man in der Literatur, zum Beispiel in [Seg72, CS74].

5.1 Modellierungszyklus

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

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

Oft müssen die Ergebnisse noch entsprechend aufbereitet und präsentiert werden (→ (Pro-)Seminare im Studium).

Mathematische Modellierung ist, vor allem in der Technik, keine Einbahnstraße. Die Modellierung verfolgt meist das klare Ziel durch besseres Verständnis in den Prozess eingreifen zu können. Dies kann durch die Anpassung von Parametern (Kontrolle) oder sogar durch die Auslegung eines neuen Prozesses (Prozess-Design) erfolgen. Deshalb werden sich in der Praxis die obigen Schritte stark gegenseitig (und nicht nur in aufsteigender Richtung) beeinflussen. So können zum Beispiel die numerische Simulation und Interpretation der Lösung zum besseren Verständnis des Verhaltens des ursprünglichen Prozesses beitragen. Sie können aber auch dazu führen, dass man die ursprüngliche Wahl der Skalen und des Modells korrigieren muss. Der gesamte Modellierungsprozess ist in Abbildung 5.1 dargestellt.

Der Vergleich mit realen Daten ermöglicht es oft, Fehlerquellen zu finden und zu eliminieren. Diese können von Modellierungsfehlern, über Fehler bei der numerischen Berechnung (Diskretisierungsfehler, Verfahrensfehler, Rundungsfehler, siehe

¹nach [Bur07]

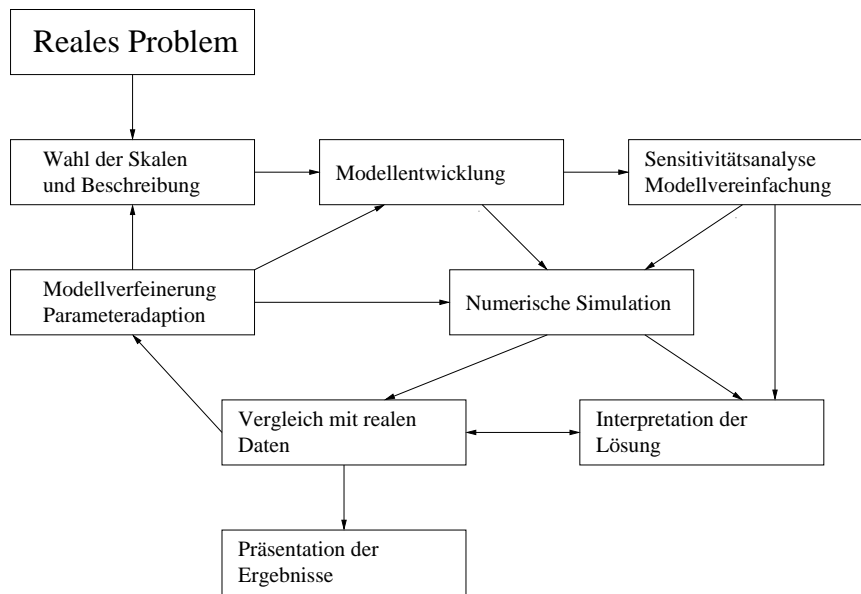


Abbildung 5.1: Schematische Darstellung des Modellierungszyklus.

Vorlesung Praktische Mathematik) bis hin zu Programmierfehlern bei der Implementierung reichen. Man darf bei diesem Vergleich aber auch nicht außer acht lassen, dass reale Daten oft mit nicht unerheblichen Messfehlern behaftet sind. Um Fehler effizient aufspüren zu können, ist es wichtig, geeignete (einfache) Testfälle zu betrachten.

Für die weitere Darstellung der einzelnen Schritte werden wir ein gemischtes Modell verwenden, das heißt eine Abbildung der Gestalt

$$y = M(x(p), p), \quad (5.1)$$

wobei $M : X \times P \rightarrow Y$ eine Abbildung zwischen Mengen in geeigneten Funktionsräumen ist. Hierbei werden $x \in X$ als Variablen, $y \in Y$ als Output und $p \in P$ als Parameter bezeichnet. Das Modell wird zunächst als abstrakte Abbildungsvorschrift betrachtet. In der Praxis wird die Auswertung des Operators M aber die Lösung von Gleichungssystemen, Optimierungsproblemen oder stochastische Simulationen erfordern, aus denen man die Variablen $x(p)$ bestimmt.

5.2 Dimensionslose Variablen und Skalierung

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

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

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

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

Die neue Variable \tilde{x}_i heißt dimensionslos, falls $f_i(x_i)$ keine physikalische Dimension besitzt. Die einfachste und am häufigsten verwendete Art der Skalierung ist die Nutzung einer affinen Funktion, das heißt

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

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

In der gleichen Weise wie die Variable x_i kann man auch den Output y_j und folglich die Abbildung M skalieren und in eine dimensionslose Form transformieren. Für die Parameter p_k bleibt dann weniger Freiheit. Bei richtiger Skalierung erhält man automatisch dimensionslose Parameter \tilde{p}_k .

Beispiel 5.1 Wurf. Wir betrachten den Flug eines (sehr kleinen) Balls, der von einer Ebene mit der Normalen $(0, 0, 1)$ mit der Geschwindigkeit $\mathbf{V} = (V_1, V_2, V_3)$ abgeschossen wird. Als Output soll seine maximal erreichte Höhe und die Entfernung bis zum Auftreffen auf der Ebene berechnet werden.

Dazu werden die Zeit $t \in \mathbb{R}$ und die zeitabhängigen Variablen (x_1, x_2, x_3) eingeführt, um die Ortskoordinaten des Balls zu bestimmen. Der Radius des Balls wird ignoriert und er wird als Massepunkt betrachtet. Wir wählen die Zeitskala und die Anfangswerte so, dass

$$\mathbf{x}(0) = (x_1(0), x_2(0), x_3(0)) = (0, 0, 0) \quad (5.2)$$

gilt. Seine Anfangsgeschwindigkeit ist

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt}(0) = \left(\frac{dx_1}{dt}(0), \frac{dx_2}{dt}(0), \frac{dx_3}{dt}(0) \right) = \mathbf{V} = (V_1, V_2, V_3). \quad (5.3)$$

Als nächstes nutzen wir das Grundgesetz der Dynamik (Newton²sche Bewegungsgleichungen): Kraft ist gleich Masse mal Beschleunigung. In unserem Beispiel wirkt nur die Schwerkraft und wir erhalten

$$m \frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} = mg \frac{R^2}{(x_3(t) + R)^2} (0, 0, -1), \quad (5.4)$$

wobei m die Masse des Balls ist, g die Erdbeschleunigung und R der Erdradius. Der Vektor $(0, 0, -1)$ zeigt an, dass die Kraft nach unten gerichtet ist, wobei vernachlässigt wurde, dass die Erde eine Kugel ist. Der dritte Faktor modelliert, dass die Erdanziehungskraft mit wachsendem Abstand zum Erdmittelpunkt kleiner wird.

Um den Output zu berechnen, benötigen wir noch die Variablen T_1, T_2 und die Gleichungen

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

um die Outputs zu bestimmen. Die erste Gleichung beschreibt die Stelle, an der sich die Flugbahn des Balls umkehrt und die zweite Gleichung den Auftreffpunkt des Balls. Der Output ist also gegeben durch

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

²Issac Newton (1643 – 1727)

Zusammenfassend besitzt das Modell die Variablen t, T_1, T_2 und $\mathbf{x}(t)$, die Parameter m, g, R und \mathbf{V} sowie den Output y_1, y_2 .

Wir beginnen die Skalierung mit der Zeitvariablen und führen eine typische Zeitskala τ ein. Als transformierte, dimensionslose Variablen erhält man

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

In gleicher Weise wird die Ortsvariable mittels einer typischen Länge λ_i skaliert

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

Für die Ableitung der skalierten Ortsvariablen nach der skalierten Zeit erhält man mit Kettenregel

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

Setzt man dies in die Formel (5.3) für die Anfangsgeschwindigkeit ein, so erhält man

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

Das heißt, aus der Skalierung der Orts- und Zeitvariablen erhält man automatisch die dimensionslosen Anfangsgeschwindigkeiten $\tau V_i / \lambda_i$. Bei unserem Beispiel sind die gegebenen Werte die Geschwindigkeiten und wir kennen aus der Aufgabenstellung keine typischen Längen. Wir wählen die Skalierung

$$\lambda_i = \tau V_i, \quad (5.5)$$

falls $V_i \neq 0, i = 1, 2, 3$. Das setzen wir im weiteren immer voraus. Die Spezialfälle, dass es Anfangsgeschwindigkeiten $V_i = 0$ gibt, werden nicht betrachtet. Es ist einleuchtend die typische Länge proportional zu V_i zu nehmen, denn wenn die Geschwindigkeit in eine Richtung doppelt so gross wie in eine andere ist, wird der Ball auch ungefähr die doppelte Länge in die erste Richtung zurücklegen. Die dimensionslosen Anfangsbedingungen sind nun einfach

$$\frac{d\tilde{x}_i}{d\tilde{t}}(0) = 1. \quad (5.6)$$

Durch Anwendung der Kettenregel auf die zweiten Ableitungen der Bewegungsgleichung erhält man

$$\frac{d^2\tilde{x}_i}{d\tilde{t}^2} = \frac{\tau}{\lambda_i} \frac{d}{d\tilde{t}} \left(\frac{dx_i}{dt} \right) = \frac{\tau^2}{\lambda_i} \frac{d^2x_i}{dt^2}.$$

Einsetzen in (5.4) gibt die dimensionslosen Bewegungsgleichungen (komponentenweise)

$$\begin{aligned} \frac{d^2\tilde{x}_1}{d\tilde{t}^2}(\tilde{t}) &= 0, \\ \frac{d^2\tilde{x}_2}{d\tilde{t}^2}(\tilde{t}) &= 0, \\ m \frac{d^2\tilde{x}_3}{d\tilde{t}^2}(\tilde{t}) &= -\frac{mg\tau^2}{\lambda_3} \frac{R^2}{(x_3(t) + R)^2} = -\frac{mg\tau^2}{\lambda_3} \frac{R^2}{(\lambda_3\tilde{x}_3(\tilde{t}) + R)^2}. \end{aligned}$$

Man kann die Masse kürzen und die dritte Gleichung in die Form

$$\frac{d^2\tilde{x}_3}{d\tilde{t}^2}(\tilde{t}) = -\frac{\alpha}{(\beta\tilde{x}_3(\tilde{t}) + 1)^2}, \quad \alpha = \frac{g\tau^2}{\lambda_3}, \quad \beta = \frac{\lambda_3}{R} \quad (5.7)$$

umschreiben, wobei die Parameter α, β dimensionslos sind.

Nun besteht noch die Freiheit, die typische Zeiteinheit τ zu wählen. Das kann so realisiert werden, dass $\alpha = 1$ wird, also

$$\tau = \sqrt{\frac{\lambda_3}{g}} \stackrel{(5.5)}{=} \sqrt{\frac{\tau V_3}{g}} \implies \tau = \frac{V_3}{g}.$$

Für die typischen Längenskalen gilt damit

$$\lambda_i = \frac{V_3 V_i}{g}, \quad i = 1, 2, 3. \quad (5.8)$$

Man beachte, dass man aus der Skalierung automatisch Informationen über typische Orts- und Zeitskalen in Abhängigkeit der gegebenen Parameter (hier Geschwindigkeit und Erdbeschleunigung) erhält. Andererseits ist diese Wahl nicht eindeutig, man hätte die Skalierung auch so wählen können, dass $\beta = 1$ gilt.

Für den Output nimmt man die natürlichen Skalierungen

$$\tilde{y}_1 = \lambda_3^{-1} y_1, \quad \tilde{y}_2 = \min\{\lambda_1^{-1}, \lambda_2^{-1}\} y_2.$$

Nehmen wir an, dass $\lambda_2 \leq \lambda_1$ gilt, dann sind

$$\tilde{y}_1 = \tilde{x}_3(\tilde{T}_1), \quad \tilde{y}_2 = \sqrt{\tilde{x}_1^2(\tilde{T}_2) + \gamma \tilde{x}_2^2(\tilde{T}_2)}, \quad \gamma = \frac{\lambda_2^2}{\lambda_1^2} \leq 1.$$

Im resultierenden dimensionslosen System treten nur noch die dimensionslosen Parameter

$$\beta = \frac{\lambda_3}{R} \stackrel{(5.8)}{=} \frac{V_3^2}{gR}, \quad \gamma = \frac{\lambda_2^2}{\lambda_1^2} \stackrel{(5.5)}{=} \frac{V_2^2}{V_1^2}$$

auf. Die Anzahl der Parameter hat sich damit von ursprünglich sechs auf zwei reduziert. Solch ein Verhalten ist typisch, es gibt fast immer redundante Parameter (hier die Masse m) beziehungsweise weitere, die man durch Skalierung eliminieren kann. Die am Ende auftretenden Parameter sind fast immer relative Größen zwischen den ursprünglichen Parametern. Man nennt sie effektive Parameter. \square

5.3 Sensitivitätsanalyse

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

Wir ein generisches Modell mit Parametern p betrachtet, so kann der Output als Funktion der Parameter aufgefasst werden, das heißt $\mathbf{y} = \mathbf{y}(\mathbf{p})$. Bei einer kleinen Variation Δp der Parameter kann man die Änderung des Outputs durch eine Taylor³-Approximation erster Ordnung beschreiben, das heißt

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

(Skizze, die diese Formel erklärt.) Für die relative Änderung des Outputs hat man dann die Abschätzung

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

³Brook Tayler (1685 – 1731)

Damit kann die relative Änderung erster Ordnung durch die Größe der Ableitung nach den Parametern abgeschätzt werden. Man nennt die Größe der Ableitung des Outputs nach den Parametern auch Sensitivität.

Die Sensitivitätsanalyse von Beispiel 5.1 benötigt leider mathematische Hilfsmittel, die im ersten Semester noch nicht zur Verfügung stehen. Man kann aber zum Beispiel zeigen:

- Der Output y_1 ist sehr sensitiv zur Anfangsgeschwindigkeit V_3 . Das ist einleuchtend, denn der Ball wird umso höher fliegen, desto schneller er in vertikale Richtung abgeschossen wird.
- Der Output y_1 hängt nicht von der Anfangsgeschwindigkeit V_1 ab.

5.4 Modellvereinfachungen

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

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

Beispiel 5.2 Modellvereinfachung im Beispiel 5.1. In der skalierten Version treten nur die Parameter β und γ auf. Im allgemeinen wird man vermuten, dass die Höhe in welcher der Ball sich bewegt, klein ist im Vergleich zum Erdradius. Diese Höhe wird durch die charakteristische Länge λ_3 charakterisiert, also

$$\lambda_3 \ll R \stackrel{(5.8)}{\iff} \frac{V_3^2}{g} \ll R \iff \frac{V_3^2}{Rg} \ll 1.$$

Damit gilt $\beta \ll 1$. Da nur bereits skalierte Terme mit β multipliziert werden, also Terme der Größenordnung 1, kann man folgern, dass damit auch $\beta|\tilde{x}_i| \ll 1$ und $\beta\tilde{x}_i + 1 \approx 1$ gelten. Somit vereinfacht sich die Bewegungsgleichung (5.7) zu

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

Aus dieser Gleichung erhält man durch zweimaliges Integrieren und die Nutzung der Anfangsbedingungen (5.2) (diese muss noch entdimensioniert werden) und (5.6) die Lösung

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

eine Parabel. Für die maximal erreichte Höhe ergibt sich

$$T_1 = \frac{V_3}{g}, \quad y_1 = \frac{V_3^2}{2g}.$$

□

Bemerkung 5.3 Modellfehler. Bei der Betrachtung des Kanonenschusses wurden einige physikalische Aspekte nicht betrachtet beziehungsweise vereinfacht:

- Der richtige Ball ist dreidimensional und keine Punktmasse.
- Der richtige Ball besitzt eine Eigenbewegung, zum Beispiel Rotation, die vernachlässigt wurde.

- Wenn man keine Punktmasse betrachtet, sondern einen richtigen Körper, tritt Reibung durch den Luftwiderstand auf. Diese muss modelliert werden (Stokes⁴'sches oder Newton'sches Reibungsgesetz).
- Die Fallbeschleunigung ist nur näherungsweise bekannt.

Wie groß die durch diese Dinge verursachten Modellfehler sind, hängt vom konkreten Problem ab. □

⁴George Gabriel Stokes (1819 – 1903)

Kapitel 6

Modellierung von Wachstumsprozessen

Dieses¹ Kapitel befasst sich mit Modellen, die das Wachstum von Lebewesen beschreiben.

6.1 Ein einfaches Modell

6.1.1 Ein Kontinuumsmodell

Wir beginnen mit einem einfachen Modell zur Populationsdynamik. Seien $t \geq 0$ die Zeit und $t \mapsto x(t)$ eine Funktion, die die Anzahl der Lebewesen einer Population zur Zeit t angibt.

Eine erste Idee ist, die zeitliche Änderung der Population mit der Größe der Population zu koppeln. Das könnte bedeuten, dass im Falle einer großen Population auch ein großes Wachstum vorliegt. Dies würde der Erfahrung entsprechen, dass viele Lebewesen mehr Nachwuchs produzieren als wenige. Die zeitliche Änderung der Population ist durch die Ableitung von $x(t)$ nach t gegeben. Im ersten Modell soll diese Ableitung also proportional zur Größe der Population sein, das heißt es gilt

$$\frac{dx}{dt} = rx, \quad r \in \mathbb{R}, \quad (6.1)$$

$$x(0) = x_0. \quad (6.2)$$

Hierbei ist der Parameter r der Proportionalitätsfaktor, der die unterschiedlichen Wachstumsraten für Populationen unterschiedlicher Lebewesen beschreibt. Dieser Faktor ist vorgegeben, er wird gegebenenfalls durch Experimente bestimmt. Außerdem ist in (6.2) zur Vervollständigung des mathematischen Modells die Populationsgröße zum Anfangszeitpunkt gegeben, der zweite Parameter des Modells. Das mathematische Modell (6.1), (6.2) ist ein Anfangswertproblem mit einer gewöhnlichen Differentialgleichung.

Man kann Differentialgleichungen nur in Spezialfällen analytisch lösen. Bei (6.1), (6.2) handelt es sich um einen solchen Spezialfall (einen der einfachsten). Man kann hier die sogenannte Trennung der Variablen verwenden. Dabei erlaubt man, mit den Differentialen dx und dt so wie mit Zahlen zu rechnen. Man sortiert die Terme der Gleichung (6.1) so um, dass alle Terme, die nur von x abhängen auf der einen Seite stehen, während alle Terme, die nur von t abhängen auf die andere Seite kommen.

¹nach [Son01]

Der Proportionalitätsfaktor hängt weder von x noch von t ab und kann auf einer beliebigen Seite der Gleichung stehen. Wendet man dieses Verfahren auf (6.1) an, so erhält man

$$\frac{dx}{x} = r dt.$$

Nun integriert man beide Seiten dieser Gleichung unbestimmt. Beim Integrieren erhält man auf beiden Seiten Integrationskonstanten, die zu einer einzigen Konstanten zusammengefasst werden

$$\int \frac{dx}{x} = \int r dt \implies \ln|x| = rt + K, \quad K \in \mathbb{R}.$$

Da uns die Population $x(t)$ interessiert, muss man nach $x(t)$ auflösen. Dafür wendet man auf beiden Seiten der letzten Gleichung die Exponentialfunktion an. Man erhält

$$x(t) = Ce^{rt}, \quad \text{mit } C \in \mathbb{R}.$$

Die Konstante C kann für das konkrete Anfangswertproblem (6.1), (6.2) mit Hilfe der Anfangsbedingung festgelegt werden. Aus (6.2) folgt

$$x_0 = x(0) = C.$$

Damit lautet die Lösung des Anfangswertproblems (6.1), (6.2)

$$x(t) = x_0 e^{rt}. \tag{6.3}$$

Das Verhalten der Lösung hängt natürlich vom Proportionalitätsfaktor r ab. Man kann drei Fälle unterscheiden:

1. $r = 0$. Das heißt, es gibt kein Wachstum. Man erhält aus (6.3) $x(t) = x_0$ für alle Zeiten. Die Anzahl der Lebewesen in der Population verändert sich nicht. Stirbt eines, wird gleichzeitig ein neues geboren und umgekehrt.
2. $r > 0$. Man hat positives Wachstum. Es gilt

$$\lim_{t \rightarrow \infty} x(t) = \infty,$$

das heißt die Anzahl der Lebewesen der Population wächst unbeschränkt.

3. $r < 0$. Man hat negatives Wachstum. In dem Fall folgt aus (6.3)

$$\lim_{t \rightarrow \infty} x(t) = 0,$$

das bedeutet, dass die Population für $t \rightarrow \infty$ ausstirbt.

Diese drei Fälle sind in Abbildung 6.1 illustriert.

Das einfache Modell (6.1), (6.2) erweist sich als nicht sehr realistisch. Es spiegelt bekannte Zusammenhänge nicht wider. Zum Beispiel vermehren sich Bakterien in einer Petrischale nicht mehr so gut, wenn die Population eine gewisse Größe erreicht hat, weil beispielsweise Knappheit an Nahrung herrscht. Andererseits ist das Wachstum größer, wenn genügend Platz in der Schale ist. In einem realistischen Modell würde daher positives Wachstum nur bis zu einer gewissen Grenze existieren. Dann würde die Sterblichkeitsrate der Population überwiegen, das heißt negatives Wachstum, bis irgendwann wieder positives Wachstum einsetzen kann, und so weiter.

6.1.2 Ein diskretes Modell

Bevor ein realistischeres Modell eingeführt wird, betrachten wir noch eine diskrete Variante des einfachen Modells (6.1), (6.2). Diskret bedeutet, dass die Zeit nicht

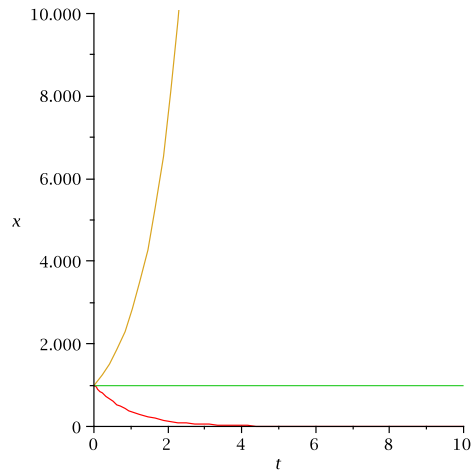


Abbildung 6.1: Lösungen (6.3) des einfachen Wachstumsmodells für unterschiedliche Wachstumsraten, $x_0 = 1000$.

mehr als kontinuierliche Variable betrachtet wird, sondern nur noch gewisse Zeitpunkte

$$0, \Delta t, 2\Delta t, 3\Delta t, \dots$$

mit $\Delta t > 0$ betrachtet werden (wie auf einer digitalen Uhr). Da die Zeit nicht mehr kontinuierlich ist, kann man nicht mehr ableiten. Man muss die Ableitung in (6.1) geeignet ersetzen. Das geschieht mit Hilfe des Differenzenquotienten

$$\frac{\Delta x}{\Delta t} := \frac{x(t + \Delta t) - x(t)}{\Delta t}. \quad (6.4)$$

Ist $x(t)$ zweimal stetig differenzierbar, so erhält man aus der Taylor-Entwicklung

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \Delta t \frac{dx}{dt}(t) + \mathcal{O}((\Delta t)^2).^2$$

Durch Umstellung ergibt sich

$$\frac{\Delta x}{\Delta t} = \frac{dx}{dt}(t) + \mathcal{O}(\Delta t).$$

Das bedeutet, dass der Differenzenquotient (6.4) eine Approximation erster Ordnung an die Ableitung ist.

Wir wählen die Bezeichnung $x^{(0)} = x(0)$, $x^{(1)} = x(\Delta t)$ und so weiter. Der Einfachheit halber betrachten wir $\Delta t = 1$, was man immer durch eine geeignete Entdimensionierung des realen Problems erreichen kann. Wählt man auf der rechten Seite von (6.1) die Anzahl der Lebewesen der Population vom vorangegangenen Zeitpunkt $x^{(n)}$, so erhält zur Berechnung der Anzahl der Lebewesen zum nächsten Zeitpunkt die Differenzgleichung 1. Ordnung

$$x^{(n+1)} - x^{(n)} = rx^{(n)}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (6.5)$$

$$x^{(0)} = x_0. \quad (6.6)$$

Durch Umstellen erhält man

$$x^{(n+1)} = (1 + r)x^{(n)}.$$

²Eine Funktion $f(t)$ ist $\mathcal{O}(t)$, wenn es eine Konstante $C > 0$ gibt, so dass $|f(t)| \leq C|t|$ gilt, für $|t|$ hinreichend klein.

Rekursives Einsetzen ergibt

$$x^{(n+1)} = (1+r)x^{(n)} = (1+r)^2x^{(n-1)} = \dots = (1+r)^{n+1}x^{(0)}. \quad (6.7)$$

Mit (6.7) lässt sich das Lösungsverhalten von Modell (6.5), (6.6) studieren:

1. $r > 0$. In diesem Fall wächst die Anzahl der Lebewesen immer noch unbeschränkt.
2. $r = 0$. Auch hier ändert sich nichts im Vergleich zum kontinuierlichen Modell (6.1), (6.2). Die Anzahl der Lebewesen bleibt konstant.
3. $-2 < r < 0$. In diesem Fall gilt $\lim_{n \rightarrow \infty} x^{(n)} = 0$, die Population stirbt also aus.
4. $r = -2$. In diesem Fall alterniert die Anzahl der Lebewesen zwischen $x^{(0)}$ und dem negativen Wert $-x^{(0)}$. Dieser Fall ist unrealistisch.
5. $r < -2$. In diesem Fall existiert kein eigentlicher Grenzwert. Es treten jedoch negative Anzahlen von Lebewesen auf, was wiederum in der Realität nicht vorkommt.

Insgesamt stellt man fest:

1. Das Lösungsverhalten des kontinuierlichen und des diskreten Modells unterscheidet sich (hier für $r \leq -2$),
2. Das Lösungsverhalten des diskreten Modells ist auch nicht realistischer als das Lösungsverhalten des kontinuierlichen Modells.

6.1.3 Numerische Verfahren zur Lösung des Kontinuumsmodells

Wir haben gesehen, dass Kontinuumsmodelle physikalischer Prozesse zu Gleichungen führt, in denen Funktionen gesucht sind. Sind in diesen Gleichungen Ableitungen der gesuchten Funktion enthalten, spricht man von Differentialgleichungen. Handelt es sich bei den Funktionen um skalare Funktionen einer Veränderlichen $u : (a, b) \rightarrow \mathbb{R}$, so spricht man von gewöhnlichen Differentialgleichungen. Diese werden im Laufe des Studiums noch ausführlich behandelt.

Die Herleitung von gewöhnlichen Differentialgleichungen durch Modellierung ist ein Teil der Beschreibung von Naturvorgängen, siehe (6.1),(6.2). Der zweite Teil besteht darin, diese Gleichungen zu lösen. Das geht im allgemeinen nicht so einfach wie im Abschnitt 6.1.1.

Der einfachste Typ einer gewöhnlichen Differentialgleichung wurde bereits in der Schule behandelt: Gegeben ist eine Funktion $f : (a, b) \rightarrow \mathbb{R}$. Gesucht ist eine Funktion $u : (a, b) \rightarrow \mathbb{R}$, so dass

$$u'(x) = f(x)$$

gilt. Die allgemeine (abstrakte) Lösung ist das unbestimmte Integral

$$u(x) = \int f(x) dx. \quad (6.8)$$

Bekanntes aus der Schule über das Integral:

- Es gibt Integrationsregeln, die man probieren kann (Substitutionen, partielle Integration).
- Diese funktionieren jedoch nur bei speziellen Funktionen.
- Mathematische Software kann weiterhelfen (MAPLE, MATHEMATICA, ...).
- *Integration im allgemeinen kompliziert !*

Beispiel 6.1 Gesucht ist die Stammfunktion von $f(x) = \sqrt{x + \sqrt{x}}$. Man erhält mit MAPLE

$$u(x) = \int \sqrt{x + \sqrt{x}} \, dx = \left(\frac{2}{3}x^{5/4} + \frac{1}{6}x^{3/4} - \frac{1}{4}x^{1/4} \right) \sqrt{\sqrt{x} + 1} + \frac{1}{4} \operatorname{arsinh} \left(x^{1/4} \right).$$

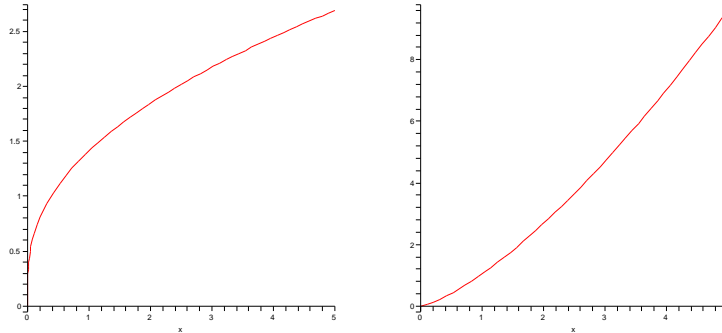


Abbildung 6.2: Integrand und Stammfunktion zum Beispiel 6.1.

□

Beispiel 6.2 Gesucht ist die Stammfunktion von $f(x) = \sqrt{x^2 + \sqrt{x}}$. Man erhält mit MAPLE

$$u(x) = \int \sqrt{x^2 + \sqrt{x}} \, dx = \frac{4}{5}x^{5/4} \operatorname{hypergeom} \left(\left[\frac{-1}{2}, \frac{5}{6} \right], \left[\frac{11}{6} \right], -x^{3/2} \right)$$

Die Stammfunktion kann nur durch eine spezielle Funktion, die sogenannte hypergeometrische Funktion, dargestellt werden !

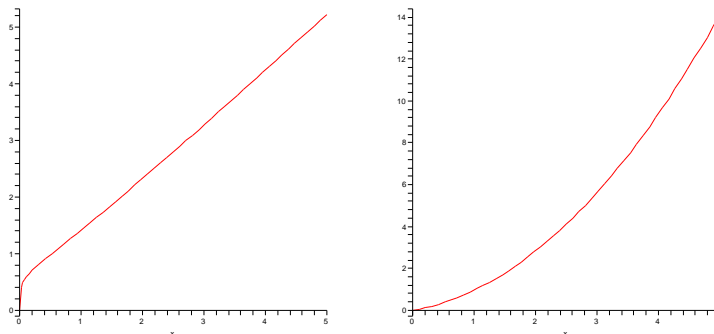


Abbildung 6.3: Integrand und Stammfunktion zum Beispiel 6.2.

□

Beispiel 6.3 Gesucht ist die Stammfunktion von $f(x) = \sqrt{x + 1 + \sqrt{x}}$. Bei diesem Integranden hilft auch MAPLE nicht weiter. Trotzdem möchte man eine Vorstellung von einer Stammfunktion haben. Dazu dienen numerische Verfahren.

□

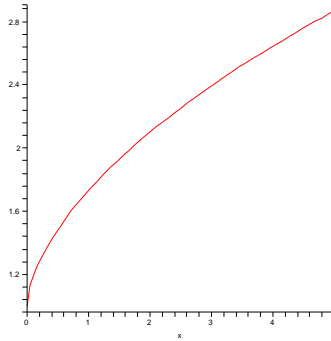


Abbildung 6.4: Integrand zum Beispiel 6.3.

Schon beim unbestimmten Integral gibt es Fälle, wo man die Lösung nicht analytisch findet. Bei Differentialgleichungen ist das der allgemeine Fall. Es gibt nur wenige, einfache Typen, die eine geschlossene analytische Darstellung der Lösung ermöglichen, wie (6.1), (6.2).

Ein Beispiel für eine gewöhnliche Differentialgleichung, die analytisch nicht auflösbar ist, ist

$$u'(x) = x^2 + u^2(x). \quad (6.9)$$

Man kann zeigen, dass eine Lösung dieser Differentialgleichung existiert, aber dass diese Lösung nicht mit elementaren Funktionen und Integration darstellbar ist. In solchen Fällen helfen nur numerische Verfahren zur Approximation der Lösung.

Betrachte die allgemeine gewöhnliche Differentialgleichung 1. Ordnung

$$u'(x) = f(x, u(x)) \quad x \in (a, b), \quad u(a) = u_0. \quad (6.10)$$

Das einfachste numerische Verfahren zur Approximation der Lösung von (6.10) ist das explizite Euler³-Verfahren. Zunächst zerlegt man $[a, b]$ in n (gleich große) Teilintervalle mit den Punkten

$$a = x_1 < x_2 < \dots < x_n < x_{n+1} = b, \quad x_i - x_{i-1} = h,$$

siehe Abbildung 6.5. Die numerische Approximation der Lösung wird mit u^h bezeichnet.



Abbildung 6.5: Zerlegung des Intervalls für numerische Verfahren.

Man kennt

- den Funktionswert von u in x_1 : $u(x_1) = u_0$,
- die Ableitung von u in x_1 : $u'(x_1) = f(x_1, u(x_1))$.

Die Idee besteht nun darin, in Richtung dieser Ableitung bis x_2 zu gehen, wobei man den Funktionswert auf dieser Geraden als Approximation für $u(x_2)$ nimmt

$$u^h(x_2) := u(x_1) + hf(x_1, u(x_1)),$$

siehe Abbildung 6.6. Dabei macht man im allgemeinen einen Fehler : $u^h(x_2) \neq u(x_2)$!

³Leonhard Euler (1707 – 1783)

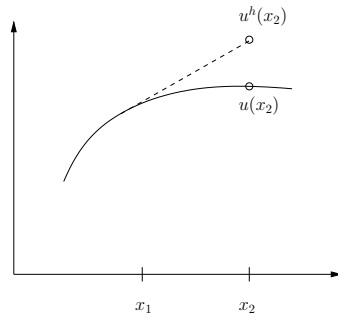


Abbildung 6.6: Prinzip des expliziten Euler-Verfahrens.

Man fährt nach dem gleichen Prinzip fort und erhält das explizite Euler-Verfahren

$$\begin{aligned} u^h(x_1) &= u(x_1), \\ u^h(x_i) &= u^h(x_{i-1}) + hf(x_{i-1}, u^h(x_{i-1})), \quad i = 2, \dots, n+1. \end{aligned} \quad (6.11)$$

Ein anderes Verfahren, das sogenannte implizite Euler-Verfahren, erhält man, wenn man anstelle des bekannten Anstieges $f(x_{i-1}, u^h(x_{i-1}))$ den unbekanntes Anstieg $f(x_i, u^h(x_i))$ nimmt

$$\begin{aligned} u^h(x_1) &= u(x_1), \\ u^h(x_i) &= u^h(x_{i-1}) + hf(x_i, u^h(x_i)), \quad i = 2, \dots, n+1. \end{aligned} \quad (6.12)$$

Bei diesem Verfahren muss man zur Berechnung von $u^h(x_i)$ im allgemeinen eine nichtlineare Gleichung lösen. Das ist teurer als das explizite Euler-Verfahren.

Aus mathematischer Sicht muss man folgende Fragen zu den Verfahren untersuchen, siehe spätere Vorlesungen:

- Funktionieren die Verfahren immer? Wenn nicht, unter welchen Bedingungen funktionieren sie?
- Wie genau sind die Ergebnisse?
- Wie schnell sind die Berechnungen?
- Wie verändern sich die Ergebnisse, wenn man das Gitter verändert?
- Gibt es bessere Verfahren, das heißt, Verfahren die genauer auf dem gleichen Gitter bei vergleichbarem Aufwand sind?

Beispiel 6.4 Wir betrachten eine Gleichung vom Typ (6.9)

$$u'(x) = x^2 + u^2(x), \quad u(0) = 0 \quad \text{in } [0, 1].$$

Der Iterationsschritt beim expliziten Euler-Verfahren lautet

$$u^h(x_i) = u^h(x_{i-1}) + h(x_{i-1}^2 + (u^h(x_{i-1}))^2)$$

und beim impliziten Euler-Verfahren

$$u^h(x_i) = u^h(x_{i-1}) + h(x_i^2 + (u^h(x_i))^2).$$

In jedem Schritt des impliziten Euler-Verfahrens muss man eine quadratische Gleichung lösen

$$0 = h(u^h(x_i))^2 - u^h(x_i) + (u^h(x_{i-1}) + hx_i^2).$$

MATLAB-DEMO

□

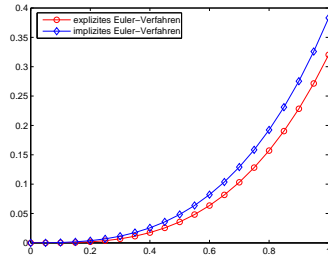


Abbildung 6.7: Approximation der Lösung von Beispiel 6.4 in $[0, 1]$, $h = 0.05$.

6.2 Ein realistischeres Modell

Bei einem realistischeren Modell muss zum einen die Population, wenn sie zu groß wird, wegen Überbevölkerung wieder kleiner werden. Wenn zum anderen die Population eine gewisse Schranke unterschreitet, dann ist wieder genug Platz zum Wachsen da und die Population muss wieder größer werden.

6.2.1 Ein Kontinuumsmodell

Ein kontinuierliches Modell, in welchem versucht wird, den obigen Anforderungen gerecht zu werden, hat die Gestalt

$$\frac{dx}{dt} = rx(L - x), \quad r, L \in \mathbb{R}, L > 0, \quad (6.13)$$

$$x(0) = x_0. \quad (6.14)$$

Dabei ist L eine charakteristische Anzahl der Lebewesen in der Population. Betrachte nämlich $r = 1$:

1. Ist $x = L$, dann verschwindet die rechte Seite von (6.13), das bedeutet $dx/dt = 0$, und die Größe der Population ändert sich nicht mehr.
2. Ist $x > L$, dann ist $dx/dt < 0$ und die Population wird kleiner.
3. Ist $x < L$, dann ist $dx/dt > 0$ und die Population wächst.

Die Lösung des Anfangswertproblems (6.13), (6.14) ist

$$x(t) = \frac{Lx_0e^{Lrt}}{L - x_0 + x_0e^{Lrt}}, \quad (6.15)$$

was man durch Einsetzen überprüfen kann. Die Lösungen $x(t)$ sind für $r = 1$, $L = 1$ und unterschiedliche Werte von x_0 in Abbildung 6.8 dargestellt. Man stellt fest, dass unabhängig vom Anfangswert, die Anzahl der Lebewesen in der Population dem Wert $L = 1$ zustrebt. Man erhält ein Gleichgewicht für die Anzahl der Lebewesen. Das stellt man auch für andere positive Wachstumsraten und andere Werte von L fest. Die Populationsdynamik von Modell (6.13), (6.14) entspricht also nicht der Realität.

6.2.2 Ein diskretes Modell

Wie beim einfachen Modell wird der Differentialquotient durch den Differenzenquotienten ersetzt. Der Einfachheit halber rechnen wir wieder mit $\Delta t = 1$ und mit $L = 1$. Man erhält aus (6.13), (6.14) die Differenzengleichung

$$x^{(n+1)} = x^{(n)} + rx^{(n)}(1 - x^{(n)}).$$

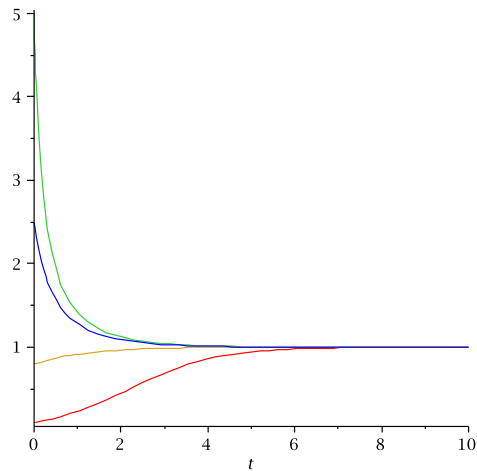


Abbildung 6.8: Lösungen (6.15) des realistischen Wachstumsmodells für $L = 1$, $r = 1$ und unterschiedliche Anfangswerte x_0 .

Durch Umstellen erhält man

$$x^{(n+1)} = (1+r)x^{(n)} - r(x^{(n)})^2, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (6.16)$$

$$x^{(0)} = x_0. \quad (6.17)$$

Diese Gleichung nennt man logistische Differenzgleichung.

Zur Lösung der logistischen Differenzgleichung verwendet man am besten einen Computer. Wir verwenden als Anfangsbedingung $x_0 = 0.1$ und experimentieren mit verschiedenen Werten der Wachstumsrate r . Die Ergebnisse sind in Abbildung 6.9 dargestellt. Die diskreten Ergebnisse sind dabei durch Linien verbunden. Für $r = 1.5$ unterscheidet sich die Lösung des diskreten Modells nicht wesentlich von der Lösung des kontinuierlichen Modells. Das ist jedoch für $r = 2.5$ schon anders. Man erhält für diese Wachstumsrate eine oszillierende Lösung mit konstanter Amplitude. Erhöht man die Wachstumsrate weiter, verliert man noch die Regelmäßigkeit der Lösung. Für $r = 3$ erhält man eine chaotisch oszillierende Lösung. Diese Lösung entspricht den Erwartungen an die Veränderungen der Anzahl von Lebewesen in eine Population.

In Abbildung 6.9 sieht man, dass unterschiedliche Wachstumsraten r zu qualitativ vollkommen unterschiedlichen Lösungen führen. Um das Verhalten der Lösung bezüglich der Wachstumsrate näher zu studieren, sind in Abbildung 6.10 die Iterierten $x^{(5000)}, \dots, x^{(5120)}$ der logistischen Differenzgleichung für $r \in [1.9, 3]$ eingezeichnet. Man sieht:

1. Bis etwa $r = 2$ bekommt man nur die stationäre Lösung.
2. Danach treten Lösungen auf, bei denen sich immer zwei Werte abwechseln (oszillierende Lösungen mit konstanter Amplitude).
3. Ab etwa $r = 2.45$ treten oszillierende Lösungen mit vier Werten auf.
4. Ab etwa $r = 2.55$ treten oszillierende Lösungen mit acht Werten auf.
5. Für größere Werte von r sieht das Verhalten im Bild chaotisch aus. Das dem nicht so ist, zeigt der Ausschnitt auf der rechten Seite von Abbildung 6.10. Dieser Ausschnitt sieht ähnlich wie das Gesamtbild aus. Die kleinen Skalen verhalten sich offenbar ähnlich wie die großen Skalen.

Das diskrete realistischere Modell ist wesentlich reicher strukturiert als das kontinuierliche realistischere Modell. Für hinreichend große Wachstumsraten erhält man

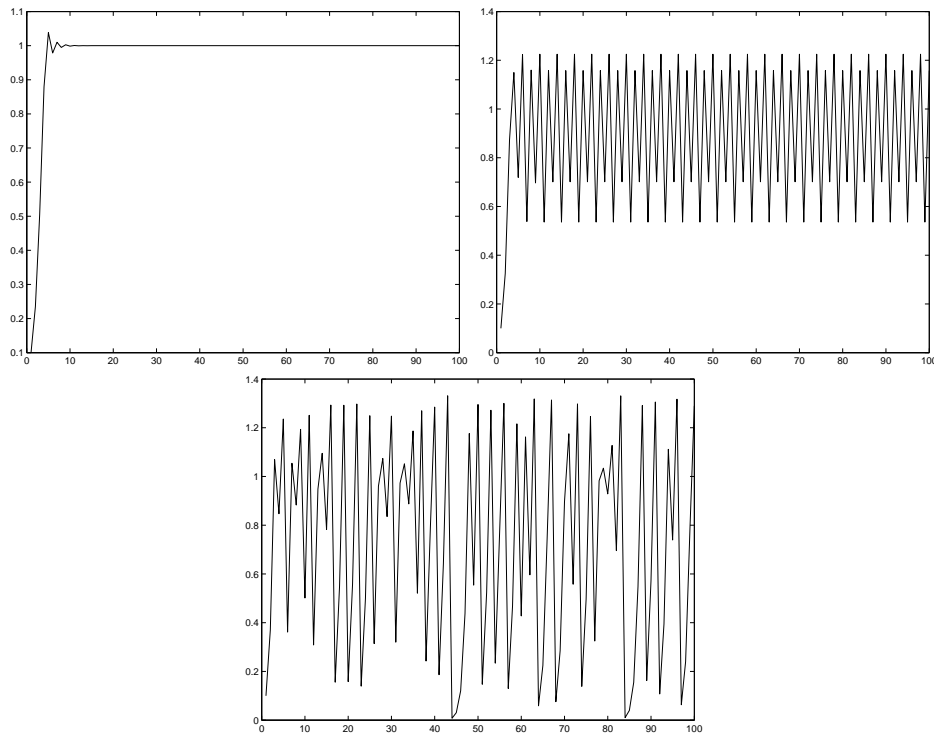


Abbildung 6.9: Lösungen von (6.16), (6.17) mit $x_0 = 0.1$ und $r = 1.5$, $r = 2.5$ und $r = 3$ (von links nach rechts und oben nach unten).

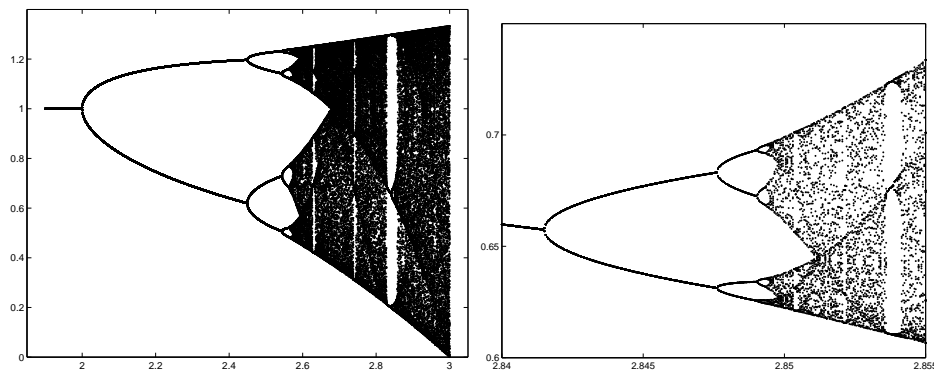


Abbildung 6.10: Lösungen von (6.16), (6.17) mit $x_0 = 0.1$ und $r \in [1.9, 3]$ (links), rechts Ausschnitt.

Lösungen, die den Vorstellungen an die Entwicklung der Anzahl von Lebewesen in eine Population entsprechen.

Bemerkung 6.5 Die logistische Differenzgleichung (6.16), (6.17) kann auch als explizites Euler-Verfahren des kontinuierlichen Modells (6.13), (6.14) aufgefasst werden. In späteren Vorlesungen wird gezeigt werden, dass das explizite Euler-Verfahren in bestimmten Situationen instabil ist, siehe auch in den Übungen. Die logistische Differenzgleichung ist gerade eine solche Situation. Deshalb gibt es solch große Unterschiede zwischen dem kontinuierlichen und dem diskreten Modell. \square

Kapitel 7

Wärmeleitung

Dieses¹ Kapitel behandelt die mathematische Modellierung von Wärmeleitungsprozessen. Es werden die Grundprinzipien der Thermodynamik und wichtige Konzepte, wie Diffusion und Konvektion, eingeführt.

7.1 Thermodynamik

Das Grundkonzept der Thermodynamik ist jenes der Wärme, das einer ungeordneten Bewegung von Molekülen entspricht. Dieser Bewegung ist eine kinetische Energie zugeordnet, die als Wärmeenergie bezeichnet wird. Die Temperatur ist ein lineares Maß für den Mittelwert dieser Energie. Seien m [kg] die Masse der Moleküle und v [m/s] der Betrag ihrer Geschwindigkeit, dann ist der Druck p [N/m²] (Kraft pro Fläche) durch

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

beschrieben, wobei V [m³] das Volumen, N die Anzahl der Teilchen und $\overline{E_{\text{kin}}}$ [J] = [Nm] die mittlere kinetische Energie der Teilchen bezeichnen. Verwendet man die Zustandsgleichung für das ideale Gas

$$pV = NkT$$

mit der Temperatur T [K] und der Boltzmann²-Konstanten $k = 1.38 \cdot 10^{-23}$ J/K, so ergibt sich

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

Die wichtigen Konzepte der Thermodynamik sind energetischer Natur:

- Die innere Energie U [J] bezeichnet die kinetische Energie der Teilchen des betrachteten Systems, die Energie der chemischen Bindungen der Teilchen des Systems und ähnliche Effekte.
- Die Enthalpie H [J] ist die Summe aus innerer Energie und Volumenarbeit, das heißt

$$H = U + pV.$$

Die Erhaltung der Energie wird im ersten Hauptsatz der Thermodynamik beschrieben. Dieser besagt, dass die Änderung ΔU der inneren Energie gleich der Summe aus zugeführter Wärmemenge ΔQ und geleisteter Arbeit $-\Delta W$ ist. Da die Arbeit durch $W = pV$ gegeben ist, folgt

$$H = U + W.$$

¹nach [Bur07], [Wla72]

²Ludwig Boltzmann (1844 – 1906)

Dann kann die Energieerhaltung als

$$\Delta(U + W) = \Delta H = \Delta Q \quad (7.1)$$

geschrieben werden.

Um die Unordnung im System zu beschreiben, verwendet man die Entropie S [J/K], siehe zweiter Hauptsatz der Thermodynamik. Die Entropie ist durch die Relation

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

beschrieben. Das bedeutet, die Entropie ist gleich der zugeführten Wärmemenge pro Temperatur. Nach (7.1) ist

$$\Delta S = -\frac{\Delta H}{T}.$$

Der zweite Hauptsatz der Thermodynamik besagt nun, dass bei einem reversiblen Prozess $\Delta S = 0$ gilt und bei einem irreversiblen Prozess $\Delta S > 0$.

7.2 Transport

Im Rahmen der kinetischen Gastheorie kann Wärmeleitung als Energietransport durch die Teilchen interpretiert werden. Neben der Energie, können auch Masse und Impuls transportiert werden. Diese Effekte sind bei Strömungen von Interesse.

Der Einfachheit halber betrachten wir als Gebiet einen Stab, der als eindimensionale Strecke $\Omega = (a, b)$ modelliert wird. Zur makroskopischen Beschreibung der Wärmeleitung durch Transport werden die kontinuierlichen Dichten, h für die Enthalpie und u für die Temperatur, als Funktionen für positive Zeiten

$$h, u : \mathbb{R}^+ \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}^+$$

betrachten. Wir sagen zu den Dichten auch kurz Enthalpie beziehungsweise Temperatur.

Die Grundlage der Modellierung ist der erste Hauptsatz der Thermodynamik. Man betrachtet ein beliebiges Teilgebiet $\omega \subset \Omega$, $\omega = (\alpha, \beta)$. Dann ist die zeitliche Änderung der Enthalpie in ω gleich der zugeführten Wärmemenge, (7.1). Wärmezufuhr (auch negative) kann durch in ω befindliche Wärmequellen oder durch Wärmefluss über den Rand von ω erfolgen. Die Wärmequellen in Ω werden durch die Dichte $f(t, x) : \mathbb{R}^+ \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ und der Wärmefluss wird durch den „Flussvektor“ $q : \mathbb{R}^+ \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ beschrieben. Man erhält

$$\frac{d}{dt}H(t, \omega) = \frac{d}{dt} \int_{\omega} h(t, x) dx = \int_{\omega} f(t, x) dx + q(t, \beta) - q(t, \alpha). \quad (7.2)$$

Die Formel der partiellen Integration liefert

$$\int_{\omega} \frac{\partial}{\partial x} q(t, x) dx = q(t, \beta) - q(t, \alpha).$$

Einsetzen dieser Beziehung in (7.2), Vertauschung von Differentiation nach der Zeit und Integration im Ort sowie Umstellen ergibt

$$\int_{\omega} \left(\frac{\partial}{\partial t} h(t, x) - \frac{\partial}{\partial x} q(t, x) - f(t, x) \right) dx = 0.$$

Diese Beziehung gilt für ein beliebig gewähltes Teilgebiet ω . Das kann nur der Fall sein, wenn der Integrand gleich Null ist, also

$$\frac{\partial h}{\partial t} - \frac{\partial q}{\partial x} = f \quad \text{in } (0, t) \times (a, b). \quad (7.3)$$

Gleichung (7.3) wird Transportgleichung genannt. Die rechte Seite f ist eine bekannte Funktion, welche die Dichten der Wärmequellen beschreibt. Die Funktionen h und q sind unbekannt. In der Form (7.3) ist die Beschreibung des Wärmetransports unabhängig von der Temperatur. Man benötigt nun noch Materialgesetze, die noch eine Relation zur Temperatur herstellen.

7.3 Materialgesetze

Die Beziehung zwischen der Enthalpie und der Temperatur kann in vielen Fällen als linear modelliert werden

$$h(t, x) = \rho c u(t, x), \quad (7.4)$$

wobei ρ [kg/m^3] die Dichte und c [$J/(kg K)$] = [$W s/(kg K)$] die spezifische Wärmekapazität des betrachteten Materials sind. Im einfachsten Fall sind ρ und c Konstanten. In manchen Situationen ist es aber wichtig, diese Größen als veränderlich zu betrachten, beispielsweise $\rho = \rho(x, u)$, $c = c(x, u)$. Das tritt beispielsweise auf, wenn man eine Mischung mehrerer Materialien zu modellieren hat, die unterschiedliche Dichten und Wärmekapazitäten besitzen. Die effektive Dichte und Wärmekapazität sind dann dann ortsabhängige Funktionen, die durch das Material an der jeweiligen Position bestimmt sind. Ein anderer Fall ist, dass manche Materialien sich stark ausdehnen, wenn die Temperatur ansteigt. Dann verändert sich deren Dichte und es ist wichtig, $\rho = \rho(u)$ zu betrachten.

Die Beziehung zwischen dem Wärmefluss q und der Temperatur u wird im allgemeinen durch Diffusion bestimmt. Das bedeutet, die Teilchen bewegen sich (mikroskopisch mittels einer Brown³'schen Bewegung) bevorzugt in die Richtung des stärksten Temperaturgefälles, um lokale Schwankungen der Temperatur auszugleichen. Das lokal stärkste Temperaturgefälle kann mit Hilfe der ersten Ableitung bestimmt werden. Es wird durch das sogenannte Fick⁴'sche Gesetz oder Fourier⁵'sche Abkühlungsgesetz modelliert

$$q(t, x) = \lambda \frac{\partial}{\partial x} u(t, x), \quad (7.5)$$

wobei $\lambda > 0$ [$W/(m K)$] den Wärmeleitkoeffizienten bezeichnet. Die spezielle Modellierung von λ hängt wieder von der betrachteten Situation ab. Im allgemeinen wird $\lambda = \lambda(x, u)$ sein, manchmal muss man auch eine Abhängigkeit vom Temperaturgefälle $\frac{\partial u}{\partial x}$ berücksichtigen.

7.4 Die Wärmeleitungsgleichung

Wir betrachten der Einfachheit halber den Fall konstanter, skalarer Werte von ρ , c und λ . Dann erhält man mit dem Einsetzen von (7.4) und (7.5) in (7.3) die lineare Differentialgleichung

$$\frac{\partial u}{\partial t} - D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = f \quad \text{in } \mathbb{R}^+ \times (a, b), \quad (7.6)$$

wobei $D = \lambda/(c\rho)$ [m^2/s] der Temperatur-Leitwert ist.

Man weiss aus der Theorie zu Gleichungen der Gestalt (7.6), dass die Lösung dann eindeutig bestimmt ist, wenn man für die Temperatur des Systems am Anfang,

³Robert Brown (1773 – 1858)

⁴Adolf Fick (1829 – 1901)

⁵Jean Baptiste Joseph Fourier (1768 – 1830)

das heißt zum Zeitpunkt $t = 0$ und zusätzlich auf dem Rand, das heißt in den Punkten a und b , geeignete Bedingungen für alle Zeiten vorgibt. Die Anfangsbedingung hat die Form

$$u(0, x) = u_0(x), \quad x \in (a, b),$$

für eine gegebene Anfangstemperatur $u_0(x)$.

Randbedingungen kann man unterschiedlich vorgeben. Dazu betrachten wir den Wärmefluss über den Rand und nehmen an, dass außerhalb von (a, b) eine Umgebungstemperatur u^* gegeben ist. Im allgemeinen erfolgt die Wärmeübertragung mit der Umgebung durch Strömung (Konvektion). Dabei wird die Wärme in ein oder aus einem Fluid beziehungsweise Gas übertragen, indem das Fluid beziehungsweise Gas die Oberfläche eines anderen Volumens überströmt und dabei ein Temperaturengleich erfolgt. Da der Wärmefluss über den Rand die Temperaturdifferenz ausgleichen muss, erhält man, zum Beispiel im Punkt b

$$q(t, b) = -\alpha(u - u^*)(t, b)$$

mit einem positiven Wärmeübergangskoeffizienten $\alpha = \alpha(x, u, u^*)$. Ersetzt man den Wärmefluss durch die Temperatur, (7.5), erhält man die sogenannte Robin⁶-Randbedingung

$$\lambda \frac{\partial u}{\partial x}(t, b) = -\alpha(u - u^*)(t, b).$$

Interessant sind die Grenzwerte von $\beta = \alpha/\lambda$:

- Für $\beta \rightarrow 0$ erhält man die sogenannte homogene Neumann⁷-Randbedingung $\frac{\partial u}{\partial x}(t, b) = 0$. Diese Randbedingung besagt, dass kein Austausch von Wärme mit der Umgebung erfolgt. Dies ist bei einem isolierten Rand der Fall.
- Für $\beta \rightarrow \infty$ erhält man die Dirichlet⁸-Randbedingung $u(t, b) = u^*(t, b)$. Diese Randbedingung besagt, dass der Wärmeaustausch mit der Umgebung so stark ist, dass sich die Temperatur am Rand des Stabs der Umgebungstemperatur anpasst.

Im Punkt a sind die Dirichlet-Randbedingung $u(t, a) = u^*(t, a)$, die homogene Neumann-Randbedingung $\frac{\partial u}{\partial x}(t, a) = 0$ und die Robin-Randbedingung $\lambda \frac{\partial u}{\partial x}(t, a) = \alpha(u - u^*)(t, a)$.

Man beachte, dass man für $f = 0$, das heißt man hat keine Temperaturquellen und -senken, und im Fall eines isolierten Randes ein abgeschlossenes System erhält, in dem die Energieerhaltung gilt

$$\frac{d}{dt}H(t, (a, b)) = \int_a^b \frac{\partial h}{\partial t}(t, x) dx = q(b) - q(a) = 0,$$

vergleiche (7.2).

Nun kann man die Wärmeleitungsgleichung (7.6) skalieren und in eine dimensionslose Form bringen. Man wählt eine typische Länge l für das Gebiet und eine zunächst noch unbestimmte Zeitskala τ und transformiert die Variablen zu

$$\tilde{x} = \frac{x}{l}, \quad \tilde{t} = \frac{t}{\tau}.$$

Als nächstes wird die Temperatur mittels einer Abschätzung T_0 für die auftretende Minimaltemperatur und einer Abschätzung ΔT für die Temperaturschwankung transformiert

$$\tilde{u} = \frac{u - T_0}{\Delta T}.$$

⁶Gustave Robin (1855 – 1897)

⁷Carl Gottfried Neumann (1832 – 1925)

⁸Johann Peter Gustav Lejeune Dirichlet (1805 – 1859)

Mit der Kettenregel

$$\begin{aligned}\frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{t}} &= \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{u - T_0}{\Delta T} \right) \frac{\partial t}{\partial \tilde{t}} = \frac{\tau}{\Delta T} \frac{\partial u}{\partial t}, \\ \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{x}} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{u - T_0}{\Delta T} \right) \frac{\partial x}{\partial \tilde{x}} = \frac{l}{\Delta T} \frac{\partial u}{\partial x}, \\ \frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial \tilde{x}^2} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{l}{\Delta T} \frac{\partial u}{\partial x} \right) \frac{\partial x}{\partial \tilde{x}} = \frac{l^2}{\Delta T} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2},\end{aligned}$$

erhält man nun aus (7.6) die skalierte Wärmeleitungsgleichung

$$\frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{t}} = \frac{\tau}{\Delta T} \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\tau}{\Delta T} \left(D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f \right) = \frac{\tau}{\Delta T} \frac{\Delta T}{l^2} D \frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial \tilde{x}^2} + \tilde{f} = \frac{D\tau}{l^2} \frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial \tilde{x}^2} + \tilde{f} \quad (7.7)$$

mit $\tilde{f} = \tau f / \Delta T$. Die Randbedingung skaliert sich zu

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial \tilde{x}} \tilde{u} \left(\frac{t}{\tau}, \frac{b}{l} \right) &= \frac{\alpha l}{\lambda \Delta T} \left((\Delta T u - T_0) - (\Delta T u^* - T_0) \right) \left(\frac{t}{\tau}, \frac{b}{l} \right) \\ &= -\frac{\alpha l}{\lambda} (\tilde{u} - \tilde{u}^*) \left(\frac{t}{\tau}, \frac{b}{l} \right)\end{aligned}$$

und die Anfangsbedingung zu $\tilde{u}(\tilde{x}, 0) = \tilde{u}_0(\tilde{x})$.

In der Wärmeleitungsgleichung (7.7) gibt es noch zwei effektive Parameter, τ und l . Es liegt nun nahe, die Zeitskala τ so zu wählen, dass der dimensionslose Diffusionskoeffizient gleich Eins ist, das heißt $\tau = l^2 / D$. Dann folgt aus (7.7)

$$\frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{t}} - \frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial \tilde{x}^2} = \tilde{f} = \frac{l^2}{D \Delta T} f \quad \text{in } \mathbb{R}^+ \times \left(\frac{a}{l}, \frac{b}{l} \right). \quad (7.8)$$

Es verbleibt noch der dimensionslose Wärmeübergangskoeffizient $\beta = \alpha l / \lambda$ in der Randbedingung als Parameter.

Bemerkung 7.1 Stationäre Wärmeleitungsgleichung. Falls \tilde{u} zeitlich konstant ist, erhält man die stationäre Wärmeleitungsgleichung

$$-\tilde{u}'' = \tilde{f} \quad \text{in } (a, b). \quad (7.9)$$

Das ist die sogenannte Poisson⁹-Gleichung. Die homogene Form, das heißt $\tilde{f} = 0$, wird Laplace¹⁰-Gleichung genannt. Die Gleichung (7.9) kann man im Prinzip durch zweimaliges Integrieren im Ort lösen, währenddessen das bei der Gleichung (7.8) nicht mehr funktioniert. \square

Bemerkung 7.2 Modellfehler. Die Differentialgleichungen (7.8) und (7.9) modellieren die Wärmeausbreitung in einem Stab. Es stellt sich auch hier die Frage, wie gut diese Modelle sind. Der Modellfehler besitzt unter anderem folgende Bestandteile:

- Der Stab ist nicht ein- sondern dreidimensional. Man findet im Prinzip auf die gleiche Art und Weise wie oben die Wärmeleitungsgleichung im dreidimensionalen Gebiet. Im Unterschied zur eindimensionalen Gleichung treten dann Ableitungen in alle drei Raumrichtungen auf, womit man eine sogenannte partielle Differentialgleichung erhält.
- Bei den linearen Ansätzen (7.4) und (7.5) werden Terme höherer Ordnung vernachlässigt.

⁹Siméon Denis Poisson (1781 – 1840)

¹⁰Pierre Simon Laplace (1749 – 1829)

- Das Material ist im allgemeinen nicht vollständig homogen.
- Die physikalischen Konstanten kennt man nur bis zu einer gewissen Genauigkeit.
- Die Anfangsbedingung kennt man im allgemeinen nur punktweise.
- Die Randbedingungen kann man auch nur zu einer gewissen Genauigkeit steuern.

□