



Prof. Dr. Michael Herrmann
Technische Universität Braunschweig
Institut *Computational Mathematics*
`michael.herrmann@tu-braunschweig.de`

Skript zur Vorlesung
Angewandte Analysis
im Sommersemester 2019

© Michael Herrmann

Der Autor ist für Hinweise und Kommentare jederzeit dankbar.

Dieses Skript ist lizenziert unter **CC BY-SA 3.0 DE**.
<http://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0/de/>



Bei der Ausarbeitung dieses Vorlesungsskriptes hat der Autor regelmäßig die folgenden Werke konsultiert und viele Beweisstrategien, Präsentationsideen, Beispiele usw. übernommen:

- [Bar] G. I. BARENBLATT:
Scaling, self-similarity, and intermediate asymptotics
Cambridge University Press, 1996
- [EGK] CH. ECK, H. GARCKE, P. KNABNER:
Mathematische Modellierung (Springer Berlin, 2008)
- [Hol] M. H. HOLMES:
Introduction to the Foundations of Applied Mathematics
Springer New York, 2009
- [HW] K. H. HOFFMANN, G. WITTERSTEIN:
Mathematische Modellierung
Birkhäuser, 2014

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	5
1.1	Über Mathematische Modelle	5
1.2	Physikalische Dimensionen und Einheiten	10
1.3	Das Buckingham'sche Prinzip	12
1.4	Entdimensionalisierung	23
2	Methoden der Angewandten Analysis	31
2.1	Sensitivitätsanalyse	32
2.2	Linearisierung um Lösungen	38
2.3	Einführung in die asymptotische Analysis	43
2.3.1	Asymptotik für Lösungen glatter Gleichungen	44
2.3.2	Asymptotische Analysis von Differentialgleichungen	52
2.4	Fourier-Methoden	63
2.4.1	Fourier-Transformation	68
2.4.2	Anwendungen auf Partielle Differentialgleichungen	75
2.4.3	Fourier-Reihen	80
2.4.4	Anwendungen auf Rand-Anfangswert-Probleme	89
3	Modelle in den Naturwissenschaften	95
3.1	Reaktionen und kinetische Gleichungen	95
3.1.1	Einführende Beispiele	95
3.1.2	Massenwirkungsgesetz für (chemische) Reaktionen	97
3.2	Diffusionsprozesse	100
3.2.1	Random Walks	101
3.2.2	Diffusion als Feldtheorie	108
3.3	Kontinuumsmechanik und Thermodynamik	119
3.3.1	Kontinuumsmechanik in einer Raumdimension	119
3.3.2	Elastizitätstheorie in einer Raumdimension	127
3.3.3	Thermomechanischer Körper in 3 Raumdimensionen	131

Kapitel 1

Einführung

1.1 Über Mathematische Modelle

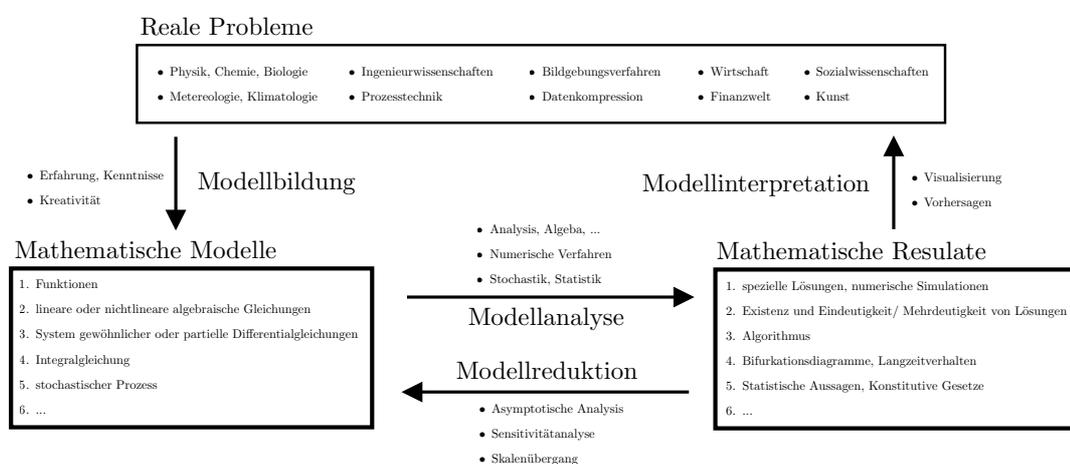


Abbildung 1.1: Die sehr grobe und unvollständige Übersicht aus der ersten Vorlesung.

Beispiel: Das Pendel

Unser erstes Beispiel ist eine Punktmasse der Masse m , die an einem Faden der Länge L aufgehängt ist und sich im Gravitationsfeld der Erde bewegt, siehe Abbildung 1.2.

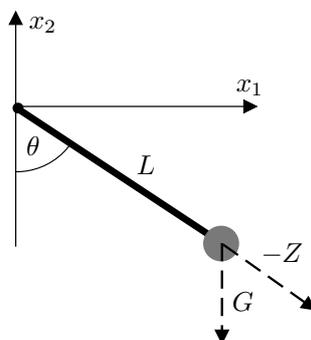


Abbildung 1.2: Schematische Darstellung eines Pendels.

Herleitung eines mathematischen Modells Wir werden das Pendel im Rahmen der Klassischen Mechanik beschreiben und beginnen deshalb mit der *Newtonschen Bewegungsgleichung*¹

$$m \cdot a = F \quad (\text{Masse} \cdot \text{Beschleunigung} = \text{Kraft}), \quad (1.1)$$

die nun im konkreten Fall spezifiziert werden muss. Wir nehmen an, dass sich das Pendel in einer Ebene bewegt und bezeichnen mit $x = (x_1, x_2)$ die Koordinaten der Punktmasse, wobei die Gravitation in Richtung der negativen x_2 -Achse wirken soll. Die Position der Punktmasse wird natürlich von der Zeit t abhängen, wobei die momentane Geschwindigkeit bzw. die Beschleunigung durch

$$\dot{x} = \frac{dx}{dt} \quad \text{bzw.} \quad \ddot{x} = \frac{d^2x}{dt^2}$$

gegeben ist. Beim Pendeln kann sich die Punktmasse nur auf einer Kreisbahn der Länge L um den Aufhängepunkt bewegen, wobei letzterer mit dem Koordinatenursprung identifiziert wird. Es liegt daher nahe, die Polarkoordinaten

$$x = L \cdot \begin{pmatrix} + \sin \theta \\ - \cos \theta \end{pmatrix}$$

zu verwenden, wobei der Winkel θ sich natürlich mit der Zeit ändert. Die Länge L ist jedoch zeitunabhängig und damit liefert die Kettenregel

$$\dot{x} = L \cdot \dot{\theta} \cdot \begin{pmatrix} + \cos \theta \\ + \sin \theta \end{pmatrix}$$

sowie

$$\ddot{x} = L \cdot \ddot{\theta} \cdot \begin{pmatrix} + \cos \theta \\ + \sin \theta \end{pmatrix} + L \cdot \dot{\theta}^2 \cdot \begin{pmatrix} - \sin \theta \\ + \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (1.2)$$

Auf die Punktmasse wirkt nun zum einen die Gravitationskraft G als auch eine Zwangskraft Z , die vom Faden ausgeübt wird und den konstanten Abstand zum Ursprung garantiert. Die Gravitationskraft kennen wir sehr gut, denn es gilt (zumindest in erster Näherung)

$$G = m \cdot g \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix},$$

wobei g die Erdbeschleunigung² bezeichnet. Von der Zwangskraft

$$Z = \zeta \cdot \begin{pmatrix} - \sin \theta \\ + \cos \theta \end{pmatrix}$$

wissen wir, dass sie entlang des Fadens in Richtung des Ursprungs wirkt, aber ihr Betrag $\zeta \in \mathbb{R}$ ist im Moment unbekannt. Insgesamt wirkt damit die Gesamtkraft

$$F = G + Z,$$

¹Isaac Newton (1642–1727), englischer Mathematiker und Physiker.

²Es gilt $g \approx 9,81 \text{ m/s}^2$; der exakte Wert variiert mit der Höhe und weil die Erde keine perfekte Kugel ist.

wobei G nicht von der Zeit aber Z und damit auch F sehr wohl von t abhängen. Im nächsten Schritt zerlegen wir G in den zu x parallelen und den zu x senkrechten Anteil. Dies ergibt

$$G = -m \cdot g \cdot \sin \theta \cdot \begin{pmatrix} + \cos \theta \\ + \sin \theta \end{pmatrix} + m \cdot g \cdot \cos \theta \cdot \begin{pmatrix} + \sin \theta \\ - \cos \theta \end{pmatrix}$$

und damit

$$F = -m \cdot g \cdot \sin \theta \cdot \begin{pmatrix} + \cos \theta \\ + \sin \theta \end{pmatrix} + (-\zeta + m \cdot g \cdot \cos \theta) \cdot \begin{pmatrix} + \sin \theta \\ - \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (1.3)$$

Gemäß des Newtonschen Gesetzes (1.1) unterscheiden sich die rechten Seiten in (1.2) und (1.3) nur um den Faktor m . Ein Koeffizientenvergleich bzgl. der orthogonalen Vektoren $(+\cos \theta, +\sin \theta)^T$ und $(+\sin \theta, -\cos \theta)^T$ liefert nun zum einen eine gewöhnliche Differentialgleichung für θ , nämlich

$$\ddot{\theta} = -\frac{g}{L} \cdot \sin \theta \quad (\text{„mathematisches Pendel“}), \quad (1.4)$$

als auch eine zweite Gleichung, die nach dem Betrag ζ der Zwangskraft Z aufgelöst werden kann. Insbesondere gilt

$$\zeta = m \cdot L \cdot \dot{\theta}^2 - m \cdot g \cdot \cos \theta,$$

d.h. die Zwangskraft Z kompensiert sowohl die Zentrifugalkraft als auch die radiale Komponente der Gravitationskraft (Z und ζ sind aber im Weiteren nicht wichtig).

Beachte, dass θ immer noch von t abhängt. Mathematisch gesehen ist $\theta: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ eine unbekannte Funktion und (1.4) etabliert eine punktweise Relation zwischen dieser Funktion und ihrer zweiten Ableitung, nämlich

$$\frac{d^2\theta(t)}{dt^2} = -\frac{g}{L} \cdot \sin(\theta(t)) \quad \text{für alle Zeiten } t.$$

Für die mathematische Theorie von gewöhnlichen Differentialgleichungen im Allgemeinen und von (1.4) im Speziellen sei auf die einschlägige Literatur verwiesen.

Modellvereinfachung und explizite Lösung In der Physik wird oft die folgende *Modellvereinfachung* vorgenommen: Der Satz von Taylor³ garantiert⁴

$$\sin \theta = \theta - \frac{\theta^3}{6} + \mathcal{O}(|\theta|^5)$$

und damit $\sin \theta \approx \theta$ solange $|\theta|$ sehr klein ist. Unter einer Kleinheitsannahme an θ kann also die approximative Gleichung

$$\ddot{\theta} = -\frac{g}{L} \cdot \theta \quad (\text{„physikalisches Pendel“}) \quad (1.5)$$

gerechtfertigt werden. Der Vorteil ist, dass die vereinfachte Differentialgleichung (1.5) im Gegensatz zu (1.4) explizit gelöst werden kann. Die entsprechende allgemeine Lösung lautet

$$\theta(t) = A \cdot \cos\left(\sqrt{\frac{g}{L}} \cdot t\right) + B \cdot \sin\left(\sqrt{\frac{g}{L}} \cdot t\right), \quad (1.6)$$

³Brook Taylor (1685–1731), englischer Mathematiker.

⁴ $\mathcal{O}(|\theta|^k)$ bezeichnet einen Term, der für $|\theta| \rightarrow 0$ im Betrag mindestens so schnell wie $|\theta|^k$ gegen 0 konvergiert.

wobei A und B zwei Konstanten sind, die durch die Vorgabe weiterer Bedingungen eliminiert werden können. Schreibt man zum Beispiel den Anfangswinkel θ_0 und den Betrag v_0 der Anfangsgeschwindigkeit vor, so gilt

$$x(0) = L \begin{pmatrix} + \sin \theta_0 \\ - \cos \theta_0 \end{pmatrix}, \quad v_0 = |\dot{x}(0)| = L \cdot |\dot{\theta}(0)|$$

und damit

$$A = \theta_0, \quad B = \frac{v_0}{\sqrt{g \cdot L}}.$$

Diskussion Wir haben nun zwei verschiedene aber immer noch relative einfache mathematische Modelle für dasselbe physikalische Problem gefunden. Aber selbst die nichtlineare Differentialgleichung (1.4), die wir direkt aus den Newtonschen Bewegungsgleichungen abgeleitet haben, ist nur ein *Modell*, also eine *Idealisierung*, und beschreibt die Wirklichkeit nicht vollständig. Die Bewegung eines realen Pendels ist sehr viel komplizierter: Zum einen gibt es Reibungseffekte – z.Bsp. durch den Luftwiderstand oder die Verdrillung des Fadens – die die Bewegung dämpfen werden. Zum anderen gibt es natürlich keine Punktmassen sondern nur räumlich ausgedehnte Objekte und im Allgemeinen kann auch die Erdrotation nicht vernachlässigt werden (Foucaultsches Pendel). Jeden dieser Effekte kann man im Rahmen komplizierterer Modelle beschreiben, aber es gibt kein Modell, das die Physik vollständig beschreibt. Jedes Modell geht von Vereinfachungen aus und die Kunst in der Modellierung besteht darin, je nach Anwendungsfall das ‘beste’ mathematische Modelle abzuleiten bzw. zu untersuchen. Die Optimalität ist dabei von Fall zu Fall ein Kompromiss zwischen

1. *Einfachheit* (wir wollen die Gleichungen am Ende per Hand oder mit dem Computer lösen können und haben darüber hinaus nur endliche Ressourcen zur Verfügung),
2. *Komplexität* (damit wir die wichtigen bzw. interessanten Aspekte des Problems untersuchen und beschreiben können),
3. und weiteren Bedingungen (wir etwa Verfügbarkeit von Messdaten oder unsere methodischen Vorlieben).

Beispiel: Abschuss eines Projektils

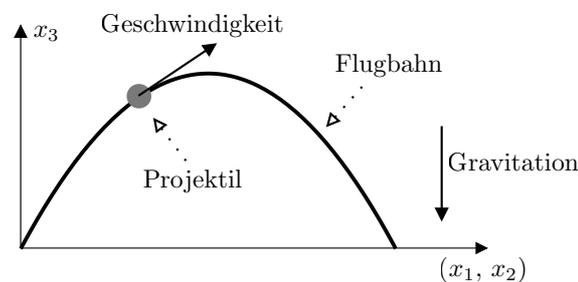


Abbildung 1.3: Schematische Darstellung einer Projekttilbahn.

Als zweites einfaches Beispiel wollen wir in Abbildung 1.3 dargestellt den Wurf oder Abschuss eines Projektils (Ball, Tontaube, Granate) der Masse m untersuchen. Nachdem dieses Projektil abgeschossen wurde, wird es einige Zeit fliegen aber schließlich auf Grund der Erdanziehung den Erdboden erreichen (es sei denn, wir geben dem Projektil eine sehr große Anfangsgeschwindigkeit).

Herleitung eines mathematischen Modells Wir wollen im folgenden die Wechselwirkungen mit der umgebenden Luft und sonstige Effekte ignorieren (was man in vielen Anwendungen eigentlich nicht tun sollte). Wir wollen außerdem die Erdkrümmung vernachlässigen und die Erdoberfläche mit der (x_1, x_2) -Ebene identifizieren (was meist eine sinnvolle Vereinfachung ist). Die Position des Projektils wird durch die drei zeitabhängigen Koordinaten (x_1, x_2, x_3) beschrieben, wobei $x_3 > 0$ während des Fluges gilt und wir nur bis zum Aufprall rechnen.

Das Newtonsche Gravitationsgesetz besagt, dass der Betrag der Anziehungskraft F zwischen zwei Körpern mit den Massen m_1 und m_2 und dem Anstand r durch

$$|F| = \Gamma \cdot \frac{m_1 \cdot m_2}{r^2}$$

gegeben ist, wobei Γ die Gravitationskonstante⁵ ist. Da in unserem Modell die Gravitation die einzige Kraft ist und darüber hinaus immer nach unten zeigt, wird auf das Projektil immer die (zeitabhängige) Kraft

$$F = -\frac{\Gamma \cdot M \cdot m}{(x_3 + R)^2} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

ausgeübt, wobei R und M den Erdradius und die Erdmasse bezeichnen (die beide als konstant und gegeben angenommen werden). Die Newtonsche Bewegungsgleichung (1.1) wird damit zur Differentialgleichung

$$m \begin{pmatrix} \ddot{x}_1 \\ \ddot{x}_2 \\ \ddot{x}_3 \end{pmatrix} = -\frac{\Gamma \cdot M \cdot m}{(x_3 + R)^2} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (1.7)$$

in der die x_i zeitabhängig und alle anderen Größen zeitlich konstant sind. Insbesondere ergibt sich eine nichtlineare Differentialgleichung zweiter Ordnung für die Projektilhöhe x_3 , nämlich

$$\ddot{x}_3 = -\frac{\Gamma \cdot M}{(x_3 + R)^2}, \quad (1.8)$$

die mit Hilfe von $g = \Gamma \cdot M / R^2$ (g ist wieder die Erdbeschleunigung) auch als

$$\ddot{x}_3 = -\frac{g \cdot R^2}{(x_3 + R)^2}$$

geschrieben werden kann. Die Gleichungen für die beiden horizontalen Komponenten sind jedoch denkbar einfach: Mit

$$\ddot{x}_1 = 0, \quad \ddot{x}_2 = 0 \quad (1.9)$$

folgt sofort

$$x_i(t) = x_i(0) + \dot{x}_i(0) \cdot t \quad i = 1, 2,$$

d.h. x_1 und x_2 sind lineare Funktionen in der Zeit.

Beachte, dass unser Modell im Allgemeinen nur für endliche Zeiten Sinn macht, nämlich nur solange bis das Projektil auf der Erdoberfläche aufschlägt. Ob bzw. wann dies passiert, muss erst aus noch ermittelt werden.

⁵Obwohl wir hier nicht an konkreten Werten interessiert sind, wollen wir zur Vollständigkeit alle im Folgenden benutzten Konstanten angeben: $\Gamma \approx 6,67 \cdot 10^{-11} \text{ m}^3/(\text{kg} \cdot \text{s}^2)$, $M \approx 5,97 \cdot 10^{24} \text{ kg}$, $R \approx 6,37 \cdot 10^6 \text{ m}$.

Modellvereinfachung Wir wollen im Folgenden annehmen, dass das Projektil zur Zeit $t = 0$ von Erdboden aus abgeschossen wird und dass die Abschussposition mit dem Koordinatenursprung zusammenfällt, d.h. wir setzen

$$x_1(0) = x_2(0) = x_3(0) = 0. \quad (1.10)$$

Die Anfangsdaten für die vektorielle Geschwindigkeit können dann als

$$\begin{pmatrix} \dot{x}_1(0) \\ \dot{x}_2(0) \\ \dot{x}_3(0) \end{pmatrix} = V \cdot \begin{pmatrix} \cos \alpha \cdot \cos \beta \\ \cos \alpha \cdot \sin \beta \\ \sin \alpha \end{pmatrix} \quad (1.11)$$

geschrieben werden, wobei V gerade der Betrag der vektoriellen Anfangsgeschwindigkeit ist und $\alpha \in (0, \pi]$ bzw. $\beta \in [0, 2\pi)$ den Abschusswinkel bzw. den Ausrichtungswinkel bezeichnet. Insbesondere sehen wir nun mit (1.9), dass x_1/x_2 zeitlich konstant ist, d.h. die Flugbahn liegt in der Ebene die durch \dot{x}_0 und die x_3 -Achse aufgespannt wird (physikalisch gesehen ist das keine Überraschung sondern Konsequenz der *Drehimpulserhaltung*)

Ist die vertikale Anfangsgeschwindigkeit sehr groß, so wird das Projektil nie zum Erdboden zurückkehren. Wir wollen hier die entsprechende Rechnung nicht ausführen, aber im Modell (1.7) gilt dies genau dann, wenn⁶

$$(V \cdot \sin \alpha)^2 > 2 \cdot \frac{\Gamma \cdot M}{R} = 2 \cdot g \cdot R. \quad (1.12)$$

In Wirklichkeit (bzw. in einem komplexeren Modell) muss die Geschwindigkeit noch sehr viel größer sein, da die Atmosphäre des Projektil abbremst. Für viele Zwecke wird man davon ausgehen können, dass die Projektilgeschwindigkeit zu jedem Zeitpunkt eher klein ist und dass die Projektilhöhe x_3 immer sehr viel kleiner als der Erdradius R ist. Unter dieser Voraussetzung gilt

$$\frac{R}{x_3 + R} \approx 1$$

und die nichtlineare Differentialgleichung (1.8) kann durch die wesentliche einfachere Gleichung

$$\ddot{x}_3 = -g \quad (1.13)$$

ersetzt werden. Wird diese Gleichung nun mit (1.9) sowie den Anfangsbedingungen (1.10) und (1.11) kombiniert, so können alle interessanten Größen explizit berechnet werden können (Übungsaufgabe).

1.2 Physikalische Dimensionen und Einheiten

Eine wesentliche Eigenschaft fast aller realen Größen ist, dass diese eine *physikalische* (oder andere) *Dimension* besitzen, die üblicherweise durch die Angabe von *Einheit*

⁶In Zahlen bedeutet dies $V \cdot \sin \alpha \gtrsim 1,1 \cdot 10^4 \text{ m/s} \approx 4,0 \cdot 10^4 \text{ km/h}$. Eine mögliche Herleitung beruht auf der Identität $\dot{x}_3^2 - 2 \cdot \Gamma \cdot M / (x_3 + R) = (V \cdot \sin \alpha)^2 - 2 \cdot \Gamma \cdot M / R$, die aus der *Energieerhaltungssatz* abgeleitet werden kann.

⁷Obwohl es sehr viele Einheitensysteme gibt, verwendet man heutzutage vor allem das *Internationale Einheitensystem SI (système international d'unités)*. Für den amtlichen Schriftverkehr ist dies in Deutschland sogar gesetzlich vorgeschrieben, siehe zum Beispiel die Broschüre *Das Internationale Einheitensystem (SI)* der *Physikalisch-Technischen Bundesanstalt (PTB)*.

⁸Manchmal werden reelle Zahlen mit *ergänzenden Einheiten* versehen. Ein Beispiel ist die Einheit *Radiant* für ebene Winkel, die als Verhältnis von zwei Längen die Dimension $\mathbf{L} / \mathbf{L} = \mathbf{1}$ besitzen.

Dimension	Mögliche Einheiten ⁷	Symbol	
Länge	Meter, Millimeter, Meile, ...	L	(length)
Masse	Kilogramm, Pfund, Megatonne, ...	M	(mass)
Zeit	Sekunde, Stunde, Woche, ...	T	(time)
Ladung	Coloumb, Amperesekunde, ...	C	(charge)
Stoffmenge	Mol, ...	N	(number)
Temperatur	Kelvin, Grad Celsius, ...	Θ	
Lichtstärke	Candela, ...	J	
reelle Zahl	<i>keine</i> ⁸	1	<i>dimensionslos</i>

Tabelle 1.1: Die wichtigsten physikalischen Basisdimensionen und ihr Symbol. In der modernen Physik wird *Ladung* oftmals durch *Strom=Ladung pro Zeit* ersetzt, d.h. man betrachtet $\mathbf{I} = \mathbf{C}/\mathbf{T}$ statt $\mathbf{C} = \mathbf{I} \cdot \mathbf{T}$ als Basisdimension.

Dimension	Mögliche Einheiten	Symbol
Geschwindigkeit	Kilometer pro Stunde, ...	$\frac{\mathbf{L}}{\mathbf{T}}$
Beschleunigung	Meter pro Quadratsekunde, Gal, ...	$\frac{\mathbf{L}}{\mathbf{T}^2}$
Kraft	Newton, Dyn, ...	$\frac{\mathbf{M} \cdot \mathbf{L}}{\mathbf{T}^2}$
Energie, Arbeit	Joule, Newtonmeter, Wattsekunde, ...	$\frac{\mathbf{M} \cdot \mathbf{L}^2}{\mathbf{T}^2}$
Leistung	Watt, Voltampere, ...	$\frac{\mathbf{M} \cdot \mathbf{L}^2}{\mathbf{T}^3}$
Stromstärke	Ampere, ...	$\frac{\mathbf{C}}{\mathbf{T}}$
Spannung	Volt, ...	$\frac{\mathbf{M} \cdot \mathbf{L}^2}{\mathbf{T}^2 \cdot \mathbf{C}}$
Volumen	Kubikmeter, ...	\mathbf{L}^3
spezifisches Volumen	Kubikmeter pro Kilogramm, ...	$\frac{\mathbf{L}^3}{\mathbf{M}}$
Massendichte (3D)	Kilogramm pro Kubikmeter, ...	$\frac{\mathbf{M}}{\mathbf{L}^3}$
Zahldichte von X (3D)	X pro Kubikmeter, ...	$\frac{\mathbf{N}_x}{\mathbf{L}^3}$

Tabelle 1.2: Wichtige abgeleitete physikalische Dimensionen. In der Mechanik können alle Dimensionen durch \mathbf{L} , \mathbf{M} , und \mathbf{T} ausgedrückt werden. In der Thermodynamik kommt dann Θ hinzu, in der Elektrodynamik \mathbf{C} oder $\mathbf{I} = \mathbf{C}/\mathbf{T}$.

ten spezifiziert wird. So gibt es z. Bsp. *Längen*, die einer *Längeneinheit*⁹ gemessen

⁹Obwohl *Dimension* und *Einheit* sehr viel miteinander zu tun haben, sind sie keine Synonyme sondern haben unterschiedliche Bedeutung. Da wir in dieser Vorlesung meist nicht an konkreten

werden, und *Massen*, die in einer *Masseneinheit* angegeben werden; siehe Tabelle 1.1. Unterschiedliche Masse- bzw. Längeneinheiten können natürlich ineinander umgerechnet werden

$$1 \text{ Kilogramm} = 1.000 \text{ Gramm} = 2,0 \text{ deutsche Pfund} \approx 2,204 \text{ britische Pfund}$$

bzw.

$$1 \text{ Meter} = 0.00053 \text{ Seemeilen} = 1.84596 \cdot 10^{-11} \text{ astronomische Einheiten},$$

aber eine Masse und eine Länge können niemals addiert oder voneinander abgezogen werden. Es ist jedoch sehr wohl möglich, verschiedenartige Größen miteinander zu multiplizieren oder durch einander zu dividieren. Insbesondere gilt, siehe Tabelle 1.2,

$$\frac{\text{Länge}}{\text{Zeit}} = \text{Geschwindigkeit}, \quad \text{Kraft} \cdot \text{Länge} = \text{Arbeit}, \quad \text{usw.}$$

Manchmal ist es sinnvoll, auch Anzahlen von Dingen eine Dimension zuzuordnen, eben weil man die sprichwörtlichen Äpfel und Birnen nicht zusammenzählen kann. Das führt dann zu neuen Dimensionssymbolen wie etwa $\mathbf{N}_{\text{Apfel}}$ und $\mathbf{N}_{\text{Birne}}$. Darüber hinaus kann das Dimensionskonzept auch außerhalb klassischen Natur- und Technikwissenschaften verwendet werden. Viele ökonomische Größen lassen sich zum Beispiel der Dimension *Geld* zuordnen und die verschiedenen Währungen können als Einheiten interpretiert werden (wobei die entsprechenden Umrechnungsfaktoren nun nicht mehr konstant sind sondern stark fluktuieren können).

Im folgenden wollen wir die Basisdimensionen wie in den Tabellen 1.1 und 1.2 dargestellt mit den Symbolen \mathbf{L} , \mathbf{M} usw. bezeichnen. Darüber hinaus schreiben¹⁰ wir

$$[X] \text{ für die Dimension einer Größe } X,$$

und betonen, dass auch alle Naturkonstanten eine Dimension besitzen, siehe Tabelle 1.3.

1.3 Das Buckingham'sche Prinzip

In diesem Abschnitt untersuchen wir, inwieweit physikalische Einheiten bzw. Dimensionen bei der mathematischen Modellierung benutzt werden können bzw. sollten. Insbesondere werden wir sehen, dass sehr viele nichttriviale Ergebnisse bereits aus einer einfachen *Dimensionsanalyse* gewonnen werden können.

Beispiel: Die Periode eines Pendels In Abschnitt §1.1 hatten wir die Gleichungen für das Pendel abgeleitet. Eine klassische Frage ist dabei, wie die Periode t_{per} , d.h. die Schwingungsdauer des Pendels, von den Länge L , der Masse m , und der Erdbeschleunigung g abhängt. Diese Frage läßt sich natürlich durch Messungen oder das Lösen der

Messwerten interessiert sind, ist das Konzept der *Dimension* für unsere Zwecke geeigneter als das der *Einheit*.

¹⁰Beachte, dass $[z]$ in der Physik manchmal die Einheit einer Meßgröße z und nicht die Dimension von z meint.

Konstante	Dimension	SI-Einheit	Zahlenwert
Gravitationskonstante	$\frac{\mathbf{L}^3}{\mathbf{M} \cdot \mathbf{T}^2}$	$\frac{\text{Meter}^3}{\text{Kilogramm} \cdot \text{Sekunde}^2}$	$6,674 \cdot 10^{-11}$
Erdbeschleunigung	$\frac{\mathbf{L}}{\mathbf{T}^2}$	$\frac{\text{Meter}}{\text{Sekunde}^2}$	9,81
Lichtgeschwindigkeit	$\frac{\mathbf{L}}{\mathbf{T}}$	$\frac{\text{Meter}}{\text{Sekunde}}$	299.792.458
Elementarladung	\mathbf{C}	Coloumb	$1,602 \cdot 10^{-19}$
Boltzmann-Konstante	$\frac{\mathbf{M} \cdot \mathbf{L}^2}{\mathbf{T}^2 \cdot \Theta}$	$\frac{\text{Joule}}{\text{Kelvin}}$	$1,380 \cdot 10^{-23}$
Wirkungsquantum	$\frac{\mathbf{M} \cdot \mathbf{L}^2}{\mathbf{T}}$	Joule · Sekunde	$6,66 \cdot 10^{-34}$
Gaskonstante	$\frac{\mathbf{M} \cdot \mathbf{L}^2}{\mathbf{N} \cdot \mathbf{T}^2 \cdot \Theta}$	$\frac{\text{Joule}}{\text{Mol} \cdot \text{Kelvin}}$	8,314

Tabelle 1.3: Einige Naturkonstanten.

Differentialgleichung beantworten, aber man kann dies auch durch *Dimensionsargumente* bestimmen, sofern man davon ausgeht, dass es einen einfachen Zusammenhang der Form

$$t_{\text{per}} = C \cdot L^\alpha \cdot m^\beta \cdot g^\gamma, \quad (1.14)$$

gibt, wobei C eine dimensionslose Konstante bezeichnet und α, β, γ Skalierungsexponenten (und damit auch dimensionslos) sind. Der Punkt ist, dass die Werte von α, β und γ nun schon allein aus *Dimensionsgründen* festgelegt sind, denn mit

$$[L] = \mathbf{L}, \quad [t_{\text{per}}] = \mathbf{T}, \quad [m] = \mathbf{M}, \quad [g] = \frac{\mathbf{L}}{\mathbf{T}^2}$$

ergibt sich aus (1.14) die Dimensionsformel

$$\mathbf{T} = \mathbf{1} \cdot \mathbf{L}^\alpha \cdot \mathbf{M}^\beta \cdot \left(\frac{\mathbf{L}}{\mathbf{T}^2}\right)^\gamma = \mathbf{L}^{\alpha+\gamma} \cdot \mathbf{T}^{-2\gamma} \cdot \mathbf{M}^\beta.$$

Alle Dimensionssymbole müssen nun auf der linken und der rechten Seite in derselben Potenz erscheinen. Ein einfacher Koeffizientenvergleich liefert

$$\alpha = +\frac{1}{2}, \quad \beta = 0, \quad \gamma = -\frac{1}{2},$$

und wir schließen, dass (1.14) nur die Form

$$t_{\text{per}} = C \cdot \sqrt{\frac{L}{g}} \quad (1.15)$$

annehmen kann. Die Konstante $C = 2\pi$ kann mit Dimensionsargumenten natürlich nicht bestimmt werden, aber man sieht mit diesem sehr einfachen Argument, dass die Periode eines Pendels nicht von seiner Masse abhängen kann. Dies folgt natürlich auch aus der Gleichung (1.4), da dort die Masse m nicht auftaucht.

Beispiel: Die Taylor-Sedov-Formel Eine aus ethischer Sicht problematische Anwendung von Dimensionsargumenten ist die Untersuchung der Detonationswellen, die durch sehr energiereiche Explosionen entstehen (ursprünglich war man Atombomben interessiert). Auf Photographien¹¹ sieht man sehr deutlich, dass eine solche Explosion eine selbstähnliche Kugelwelle mit zeitabhängigen Radius R erzeugt und Physiker argumentierten, dass R neben der Zeit t im Wesentlichen von der freigesetzten Energie E und der Dichte ϱ der umgebenden Luft abhängt. Es liegt daher nahe ein einfaches Gesetz der Art

$$R^\alpha \cdot t^\beta \cdot E^\gamma \cdot \varrho^\delta \approx \text{const}$$

zu postulieren. Bzgl. der Dimensionen meint dies

$$\mathbf{L}^\alpha \cdot \mathbf{T}^\beta \cdot \left(\frac{\mathbf{ML}^2}{\mathbf{T}^2}\right)^\gamma \cdot \left(\frac{\mathbf{M}}{\mathbf{L}^3}\right)^\delta = \mathbf{1},$$

und für jede sinnvolle Wahl von $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ müssen sich alle Dimensionen auf der linken Seite aufheben. Für eine Detonationswelle erhalten wir also

$$\alpha + 2\gamma - 3\delta = 0 \quad (\text{für } \mathbf{L}), \quad \beta - 2\gamma = 0 \quad (\text{für } \mathbf{T}), \quad \gamma + \delta = 0 \quad (\text{für } \mathbf{M}).$$

und damit drei lineare Gleichungen für die vier reellen Unbekannten $\alpha, \beta, \gamma, \delta$. Die allgemeine Lösung ist

$$\alpha = +5\delta, \quad \beta = -2\delta, \quad \gamma = -\delta$$

und impliziert (für jeden Wert von δ) das Gesetz von Taylor¹²-Sedov¹³

$$\frac{\varrho \cdot R^5}{t^2 \cdot E} = \text{const} =: C$$

und damit

$$R = \tilde{C} \left(\frac{t^2 \cdot E}{\varrho}\right)^{1/5}.$$

Eine wesentlich zivilere Anwendung dieser Formel ist die Theorie der Supernovae in der Astrophysik.

Mathematische Definitionen

Wir wollen nun die Dimensionsanalyse genauer verstehen.

Definition 1 (Unabhängigkeit von Dimensionen, Dimensionsvektor einer Größe). *Die Liste $(\mathbf{E}_1, \dots, \mathbf{E}_M)$ von Dimensionssymbolen heißt unabhängig, falls es keine nicht-trivialen Exponenten $(\alpha_1, \dots, \alpha_M) \in \mathbb{Q}^M$ gibt, so dass*

$$\mathbf{E}_1^{\alpha_1} \cdot \dots \cdot \mathbf{E}_M^{\alpha_M} = \mathbf{1}.$$

Die Dimension einer Größe X heißt darstellbar bzw. abhängig, sofern

$$[X] = \mathbf{E}_1^{\alpha_1} \cdot \dots \cdot \mathbf{E}_M^{\alpha_M}$$

für einen Vektor¹⁴ $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_m) \in \mathbb{Q}^M$ gilt. Dieser Vektor wird Dimensionsvektor von X bzgl. $(\mathbf{E}_1, \dots, \mathbf{E}_M)$ genannt.

¹¹Siehe z.B. die Abbildungen in [Bar, Hol].

¹²Geoffrey Ingram Taylor (1886–1975), britischer Physiker und Mathematiker.

¹³Leonid Ivanovitch Sedov (1907–1999), sowjetischer Physiker.

¹⁴Mit α bzw. $(\alpha_1, \dots, \alpha_M)$ bezeichnen wir streng genommen einen Zeilenvektor. Für den entsprechenden Spaltenvektor schreiben wir α^T bzw. $(\alpha_1, \dots, \alpha_M)^T$.

Der Komponenten α_m des Dimensionsvektors einer Größe X werden in aller Regel ganze Zahlen sein. Aus mathematischen Gründen (\mathbb{Z} ist kein Körper, \mathbb{Q} aber schon) und aus Zweckmäßigkeitgründen wollen wir aber rationale Exponenten nicht ausschließen.

Definition 2 (Dimensionsmatrix). *Seien (X_1, \dots, X_N) physikalische Größen, deren Dimensionen durch die unabhängigen Symbole $(\mathbf{E}_1, \dots, \mathbf{E}_M)$ dargestellt werden können. Die Matrix*

$$A := \begin{pmatrix} \alpha_{1,1} & \dots & \alpha_{1,N} \\ \vdots & & \vdots \\ \alpha_{M,1} & \dots & \alpha_{M,N} \end{pmatrix},$$

die in eindeutiger Weise durch

$$[X_n] = \mathbf{E}_1^{\alpha_{1,n}} \cdot \dots \cdot \mathbf{E}_M^{\alpha_{M,n}} \quad \text{für alle } n = 1 \dots N$$

definiert ist, heißt die Dimensionsmatrix von (X_1, \dots, X_N) bzgl. $(\mathbf{E}_1, \dots, \mathbf{E}_M)$, und der Rank von A heißt der Dimensionsrang.

In der Mathematik ist ein *Monom* ein Polynom mit nur einem Summanden. Insbesondere gibt es für jedes Monom $F : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$ einen *Exponentenvektor* $\beta = (\beta_1, \dots, \beta_N) \in \mathbb{N}^N$ sowie eine Konstante $d \in \mathbb{R}_+$, so dass

$$F(x_1, \dots, x_N) = d \cdot x_1^{\beta_1} \cdot \dots \cdot x_N^{\beta_N} \quad \text{für alle } (x_1, \dots, x_N) \in \mathbb{R}^N \quad (1.16)$$

gilt. Im folgenden nennen wir $F : \mathbb{R}_+^N \rightarrow \mathbb{R}_+$ ein *verallgemeinertes Monom*, falls (1.16) mit *rationalen* Exponenten $(\beta_1, \dots, \beta_N) \in \mathbb{Q}^N$ und eine positiven Konstanten $d > 0$ gilt. In der Physik wird ein verallgemeinertes Monom F manchmal auch als *Produkt* in den X_n bezeichnet, obwohl es sich streng genommen um ein Produkt rationaler Potenzen handelt.

Lemma 3 (Dimension eines Monoms). *Mit den Notationen von Definition 2 gilt: Ist $F : \mathbb{R}_+^N \rightarrow \mathbb{R}$ ein verallgemeinertes Monom, so besitzt die Größe*

$$Y := F(X_1, \dots, X_N) = X_1^{\beta_1} \cdot \dots \cdot X_N^{\beta_N}$$

den Dimensionsvektor $A \cdot \beta^T$. Insbesondere ist Y genau dann dimensionslos, wenn $A \cdot \beta^T = 0$ gilt.

Beweis. Es gilt

$$\begin{aligned} [Y] &= [X_1]^{\beta_1} \cdot \dots \cdot [X_N]^{\beta_N} \\ &= \mathbf{E}_1^{(\beta_1 \cdot \alpha_{1,1} + \dots + \beta_N \alpha_{1,N})} \cdot \dots \cdot \mathbf{E}_M^{(\beta_1 \cdot \alpha_{M,1} + \dots + \beta_N \cdot \alpha_{M,N})}. \end{aligned}$$

Insbesondere ist Y genau dann dimensionslos, wenn

$$0 = \beta_1 \cdot \alpha_{m,1} + \dots + \beta_N \cdot \alpha_{m,N}$$

für alle $m = 1 \dots M$ gilt. □

Theorem und Prinzip von Buckingham

Obwohl Lemma 3 vergleichsweise simpel ist, hat es doch wichtige Anwendungen. Insbesondere beschreibt die Dimension des Kerns der Dimensionsmatrix A , wieviele unabhängige dimensionslose Monome aus den (X_1, \dots, X_N) gebildet werden können bzw. wieviele Konstanten durch Messungen oder andere Argumente bestimmt werden müssen. Diese Beobachtung wird in der Literatur üblicherweise wie folgt formuliert.

Theorem 4 (Buckinghamsches¹⁵ Theorem¹⁶). *Mit den Notationen von Definition 2 sowie $R := \text{rank}A$ und $K := N - R$ gilt: Es existieren*

1. R indizes (n_1, \dots, n_R) und
2. K dimensionslose Größen (P_1, \dots, P_K) ,

so dass für jedes gegebene verallgemeinerte Monom $F : \mathbb{R}_+^K \rightarrow \mathbb{R}_+$ zwei verallgemeinerte Monome $G : \mathbb{R}_+^R \rightarrow \mathbb{R}_+$ und $H : \mathbb{R}_+^K \rightarrow \mathbb{R}_+$ existieren mit

$$F(X_1, \dots, X_n) = G(X_{n_1}, \dots, X_{n_R}) \cdot H(P_1, \dots, P_K). \quad (1.17)$$

Beweis. Um die wesentlichen Ideen zu verdeutlichen, wollen wir

$$0 < R < N, \quad 0 < K < N \quad (1.18)$$

voraussetzen. Die beiden Spezialfälle $(R, K) = (0, N)$ und $(R, K) = (N, 0)$ können danach analog abgearbeitet werden.

Aus der Linearen Algebra wissen wir, dass das Bild der linearen Abbildung $A : \mathbb{Q}^N \rightarrow \mathbb{Q}^M$ ein R -dimensionaler Unterraum des \mathbb{Q}^M ist. Insbesondere gibt es Indizes (n_1, \dots, n_R) , so dass

$$\text{im } A = \text{span} \{ \alpha_{n_1}^T, \dots, \alpha_{n_R}^T \} \quad (1.19)$$

wobei $\alpha_n^T = (\alpha_{1,n}, \dots, \alpha_{M,n})^T$ der Dimensionsspaltenvektor von X_n ist und $\text{im } A$ den Bildraum von A bezeichnet. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit (andernfalls ändern wir die Nummerierung der X_n) können wir

$$n_1 = 1, \quad \dots, \quad n_R = R \quad (1.20)$$

annehmen.

Der Dimensionsspaltenvektor α_n^T von X_n kann nun für jedes $n = R+k$ mit $k = 1 \dots K$ durch Linearkombination von $\alpha_1^T, \dots, \alpha_R^T$ dargestellt werden, d.h. es gilt

$$\alpha_{R+k}^T = \gamma_{1,k} \alpha_1^T + \dots + \gamma_{R,k} \alpha_R^T = \gamma_{1,k} \cdot \begin{pmatrix} \alpha_{1,1} \\ \vdots \\ \alpha_{M,1} \end{pmatrix} + \dots + \gamma_{R,k} \cdot \begin{pmatrix} \alpha_{1,R} \\ \vdots \\ \alpha_{M,R} \end{pmatrix} \quad (1.21)$$

für gewisse Exponenten

$$\begin{pmatrix} \gamma_{1,1} & \dots & \gamma_{1,K} \\ \vdots & & \vdots \\ \gamma_{R,1} & \dots & \gamma_{R,K} \end{pmatrix} \in \mathbb{Q}^{K \times R}.$$

¹⁵Edgar Buckingham (1867–1940), US-amerikanischer Physiker.

¹⁶Dieses Resultat wird oft auch *II-Theorem* genannt, da in der ursprüngliche Formulierung die P_k als Π_k bezeichnet wurden.

Die Identitäten in (1.21) implizieren insbesondere

$$\begin{aligned} [X_{R+k}] &= \mathbf{E}_1^{(\gamma_{1,k} \cdot \alpha_{1,1} + \dots + \gamma_{R,k} \cdot \alpha_{1,R})} \cdot \dots \cdot \mathbf{E}_M^{(\gamma_{1,k} \cdot \alpha_{M,1} + \dots + \gamma_{R,k} \cdot \alpha_{M,R})} \\ &= [X_1^{\gamma_{1,k}} \cdot \dots \cdot X_R^{\gamma_{R,k}}], \end{aligned}$$

d.h. die Größe P_k , die wir jetzt durch

$$P_k := \frac{X_{R+k}}{X_1^{\gamma_{1,k}} \cdot \dots \cdot X_R^{\gamma_{R,k}}}, \quad k = 1 \dots K \quad (1.22)$$

definieren, ist nach Konstruktion dimensionslos.

Da F ein Monom wie in (1.16) ist, gilt

$$\begin{aligned} F(X_1, \dots, X_R, X_{R+1}, \dots, X_N) \\ = \left(X_1^{\beta_1} \cdot \dots \cdot X_R^{\beta_R} \right) \cdot F(1, \dots, 1, X_{R+1}, \dots, X_{R+K}) \end{aligned} \quad (1.23)$$

sowie

$$\begin{aligned} F(1, \dots, 1, P_1, \dots, P_K) \\ = \frac{F(1, \dots, 1, X_{R+1}, \dots, X_{R+K})}{\left(X_1^{\gamma_{1,1}} \cdot \dots \cdot X_R^{\gamma_{R,1}} \right)^{\beta_{R+1}} \cdot \dots \cdot \left(X_1^{\gamma_{1,K}} \cdot \dots \cdot X_R^{\gamma_{R,K}} \right)^{\beta_{R+K}}} \\ = \frac{F(1, \dots, 1, X_{R+1}, \dots, X_{R+K})}{X_1^{(\gamma_{1,1} \cdot \beta_{R+1} + \dots + \gamma_{1,K} \cdot \beta_{R+K})} \cdot \dots \cdot X_R^{(\gamma_{R,1} \cdot \beta_{R+1} + \dots + \gamma_{R,K} \cdot \beta_{R+K})}}. \end{aligned} \quad (1.24)$$

Wir definieren nun

$$H(P_1, \dots, P_K) := F(1, \dots, 1, P_1, \dots, P_K) = d \cdot P_1^{\beta_{R+1}} \cdot \dots \cdot P_K^{\beta_{R+K}}$$

sowie

$$G(X_1, \dots, X_R) := X_1^{\delta_1} \dots X_R^{\delta_R}$$

mit

$$\delta_r := \beta_r + (\gamma_{r,1} \cdot \beta_{R+1} + \dots + \gamma_{r,K} \cdot \beta_{R+K}),$$

und erhalten (1.17) aus (1.23) und (1.24). □

Bemerkung.

1. Die Wahl von (n_1, \dots, n_R) und (P_1, \dots, P_K) ist im Allgemeinen nicht eindeutig. Die Anzahlen R und K sind aber eindeutig. Insbesondere gilt $R = \dim \operatorname{im} A$ und $K = \dim \ker A$.
2. Sind (n_1, \dots, n_R) und (P_1, \dots, P_K) festgelegt, so sind G und H bis auf Konstanten bestimmt.
3. Die physikalische Dimension von $G(X_{n_1}, \dots, X_{n_R})$ ist gerade die Dimension von $F(X_1, \dots, X_N)$.
4. Jedes P_k kann als verallgemeinertes Monom in (X_1, \dots, X_N) geschrieben werden.
5. Die wesentliche Aussage von Theorem 4 ist nicht, dass sich jedes Monom F als Produkt zweier Monome G und H schreiben lässt (das ist eigentlich trivial), sondern dass man von jedem Monom F in den dimensionsbehafteten Größen (X_1, \dots, X_N) immer eine monomiale Kombination von genau K dimensionslosen Größen abspalten kann. Man könnte auch sagen: Das Buckingham'sche Theorem macht eine Aussage über die maximale Anzahl von dimensionslosen Freiheitsgraden.

Die im Beweis von Theorem 4 benutzten Dimensionsbetrachtungen werden in den Natur- und Ingenieurwissenschaften nicht nur auf verallgemeinerte Monome F sondern auf viel allgemeinere funktionale Zusammenhänge angewendet. Insbesondere gilt das folgende Prinzip, dessen Herleitung aber nicht nur auf mathematischen sondern auch auf physikalischen Argumenten beruht.

Prinzip 5 (Buckingham'sches Prinzip). *Mit den Notationen von Theorem 4 gilt: Jedes physikalisch Gesetz der Art*

$$Y = \Phi(X_1, \dots, X_N)$$

kann als

$$Y = (X_{n_1}^{\delta_1} \cdot \dots \cdot X_{n_R}^{\delta_R}) \cdot \Psi(P_1, \dots, P_K)$$

geschrieben werden, wobei $\Psi : \mathbb{R}_+^K \rightarrow \mathbb{R}_+$ eine skalare Funktion und $(\delta_1, \dots, \delta_R) \in \mathbb{Q}^K$ gewisse Exponenten sind. Hierbei sind Ψ und die Exponenten δ_r in eindeutiger Weise durch Φ sowie durch die Wahl von (n_1, \dots, n_R) und (P_1, \dots, P_K) bestimmt.

Herleitung.

Vorbereitungen: Wir beginnen wie im Beweis von Theorem 4. Insbesondere nehmen wir wieder o.B.d.A. an, dass (1.18) und (1.20) gelten und definieren (P_1, \dots, P_K) durch (1.22). Außerdem können wir voraussetzen, dass die Dimension von Y durch die $(\mathbf{E}_1, \dots, \mathbf{E}_M)$ dargestellt werden kann und dass der entsprechende Dimensionsspaltenvektor im Bild von A enthalten ist (andernfalls hätten wir kein sinnvolles physikalisches Gesetz und müssten die Symbolliste $(\mathbf{E}_1, \dots, \mathbf{E}_M)$ und/oder die Variablenliste (X_1, \dots, X_N) geeignet erweitern). Deshalb und wegen (1.19) gibt es eindeutige Exponenten $(\delta_1, \dots, \delta_R)$, so dass

$$[Y] = \left[X_1^{\delta_1} \cdot \dots \cdot X_R^{\delta_R} \right].$$

Insbesondere ist die Kombination

$$\tilde{\Psi}(X_1, \dots, X_R, P_1, \dots, P_K) := \frac{\Phi(X_1, \dots, X_K, (X_1^{\gamma_{1,1}} \cdot \dots \cdot X_R^{\gamma_{R,1}}) \cdot P_1, \dots, (X_1^{\gamma_{1,K}} \cdot \dots \cdot X_R^{\gamma_{R,K}}) \cdot P_K)}{X_1^{\delta_1} \cdot \dots \cdot X_R^{\delta_R}}$$

dimensionslos, wobei immer die Identität

$$\frac{\Phi(X_1, \dots, X_K, X_{K+1}, \dots, X_{K+R})}{X_1^{\delta_1} \cdot \dots \cdot X_R^{\delta_R}} = \tilde{\Psi}(X_1, \dots, X_R, P_1, \dots, P_K)$$

wegen (1.22) gilt.

Physikalisches Argument: Bisher haben wir nur elementare Rechnungen wie im Beweis von Theorem 4 verwendet. Nach dem *Invarianzprinzip* müssen außerdem alle sinnvollen physikalischen Gesetze für alle Beobachter und auch unabhängig vom verwendeten Einheitensystem gelten. Durch Wahl geeigneter Einheiten für die Dimensionen $(\mathbf{E}_1, \dots, \mathbf{E}_M)$ kann man erreichen, dass jede der Größen (X_1, \dots, X_R) den Zahlenwert 1 annimmt (dies gelingt, eben weil die Symbole $(\mathbf{E}_1, \dots, \mathbf{E}_M)$ unabhängig sind und weil stets $R \leq M$ gilt). Nach dem Invarianzprinzip wird sich aber der Wert der dimensionslosen Größen (P_1, \dots, P_K) beim Wechsel der Einheiten *nicht* ändern. In dem ausgezeichneten Einheitensystem gilt also

$$\tilde{\Psi}(X_1, \dots, X_R, P_1, \dots, P_K) = \tilde{\Psi}(1, 1, 1, P_1, \dots, P_K) =: \Psi(P_1, \dots, P_K)$$

und damit

$$\frac{\Phi(X_1, \dots, X_K, X_{K+1}, \dots, X_{K+R})}{X_1^{\delta_1} \cdot \dots \cdot X_R^{\delta_R}} = \Psi(P_1, \dots, P_K).$$

Nach dem Invarianzprinzip gilt diese Formel nun aber nicht nur in dem ausgezeichneten, sondern in *allen* Einheitensystemen, also immer. Außerdem sehen wir an dieser Formel sofort, dass die Eindeutigkeit der Exponenten $(\delta_1, \dots, \delta_R)$ auch die Eindeutigkeit von Ψ impliziert. \square

Das Buckingham'sche Prinzip 5 ist wie jedes gute physikalische Prinzip sowohl einfach zu verstehen als auch ausgesprochen mächtig. Eine Konsequenz ist, dass komplizierte funktionale Gesetze nur dimensionslose Größen betreffen können. Für die Lösung der physikalischen Pendelgleichung (1.5) hatten wir zum Beispiel die Formel (1.6) abgeleitet. Diese enthält die nicht-monomiale Sinusfunktion, aber das Argument derselben ist eben die *dimensionslose* Größe $t \cdot \sqrt{g/L}$. Ganz allgemein kann man sagen: In physikalischen Gesetzen kann niemals der Sinus einer dimensionsbehafteten Größe sondern nur der Sinus eines dimensionslosen Monoms verschiedener Größen auftauchen. Der Sinus kann hier sinngemäß natürlich durch viele andere Funktionen (cos, tan, log, exp usw.) ersetzt werden.

Wir betonen schließlich, dass man im Buckingham'schen Prinzip oftmals aber nicht immer mit nur ganzzahligen Exponenten $(\delta_1, \dots, \delta_R)$ auskommt. Ein Beispiel ist die Gleichung (1.15) für die Periode eines Pendels, die sicherlich ein physikalisches Gesetz widerspiegelt. Wir ziehen hier die Wurzel aus einer Größe mit Dimension \mathbf{T}^2 und erhalten so eine Zeit; die Wurzel einer Zeit (oder der dritten Potenz einer Länge oder ...) hat jedoch keine physikalische Bedeutung.

Beispiel: Der Druckabfall einer Rohrströmung

Eine wichtige praktische Frage ist, wie der Druck einer strömenden Flüssigkeit in einem Rohr auf Grund von Reibungseffekten abnimmt. Unter geeigneten Idealisierungsannahmen (langes zylindrisches Rohr, konstanter Druckabfall, ideale Flüssigkeit, räumlich und zeitlich gleichmäßige Strömung) kann man davon ausgehen, dass es einen einfachen funktionalen Zusammenhang zwischen den folgenden Größen gibt:

Größe	Variable	Dimension	Symbol
Druckabfall	$\frac{\Delta p}{\Delta x}$	$\frac{\text{Kraft}}{\text{Fläche} \cdot \text{Länge}}$	$\frac{\mathbf{M}}{\mathbf{T}^2 \cdot \mathbf{L}^2}$
Durchmesser des Rohres	D	Länge	\mathbf{L}
mittlere Geschwindigkeit	V	$\frac{\text{Länge}}{\text{Zeit}}$	$\frac{\mathbf{L}}{\mathbf{T}}$
Dichte der Flüssigkeit	ϱ	$\frac{\text{Masse}}{\text{Volumen}}$	$\frac{\mathbf{M}}{\mathbf{L}^3}$
Viskosität ¹⁷ der Flüssigkeit	μ	$\frac{\text{Kraft} \cdot \text{Länge}}{\text{Fläche} \cdot \text{Geschwindigkeit}}$	$\frac{\mathbf{M}}{\mathbf{T} \cdot \mathbf{L}}$

Wir postulieren daher

$$\left(\frac{\Delta p}{\Delta x} \right) = \Phi(D, V, \varrho, \mu),$$

wobei Φ ein physikalisch sinnvolles Gesetz beschreibt. Für die Dimensionsanalyse lesen wir zunächst die Matrix A aus dem Dimensionsschema

	$X_1 = D$	$X_2 = V$	$X_3 = \varrho$	$X_4 = \mu$
$\mathbf{E}_1 = \mathbf{L}$	+1	+1	-3	-1
$\mathbf{E}_2 = \mathbf{M}$	0	0	+1	+1
$\mathbf{E}_3 = \mathbf{T}$	0	-1	0	-1

ab, und verifizieren danach durch direkte Rechnungen, dass der Kern von A eindimensional ist und durch den Vektor $(+1, +1, +1, -1)^T$ aufgespannt wird. Das Variablenmonom

$$\frac{\varrho \cdot D \cdot V}{\mu} =: \text{Re}$$

ist also die einzige dimensionslose Kombination, die aus (D, V, ϱ, μ) gebildet werden kann; diese Größe heißt *Reynoldszahl*¹⁸ und spielt eine sehr wichtige Rolle in der Strömungsmechanik.¹⁹ Außerdem können wir

$$n_1 = 1, \quad n_2 = 2, \quad n_3 = 3$$

¹⁷Die Viskosität quantifiziert die *Zähigkeit* einer Flüssigkeit. So gilt $\mu_{\text{Wasser}} < \mu_{\text{Honig}} < \mu_{\text{Zahnpaste}}$ und extrem zähe Flüssigkeiten sind zum Beispiel Asphalt oder Glas.

¹⁸Osborne Reynolds (1842–1912), britischer Physiker.

¹⁹Realitätsnahe Modellversuche in der Strömungslehre (kleine Auto-, Flugzeug- oder Schiffmodelle im Wind- oder Wasserkanal) müssen zum Beispiel immer mit der richtigen Reynoldszahl durchgeführt werden.

wählen, denn das Bild von A wird von den Dimensionsspaltenvektoren α_1^T , α_2^T und α_3^T aufgespannt (wir hätten in diesem Beispiel auch jede andere Wahl für (n_1, n_2, n_3) treffen können).

Das Buckingham'sche Prinzip 5 besagt nun, dass es eine skalare Funktion $\Psi : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}_+$ geben muss, so dass

$$\left(\frac{\Delta p}{\Delta x} \right) = \frac{\varrho \cdot V^2}{D} \cdot \Psi \left(\frac{\varrho \cdot V \cdot D}{\mu} \right)$$

gilt, wobei der Vorfaktor auf der rechten Seite dieselbe Dimension wie $\Delta p / \Delta x$ hat. Insbesondere beschreibt Ψ den funktionalen Zusammenhang zwischen den zwei dimensionslosen Größen

$$\frac{\frac{\Delta p}{\Delta x} \cdot D}{\varrho \cdot V^2} \quad \text{und} \quad \frac{\varrho \cdot V \cdot D}{\mu}.$$

Physikalische Messungen mit verschiedenen Parametern bestätigen die Existenz einer solchen Funktion Ψ , aber diese ist kein Monom.²⁰

Beispiel: Selbstähnliche Lösungen partieller DGI.

Wir wollen hier nur ein einfaches Beispiel²¹ rechnen: Die Wärmeleitgleichung in einer Raumdimension lautet

$$\partial_t u - a \cdot \partial_x^2 u = 0. \quad (1.25)$$

Hierbei ist die Konstante a die sogenannte *Temperaturleitfähigkeit*²² und u beschreibt *Temperaturabweichung* – also die Differenz zu einer festen Referenztemperatur – zur Zeit t an der Position x . Wir wollen im folgenden $t \geq 0$ und $x \geq 0$ annehmen, d.h. wir beschreiben die Wärmeausbreitung in einem sehr dünnen und halb-unendlichen Stab. Um das Modell zu vervollständigen, stellen wir noch die Anfangsbedingung

$$u = 0 \quad \text{für} \quad t = 0 \quad (1.26)$$

sowie die Randbedingung

$$u = U \quad \text{für} \quad x = 0 \quad (1.27)$$

Die letztere beschreibt, dass am Rand des Stabes im Kontakt mit einer Heizung ist, deren Temperatur als konstant angenommen wird.

Mathematisch gesehen, suchen wir nun eine hinreichend glatte Funktion $u : \mathbb{R}_{0+} \times \mathbb{R}_{0+} \times \mathbb{R}_{0+} \rightarrow \mathbb{R}_{0+}$ ²³, so dass

$$\partial_t u(t, x) - a \cdot \partial_x^2 u(t, x) = 0 \quad \text{für alle} \quad t > 0, x > 0.$$

und

$$u(0, x) = 0 \quad \text{für alle} \quad x > 0, \quad u(t, 0) = U \quad \text{für alle} \quad t > 0,$$

²⁰Siehe [Bar, Seite 44] sowie die dort angegebene physikalische Literatur.

²¹Wir werden im Laufe der Vorlesung auch für andere partielle Differentialgleichungen selbstähnliche Lösungen kennenlernen.

²²Die Temperaturleitfähigkeit ist eine *Materialkonstante*. Insbesondere ist a sehr groß für Wärmeleiter (etwa Metalle) und sehr klein für Isolatoren (Dämmstoffe u.ä.)

²³ \mathbb{R}_{0+} meint das halboffene Intervall $[0, \infty)$, wohingegen \mathbb{R}_+ die Abkürzung für $(0, \infty)$ ist.

wobei $u(0, 0)$ nicht definiert sein wird sofern $U \neq 0$.

Aus physikalischer Sicht kann nun wie folgt argumentiert werden: Sofern es eine Lösung gibt, so kann der Wert von u nur von vier skalaren aber dimensionsbehafteten Größen t , x , a und D (zwei Variablen + zwei Konstanten) abhängen, d.h. es muss ein Gesetz der Form

$$u = \Phi(t, x, a, U)$$

geben, wobei die Dimensionen wie folgt gegeben sind:

	u bzw. U	t	x	a
L	0	0	+1	+2
T	0	+1	0	-1
Θ	+1	0	0	0

Das Buckingham'sche Prinzip 5 besagt nun, dass aus Dimensionsgründen nur ein Gesetz der Bauart

$$u = U \cdot \Psi(\mu), \quad \mu := \frac{x^2}{a \cdot t}$$

in Frage kommt²⁴. Mit dieser Information können wir nun die partielle Differentialgleichung wie folgt eine gewöhnliche Differentialgleichung umwandeln: Einfaches Rechnen liefert

$$\partial_t u = -\frac{x^2 \cdot U}{a \cdot t^2} \cdot \Psi' \left(\frac{x^2}{a \cdot t} \right), \quad \partial_x u = \frac{2 \cdot x \cdot U}{a \cdot t} \cdot \Psi' \left(\frac{x^2}{a \cdot t} \right)$$

sowie

$$\partial_x^2 u = \frac{2 \cdot U}{a \cdot t} \cdot \Psi' \left(\frac{x^2}{a \cdot t} \right) + \left(\frac{2 \cdot x}{a \cdot t} \right)^2 \cdot U \cdot \Psi'' \left(\frac{x^2}{a \cdot t} \right)$$

und nach Einsetzen in (1.25) und Multiplikation mit $-t/U$ erhalten wir

$$\mu \cdot \Psi'(\mu) + 2 \cdot \Psi'(\mu) + 4 \cdot \mu \cdot \Psi''(\mu) = 0.$$

Das ist eine gewöhnliche Differentialgleichung erster Ordnung für Ψ' und besitzt die allgemeine Lösung

$$\Psi'(\mu) = A \cdot \frac{\exp(-\mu/4)}{\sqrt{\mu}},$$

wobei A eine Integrationskonstante ist. Insbesondere gilt²⁵

$$\Psi(\mu) = 4 \cdot A \cdot \int_0^{\sqrt{\mu}/2} \exp(-s^2) ds + B = 2 \cdot \sqrt{\pi} \cdot A \cdot \operatorname{Erf} \left(\frac{\sqrt{\mu}}{2} \right) + B$$

²⁴Dieses Formel besagt, dass die Lösung des Rand-Anfangswert-Problems (1.25)+(1.26)+(1.27) selbstständig sein muss, denn für das Temperaturfeld – das ist u als Funktion von t und x betrachtet – gilt $u(t, x) = f(x/\sqrt{t})$ mit $f(y) = U \cdot \Psi(y^2/a)$. Insbesondere ist die Dynamik äquivalent zu einer zeitabhängigen Reskalierung der Profilkfunktion f .

²⁵Erf ist die sogenannte Fehlerfunktion und durch $\operatorname{Erf}(x) := 2\pi^{-1/2} \int_0^x \exp(-s^2) ds$ definiert.

wobei B eine weitere Integrationskonstante ist, und durch einfache Rechnungen verifizieren wir

$$\Psi(\mu) \xrightarrow{\mu \rightarrow 0} B, \quad \Psi(\mu) \xrightarrow{\mu \rightarrow \infty} 2\sqrt{\pi} + B.$$

Wir wollen nun schließlich noch verstehen, ob A und B beliebig oder auch schon festgelegt sind. Dazu bemerken wir, dass wegen

$$\mu \xrightarrow{x \rightarrow 0, t > 0} 0, \quad \mu \xrightarrow{t \rightarrow 0, x > 0} \infty$$

sowie der Anfangs- und Randbedingungen (1.26)+(1.27) auch

$$\Psi \xrightarrow{\mu \rightarrow 0} 1, \quad \Psi \xrightarrow{\mu \rightarrow \infty} 0$$

gelten muss. Dass kann aber nur für

$$B = 1, \quad A = -\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$$

richtig sein, und deshalb ist Ψ eindeutig bestimmt. Insbesondere gilt

$$u = U \cdot \left(1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\sqrt{\frac{x^2}{4t}}} \exp(-s^2) ds \right) = \frac{2 \cdot U}{\sqrt{\pi}} \cdot \int_{\sqrt{\frac{x^2}{4t}}}^{\infty} \exp(-s^2) ds.$$

Diese Formel hätte man natürlich auch mit rein mathematischen Argumenten ableiten können, aber der entsprechende Lösungsweg ist aufwändiger. In den meisten Fällen sind jedoch die Rand- bzw. Anfangswerte in (1.27) bzw. (1.26) keine Konstanten sondern selbst Funktionen (in t bzw. in x) und dann kann die Lösung des Rand-Anfangswert-Problems nicht mehr mit dem Buckingham'schen Prinzip gefunden werden.

1.4 Entdimensionalisierung bzw. Reskalierung von Differentialgleichungen

Eng verwandt mit der Buckingham'schen Dimensionsanalyse ist die *Entdimensionalisierung* von Differential- oder Integralgleichungen:

1. Die Entdimensionalisierung deckt auf, welche dimensionslosen Kombinationen der Daten (Anfangsdaten, Randdaten, physikalische Konstanten) wirklich bedeutsam sind. Idealtypisch sind in diesem Zusammenhang Gleichungen mit vielen Parametern in der dimensionsbehafteten Ursprungsfassung, aber nur einigen wenigen dimensionslosen Parametern in der entdimensionalisierten Fassung.
2. Die entdimensionalisierte Gleichung ist auch stets der Ausgangspunkt der *asymptotischen Analysis*, die vereinfachte bzw. effektive Formeln im Grenzfall sehr kleiner oder sehr großer Parameter liefert. Die Kleinheit von dimensionsbehafteten Größen ist aber sehr relativ: Einerseits hängen die Zahlenwerte vom verwendeten Einheitensystem ab und andererseits kann nur im Vergleich mit anderen Daten derselben Dimension entschieden werden, ob eine gegebene Größe nun eher klein oder eher groß ist.

3. Dimensionsaspekte sind auch im Bereich numerischer Simulationen sehr wichtig: Da die Gleitkomma-Arithmetik moderner Computer den reellen Zahlenraum nur sehr ungleichmäßig auflöst, will man – wenn immer dies möglich ist – nur mit Zahlen der Größenordnung 1 rechnen.

Die Entdimensionalisierung von Differentialgleichungen ist dabei keine abgeschlossene Theorie²⁶, sondern vielmehr eine *Technik*, die man erlernen kann aber auch immer wieder üben muss. Dabei geht es neben rein handwerklichen Fähigkeiten (z. Bsp. Anwenden von Integral- und Differentialtransformationen) auch darum, mit physikalischen Verständnis die *intrinsischen Skalen*, d.h. *charakteristischen* Längen, Zeiten usw. in einem konkreten Problem zu identifizieren.

Beispiel mit GDgl: Das Projektilproblem

In Kapitel hatten wir die nichtlineare Differentialgleichung (1.7) abgeleitet, in der die folgenden Größen auftreten:

Variable	Bedeutung	Dimension
x_i	i -te Ortskoordinate	L
t	Zeitkoordinate	T

Konstante	Bedeutung	Dimension
m	Masse des Projektils	M
M	Erdmasse	M
R	Erdradius	L
Γ	Gravitationskonstante	$\frac{\mathbf{L}^3}{\mathbf{M} \cdot \mathbf{T}^2}$

Um das Modell zu entdimensionalisieren, führen wir zunächst neue Orts- und Zeitvariablen ein. Genauer gesagt, für jede räumliche Koordinatenrichtung können wir eine dimensionsbehaftete *Referenzlänge* L_i sowie eine *entdimensionalisierte* Ortvariable \tilde{x}_i durch

$$x_1 = L_1 \cdot \tilde{x}_1, \quad x_2 = L_2 \cdot \tilde{x}_2, \quad x_3 = L_3 \cdot \tilde{x}_3 \quad (1.28)$$

definieren, wobei die L_i Konstanten sind (die wir noch geeignet wählen können) und die \tilde{x}_i neue Koordinaten sind, deren konkreter Werte für das Projektil sich während des Fluges mit der Zeit ändern werden. Analog können wir auch die Zeit durch den Ansatz

$$t_i = T \cdot \tilde{t}_i \quad (1.29)$$

entdimensionalisieren, und insgesamt ergibt sich

$$[L_i] = \mathbf{L}, \quad [T] = \mathbf{T}, \quad [\tilde{x}_i] = \frac{\mathbf{L}}{\mathbf{L}} = \mathbf{1}, \quad [\tilde{t}] = \frac{\mathbf{T}}{\mathbf{T}} = \mathbf{1}.$$

²⁶Wenn man unbedingt wollte, so könnte man abstrakte Entdimensionalisierungstheoreme bzw. -prinzipien formulieren. Diese wären aber sehr kompliziert und daher von nur geringem praktischen Nutzen.

Wir wollen bemerken, dass \tilde{t} und \tilde{x}_i manchmal auch die *reskalierten* Orts- und Zeitvariablen genannt werden, wobei T und L_i dann *Skalierungsfaktoren* heißen.²⁷ Man kann schließlich die Entdimensionalisierung auch als problembezogene *Wahl von Einheiten* interpretieren: Die Gleichung (1.29) besagt zum Beispiel, dass wir die physikalische Zeit t in Vielfachen von T angeben wollen, d.h. \tilde{t} kann als Zahlenwert von t bzgl. der Einheit T angesehen werden. In diesem Sinn geht es bei der Entdimensionalisierung darum, Einheiten für die Basisdimensionen festzulegen, wobei die ‘besten’ *Einheitswerte* L_i bzw. T eben nicht von Standardgrößen (1 Meter, 1 Sekunde, usw.) sondern aus dem konkreten Problem abgeleitet werden.

Transformation der Differentialgleichung Bevor wir die Wahl der Referenzgrößen L_i und T diskutieren, wollen wir das dynamische Modell, also (1.7), transformieren. Dazu beginnen wir mit dem *konsistenten Entdimensionalisierungsansatz*

$$x_i(t) = L_i \cdot \tilde{x}_i\left(\frac{t}{T}\right) \quad \text{bzw.} \quad \tilde{x}_i(\tilde{t}) = \frac{x_i(T \cdot \tilde{t})}{L_i}, \quad (1.30)$$

und erhalten mit der Kettenregel

$$\dot{x}_i(t) = \frac{L_i}{T} \cdot \tilde{x}'_i\left(\frac{t}{T}\right), \quad \ddot{x}_i(t) = \frac{L_i}{T^2} \cdot \tilde{x}''_i\left(\frac{t}{T}\right), \quad (1.31)$$

wobei ' die Ableitung nach \tilde{t} meint.²⁸ Wir können nun die Identitäten (1.30) in (1.31) einsetzen und erhalten die *entdimensionalisierten Differentialgleichungen*

$$\tilde{x}''_1(\tilde{t}) = 0, \quad \tilde{x}''_2(\tilde{t}) = 0 \quad (1.32)$$

und

$$\mu^2 \cdot \tilde{x}''_3(\tilde{t}) = -\frac{1}{(1 + \eta^2 \cdot \tilde{x}_3)^2}, \quad (1.33)$$

wobei die beiden Konstanten μ^2 und ν^2 mit

$$\mu^2 := \frac{L_3 \cdot R^2}{\Gamma \cdot M \cdot T^2} = \frac{L_3}{g \cdot T^2}, \quad \eta^2 := \frac{L_3}{R}$$

nun dimensionslos sind. Beachte, dass die Differentialgleichungssysteme (1.7) und (1.32)+(1.33) aus rein mathematischer Sicht vollständig äquivalent sind, eben weil sie durch die Transformation (1.30) ineinander überführt werden können. Insbesondere können die dimensionslosen Konstanten μ und η je nach Wahl von T oder L sehr kleine, moderate, oder auch sehr große Werte annehmen. Für viele praktische Zwecke (numerische Simulationen, asymptotische Formeln für gewisse Parameterregime, Herleitung vereinfachter Modelle) ist die entdimensionalisierte Form jedoch der ursprünglichen und dimensionsbehafteten Fassung vorzuziehen.

²⁷ *Entdimensionalisierung* und *Reskalierung* meinen in unserem Kontext dasselbe. Der Begriff *Reskalierung* wird in der Mathematik häufiger verwendet, eben weil der Dimensionsaspekt oftmals nicht explizit diskutiert wird.

²⁸ Die Ableitung von \tilde{x}_i hätten wir auch wieder mit $\dot{\tilde{x}}_i$ statt \tilde{x}'_i bezeichnen können. Es ist am Ende eine Frage des Geschmacks oder der Zweckmäßigkeit, ob man die ‚Punkt‘-Notation für die Ableitungen nach der physikalischen Zeit reservieren oder auch für Ableitungen nach einer reskalierten bzw. entdimensionalisierten Zeitkoordinate verwenden will. Der Autor bevorzugt in der Regel die zweite Variante und weicht hier nur ausnahmsweise davon ab.

Wahl der Referenzgrößen Wir haben immer noch die Freiheit, die Referenzlängen L_i sowie die Referenzzeit T zu wählen. Hier gibt es natürlich streng genommen kein „richtig“ oder „falsch“ sondern nur „gute“ und „praktische“ oder eben „ungeschickte“ Wahlen.

Im konkreten Fall (und in vielen anderen Problemen) kann die beste Wahl aus den Anfangsdaten abgelesen werden. Da wir im Projektilproblem immer $x_i(0) = 0$ annehmen wollen, müssen wir nur den Einfluss der vektoriellen Anfangsgeschwindigkeit verstehen. Die Anfangsbedingung für die vertikale Komponente, siehe (1.11), ist durch

$$\dot{x}_3(0) = V \cdot \sin \alpha \quad \text{bzw.} \quad \tilde{x}'_3(0) = \frac{V \cdot T \cdot \sin \alpha}{L_3}$$

gegeben. Wir können nun T bzw. L_3 dadurch festlegen, dass wir die vertikale Anfangsgeschwindigkeit mit den anderen Konstanten in monomialer Weise zu einer Zeit bzw. einer Geschwindigkeit kombinieren. Außerdem sollten wir immer versuchen, am Ende eine Gleichung mit möglichst wenigen Konstanten zu erhalten. In unserem Fall gelingt dies mit

$$T := \frac{V \cdot \sin \alpha}{g}, \quad L_3 := \frac{(V \cdot \sin \alpha)^2}{g}, \quad (1.34)$$

denn dies impliziert

$$\tilde{x}'_3(0) = 1$$

und damit *normalisierte Anfangsbedingungen* für \tilde{x} . Unsere Wahl in (1.34) impliziert außerdem

$$\mu^2 = 1, \quad \eta^2 = \frac{(V \cdot \sin \alpha)^2}{g \cdot R}$$

und erhalten wir schließlich das *entdimensionalisierte Anfangswertproblem*

$$\tilde{x}''_3(\tilde{t}) = -\frac{1}{(1 + \eta^2 \tilde{x}_3(\tilde{t}))^2}, \quad \tilde{x}_3(0) = 0, \quad \tilde{x}'_3(0) = 1. \quad (1.35)$$

Eine naheliegende Wahl für die beiden horizontalen Referenzlängen in (1.28) ist nun

$$L_1 := L_3, \quad L_2 := L_3,$$

denn im Projektilproblem gibt es eigentlich keinen Grund die drei räumlichen Richtungen unterschiedlich zu behandeln.

Diskussion Die Vorteile der Entdimensionalisierung sind klar zu erkennen: Zum einen stellt (1.34) sicher, dass unsere Anfangsbedingungen weder zu groß noch zu klein sind. Zum anderen sehen wir, dass die Dynamik des Projektilproblems letztlich nur von einem dimensionslosen Parameter – nämlich von η – abhängt und dass der Wert dieses Parameters durch die vertikale Anfangsgeschwindigkeit gegeben ist. Genauer gesagt, mit (1.34) gilt

$$\eta = \frac{V \cdot \sin \alpha}{v_{\text{crit}}}, \quad v_{\text{crit}} := \sqrt{g \cdot R},$$

wobei v_{crit} gerade die sogenannte *erste kosmische Geschwindigkeit*²⁹ ist. Insbesondere gilt bei vielen praktischen Anwendungen $0 < \eta \ll 1$, und in diesem Fall kann (1.33) zu

$$\tilde{x}_3'' = 1 \quad (1.36)$$

vereinfacht³⁰ werden; diese Gleichung ist gerade die Entdimensionalisierung der reduzierten Modellgleichung (1.13).

Beispiel mit PDgl: Nichtlineare Reaktions-Diffusionsgleichung

Entdimensionalisierungen sind auch bei partiellen Differentialgleichungen sehr wichtig. Als prototypisches Beispiel betrachten wir die (räumlich eindimensionale) Differentialgleichung

$$\partial_t u - D \cdot \partial_x^2 u = \lambda \cdot u \cdot (E - u), \quad t \geq 0, \quad x \in [0, L], \quad (1.37)$$

die in der Literatur entweder *Kolmogorov-Petrovsky-Piscounov*³¹-Gleichung oder *Fisher*³²-Gleichung genannt wird. Die erste Bezeichnung verweist auf die Anwendung in der chemischen Reaktionskinetik, wohingegen der zweite Name sich auf ein Modell der Populationsdynamik bezieht. Im chemischen Kontext beschreibt (1.37) die Evolution eines Ensembles aus Molekülen einer gegebenen Substanz unter den folgenden Annahmen:

1. Das System befindet sich in einem zylindrischen Behälter mit Länge L und Durchmesser $D \ll L$. Insbesondere reicht es (zumindest in erster Näherung), nur die *eindimensionale* Ortsvariable $x \in [0, L]$ zu betrachten.
2. Es gibt sehr viele Moleküle im System, so dass wir den Zustand des Ensembles durch die Konzentration bzw. Zahldichte $u = u(t, x)$ beschreiben können.
3. Der räumliche Ableitungsterm $D \cdot \partial_x^2 u$ beschreibt, dass die Moleküle innerhalb des Behälters diffundieren können.
4. Die rechte Seite in (1.37) modelliert chemische Reaktionen, aufgrund derer die Moleküle der betrachteten Substanz entstehen oder verschwinden können.

In (1.37) treten die folgenden Größen auf:

Variable	Bedeutung	Dimension
x	Ortskoordinate	L
t	Zeitkoordinate	T
u	Konzentration der Moleküle (1D)	$\frac{\mathbf{N}}{\mathbf{L}}$

²⁹In Formel (1.12) steht die *zweite* kosmische Geschwindigkeit $\bar{v}_{\text{crit}} = \sqrt{2} \cdot v_{\text{crit}}$.

³⁰Im Allgemeinen dürfen kleine Parameter in einer Differentialgleichung nicht einfach ignoriert werden (auch nicht zu führender Ordnung), siehe die Diskussion weiter unten über *reguläre* und *singuläre Störungen* in der asymptotischen Analysis. Für die Differentialgleichung (1.33) kann aber ein kleiner Wert von η als eine nur reguläre (und damit „harmlose“) Störung betrachtet werden, wohingegen ein kleiner Wert von μ einer singulären Störung entsprechen würde.

³¹Andrei Nikolajewitsch Kolmogorov (1903–1987), Ivan Georgievich Petrovsky (1901–1973), Nikolai Semyonovich Piscounov (1908–1977): russische bzw. sowjetische Mathematiker.

³²Ronald Aylmer Fisher (1890–1962), britischer Statistiker und theoretischer Biologe.

Ableitung	Bedeutung	Dimension
$\partial_t u$	zeitliche Änderung von u	$\frac{\mathbf{N}}{\mathbf{L} \cdot \mathbf{T}}$
$\partial_x u$	räumliche Änderung von u	$\frac{\mathbf{N}}{\mathbf{L}^2}$
$\partial_x^2 u$	räumliche Änderung von $\partial_x u$	$\frac{\mathbf{N}}{\mathbf{L}^3}$
Konstante	Bedeutung	Dimension
L	Länge des Behälters	\mathbf{L}
D	Diffusionskonstante	$\frac{\mathbf{L}^2}{\mathbf{T}}$
λ	erster Reaktionsparameter	$\frac{\mathbf{L}}{\mathbf{T} \cdot \mathbf{N}}$
E	zweiter Reaktionsparameter	$\frac{\mathbf{N}}{\mathbf{L}}$

Mathematisch gesehen ist (1.37) eine partielle Differentialgleichung für die unbekannte Funktion $u = u(t, x)$, die noch um Anfangs- und Randbedingungen ergänzt werden muss. Die *Anfangsbedingung* lautet

$$u(0, x) = u_{\text{ini}}(x) \quad \text{für alle } x \in [0, L], \quad (1.38)$$

wobei u_{ini} die als bekannt vorausgesetzte Anfangssituation zur Zeit $t = 0$ beschreibt. Darüber hinaus wollen wir der Einfachheit halber annehmen, dass die Moleküle nicht aus dem Behälter entweichen können, und stellen daher die *homogenen Neumann-Randbedingungen*³³

$$\partial_x u(t, 0) = \partial_x u(t, L) = 0 \quad \text{für alle } t \geq 0. \quad (1.39)$$

Mit Hilfe von nichttrivialen Methoden der Nichtlinearen Funktionalanalysis kann nun gezeigt werden, dass (1.37)+(1.38)+(1.39) für alle gegebenen und hinreichend regulären Anfangsdaten u_{ini} eine Lösung u besitzt.³⁴

Natürliche Referenzgrößen Um dieses Beispiel zu entdimensionalisieren, werden wir geeignete Referenzgrößen für die Orts-, Zeit- und Konzentrationsvariablen einführen. Die Entdimensionalisierung der Ortsvariablen x ist in natürlicher Weise durch

$$x = L \cdot \tilde{x}$$

³³Wir werden im Verlauf der Vorlesung verschiedenen Klassen von Randbedingungen kennenlernen.

³⁴Die mathematische Frage, ob ein gegebenes Rand-Anfangswert-Problem überhaupt eine eindeutige Lösung besitzt, ist alles andere als trivial und kann innerhalb einer Vorlesung über *Mathematische Modellierung* im Allgemeinen nicht diskutiert werden. Man kann aber sagen, dass ein physikalisch sinnvolles Modell immer mindestens eine Lösung haben wird, denn andernfalls wäre das Modell sicherlich unsinnig. Gibt es hingegen zu viele Lösungen, so kann/muss man weitere Bedingungen stellen, um die physikalisch richtige Lösung auszuwählen.

gegeben, das heißt wir wählen die Behälterlänge L als Referenzlänge. Wir bemerken außerdem, dass wir die Unbekannte u auf sehr naheliegende Art und Weise mit Hilfe der Anfangsdaten entdimensionalisieren können. Genauer gesagt, wegen

$$\left[\int_0^L u_{\text{ini}}(x) \, dx \right] = \frac{\mathbf{N}}{\mathbf{L}} \cdot \mathbf{L}$$

hat die *mittlere Anfangskonzentration*

$$U := \frac{\int_0^L u_{\text{ini}}(x) \, dx}{L}$$

dieselbe Dimension wie u und wir können

$$u = U \cdot \tilde{u}$$

ansetzen, so dass \tilde{u} im Folgenden das dimensionslose Verhältnis von u und der Referenzkonzentration U ist. Insbesondere gilt damit

$$u_{\text{ini}}(x) = U \cdot \tilde{u}_{\text{ini}}(x/L), \quad \int_0^1 \tilde{u}_{\text{ini}}(\tilde{x}) \, d\tilde{x} = 1.$$

Die Entdimensionalisierung der Zeit ist wieder durch

$$t = T \cdot \tilde{t}$$

gegeben, aber wir wollen die Referenzzeit T noch offen lassen.

Transformation der Gleichung und mögliche Wahl der Referenzzeit Mit Hilfe des konsistenten Ansatzes

$$u(t, x) = U \cdot \tilde{u}\left(\frac{t}{T}, \frac{x}{L}\right) \quad \text{bzw.} \quad \tilde{u}(\tilde{t}, \tilde{x}) = \frac{u(T \cdot \tilde{t}, L \cdot \tilde{x})}{U}$$

sowie der Kettenregel können wir nun die partielle Differentialgleichung (1.37) in

$$\frac{U}{T} \cdot \partial_{\tilde{t}} \tilde{u}(\tilde{t}, \tilde{x}) - \frac{D \cdot U}{L^2} \cdot \partial_{\tilde{x}}^2 \tilde{u}(\tilde{t}, \tilde{x}) = \lambda \cdot U^2 \cdot \tilde{u}(\tilde{t}, \tilde{x}) \cdot \left(\frac{E}{U} - \tilde{u}(\tilde{t}, \tilde{x}) \right) \quad (1.40)$$

überführen, wobei wir natürlich beide Seiten dieser Formel noch durch U oder irgendeine andere Konstante teilen können.

Die Referenzzeit T kann nun zum Beispiel dadurch festgelegt werden, dass man die verschiedenen dimensionsbehafteten physikalischen Konstanten in monomialer Weise zu einer Zeit kombiniert. In unserem Fall gibt es dafür mehrere Möglichkeiten; eine ist

$$T := \frac{L^2}{D}, \quad (1.41)$$

die darüber hinaus dazu führt, dass die beiden Ableitungsterme in (1.40) denselben Vorfaktor aufweisen (das ist nicht immer, aber oft eine begrüßenswerte Eigenschaft). Insbesondere wird das *entdimensionalisierte Rand-Anfangswert-Problem* nun durch die partielle Differentialgleichung

$$\partial_{\tilde{t}} \tilde{u} - \partial_{\tilde{x}}^2 \tilde{u} = \mu \cdot \tilde{u} \cdot (\eta - \tilde{u}) \quad \tilde{t} \geq 0, \quad \tilde{x} \in [0, 1] \quad (1.42)$$

sowie die Rand- bzw. Anfangsbedingungen

$$\partial_{\tilde{x}}\tilde{u}(\tilde{t}, 0) = \partial_{\tilde{x}}\tilde{u}(\tilde{t}, 1) = 0 \quad \text{für alle } \tilde{t} \geq 0, \quad \tilde{u}(0, x) = \tilde{u}_{\text{ini}}(\tilde{x}) \quad \text{für alle } \tilde{x} \in [0, 1]$$

beschrieben, wobei

$$\mu := \frac{\lambda \cdot U \cdot L^2}{D}, \quad \eta := \frac{E}{U} \quad (1.43)$$

die einzigen dimensionslosen Parameter sind. Die physikalische Bedeutung von E ist die einer Gleichgewichtskonzentration³⁵, d.h. der Parameter η gibt die relative Abweichung der mittlere Anfangskonzentration U vom Gleichgewicht E an. Der Parameter μ misst hingegen wie stark die chemischen Reaktionen im Vergleich zur Teilchendiffusion sind. Insbesondere wird bei kleinem μ und moderaten Zeiten t die Diffusion der dominante Effekt sein.

Andere mögliche Referenzgrößen Die rechte Seite in der Formel (1.41) kann als *charakteristische Diffusionszeit* interpretiert werden, d.h. als die Zeit, die man warten muss bevor die Diffusion (deren Stärke durch D beschrieben wird) über eine Strecke der Größenordnung L zu einer nennenswerten Änderung von Konzentrationen führt. Man kann natürlich auch die *charakteristische Reaktionszeit* auswählen und die Referenzzeit als

$$T := \frac{1}{\lambda \cdot U} \quad (1.44)$$

festlegen. In diesem Fall erhält man an Stelle von (1.42) die Differentialgleichung

$$\partial_{\tilde{t}}\tilde{u} - \frac{1}{\mu}\partial_{\tilde{x}}^2\tilde{u} = \tilde{u} \cdot (\eta - \tilde{u}) \quad \tilde{t} \geq 0, \quad \tilde{x} \in [0, 1], \quad (1.45)$$

wobei μ und η wie oben durch (1.43) gegeben sind. Die Unbekannte \tilde{u} ist hier aber eine andere Funktion als oben, da sie nun durch eine andere Skalierung aus u hervorgegangen ist (das alte und das neue \tilde{u} können aber leicht ineinander umgerechnet werden). Heuristisch kann man sagen, dass die Größe des Parameters μ – der ja gerade das Verhältnis der beiden charakteristischen Zeiten ist – entscheidet, welche Zeitskalierung besser ist: Im Fall von $\mu \ll 1$ bzw. $\mu \gg 1$ wird man meist (1.41) bzw. (1.44) verwenden, d.h. man wird in der Regel T mit Hilfe der kleinsten charakteristischen Zeit festlegen. Haben beide Zeiten dieselbe Größenordnung, gibt es keinen wesentlichen Unterschied zwischen den Skalierungen (1.41) und (1.44) bzw. zwischen den entsprechenden entdimensionalisierten Differentialgleichungen (1.42) und (1.45). Die Existenz von zwei charakteristischen Zeiten bedeutet, dass (1.37) ein echtes *Mehrskaligenproblem* modelliert.

Wir wollen schließlich erwähnen, dass man im Prinzip auch andere Referenzlängen und -konzentrationen verwenden kann. Statt mit U könnte man die Konzentrationen u auch mit Hilfe von E entdimensionalisieren und im Falle stark oszillierender Anfangsdaten wird es neben L noch eine weitere charakteristische Länge geben, nämlich die Länge auf der die Anfangsdaten oszillieren. Insgesamt gibt es damit mehrere Möglichkeiten zur Entdimensionalisierung und man muss immer von Fall zu Fall entscheiden, was die „besten“ Referenzgrößen sind.

³⁵Das sieht man zum Beispiel daran, dass $\tilde{u}(t, x) = E$ eine konstante Lösung von (1.37) ist.

Kapitel 2

Methoden der Angewandten Analysis

Wir führen zunächst eine nützliche Notation ein, wobei wir mit X einen normierten Raum¹ mit Norm $\|\cdot\|$ bezeichnen.

Definition 6 (Landau²-Symbole). Seien x_ε eine X -wertige und $p_\varepsilon \geq 0$ eine skalare Größe, die beide von einem skalaren Parameter $\varepsilon \geq 0$ abhängen. Man schreibt

1. $x_\varepsilon = \mathcal{O}(p_\varepsilon)$, falls $\limsup_{\varepsilon \rightarrow 0} q_\varepsilon < \infty$,
2. $x_\varepsilon = o(p_\varepsilon)$, falls $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} q_\varepsilon = 0$,

wobei $q_\varepsilon := \|x_\varepsilon\| / p_\varepsilon$.

Bemerkung.

1. Man setzt meist $p_\varepsilon = \varepsilon^\alpha$ mit $\alpha \in \mathbb{N}$ oder $\alpha \in \mathbb{R}_+$ aber es gibt auch Fälle, in denen $p_\varepsilon = 1/\ln(1/\varepsilon)$ oder $p_\varepsilon = \exp(-1/\varepsilon)$ verwendet wird.
2. Es muss auch nicht immer $p_\varepsilon \rightarrow 0$ für $\varepsilon \rightarrow 0$ gelten; ein Beispiel ist $p_\varepsilon = \varepsilon^\alpha$ mit $\alpha < 0$.
3. Es gilt $c \cdot \varepsilon^\alpha = o(\varepsilon^\beta)$ für alle Konstanten c und Exponenten $\alpha > \beta$.
4. $x_\varepsilon = \mathcal{O}(1)$ bzw. $x_\varepsilon = o(1)$ meint $\|x_\varepsilon\|$ bleibt beschränkt für $\varepsilon \rightarrow 0$ bzw. konvergiert für $\varepsilon \rightarrow 0$ gegen 0.
5. Ist x_ε ebenfalls skalar und nicht-negativ, so schreibt man manchmal auch $x_\varepsilon \lesssim p_\varepsilon$ statt $x_\varepsilon = \mathcal{O}(p_\varepsilon)$.
6. Ist X endlich-dimensional, so schreiben wir in aller Regel $|x|$ statt $\|x\|$.

Im Falle eines endlich-dimensionalen Raumes X ist es egal, welche Norm in Definition 6 zu Grunde gelegt wird. Ist X jedoch unendlich-dimensional, so sind nicht mehr alle Normen äquivalent und man muß – etwa durch Generalkonvention oder Benutzungen eines geeigneten Indexsymbols – immer deutlich machen, bzgl. welcher Norm

¹Wenn Sie nicht wissen, was ein normierter Raum ist, können Sie $X = \mathbb{R}^N$ und $\|x\| = \sqrt{x_1^2 + \dots + x_N^2}$ annehmen. Es gibt aber auch unendlich-dimensionale normierte Räume, zum Beispiel *Funktionsräume*, die in der Funktionalanalysis und der modernen Theorie der Differentialgleichungen eine herausgehobene Rolle spielen.

²Edmund Georg Hermann Landau (1877–1938), deutscher Mathematiker.

die Landau-Symbole zu verstehen sind. Ist X zum Beispiel der Raum aller stetigen Funktionen auf dem Intervall $[0, 1]$, so wird durch

$$u_\varepsilon(s) := \exp(-s/\varepsilon)$$

für jedes $\varepsilon > 0$ eine Funktion $u_\varepsilon \in X$ definiert. Mit Hilfe der Transformationsregel für Integrale berechnen wir

$$\|u_\varepsilon\|_p := \left(\int_0^1 |u_\varepsilon(s)|^p ds \right)^{1/p} = \left(\frac{\varepsilon}{p} \int_0^{p/\varepsilon} \exp(-\tilde{s}) d\tilde{s} \right)^{1/p} \leq \left(\frac{\varepsilon}{p} \right)^{1/p} \cdot 1$$

für alle $p \in [1, \infty)$; außerdem gilt

$$\|u_\varepsilon\|_\infty := \sup_{s \in [0, 1]} |u_\varepsilon(s)| = u_\varepsilon(0) = 1.$$

Insgesamt erhalten $u_\varepsilon = \mathcal{O}_{\|\cdot\|_p}(\varepsilon^{1/p})$ für jedes feste $p \in [1, \infty]$, d.h. es hängt von der Norm in X ab, ob bzw. wie klein u_ε für kleine ε ist.

2.1 Sensitivitätsanalyse

Bei der Modellierung realer Phänomene ist es sehr wichtig zu verstehen, wie stark sich die abhängigen Größen bei kleinen Störungen der unabhängigen Variablen und oder der Konstanten ändern. Gehen wir von einem abstrakten Gesetz der Art

$$y = \phi(x) \tag{2.1}$$

aus und bezeichnen wir kleine Störungen³ von x mit δx , so wollen wir letztlich verstehen, wie groß

$$\delta y := \phi(x + \delta x) - \phi(x).$$

ist. Im einfachsten Fall (und unter Vernachlässigung eventuell vorhandener physikalischer Dimensionen) kann man annehmen, dass

$$y = (y_1, \dots, y_M) \in \mathbb{R}^M, \quad x = (x_1, \dots, x_N) \in \mathbb{R}^N$$

gilt und dass $\phi : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^M$ eine stetig differenzierbare Funktion ist. In diesem Fall liefert der Satz von Taylor

$$\delta y = \partial_x \phi(x) \cdot \delta x + o(|\delta x|), \tag{2.2}$$

wobei

$$\partial_x \phi(x) = \begin{pmatrix} \partial_{x_1} \phi_1(x) & \dots & \partial_{x_N} \phi_1(x) \\ \vdots & & \vdots \\ \partial_{x_1} \phi_M(x) & \dots & \partial_{x_N} \phi_M(x) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{M \times N}$$

³Es gibt viele Notationen für kleine Störungen. Die δ -Notation kommt aus der Physik und ist sehr intuitiv.

gerade die Jacobi-Matrix⁴ von ϕ ausgewertet in x ist. Die approximative Gleichheit in (2.2) kann natürlich auch in Komponenten als

$$\delta y_m = \partial_{x_1} \phi_m(x) \cdot \delta x_1 + \dots + \partial_{x_N} \phi_m(x) \cdot \delta x_N + o(|\delta x|)$$

geschrieben werden, und ist ϕ zweimal stetig differenzierbar, so kann $o(|\delta x|)$ sogar durch $\mathcal{O}(|\delta x|^2)$ ersetzt werden.

In der mathematischen Modellierung heißt die partielle Ableitung $\partial_{x_n} \phi_m(x)$ auch die *Sensitivität von y_m bzgl. x_n im Punkt $x \in \mathbb{R}^N$* , und die Jacobi-Matrix $\partial_x \phi(x) \in \mathbb{R}^{M \times N}$ wird die *Sensitivitätsmatrix* in $x \in \mathbb{R}^N$ genannt. *Sensitivitätsanalyse* ist also eigentlich nichts anderes als das Rechnen mit partiellen Ableitungen, wobei es wieder sehr wichtig sein wird, von welcher Größenordnung die auftretenden Terme sind.

Oftmals wird das Gesetz (2.1) implizit, also durch Gleichungen der Bauart

$$F(x, \phi(x)) = 0$$

eingeführt, wobei $F : \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^M \rightarrow \mathbb{R}^M$ eine gegebene und stetig differenzierbare Funktion ist. In diesem Fall kann die Sensitivitätsmatrix direkt aus den Ableitungen von F berechnet werden, denn mit der Kettenregel gilt

$$\partial_x \phi(x) = - \left(\partial_y F(x, \phi(x)) \right)^{-1} \cdot \partial_x F(x, \phi(x)) \quad (2.3)$$

sofern die Matrix $\partial_y F(x, \phi(x))$ invertierbar ist.

Es sei schließlich erwähnt, dass ähnliche Konzepte und Begriffe auch dann eingeführt werden können, wenn x bzw. y Werte in allgemeinen Banach-Räumen⁵ X bzw. Y annehmen, wobei dann die Jacobi-Matrix $\partial_x \phi$ durch einen entsprechenden Ableitungsbegriff ersetzt werden muss, z. Bsp. durch die Gâteaux- oder die Fréchet-Ableitung.⁶

Sensitivität bei gewöhnlichen Differentialgleichungen

Im Prinzip deckt die obige Diskussion auch Differentialgleichungen ab, denn diese können auch in der Form (2.1) geschrieben werden, wobei die Abbildung ϕ Werte in einem Funktionenraum annimmt. Dieser abstrakte Standpunkt ist zwar einerseits extrem hilfreich, verdeckt aber andererseits auch, dass die Sensitivitätsanalyse von Differentialgleichungen zu spezifischen Herausforderungen führt. Um dies besser zu verstehen, betrachten wir zunächst ganz allgemein das Anfangswertproblem

$$\dot{x} = f(t, x, p), \quad x|_{t=0} = \xi. \quad (2.4)$$

Hierbei nehmen x und ξ Werte in \mathbb{R}^N an und $p \in \mathbb{R}^K$ beschreibt die Parameter des Problems. Außerdem ist $f : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^K \rightarrow \mathbb{R}^N$ eine gegebene Funktion, von der wir immer voraussetzen wollen, dass sie wenigstens stetig differenzierbar ist, so dass es nach dem *Satz von Picard⁷-Lindelöf⁸* immer eine eindeutige maximale Lösung zu (2.4) gibt.⁹

⁴Carl Gustav Jacob Jacobi (1804–1851), deutscher Mathematiker. Das Symbol $\mathbb{R}^{M \times N}$ steht für die Menge aller Matrizen mit M Zeilen, N Spalten und reellwertigen Einträgen.

⁵Stefan Banach (1892–1945), polnischer Mathematiker. Ein Banach-Raum ist ein *vollständiger* normierter Raum.

⁶René Eugène Gâteaux (1889–1914), Maurice René Fréchet (1878–1973): französische Mathematiker.

⁷Charles Émile Picard (1856–1941), französischer Mathematiker.

⁸Lorenz Leonard Lindelöf (1827–1908), finnischer Mathematiker und Astronom.

⁹Für die allgemeine Theorie gewöhnlicher Differentialgleichungen verweisen wir auf die Vorlesungen *Analysis I–III* und *Dynamische Systeme* sowie auf die einschlägige Literatur.

Aus mathematischer Sicht ist eine Lösung des Anfangswertproblems (2.4) eine stetig differenzierbare Funktion

$$x_{\xi,p} : J \rightarrow \mathbb{R}^N$$

die auf einem Intervall J definiert ist, so dass

$$x_{\xi,p}(0) = \xi, \quad \dot{x}_{\xi,p}(t) = f(t, x_{\xi,p}(t), p) \quad \text{für alle } t \in J.$$

Manchmal – wie zum Beispiel in diesem Abschnitt – ist es aber besser, die Lösungen in der Art eines physikalischen Gesetzes, nämlich als

$$x = \phi(t, \xi, p) \tag{2.5}$$

zu schreiben.¹⁰ Die gewöhnliche Differentialgleichung (2.4)₁ wird damit zur degenerierten partiellen Differentialgleichung

$$\partial_t \phi(t, \xi, p) = f(t, \phi(t, \xi, p), p), \tag{2.6}$$

die aber äquivalent zu (2.4)₁ ist; die Anfangsbedingung (2.4)₂ kann als

$$\phi(0, \xi, p) = \xi \tag{2.7}$$

geschrieben werden.

Die Funktion ϕ spielt auch innerhalb der Mathematik eine große Rolle, denn für jeden gegebenen Parameter p und jede feste Zeit t ist die Abbildung

$$\xi \mapsto \phi(t, \xi, p) \tag{2.8}$$

gerade der *Fluss*¹¹ der Differentialgleichung mit festem p zur Zeit t . Ein wichtiges technisches Resultat betrifft die Regularität von ϕ .

Lemma 7 (Glattheit von ϕ). *Ist f k -mal stetig differenzierbar, so sind auch ϕ und $\partial_t \phi$ k -mal stetig differenzierbar (auf dem Definitionsbereich von ϕ).*

Beweis. Hier sei auf die Literatur sowie auf Bemerkung zu Theorem 8 verwiesen. \square

Für unsere Zwecke ist die Schreibweise (2.5) nützlich, denn wir sehen sofort, dass die verschiedenen Sensitivitäten von der Zeit abhängen und damit selbst einer Dynamik unterliegen. Um diese zu verstehen, fixieren wir sowohl ξ also auch p und schreiben

$$\begin{aligned} U(t) &:= \partial_t \phi(t, \xi, p) \in \mathbb{R}^{N \times 1}, \\ V(t) &:= \partial_\xi \phi(t, \xi, p) \in \mathbb{R}^{N \times N}, \\ W(t) &:= \partial_p \phi(t, \xi, p) \in \mathbb{R}^{N \times K}. \end{aligned}$$

Theorem 8 (Evolution der Sensitivität). *Mit den obigen Notationen gilt*

$$U(0) = f(0, \xi, p), \quad V(0) = \text{Id}, \quad W(0) = 0 \tag{2.9}$$

¹⁰Um eine Proliferation von Symbolen zu vermeiden, schreibt man auch oft $x = x(t, \xi, p)$ statt $x = \phi(t, \xi, p)$.

¹¹Das deutsche Wort *Fluss* hat mehrere Übersetzungen ins Englische: Eine Abbildung wie in (2.8) heißt *flow*, wohingegen in der Kontinuumsmechanik der Fluss zu einer Dichte als *flux* bezeichnet wird; *river* hat hingegen keine mathematische Bedeutung.

und die Differentialgleichungen

$$\dot{U}(t) = A(t) \cdot U(t) + B(t), \quad \dot{V}(t) = A(t) \cdot V(t), \quad \dot{W}(t) = A(t) \cdot W(t) + C(t), \quad (2.10)$$

gelten in allen Punkten (t, ξ, p) , in denen ϕ definiert ist. Hierbei können die matrizenwertigen Funktionen

$$\begin{aligned} A(t) &:= \partial_x f(t, \phi(t, \xi, p), p) \in \mathbb{R}^{N \times N}, \\ B(t) &:= \partial_t f(t, \phi(t, \xi, p), p) \in \mathbb{R}^{N \times 1}, \\ C(t) &:= \partial_p f(t, \phi(t, \xi, p), p) \in \mathbb{R}^{N \times K} \end{aligned}$$

allein aus Kenntnis von f und der festgehaltenen Lösung des Anfangswertproblems (2.4) berechnet werden.

Beweis. Die Anfangsbedingungen (2.9) ergeben sich direkt aus (2.7) durch Differenziation nach ξ und p . Differenzieren wir nun die m -te Komponente der Differentialgleichung (2.6) nach der Zeit t , so erhalten wir

$$\partial_t \partial_t \phi_m(t, \xi, p) = \partial_t f_m(t, \phi(t, \xi, p), p) + \sum_{n=1}^N \partial_{x_n} f_m(t, \phi(t, \xi, p), p) \partial_t \phi_n(t, \xi, p)$$

und nach Definition von U ist das gerade

$$\dot{U}_m(t) = \left(B(t) + A(t) \cdot U(t) \right)_m$$

und damit die m -Komponente von (2.10). Die Ableitung der anderen Differentialgleichungen in (2.10) erfolgt vollkommen analog. \square

Bemerkung.

1. Die Differentialgleichung für U haben wir nur der Vollständigkeit halber aufgeführt, denn U kann auch direkt mittels

$$U(t) = f(t, \phi(t, \xi, p), p)$$

berechnet werden. Die gewöhnliche Differentialgleichung (2.4)₁ liefert also schon das Gesetz der Zeitsensitivität.

2. Die Differentialgleichungen (2.10) spielen auch im Beweis von Lemma 7 eine Rolle. Will man zum Beispiel die Differenzierbarkeit nach ξ beweisen, so definiert man sich $V(t)$ als Lösung des entsprechenden Anfangswertproblems – also von $\dot{V}(t) = A(t) \cdot V(t)$ mit $V(0) = \text{Id}$ – und zeigt

$$\left| \frac{\phi(t, \xi + \varepsilon \cdot \delta\xi, p) - \phi(t, \xi, p)}{\varepsilon} - V(t) \cdot \delta\xi \right| \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0$$

für jedes feste $(t, \xi, p) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^K$ und alle $\delta\xi \in \mathbb{R}^N$ mit Hilfe des Lemmas von Gronwall¹² und einiger technischer Argumente.

¹²Thomas Hakon Grönwall (1877–1932), schwedischer Mathematiker. Das nach ihm benannte Lemma wollen wir hier nicht formulieren, obwohl es eines der wichtigsten Hilfsmittel in der mathematischen Theorie der dynamischen Systeme ist.

Eine Sensitivitätsanalyse ist auch bei partiellen Differentialgleichungen möglich und führt auch wieder auf lineare – nun aber partielle – Differentialgleichungen. Allerdings ist die zu Grunde liegende Mathematik wesentlich anspruchsvoller, da man zunächst verstehen muss, ob bzw. in welchen Sinne eine Lösung nach den Anfangsdaten oder den auftretenden Parametern differenziert werden kann. Insbesondere können die *Daten* des Problems (Randdaten, Anfangsdaten, Koeffizienten vor den räumlichen oder zeitlichen Ableitungen) nun meist nicht mehr mit Punkten aus dem \mathbb{R}^D identifiziert werden sondern sind selbst Elemente eines unendlich-dimensionalen Funktionenraumes. In solchen Räumen gibt es mehrere Differentiationsbegriffe, aber eine Diskussion derselben würde hier den Rahmen sprengen.

Beispiel: Das Projektilproblem

Wir wollen nun die oben entwickelten Konzepte auf das Anfangswertproblem

$$\ddot{y} = -\frac{1}{(1+p \cdot y)^2}, \quad y|_{t=0} = 0, \quad \dot{y}|_{t=0} = \zeta \quad (2.11)$$

mit Parameter p anwenden, dass natürlich als entdimensionalisierte Fassung der dritten Gleichung des Projektilproblems interpretiert werden kann (siehe (1.35)); wir haben nur Bezeichnungen geändert um die folgenden Rechnungen übersichtlicher zu halten).

Um die oben entwickelten Argumente sowie Theorem 8 anwenden zu können, könnten wir diese Differentialgleichung zweiter Ordnung für y in ein äquivalentes System erster Ordnung mit den Variablen $x_1 = y$, $x_2 = \dot{y}$ und den Anfangsbedingungen $\xi_1 = 0$ und $\xi_2 = \zeta$ umformulieren, aber wir können auch direkt mit (2.11) argumentieren.

Wir schreiben analog zu oben

$$y = \phi(t, \zeta, p),$$

wobei wir der Einfachheit halber Störungen der ersten Anfangsbedingung $y|_{t=0} = 0$ nicht betrachten und daher keine entsprechende Variable eingeführt haben. Das parametrisierte Anfangswertproblem (2.11) ist nun äquivalent zu

$$\partial_t^2 \phi(t, \zeta, p) = -\frac{1}{(1+p \cdot \phi(t, \zeta, p))^2}, \quad \phi(0, \zeta, p) = 0, \quad \partial_t \phi(0, \zeta, p) = \zeta \quad (2.12)$$

und wir wollen im Folgenden die Sensitivität gegenüber Parameterstörungen δp sowie Sensitivität gegenüber Störungen $\delta \zeta$ der Anfangsdaten quantifizieren.

Durch Differentiation aller Gleichungen in (2.12) nach ζ erhalten wir

$$\partial_t^2 \partial_\zeta \phi(t, \zeta, p) = \frac{2 \cdot p \cdot \partial_\zeta \phi(t, \zeta, p)}{(1+p \cdot \phi(t, \zeta, p))^3} \quad (2.13)$$

sowie

$$\partial_\zeta \phi(0, \zeta, p) = 0, \quad \partial_t \partial_\zeta \phi(t, \zeta, p) = 1, \quad (2.14)$$

wobei wir bei der Herleitung von (2.13) benutzt haben, dass ϕ glatt ist (siehe Lemma 7) und deshalb $\partial_\zeta \partial_t^2 \phi = \partial_t^2 \partial_\zeta \phi$ gilt. Ableiten nach p liefert hingegen

$$\partial_t^2 \partial_p \phi(t, \zeta, p) = \frac{2 \cdot p \cdot \partial_p \phi(t, \zeta, p) + 2 \cdot \phi(t, \zeta, p)}{(1+p \cdot \phi(t, \zeta, p))^3} \quad (2.15)$$

und

$$\partial_p \phi(0, \zeta, p) = 0, \quad \partial_t \partial_p \phi(t, \zeta, p) = 0. \quad (2.16)$$

Für festes (ζ, p) definieren wir nun

$$V(t) := \partial_\zeta \phi(t, \zeta, p), \quad W(t) := \partial_p \phi(t, \zeta, p)$$

und erhalten ein Anfangswertproblem für die Sensitivität bzgl. ζ , nämlich

$$\ddot{V}(t) = A(t) \cdot V(t), \quad V(0) = 0, \quad \dot{V}(0) = 1,$$

sowie ein zweites Anfangswertproblem für die Sensitivität bzgl. p , nämlich

$$\ddot{W}(t) = A(t) \cdot W(t) + C(t), \quad W(0) = 0, \quad \dot{W}(0) = 0.$$

Hierbei sind

$$A(t) := \frac{2 \cdot p}{(1 + p \cdot \phi(t, \zeta, p))^3}, \quad C(t) := \frac{2 \cdot \phi(t, \zeta, p)}{(1 + p \cdot \phi(t, \zeta, p))^3}$$

entlang der Lösung von (2.11) mit festgehaltenem (ζ, p) auszuwerten.

Die Differentialgleichungen (2.13) bzw. (2.15) sind zwar linear in V bzw. W , aber weil die Koeffizienten A und C nicht konstant sind, wird es im Allgemeinen sehr schwierig sein, die Sensitivitäten explizit als Funktion von t zu berechnen.

Sind wir aber nur an der Evolution der Sensitivität entlang der Lösung mit $\zeta = 1$ und $p = 0$ interessiert (das entspricht gerade der Lösung der vereinfachten und enddimensionalisierten Projektilgleichung (1.36)), so kann das Problem erheblich vereinfacht werden: Die Lösung des Anfangswertproblems (2.12) ist explizit durch

$$\phi(t, 1, 0) = t - \frac{1}{2} \cdot t^2.$$

gegeben und daher gilt

$$A(t) = 0, \quad C(t) = 2 \cdot t - t^2.$$

Die Lösungen zu den linearen Anfangswertproblemen (2.13)+(2.14) sowie (2.15)+(2.16) können nun ebenfalls berechnet werden und wir erhalten

$$V(t) = t, \quad W(t) = \frac{1}{3} \cdot t^3 - \frac{1}{12} \cdot t^4.$$

Insbesondere gilt also

$$\delta y = \phi(t, 1 + \delta\zeta, 0 + \delta p) - \phi(t, 1, 0) \approx V(t) \cdot \delta\zeta + W(t) \cdot \delta p \quad (2.17)$$

wobei die Fehlerterme zwar klein in δp und $\delta\zeta$ sind, aber mit der Zeit wachsen werden (wir werden diesen Aspekt später noch genauer untersuchen).

In (2.17) sehen wir, dass die Sensitivität gegenüber $\delta\zeta$ linear in der Zeit wächst, wohingegen der Koeffizient vor δp ein Polynom in t vom Grade 4 ist. Damit ist für alle kleinen Zeiten die ζ -Sensitivität viel größer als die p -Sensitivität, aber für große Zeiten ist es anders herum.

2.2 Linearisierung um Lösungen

Die Sensitivitätsanalyse ist eng verwandt mit dem Konzept der *Linearisierung um Lösungen*. Im einfachsten Fall betrachtet man das implizit durch eine Gleichung definierte Gesetz

$$y = \phi(x) \quad \text{mit} \quad F(x, \phi(x)) = 0,$$

wobei wieder $x \in \mathbb{R}^N$, $y \in \mathbb{R}^M$, gelten soll und $F : \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^M \rightarrow \mathbb{R}^M$ eine wenigstens stetig differenzierbare Funktion ist. Ist nun eine spezielle Lösung $y_* = \phi(x_*)$ gegeben, so ist es eine natürliche Frage, ob es benachbarte Lösungen gibt und wie diese gegebenenfalls aussehen. Aus mathematischer Sicht ist man nun versucht, den Satz über Implizite Funktionen anzuwenden, aber im Moment wollen wir einen anderen, mehr heuristischen Aspekt diskutieren.

Wenn es überhaupt benachbarte Lösungen gibt, dann sollte es für jedes $x = x_* + \delta x$ mit hinreichend kleinem δx auch ein entsprechendes y geben. Diese kann man $y = y_* + \delta y$ schreiben, wobei

$$\delta y := \phi(x_* + \delta x) - \phi(x_*) = \partial_x \phi(x_*) \cdot \delta x + o(|\delta x|)$$

und mit (2.3) hatten wir uns schon eingesehen, dass $\partial_x \phi(x_*)$ im Prinzip durch Ableitungen von F ausgedrückt werden kann. Die *Fehlerterme* $o(|\delta x|)$ sind jedoch nur sehr indirekt gegeben und können im Allgemeinen nicht berechnet sondern bestenfalls nur abgeschätzt werden.

Die Methode der *Linearisierung um x_** meint nun, dass man zunächst alle Fehlerterme ignoriert und zunächst das *linearisierte Problem*

$$\partial_x F(x_*, y_*) \cdot \delta x + \partial_y F(x_*, y_*) \cdot \delta y = 0$$

nach δy auflöst. Man erhält so natürlich keine exakten, sondern bestenfalls *approximative* Werte bzw. Formeln für δy . Das ist aber oftmals eine sehr gute und brauchbare Strategie und liefert erste und wichtige Einsichten in das Verhalten von Lösungen komplizierter Modelle. In einem zweiten Schritt kann man dann diese Näherungslösung iterativ weiter verbessern (siehe den Abschnitt über asymptotische Analysis) und/oder versuchen, die Fehlerterme abzuschätzen (hier kommt die *Fehlerrechnung* oder mathematische Analysis ins Spiel).

Linearisierung bei Differentialgleichungen

Die Methode der Linearisierung spielt auch in der praktischen und theoretischen Untersuchung von Differentialgleichungen eine große Rolle. Um dies zu verstehen, betrachten wir die gewöhnliche Differentialgleichung

$$\dot{x} = f(t, x) \tag{2.18}$$

mit $x \in \mathbb{R}^N$ und $f : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$ stetig differenzierbar, wobei wir keine Anfangsbedingung stellen und der Einfachheit halber alle eventuellen Parameterabhängigkeiten vernachlässigen. Ist nun eine spezielle Lösung x_* – also eine Funktion $x_* : I \rightarrow \mathbb{R}^N$ mit $\dot{x}_*(t) = f(t, x_*(t))$ für alle $t \in I$ gegeben – so können wir

$$x(t) = x_*(t) + \delta x(t)$$

für eine benachbarte Lösung ansetzen, d.h. δx ist hier per Definition die Differenz zweier Lösungen von (2.18) und damit eine Funktion in t . Durch Einsetzen und Taylor-Entwicklung von f erhalten wir wegen $0 = \dot{x}_* = f(x_*)$ dann

$$\begin{aligned}\dot{\delta x}(t) &= f(t, x_*(t) + \delta x(t)) - f(t, x_*(t)) \\ &= \partial_x f(t, x_*(t)) \cdot \delta x(t) + o(|\delta x|).\end{aligned}$$

Die Funktion δx ist also in erster Näherung eine Lösung der *um x_* linearisierten Gleichung*

$$\dot{y} = A(t) \cdot y, \quad (2.19)$$

wobei

$$A(t) := \partial_x f(t, x_*(t)) \in \mathbb{R}^{N \times N}.$$

Hierbei muss beachtet werden, dass die Lösung des linearisierten Modells (2.19) in der Zeit anwachsen kann, d.h. selbst wenn die Anfangsbedingungen klein im Sinne von $|y(t_0)| \ll 1$ sind kann durchaus $|y(t)| \gg 1$ für $t \gg t_0$ gelten. In diesem Fall kann $y(t)$ für große Zeiten natürlich nicht mehr als gute Näherung von $\delta x(t)$ betrachtet werden, aber unter gewissen Voraussetzungen kann immer noch geschlossen werden, dass auch $|\delta x(t)|$ stark mit der Zeit wachsen muss. Die wichtige Frage, *unter welchen Voraussetzungen bzw. auf welchen Zeitskalen* die linearisierte Gleichung (2.19) eine sogar quantitative oder wenigstens noch qualitative oder gar unsinnige Approximation von δx liefert, kann hier nicht erschöpfend beantwortet werden. Wir werden daher unsere weiteren Betrachtungen auf einen speziellen aber sehr wichtigen Aspekt einschränken, nämlich auf Stabilitätsuntersuchungen für stationäre Lösungen autonomer Gleichungen.

Das Prinzip der Linearisierten Stabilität

Wir betrachten im Folgenden die *autonome*¹³ Gleichung

$$\dot{x} = f(x) \quad (2.20)$$

mit einer stetig differenzierbaren Funktion $f : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$. Wir wollen außerdem annehmen, dass x_* eine *stationäre*, also zeitunabhängige, Lösung¹⁴ ist, d.h. von nun gilt

$$x_* \in \mathbb{R}^N \quad \text{mit} \quad f(x_*) = 0, \quad A := \partial_x f(x_*) \in \mathbb{R}^{N \times N},$$

und das linearisierte Modell ist durch die ebenfalls autonome aber immer lineare Gleichung

$$\dot{y} = A \cdot y \quad (2.21)$$

gegeben.

Definition 9 (Stabilität und Hyperbolizität stationärer Lösungen). *Die stationäre Lösung x_* heißt*

¹³Autonom meint, dass die Differentialgleichung nicht explizit von der Zeit abhängt. Die Lösungen werden aber i.A. von der Zeit abhängen.

¹⁴Wir werden die Begriffe *stationäre Lösung* und *stationärer Zustand* bzw. *stationärer Punkt* synonym verwenden.

1. Ljapunow¹⁵-stabil (oder manchmal einfach stabil), falls es für jedes $\varepsilon_1 > 0$ ein $\varepsilon_2 > 0$ existiert, so dass die Implikation

$$|x(0) - x_*| \leq \varepsilon_2 \quad \implies \quad |x(t) - x_*| \leq \varepsilon_1 \quad \text{für alle } t \geq 0$$

für jede andere Lösung x gilt.

2. instabil, falls er nicht Ljapunow-stabil ist.
3. asymptotisch stabil, falls x_* Ljapunow-stabil ist und es außerdem eine $\varepsilon_3 > 0$ gibt, so dass die Implikation

$$|x(0) - x_*| \leq \varepsilon_3 \quad \implies \quad \lim_{t \rightarrow \infty} |x(t) - x_*| = 0$$

für jede andere Lösung x gilt.¹⁶

Wir nennen x_* darüber hinaus hyperbolisch, wenn alle komplexen Eigenwerte der Matrix A einen nicht-verschwindenden Realteil besitzen.

Bemerkung.

1. Stabilität ist ein lokales Konzept, denn es werden nur Aussagen über kleine Störungen gemacht.
2. Die Wahl $t=0$ als Anfangszeit ist willkürlich und kann durch $t=t_0$ ersetzt werden. Stabilität meint hier immer Vorwärtsstabilität, da nur zukünftige Zeiten $t \geq t_0$ betrachtet werden.
3. Das lineare Gleichung (2.21) besitzt immer die triviale Lösung $y_* = 0$, die natürlich stationär ist und gemäß Definition 9 stabil, instabil oder asymptotisch stabil sein kann.

Die in diesem Zusammenhang wichtigsten mathematischen Resultate kann wie folgt zusammengefasst werden.

Theorem 10 (Prinzip der linearisierten Stabilität). *Ist x_* eine stationäre und hyperbolische Lösung von (2.20), so ist x_* genau dann Ljapunow-stabil bzw. asymptotisch stabil, wenn die triviale Lösung der in x_* linearisierten Gleichung (2.21) Ljapunow-stabil bzw. asymptotisch stabil ist. Insbesondere sind beide im Fall von*

$$\text{spec}_{\mathbb{C}} A \subset \{z \in \mathbb{C} : \text{Re } z < 0\}$$

asymptotisch stabil und sonst immer schon instabil.

Bemerkung.

1. Die Menge

$$\text{spec}_{\mathbb{C}} A := \{\lambda \in \mathbb{C} : \det(\lambda \cdot \text{Id} - A) = 0\}$$

ist das Spektrum von A , also die Menge aller komplexen Eigenwerte.

¹⁵Aleksandr Mikhailovich Lyapunov (1857–1918), russischer Mathematiker und Physiker.

¹⁶Salopp gesprochen gilt: Stabilität meint, dass die Lösungen für alle benachbarten Anfangsdaten mit fortlaufender Zeit nicht von der stationären Lösung weglaufen werden. Bei asymptotischer Stabilität werden die gestörten Lösungen sogar zur stationären zurückkehren.

2. Haben also alle komplexen Eigenwerte von A einen negativen Realteil, so sind x_* und y_* beide asymptotisch stabil.
3. Der nicht-hyperbolische Fall – also wenn A rein-imaginäre Eigenwerte oder gar den Eigenwert 0 besitzt – ist wesentlich komplizierter. Zum einen impliziert Ljapunow-Stabilität nicht schon automatisch asymptotische Stabilität. Zum anderen kann man zwar immer noch explizite Stabilitätskriterien für y_* ableiten (siehe Übungsaufgabe), aber die Stabilität von x_* hängt nicht mehr nur vom Verhalten der linearisierten Gleichung sondern auch von den höheren Ableitungen von f in x_* ab.
4. Auch im nicht-hyperbolischen Fall gilt: Hat auch nur ein Eigenwert von A einen positiven Realteil, so sind sowohl x_* als auch y_* instabil.
5. Im hyperbolischen Fall charakterisiert die linearisierte Gleichung (2.21) nicht nur die Stabilität von x_* sondern lokal sogar den gesamten Fluss der ursprünglichen Gleichung (2.20). Das ist im Wesentlichen der Inhalt des Theorems von Hartman und Grobman.¹⁷

Für praktische Rechnungen sind die folgenden beiden Beobachtung nützlich.

Lemma 11 (Stabilitätskriterium bei linearen Gleichungen). *Die lineare Gleichung (2.21) besitzt genau dann eine Ljapunow-stabile (bzw. asymptotisch stabile) triviale Lösung, wenn jede ihrer Lösungen für $t \rightarrow +\infty$ beschränkt bleibt (bzw. gegen 0 konvergiert).*

Beweis. Die Behauptungen folgen direkt aus Definition 9 sowie der Tatsache, dass mit $t \mapsto y(t)$ auch immer $t \mapsto \lambda \cdot y(t)$ eine Lösung von (2.21) ist, wobei $\lambda \in \mathbb{R}$ eine beliebige Konstante bezeichnet. \square

Lemma 12 (Basiswechsel bei autonomen linearen Differentialgleichungen). *Gilt $A = Q^{-1} \cdot B \cdot Q$ für eine Matrix $B \in \mathbb{R}^{N \times N}$ und eine invertierbare Matrix $Q \in \mathbb{R}^{N \times N}$, so kann jede Lösung y von (2.21) als*

$$y(t) = Q^{-1} \cdot z(t) \tag{2.22}$$

geschrieben werden und umgekehrt, wobei z eine Lösung der Gleichung

$$\dot{z} = B \cdot z \tag{2.23}$$

ist. Insbesondere ist die triviale Lösung von (2.23) dann und nur dann Ljapunow-stabil bzw. asymptotisch stabil, wenn die triviale Lösung von (2.21) die entsprechende Eigenschaft hat.

Beweis. Die erste Behauptung kann einfach nachgerechnet werden: Ist y zum Beispiel eine Lösung von (2.21) und setzen wir $z(t) := Q \cdot y(t)$, so gilt

$$\dot{z}(t) = Q \cdot \dot{y}(t) = Q \cdot (Q^{-1} \cdot B \cdot Q) \cdot y(t) = (Q \cdot Q^{-1}) \cdot B \cdot (Q \cdot y(t)) = B \cdot z(t),$$

¹⁷Philip Hartman (geb. 1915), US-amerikanischer Mathematiker; David Grobman (?-?), sowjetischer Mathematiker. Das nach ihnen benannte Theorem wird zum Beispiel auf der englischsprachigen WIKIPEDIA erklärt.

und umgekehrt können wir ganz analog argumentieren. Die behauptete Äquivalenz der Stabilitäten kann unmittelbar aus Lemma 11 abgeleitet werden, denn mit (2.22) gilt auch

$$|y(t)| \leq C \cdot |z(t)| \quad \text{und} \quad |z(t)| \leq C \cdot |y(t)|$$

für eine geeignete Konstante C und alle Zeiten t . □

Beispiel. *Stabilitätsuntersuchungen mit 2×2 Matrizen können gemäß Lemma 12 und dem Satz über Jordansche Normalformen¹⁸ aus der linearen Algebra immer auf einen der Fälle*

$$B = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} \lambda & 1 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ -\beta & \alpha \end{pmatrix}$$

zurückgeführt werden, wobei $\lambda_1, \lambda_2, \lambda, \alpha, \beta$ reelle Zahlen sind. Der dritte Fall kann im Komplexen natürlich auf den ersten Fall mit $\lambda_{1/2} = \alpha \pm \mathbf{i} \cdot \beta$ reduziert werden.

Zum Abschluss wollen wir erwähnen, dass die Stabilitätstheorie für lineare aber nicht-autonome Gleichungen der Bauart $\dot{y} = A(t) \cdot y$ wesentlich komplizierter ist. Von besonderer Bedeutung ist dabei der Fall periodischer Matrizen mit $A(t) = A(t + t_{\text{per}})$; solche Gleichungen entstehen zum Beispiel durch Linearisierung entlang von periodischen Lösungen nichtlinearer Gleichungen und werden innerhalb der *Floquet*¹⁹-Theorie studiert.

Die Konzepte *Hyperbolizität* und *linearisierte Stabilität* gibt es darüber hinaus auch bei partiellen Differentialgleichungen, allerdings sind die entsprechenden mathematischen Theorien sehr viel komplizierter.

¹⁸Marie Ennemond Camille Jordan (1838–1922), französischer Mathematiker.

¹⁹Achille Marie Gaston Floquet (1847–1920), französischer Mathematiker.

2.3 Einführung in die asymptotische Analysis

Die Grundlage der asymptotischen Analysis sind Entwicklung nach den Potenzen eines kleinen aber meist positiven Parameters, der üblicherweise mit ε bezeichnet wird. Wir wollen im Folgenden annehmen, dass ε skalar ist. Alle Argumente können aber mühelos auch auf den Fall $\varepsilon = (\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_K) \in \mathbb{R}^K$ übertragen werden, wobei die Notionen dann aber komplizierter werden (Multi-Indizes usw.).

In der asymptotischen Analysis untersucht man Größen x , die vom Parameter ε abhängen und schreibt nach Art einer Funktion

$$x : I \rightarrow X \quad \text{bzw.} \quad x(\varepsilon) \in X \quad \text{für} \quad \varepsilon \in I$$

wobei I ein Intervall²⁰ mit $0 \in I$ bezeichnet und der normierte Raum X entweder endlich-dimensional (also isomorph zu \mathbb{R}^N) oder unendlich-dimensional (Funktionsraum) sein kann.

Definition 13 (Asymptotik der Ordnung K). *Die X -wertige Größe $x(\varepsilon)$ mit Parameter ε besitzt eine asymptotische Entwicklung zur Ordnung K , falls es Koeffizienten x_0, \dots, x_K aus X gibt, so dass*

$$x(\varepsilon) - \sum_{k=0}^K \varepsilon^k \cdot x_k = o(\varepsilon^K). \quad (2.24)$$

Gilt (2.24) sogar für $K = \infty$ mit $o(\varepsilon^\infty) := 0$, so spricht man von einer asymptotischen Reihenentwicklung von $x(\varepsilon)$.

Ist x K -mal stetig-differenzierbar nach ε und X ein Banach-Raum, so garantiert der Satz von Taylor die Existenz einer asymptotischen Entwicklung zur Ordnung K , wobei

$$x_k = \frac{1}{k!} \cdot \left. \frac{d^k x(\varepsilon)}{d\varepsilon^k} \right|_{\varepsilon=0}. \quad (2.25)$$

Ist x sogar analytisch in ε , so existiert die asymptotische Reihe und (2.24) gilt sowohl für alle $K \in \mathbb{N}$ als auch für $K = \infty$.

In der Modellierung gibt zwei verschiedene Anwendungsszenarien für asymptotische Entwicklungen:

1. Die Existenz einer asymptotischen Entwicklung, d.h. die Gültigkeit von (2.24) ist *a-priori* gesichert (in aller Regel durch abstrakte mathematische Theoreme) und man will nur vereinfachte Approximationsformeln für ein im Prinzip bekanntes, aber sehr kompliziertes Gesetz ableiten. Hier geht also nur darum, die Koeffizienten x_k – deren Existenz schon gesichert ist – explizit zu berechnen und wir werden weiter unten sehen, wie man das machen kann.
2. Man benutzt asymptotische Analysis, um ein noch unbekanntes Gesetz zumindest näherungsweise zu identifizieren. In diesem Fall wird man in einem ersten Schritt zunächst mögliche Kandidaten für die x_k berechnen und dabei alle auftretenden Fehlerterme ignorieren. In einem zweiten Schritt wird man dann versuchen, *a-posteriori* die Gültigkeit von (2.24) mit Hilfe von entsprechenden Abschätzungen rigoros zu beweisen.

²⁰Meist ist I durch $I = [0, \varepsilon_*]$ oder $I = (-\varepsilon_*, \varepsilon_*)$ mit $\varepsilon_* \in [0, \infty)$ gegeben, kann also offen oder halboffen sein. In Anwendungsfällen ist in aller Regel klar, welches I man betrachten sollte.

In vielen praktischen Fällen des zweiten Szenarios gelingt es zwar, die Rechnungen des ersten Schrittes durchzuführen, aber die Fehlerterme können auf Grund der Komplexität des Problems nicht rigoros abgeschätzt werden. In diesem Fall spricht man dann von einer *formal-asymptotischen Entwicklung*. Gesetze, die in dieser Art und Weise – also nur *formal* – abgeleitet wurden, sind zwar aus mathematischer Sicht nicht zweifelsfrei bewiesen, spielen aber doch eine sehr wichtige Rolle in der Untersuchung realer Phänomene. Viele mathematische Arbeiten beschäftigen sich ausschließlich damit, formal-asymptotisch abgeleitete Gesetze rigoros zu begründen (*justification, rigorous model reduction*); die entsprechende Analysis ist dabei alles andere als trivial und beruht auf zum Teil sehr ausgefeilten Techniken.

Darüber hinaus unterscheidet man zwischen *regulären* und *singulären* asymptotischen Entwicklungen (wobei jede rigoros oder formal sein kann), je nachdem ob das zu Grunde liegende Problem *regulär gestört* oder *singulär gestört* ist (der *Störungsparameter* ist ε). Wir werden hier keine präzise Definition dieser Konzepte geben können, sondern den Unterschied an Hand von Beispielen verdeutlichen. Als Daumenregel kann man aber formulieren: Reguläre gestörte Probleme sind eher einfach und können direkt durch asymptotische Entwicklungen approximiert werden. Singulär gestörte Probleme sind hingegen sehr viel komplizierter und müssen erst mit Hilfe ε -abhängiger Transformationen auf regulär gestörte Teilprobleme zurückgeführt werden.

2.3.1 Asymptotik für Lösungen glatter Gleichungen

Wir beginnen unsere Betrachtung mit einem Fall, der aus mathematischer Sicht sehr gut verstanden ist, eben weil sowohl die Existenz als auch die Differenzierbarkeit von $x(\varepsilon)$ a-priori gesichert werden kann. Genauer gesagt, wir betrachten die Gleichung

$$0 = F(\varepsilon, x) \quad \text{mit} \quad F : I \times \Omega \rightarrow X,$$

wobei $\Omega \subset X \cong \mathbb{R}^N$ ein offenes Gebiet bezeichnet und I wieder ein Intervall mit $0 \in I$ ist. Die *mathematische Aufgabe* besteht also darin, für einen gegebenen Parameter $\varepsilon \in I$ eine *Lösung* $x(\varepsilon)$ zu finden, so dass $F(\varepsilon, x(\varepsilon)) = 0$.

Das wichtigste mathematische Resultat in diesem Zusammenhang kann wie folgt formuliert werden.

Theorem 14 (Spezialfall des Satzes über Implizite Funktionen). *Sei F stetig differenzierbar und sei $x_0 \in \Omega$, so dass*

$$F(0, x_0) = 0, \quad \det A \neq 0, \quad A := \partial_x F(0, x_0)$$

Dann existiert ein Intervall J mit $0 \in J \subset I$ sowie eine eindeutige stetig-differenzierbare Funktion $x : J \rightarrow \Omega$, so dass

$$F(\varepsilon, x(\varepsilon)) = 0, \quad x(0) = x_0. \quad (2.26)$$

Beweis. Dieser Satz wird üblicherweise in Analysis II mit Hilfe des Banachschen Fixpunktsatzes bewiesen. Zumindest für den Fall, dass F sogar zweimal stetig differenzierbar ist, gibt es aber auch einen sehr eleganten dynamischen Beweis, der wie folgt skizziert werden kann.

Eigenschaften von x : Wir nehmen zunächst an, es gibt eine solche Funktion x und wollen verstehen, welche Eigenschaften diese haben muss und warum sie im wesentlichen (also bis auf Verkleinerung von J) eindeutig bestimmt ist. Dazu differenzieren

wir (2.26)₁ nach ε und erhalten ein nicht-lineares und nicht-autonomes System von gewöhnlichen Differentialgleichung, nämlich

$$\frac{dx(\varepsilon)}{d\varepsilon} = f(\varepsilon, x(\varepsilon)) \quad (2.27)$$

mit

$$f(\varepsilon, x) := -(A(\varepsilon, x))^{-1} \cdot b(\varepsilon, x),$$

wobei die Funktionen A und b mit

$$A(\varepsilon, x) = \partial_x F(\varepsilon, x) \quad \text{und} \quad b(\varepsilon, x) = \partial_\varepsilon F(\varepsilon, x)$$

zumindest in einer Umgebung von $(0, x_0)$ wohl-definiert und stetig differenzierbar sind. Für b ist dies sofort klar und bei A^{-1} argumentieren wir wie folgt: Weil $A : I \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}^{N \times N}$ nach Voraussetzung stetig differenzierbar ist und weil $\det A(0, x_0) \neq 0$ gilt, existiert eine Umgebung $\tilde{I} \times \tilde{\Omega} \subset I \times \Omega$ von $(0, x_0)$, so dass A^{-1} als Abbildung $\tilde{I} \times \tilde{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^{N \times N}$ wohl-definiert ist, und die Ketten- bzw. Produktregel garantiert, dass diese Abbildung sogar stetig differenzierbar ist. Insgesamt haben wir damit gesehen, dass die Funktion $f : \tilde{I} \times \tilde{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^N$ wohl-definiert und stetig differenzierbar ist, und dass die Funktion x – sofern sie existiert – die Differentialgleichung (2.27) erfüllen muss.

Existenz von x : Der Satz von Picard-Lindelöf garantiert, dass es ein Intervall J mit $0 \in J \subseteq I$ sowie eine eindeutig bestimmte Funktion $x : J \rightarrow \Omega$ gibt, die die Differentialgleichung (2.27) und die Anfangsbedingung $x(0) = x_0$ erfüllt. Insbesondere gilt nach Konstruktion und der Kettenregel

$$F(0, x(0)) = 0, \quad \frac{d}{d\varepsilon} F(\varepsilon, x(\varepsilon)) = 0,$$

und dies liefert die Gültigkeit von (2.26). □

Bemerkung.

1. Die Funktion x wird im Allgemeinen nur lokal existieren, d.h. J ist im Allgemeinen ein echtes Teilintervall von I .
2. Die maximale Größe des Existenzintervalles J kann sehr gut aus (2.27) abgelesen werden, denn die Gleichung hat dann und nur dann Sinn, wenn A invertierbar ist.
3. Gilt $\det A(\varepsilon, x(\varepsilon)) \rightarrow 0$ sowie $x(\varepsilon) \rightarrow \bar{x} \in \Omega$ für $\varepsilon \rightarrow \bar{\varepsilon} \neq 0$ und einen inneren Punkt $\bar{x} \in \Omega$, so tritt meist eine Bifurkation auf, d.h. die Anzahl der Lösungsäste ändert sich in \bar{x} .

Folgerung 15 (Variante des Satzes über Implizite Funktionen). *Mit den Notationen und Voraussetzungen von Theorem 14 gilt: Ist F sogar K -mal stetig differenzierbar, so gibt es ein offenes Intervall \tilde{J} mit $0 \in \tilde{J} \subset J$, so dass $x : \tilde{J} \rightarrow \mathbb{R}$ auch K -mal stetig differenzierbar ist. Insbesondere besitzt x auf dem Intervall \tilde{J} eine asymptotische Entwicklung der Ordnung K im Sinne von Definition 13.*

Beweis. Nach Voraussetzung und Theorem 14 gilt

$$0 = G(\varepsilon, x'(\varepsilon)) \quad \text{wobei} \quad G(\varepsilon, y) = \partial_\varepsilon F(\varepsilon, x(\varepsilon)) + \partial_x F(\varepsilon, x(\varepsilon)) \cdot y.$$

Die Funktion $G : I \times \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$ ist nun wieder stetig differenzierbar und mit $y(\varepsilon) = x'(\varepsilon)$ und $y_0 := y(0)$ gilt $G(0, y_0) = 0$. Außerdem ist die Matrix

$$B := \partial_y G(0, y_0) = \partial_x F(0, x_0) = A$$

invertierbar, und Theorem 14 – diesmal angewendet mit G statt F und y statt x – garantiert, dass die Funktion $y = x'$ stetig differenzierbar bzw. dass die Funktion x zweimal stetig differenzierbar ist. Durch Iteration dieses Arguments kann die Behauptung bewiesen werden. \square

Theorem 15 zeigt, dass man unter gewissen Voraussetzungen für alle hinreichend kleinen ε immer eine Lösung $x(\varepsilon)$ findet, und Folgerung 15 garantiert die Existenz einer asymptotischen Entwicklung für $x(\varepsilon)$ bis zur Ordnung K , wobei die Koeffizienten gerade durch (2.25) gegeben sind. Diese Formel ist abstrakt in dem Sinne, dass die Koeffizienten x_k – d.h. die k -te Ableitungen von x in $\varepsilon = 0$ – noch berechnet werden müssen. Kennt man die für jedes ε Lösung $x(\varepsilon)$, so kann dies natürlich durch einfaches Ableiten geschehen, aber in der Praxis kennt man eben die Lösung *nicht* bzw. *nicht explizit* und kann daher auch nicht die Koeffizienten durch Ableiten nach ε berechnen.

Die wesentliche Beobachtung ist nun, dass man die Koeffizienten x_1, x_2 , usw. schon allein aus F und x_0 berechnen kann. Die Funktion F – also die Gleichung – kennt man meist sehr gut und explizit. Im Allgemeinen kann es natürlich schwierig sein, einen *Entwicklungspunkt* x_0 – also eine Lösung der Gleichung $F(0, x_0) = 0$ – zu finden, aber die asymptotische Analysis setzt immer voraus, dass x_0 bekannt ist.

Wir wollen nun verstehen, wie man explizite Formeln für die Koeffizienten x_k ableiten kann ohne schon die gesamte Funktion x zu kennen. Um die wesentlichen Ideen zu verdeutlichen, betrachten wir den denkbar einfachsten Fall, nämlich $N = 1$.

Wir beginnen mit dem asymptotischen Ansatz

$$x(\varepsilon) = \varepsilon^0 \cdot x_0 + \varepsilon^1 \cdot x_1 + \varepsilon^2 \cdot x_2 + \dots$$

und berechnen die Taylor-entwicklung von F in $(0, x_0)$. Dies liefert erste Ableitungen

$$a_{10} := \partial_\varepsilon F(0, x_0), \quad a_{01} := \partial_x F(0, x_0),$$

zweite Ableitungen

$$a_{20} := \partial_\varepsilon^2 F(0, x_0), \quad a_{11} := \partial_\varepsilon \partial_x F(0, x_0), \quad a_{02} := \partial_x^2 F(0, x_0),$$

und so weiter bis zur Ordnung K , und die Taylor-Entwicklung von F in $(0, x_0)$ kann als

$$\begin{aligned} F(\varepsilon, x_0 + \delta) &= F(0, x_0) \\ &+ \frac{a_{10} \cdot \varepsilon^1 \cdot \delta^0}{1! \cdot 0!} + \frac{a_{01} \cdot \varepsilon^0 \cdot \delta^1}{0! \cdot 1!} \\ &+ \frac{a_{20} \cdot \varepsilon^2 \cdot \delta^0}{2! \cdot 0!} + \frac{a_{11} \cdot \varepsilon^1 \cdot \delta^1}{1! \cdot 1!} + \frac{a_{02} \cdot \varepsilon^0 \cdot \delta^2}{0! \cdot 2!} \\ &+ \dots \end{aligned}$$

geschrieben werden. Wir werten diese Identitäten nun für $\delta = \varepsilon^1 \cdot x_1 + \varepsilon^2 \cdot x_2 + \dots$ aus,

setzen alles in (2.26)₁ ein, und erhalten

$$\begin{aligned}
 0 &= F(\varepsilon, x_0 + \varepsilon^1 \cdot x_1 + \varepsilon^2 \cdot x_2 + \dots) \\
 &= F(0, x_0) \\
 &\quad + a_{10} \cdot \varepsilon^1 + a_{01} \cdot (\varepsilon^1 \cdot x_1 + \varepsilon^2 \cdot x_2 + \dots) \\
 &\quad + \frac{a_{20}}{2} \cdot \varepsilon^2 + a_{11} \cdot \varepsilon^1 \cdot (\varepsilon^1 \cdot x_1 + \varepsilon^2 \cdot x_2 + \dots)^1 + \frac{a_{02}}{2} \cdot (\varepsilon^1 \cdot x_1 + \varepsilon^2 \cdot x_2 + \dots)^2 \\
 &\quad + \dots \\
 &= F(0, x_0) + \varepsilon^1 \cdot (a_{10} + a_{01} \cdot x_1) \\
 &\quad + \varepsilon^2 \cdot (a_{01} \cdot x_2 + \frac{1}{2} \cdot a_{20} + a_{11} \cdot x_1 + \frac{1}{2} \cdot a_{02} \cdot x_1^2) + \dots
 \end{aligned}$$

Wir können nun durch Koeffizientenvergleich sukzessive Gleichungen für x_1, x_2 usw. identifizieren:

$\mathcal{O}(\varepsilon^0):$	$F(0, x_0)$	$=$	0	
$\mathcal{O}(\varepsilon^1):$	$a_{01} \cdot x_1$	$=$	b_1	$:= -a_{10}$
$\mathcal{O}(\varepsilon^2):$	$a_{01} \cdot x_2$	$=$	b_2	$:= -\frac{1}{2} \cdot a_{20} - a_{11} \cdot x_1 - \frac{1}{2} \cdot a_{02} \cdot x_1^2$
$\mathcal{O}(\varepsilon^3):$	$a_{01} \cdot x_3$	$=$	b_3	$:= \dots$

Insbesondere steht in der k -ten Gleichung für $k \geq 1$ immer a_{01} als Faktor vor x_k und auf der rechte Seite stehen Ableitungen von F sowie Produkte und Potenzen der x_1, \dots, x_{k-1} . Das ist kein Zufall sondern ergibt sich aus dem folgenden allgemeinen Prinzip.²¹

Prinzip 16 (Struktur einer asymptotischen Entwicklung mit $X = \mathbb{R}^N$). *Ein asymptotischer Ansatz für $x(\varepsilon)$ liefert*

1. die im Allgemeinen nichtlineare Gleichung $F(0, x_0)$ für x_0 ,
2. sowie eine Hierarchie von inhomogenen linearen Gleichungen.

Die k -te Gleichung in dieser Hierarchie kann dabei immer als

$$A \cdot x_k = b_k$$

geschrieben werden, wobei die Matrix $A = \partial_x F(0, x_0) \in \mathbb{R}^{N \times N}$ nur von x_0 abhängt und damit immer gleich ist. Die k -te Vektor $b_k \in \mathbb{R}^N$ hängt – in polynomialer Weise – jedoch von den k Vektoren $x_0, \dots, x_{k-1} \in \mathbb{R}^N$ sowie von partiellen Ableitungen von F ab, wobei letztere der Ordnung kleiner gleich k sind aber immer nur in $(0, x_0)$ ausgewertet werden müssen.

Wir können also – Kenntnis von x_0 , genügend Regularität von F , Invertierbarkeit von A sowie die nötige Ausdauer bei den Rechnungen vorausgesetzt – immer Kandidaten die Koeffizienten x_k einer asymptotischen Entwicklungen der Ordnung K von x ableiten. Heutzutage können wir diese Aufgabe sogar an ein Computerprogramm delegieren, sofern dieses symbolisch rechnen kann (wie etwa MATHEMATICA) oder wir garantieren können, dass die numerische Rundungsfehler immer der Ordnung $o(\varepsilon^K)$ sind.

²¹Es ist recht einfach einzusehen, dass dieses Prinzip richtig ist, aber etwas mühsam, eine Herleitung aufzuschreiben. Für praktische Anwendungen ist dieses Prinzip nützlich weil es einem erlaubt, Rechenfehler zu vermeiden.

Beispiel für eine regulär gestörte algebraische Gleichung

Wir betrachten die Gleichung

$$F(\varepsilon, x) := x^2 - \varepsilon \cdot x - 1 = 0,$$

deren zwei Lösungsäste explizit durch

$$x^{(-)}(\varepsilon) = \frac{1}{2} \cdot \left(\varepsilon - \sqrt{4 + \varepsilon^2} \right), \quad x^{(+)}(\varepsilon) = \frac{1}{2} \cdot \left(\varepsilon + \sqrt{4 + \varepsilon^2} \right) \quad (2.28)$$

gegeben sind. Wir wollen nun diese exakten Lösungen mit den Ergebnissen einer asymptotischen Analysis vergleichen. Dazu beginnen wir mit dem Ansatz

$$x(\varepsilon) = x_0 + \varepsilon \cdot x_1 + \varepsilon^2 \cdot x_2 + \dots,$$

und erhalten nach Einsetzen die Gleichung

$$\begin{aligned} 0 &= \left(x_0 + \varepsilon \cdot x_1 + \varepsilon^2 \cdot x_2 + \varepsilon^3 \cdot x_3 + \dots \right)^2 - \varepsilon \cdot \left(x_0 + \varepsilon \cdot x_1 + \varepsilon^2 \cdot x_2 + \varepsilon^3 \cdot x_3 + \dots \right) - 1 \\ &= \varepsilon^0 \cdot (x_0^2 - 1) + \varepsilon^1 \cdot (2 \cdot x_0 \cdot x_1 - x_0) + \varepsilon^2 \cdot (x_1^2 + 2 \cdot x_0 \cdot x_2 - x_1) + \\ &\quad \varepsilon^3 \cdot (2 \cdot x_0 \cdot x_3 + 2 \cdot x_1 \cdot x_2 - x_2) + \mathcal{O}(\varepsilon^4) \end{aligned}$$

Gruppieren wir nun alle Terme ihrer ε -Potenz entsprechend, so erhalten wir die folgende Hierarchie von Gleichungen:

$$\begin{array}{rcl} \mathcal{O}(\varepsilon^0): & x_0^2 - 1 & = 0 \\ \hline \mathcal{O}(\varepsilon^1): & 2 \cdot x_0 \cdot x_1 & = x_0 \\ \mathcal{O}(\varepsilon^2): & 2 \cdot x_0 \cdot x_2 & = x_1 - x_1^2 \\ \mathcal{O}(\varepsilon^3): & 2 \cdot x_0 \cdot x_3 & = x_2 - 2 \cdot x_1 \cdot x_2 \\ \vdots & & \vdots \\ \mathcal{O}(\varepsilon^k): & 2 \cdot x_0 \cdot x_k & = \dots \end{array}$$

Die nullte Gleichung ist dabei nichtlinear, aber alle weiteren Gleichungen sind linear und gehorchen dem Prinzip 16. Die nullte Gleichung hat zwei Lösungen – nämlich $x_0^{(\pm)} = \pm 1$ – und alle anderen Koeffizienten können dann sukzessive berechnet werden, wobei die konkreten Werte natürlich von der Wahl für x_0 abhängen. Insbesondere erhalten wir die beiden asymptotischen Entwicklungen

$$x_0^{(-)} = -1, \quad x_1^{(-)} = +\frac{1}{2}, \quad x_2^{(-)} = -\frac{1}{8}, \quad x_3^{(+)} = 0, \quad \dots$$

und

$$x_0^{(+)} = +1, \quad x_1^{(+)} = +\frac{1}{2}, \quad x_2^{(+)} = +\frac{1}{8}, \quad x_3^{(+)} = 0, \quad \dots$$

wobei hier nur zufällig $|x_k^{(+)}| = |x_k^{(-)}|$ gilt. Wir wollen auch nochmal daran erinnern, dass für jedes K schon

$$x^{(\pm)}(\varepsilon) = \sum_{k=0}^K \varepsilon^k \cdot x_k^{(\pm)} + o_{\pm}(\varepsilon^K), \quad x_k^{(\pm)} = \left. \frac{d^k x^{(\pm)}(\varepsilon)}{d\varepsilon^k} \right|_{\varepsilon=0} \quad (2.29)$$

gilt, eben weil die Funktionen $x^{(-)}$ und $x^{(+)}$ unendlich oft stetig differenzierbar sind (letzteres kann direkt mit Hilfe der exakten Formeln (2.28) oder aber indirekt mit Folgerung 15 begründet werden). Beide Funktionen sind darüber hinaus auch analytisch, d.h. es gilt sogar

$$x^{(\pm)}(\varepsilon) = \sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon^k \cdot x_k^{(\pm)}$$

für alle hinreichend kleinen ε . Natürlich ist dieses Beispiel sehr akademisch, denn es gibt eigentlich keinen Grund, die exakten Formeln (2.28) durch die Approximationen (2.29) zu ersetzen.

Beispiele für singulär gestörte algebraische Gleichungen

Wir betrachten nun die Gleichung

$$F(\varepsilon, x) = \varepsilon \cdot x^2 - x - 1 = 0, \quad (2.30)$$

die die zwei Lösungen

$$x^{(\pm)}(\varepsilon) = \frac{1}{2 \cdot \varepsilon} \cdot \left(1 \pm \sqrt{1 + 4 \cdot \varepsilon} \right) \quad (2.31)$$

besitzt. Wir können die nicht-monomiale Wurzelfunktion mit Hilfe einer Taylor-Entwicklung als

$$\sqrt{1 + 4 \cdot \varepsilon} = 1 + 2 \cdot \varepsilon - 2 \cdot \varepsilon^2 + 4 \cdot \varepsilon^3 + \mathcal{O}(\varepsilon^4)$$

darstellen, und durch Einsetzen erhalten wir

$$x^{(-)}(\varepsilon) = -1 + 1 \cdot \varepsilon - 2 \cdot \varepsilon^2 + 5 \cdot \varepsilon^3 + \mathcal{O}(\varepsilon^4) \quad (2.32)$$

bzw.

$$x^{(+)}(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon} \cdot \left(1 + 1 \cdot \varepsilon - 1 \cdot \varepsilon^2 + 2 \cdot \varepsilon^3 \right) + \mathcal{O}(\varepsilon^3).$$

Wir wollen nun verstehen, ob wir diese asymptotischen Gesetze auch ohne Kenntnis der exakten Lösung hätten ableiten können. Dazu starten wir wieder mit dem Ansatz

$$x(\varepsilon) = x_0 + \varepsilon \cdot x_1 + \varepsilon^2 \cdot x_2 + \dots, \quad (2.33)$$

und berechnen mit dem Zwischenschritt

$$\begin{aligned} 0 &= \varepsilon \cdot (x_0 + \varepsilon \cdot x_1 + \varepsilon^2 \cdot x_2 + \varepsilon^3 \cdot x_3 + \dots)^2 - (x_0 + \varepsilon \cdot x_1 + \varepsilon^2 \cdot x_2 + \varepsilon^3 \cdot x_3 + \dots) - 1 \\ &= \varepsilon^0 \cdot (-x_0 - 1) + \varepsilon^1 \cdot (x_0^2 - x_1) + \varepsilon^2 \cdot (2 \cdot x_0 \cdot x_1 - x_2) + \\ &\quad \varepsilon^3 \cdot (x_1^2 + 2 \cdot x_0 \cdot x_2 - x_3) + \mathcal{O}(\varepsilon^4) \end{aligned}$$

die folgende Hierarchie:

$\mathcal{O}(\varepsilon^0):$	$x_0 + 1$	$=$	0
$\mathcal{O}(\varepsilon^1):$	x_1	$=$	x_0^2
$\mathcal{O}(\varepsilon^2):$	x_2	$=$	$2 \cdot x_0 \cdot x_1$
$\mathcal{O}(\varepsilon^3):$	x_3	$=$	$x_1^2 + 2 \cdot x_0 \cdot x_2$
\vdots		\vdots	
$\mathcal{O}(\varepsilon^k):$	x_k	$=$	\dots

Durch sukzessives Lösen der Hierarchiegleichungen erhalten wir eine *eindeutige* Liste von Koeffizienten, nämlich

$$x_0 = -1, \quad x_1 = +1, \quad x_2 = -2, \quad x_3 = +5, \quad \dots$$

Dies ist gerade die Taylor-entwicklung von $x^{(-)}(\varepsilon)$ in 0, siehe (2.32), denn die spezielle Lösung $x_0 = -1 = x^{(-)}(0)$ für $\varepsilon = 0$ erfüllt die Voraussetzungen von Theorem 14 bzw. Folgerung 15. Der zweite Lösungsast $x^{(+)}$ aus (2.31) kann aber so nicht gefunden werden, eben weil es kein entsprechendes $x_0 \in \mathbb{R}$ gibt.

Die Gleichung (2.30) ist ein (sehr einfaches) Beispiel für ein *singulär gestörtes* Problem, eben weil der Störungsparameter ε vor dem ‚wichtigsten‘ Term – in unserem Fall der Term mit der *höchsten algebraischen Ordnung* – steht. Ein weiteres Beispiel ist

$$\varepsilon \cdot x^2 - 1 = 0, \quad (2.34)$$

für das man überhaupt keine Lösung zu nullter Ordnung findet. Bei solchen Problemen kann man nicht davon ausgehen, mit einem Ansatz wie in (2.33) *alle* relevanten bzw. überhaupt sinnvolle Lösungen zu finden. Es gibt nun prinzipiell zwei Möglichkeiten, die obere asymptotische Analysis zu verfeinern:

1. Man versucht, das singulär gestörte Problem mittels geeigneter Transformationen auf ein regulär gestörtes Problem²² zurückzuführen. Bei (2.30) bzw. (2.34) gelingt dies mit $x = y/\varepsilon$ bzw. $x = y/\sqrt{\varepsilon}$ und liefert

$$y^2 - y - \varepsilon = 0 \quad \text{bzw.} \quad y^2 - 1 = 0.$$

Man sieht auch hier die singuläre Natur des Problems, denn die Transformationen sind für $\varepsilon = 0$ nicht definiert.

2. Man beginnt die Rechnungen mit einem allgemeineren Ansatz, zum Beispiel

$$x^{(\pm)}(\varepsilon) = \varepsilon^\alpha \sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon^k \cdot x_k^{(\pm)},$$

wobei $\alpha \in \mathbb{R}$ geschickt zu wählen ist. Bei (2.30) bzw. (2.34) führen $\alpha = -1$ bzw. $\alpha = -\frac{1}{2}$ zum Ziel.

Zum Konsistenzbegriff

Wir wollen nun abschließend ein weiteres Konzept einführen und betrachten dazu die abstrakte Gleichung

$$F(\varepsilon, x) = 0, \quad F : I \times \Omega \rightarrow X, \quad \Omega \subset X$$

wobei X nun ein allgemeiner, d.h. vielleicht unendlich-dimensionaler, normierter Raum ist. In solchen Fällen ist es oftmals nicht a-priori klar, ob es für gegebenes $\varepsilon \in J$ überhaupt eine Lösung $x(\varepsilon)$ existiert bzw. ob die Familie x von Lösungen in Potenzen von ε entwickelt werden kann. In vielen Fällen kann man aber – zum Beispiel durch Raten oder durch formale asymptotische Entwicklung – einen Kandidaten für approximative Lösungen finden, die wir als

$$\bar{x} : J \rightarrow \Omega$$

schreiben wollen, d.h. $\bar{x}(\varepsilon)$ ist für jedes $\varepsilon \in J$ ein Kandidat für eine approximative Lösung, wobei J ein hinreichend kleines Intervall mit $0 \in J \subseteq I$ ist.

²²Wir wollen hier keine präzise Definition von *regulär gestört* und *singulär gestört* geben. Die Daumenregel ist: Bei regulär gestörten Problemen liefert ein einfacher asymptotischer Ansatz wie in (2.33) sinnvolle Ergebnisse, bei singulär gestörten Problemen verliert man bei dieser Methode einige oder sogar alle Lösungen.

Definition 17 (Konsistenz und Konvergenz). *Wir nennen \bar{x}*

1. konsistent zur Ordnung K , falls

$$r(\varepsilon) := F(\varepsilon, \bar{x}(\varepsilon)) = o(\varepsilon^K),$$

für alle $\varepsilon \in J$ gilt, wobei $r(\varepsilon)$ das Residuum ist.

2. konvergent zur Ordnung K , falls es eine Funktion $\delta x : J \rightarrow X$ gibt, so dass

$$0 = F(\varepsilon, \bar{x}(\varepsilon) + \delta x(\varepsilon)) \quad \text{und} \quad \|\delta x(\varepsilon)\| = o(\varepsilon^K),$$

für alle $\varepsilon \in J$ gilt, wobei $\delta x(\varepsilon)$ als Fehlerterm oder Korrekturterm bezeichnet wird.

Hierbei gilt $K \in \mathbb{N}_+$.

Eine gute Approximation ist nun sicherlich sowohl konsistent als auch konvergent, und es stellt sich die Frage, ob die eine Eigenschaft schon die andere impliziert. Üblicherweise impliziert Konvergenz auch Konsistenz (zumindest wenn F hinreichend regulär ist) aber die Umkehrung ist im Allgemeinen falsch. Ähnliche Konzepte und Fragen spielen auch der numerischen Analysis eine wichtige Rolle, wobei ε dann meist der Diskretisierungsparameter ist.

Dass Konsistenz nicht unbedingt Konvergenz nach sich zieht, sieht man zum Beispiel für $N = 2$ an der Gleichung

$$F(\varepsilon, x) := \begin{pmatrix} +1 & -1 \\ -1 + \varepsilon^3 & +1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ \varepsilon^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.35)$$

Auf den ersten Blick könnte man meinen, dass die Funktion $\bar{x} : (-1, +1) \rightarrow \mathbb{R}^2$ mit

$$\bar{x}_1(\varepsilon) = \bar{x}_2(\varepsilon) = 1.$$

für $\varepsilon \approx 0$ eine gute Approximation der exakten Lösung liefert, denn für die entsprechenden Residuen gilt

$$r_1(\varepsilon) = 1 \cdot 1 - 1 \cdot 1 - 0 = 0, \quad r_2(\varepsilon) = (-1 + \varepsilon^3) \cdot 1 + 1 \cdot 1 - \varepsilon^2 = \varepsilon^3 - \varepsilon^2 = o(\varepsilon),$$

d.h. \bar{x} ist konsistent zur Ordnung 1 (es gilt sogar $F(0, \bar{x}) = 0$, d.h. \bar{x} ist exakte Lösung der Gleichung für $\varepsilon = 0$). Der Kandidat \bar{x} ist aber zu keiner Ordnung konvergent, denn die exakte Lösung ist durch

$$x_1(\varepsilon) = x_2(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon} \quad \text{bzw.} \quad \delta x_1(\varepsilon) = \delta x_2(\varepsilon) = \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon}$$

gegeben, d.h. es gilt $|\delta x(\varepsilon)| \rightarrow \infty$ für $\varepsilon \rightarrow 0$. Dieses Beispiel ist wieder singular gestört, aber diesmal weil der ‚wichtigste‘ Term in der Gleichung (2.35) – also die quadratische Matrix – die Determinante ε^3 besitzt und daher weder zu nullter, erster oder zweiter Ordnung in ε invertierbar ist.

Bemerkung (Konsistenz und Konvergenz einer asymptotischen Entwicklung). *Besitzt die exakte Lösung $x(\varepsilon)$ eine asymptotische Entwicklung im Sinne von Definition 13, so ist die Näherungsformel*

$$\bar{x}(\varepsilon) = x_0 + \varepsilon \cdot x_1 + \dots + \varepsilon^K \cdot x_K$$

konvergent zur Ordnung K im Sinne von Definition 17. Ist F darüber hinaus lokal Lipschitz-stetig²³, so ist \bar{x} auch konsistent zur Ordnung K . Genauer gesagt: Wenn es eine Konstante C und einen Radius $r > 0$ gibt, so dass

$$\|F(\varepsilon, \xi_2) - F(\varepsilon, \xi_1)\| \leq C\|\xi_2 - \xi_1\|$$

für alle $\varepsilon \in J$ und alle $\xi_1, \xi_2 \in B_r(x_0)$ gilt, so folgt wegen $F(\varepsilon, x(\varepsilon)) = 0$ aus der Konvergenz schon

$$\|r(\varepsilon)\| = \|F(\varepsilon, \bar{x}(\varepsilon)) - F(\varepsilon, x(\varepsilon))\| \leq C\|\delta x(\varepsilon)\| = o(\varepsilon^K)$$

für alle hinreichend kleinen ε und damit die Konsistenz von \bar{x} .

2.3.2 Asymptotische Analysis von Differentialgleichungen

Wir wollen in diesem Abschnitt verstehen, in wieweit gewöhnliche Differentialgleichungen asymptotisch analysiert werden können. Im Prinzip kann man wieder sehr starke und allgemeine Theoreme formulieren und beweisen, aber wir werden uns daher auf das Studium einiger illustrativer Beispiel beschränken um die wesentlichen Schritte und Argumente zu verstehen.

Beispiel für eine Gleichung erster Ordnung

Unser erstes Beispiel ist das skalare Anfangswertproblem erster Ordnung²⁴

$$\dot{x} = -x + \sin(\varepsilon \cdot x), \quad x|_{t=0} = 1 + \varepsilon \quad (2.36)$$

mit dem kleinen Parameter ε . Wir wollen wieder die Lösungen nach Potenzen von ε entwickeln und starten mit dem asymptotischen Ansatz

$$x(\varepsilon, t) = x_0(t) + \varepsilon \cdot x_1(t) + \varepsilon^2 \cdot x_2(t) + \varepsilon^3 \cdot x_3(t) + \dots \quad (2.37)$$

Um die Terme mit verschiedenen ε -Potenzen voneinander trennen zu können, erinnern wir uns zunächst daran, dass die Sinusfunktion auf ganz \mathbb{R} analytisch ist, also in die Potenzreihe

$$\sin(z) = 1 \cdot z - \frac{1}{6} \cdot z^3 + \frac{1}{120} \cdot z^5 + \dots \quad (2.38)$$

entwickelt werden kann. Insbesondere gilt

$$\begin{aligned} \sin(\varepsilon \cdot x(t)) &= (\varepsilon \cdot x_0(t) + \varepsilon^2 \cdot x_1(t) + \varepsilon^3 \cdot x_2(t) + \dots) - \frac{1}{6} \cdot (\varepsilon \cdot x_0(t) + \dots)^3 \\ &= \varepsilon \cdot x_0(t) + \varepsilon^2 \cdot x_1(t) + \varepsilon^3 \cdot (x_2(t) - \frac{1}{6} \cdot x_0(t)^3) + \mathcal{O}(\varepsilon^4), \end{aligned} \quad (2.39)$$

wobei wir nur Terme der Ordnung $\mathcal{O}(\varepsilon^3)$ berücksichtigen wollen (wir könnten aber bis zu jeder anderen Ordnung rechnen). Setzen wir nun (2.38) und (2.39) in die Differentialgleichung (2.36)₁ ein, so erhalten wir

$$\text{L.S.} = \dot{x}_0(t) + \varepsilon \cdot \dot{x}_1(t) + \varepsilon^2 \cdot \dot{x}_2(t) + \varepsilon^3 \cdot \dot{x}_3(t) + \mathcal{O}(\varepsilon^4)$$

²³Jede stetig differenzierbare Funktion ist auch lokal Lipschitz-stetig.

²⁴Ordnung meint hier auf die Ordnung der Differentialgleichung, nicht die Ordnung der asymptotischen Entwicklung.

und

$$\begin{aligned} \text{R.S.} = & -\varepsilon^0 \cdot x_0(t) + \varepsilon^1 \cdot (-x_1(t) + x_0(t)) + \varepsilon^2 \cdot (-x_2(t) + x_1(t)) \\ & + \varepsilon^3 \cdot (-x_3(t) + x_2(t) - \frac{1}{6} \cdot x_0(t)^3) + \mathcal{O}(\varepsilon^4), \end{aligned}$$

wobei L.S. bzw. R.S. für *linke Seite* bzw. *rechte Seite* steht. Kombinieren wir diese Formeln mit den Anfangsbedingungen (2.36)₂, so ergibt sich die folgende Hierarchie von Anfangswertproblemen²⁵:

$\mathcal{O}(\varepsilon^0):$	$\dot{x}_0(t) + x_0(t) = 0$		$x_0(0) = 1$
$\mathcal{O}(\varepsilon^1):$	$\dot{x}_1(t) + x_1(t) = x_0(t)$	mit	$x_1(0) = 1$
$\mathcal{O}(\varepsilon^2):$	$\dot{x}_2(t) + x_2(t) = x_1(t)$	mit	$x_2(0) = 0$
$\mathcal{O}(\varepsilon^3):$	$\dot{x}_3(t) + x_3(t) = x_2(t) - \frac{1}{6} \cdot x_0(t)^3$	mit	$x_3(0) = 0$
\vdots	\vdots		\vdots
$\mathcal{O}(\varepsilon^k):$	$\dot{x}_k(t) + x_k(t) = \dots$	mit	$x_k(0) = 0$

Das nullte Anfangswertproblem ist in diesem Beispiel linear und besitzt die Lösung

$$x_0(t) = \exp(-t).$$

Alle anderen Anfangswertprobleme in der Hierarchie sind linear aber inhomogen (das ist immer so). Um die entsprechenden Lösungen explizit anzugeben, bemerken wir, dass die allgemeine Lösung des Anfangswertproblems

$$\dot{z}(t) = -z(t) + b(t), \quad z(0) = \zeta \tag{2.40}$$

durch

$$z(t) = \exp(-t) \cdot \left(\zeta + \int_0^t \exp(s) \cdot b(s) \, ds \right) \tag{2.41}$$

gegeben ist (Nachrechnen!). Damit können wir nun x_1 , x_2 und x_2 schrittweise berechnen und erhalten

$$\begin{aligned} x_1(t) &= \exp(-t) \cdot \left(1 + \int_0^t \exp(s) \cdot x_0(s) \, ds \right) \\ &= \exp(-t) \cdot \left(1 + \int_0^t 1 \, ds \right) = \exp(-t) \cdot (1 + t) \end{aligned}$$

bzw.

$$\begin{aligned} x_2(t) &= \exp(-t) \cdot \left(0 + \int_0^t \exp(s) \cdot x_1(s) \, ds \right) \\ &= \exp(-t) \cdot \left(0 + \int_0^t (1 + s) \, ds \right) = \exp(-t) \cdot \left(t + \frac{1}{2} \cdot t^2 \right) \end{aligned}$$

sowie

$$\begin{aligned} x_3(t) &= \exp(-t) \cdot \int_0^t \exp(s) \cdot (x_2(s) - \frac{1}{6} \cdot x_0(s)^3) \, ds \\ &= \exp(-t) \cdot \int_0^t \left(s + \frac{1}{2} \cdot s^2 - \frac{1}{6} \cdot \exp(-2s) \right) \, ds \\ &= \exp(-t) \cdot \left(\frac{1}{2} \cdot t^2 + \frac{1}{6} \cdot t^3 + \frac{1}{12} \cdot \exp(-2t) - \frac{1}{12} \right). \end{aligned}$$

²⁵Versuchen Sie, ein Analogon zu Prinzip 16 zu formulieren.

Insgesamt haben wir damit eine *formal-asymptotische Entwicklung gefunden*. Zu dritter Ordnung erhalten wir

$$\begin{aligned}\bar{x}_3(\varepsilon, t) &= x_0(t) + \varepsilon \cdot x_1(t) + \varepsilon^2 \cdot x_2(t) + \varepsilon^3 \cdot x_2(t) \\ &= \exp(-t) \cdot \left(\left(1 + \varepsilon - \frac{1}{12} \cdot \varepsilon^3\right) + (\varepsilon + \varepsilon^2) \cdot t + \left(\frac{1}{2} \cdot \varepsilon^2 + \frac{1}{2} \cdot \varepsilon^3\right) \cdot t^2 + \frac{1}{6} \cdot \varepsilon^3 \cdot t^3 \right) \\ &\quad + \exp(-3 \cdot t) \cdot \left(\frac{1}{12} \cdot \varepsilon^3\right),\end{aligned}$$

als Kandidaten für eine Näherungslösung, wohingegen die Terme erster Ordnung den Kandidaten

$$\bar{x}_1(\varepsilon, t) = x_0(t) + \varepsilon \cdot x_1(t) = \exp(-t) \cdot (1 + \varepsilon + \varepsilon \cdot t).$$

liefern. Es ist aber nicht a-priori klar – jedenfalls nicht mit dem Wissen aus den Grundvorlesungen zur Analysis – ob diese asymptotischen Formeln – die wir ja zunächst nur formal, d.h. durch den geratenen Ansatz (2.37), abgeleitet haben – wirklich die exakten Lösungen approximieren. Wir wollen nun diese Frage zumindest für $K = 1$ a-posteriori beantworten. Dazu erinnern wir daran, dass für ein eingegebenes Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ der Funktionenraum

$$\mathbf{BC}(\Omega) := \{w : \Omega \rightarrow \mathbb{R} : w \text{ ist beschränkt und stetig}\},$$

mit der Supremumsnorm $\|u\|_\infty := \sup_{y \in \Omega} |u(y)|$ ein normierter Raum ist.

Lemma 18. *Die Approximation \bar{x}_1 ist für $\varepsilon \in I := (-1, 1)$ konsistent und konvergent zur Ordnung 1 im Funktionenraum $X = \mathbf{BC}(\mathbb{R}_{0+})$. Insbesondere besitzt die exakte Lösung x des Anfangswertproblems (2.36) eine asymptotische Entwicklung zur Ordnung 1 im Sinne von Definition 13.*

Beweis. Um die wesentlichen Idee zu verdeutlichen, schreiben wir in diesem Beweis $\bar{x}_\varepsilon(t)$ statt $\bar{x}_1(\varepsilon, t)$. Außerdem setzen wir

$$C_1 := \sup_{t \geq 0} (2 + t) \cdot \exp(-t) < \infty$$

und bemerken (nach einem Taylor-Argument), dass

$$|\sin z - z| \leq C_2 \cdot z^3$$

für eine gewisse Konstante $C_2 \in \mathbb{R}$ und alle $z \in \mathbb{R}$ gilt.

Konsistenz: Per Definition ist

$$r_\varepsilon(t) := \dot{\bar{x}}_\varepsilon(t) + \bar{x}_\varepsilon(t) - \sin(\varepsilon \cdot \bar{x}_\varepsilon(t))$$

das Residuum der Differentialgleichung (die Anfangsbedingung wird exakt erfüllt und führt somit zu einem trivialen Residuum) und durch Rechnen verifizieren wir

$$\begin{aligned}r_\varepsilon(t) &= \varepsilon \cdot \exp(-t) - \sin(\varepsilon \cdot \bar{x}_\varepsilon(t)) \\ &= \left(\varepsilon \cdot \bar{x}_\varepsilon(t) - \sin(\varepsilon \cdot \bar{x}_\varepsilon(t)) \right) - \varepsilon^2 \cdot (1 + t) \exp(-t).\end{aligned}$$

Insbesondere mit

$$|\bar{x}_\varepsilon(t)| \leq C_1 \quad \text{für alle } t \geq 0, \varepsilon \in I \quad (2.42)$$

die Abschätzung

$$\|r_\varepsilon\|_\infty = \sup_{t \geq 0} |r_\varepsilon(t)| \leq \varepsilon^3 \cdot C_2 \cdot C_1^3 + \varepsilon^2 \cdot C_1 = \mathcal{O}(\varepsilon^2) = o(\varepsilon), \quad (2.43)$$

d.h. x_ε ist in der Tat konsistent zur Ordnung 1.

Konvergenz: Die Fehlerterme können als

$$\delta x_\varepsilon(t) := x_\varepsilon(t) - \bar{x}_\varepsilon(t)$$

dargestellt werden, wobei $x_\varepsilon(t)$ die exakte Lösung zu (2.36) ist. Diese kennen wir zwar nicht explizit, aber elementare Argumente²⁶ aus der Theorie der nichtlinearen gewöhnlichen Differentialgleichungen zeigen, dass es eine Konstante C_3 gibt, so dass

$$|x_\varepsilon(t)| \leq C_3 \quad \text{für alle } t \geq 0, \varepsilon \in I. \quad (2.44)$$

Nach Definition von $r_\varepsilon(t)$ und $x_\varepsilon(t)$ gilt nun

$$\begin{aligned} \dot{\delta x}_\varepsilon(t) &= \dot{x}_\varepsilon(t) - \dot{\bar{x}}_\varepsilon(t) \\ &= \left(-x_\varepsilon(t) + \sin(\varepsilon \cdot x_\varepsilon(t)) \right) - \left(-\bar{x}_\varepsilon(t) + \sin(\varepsilon \cdot \bar{x}_\varepsilon(t)) + r_\varepsilon(t) \right) \\ &= -\delta x(t) + g_\varepsilon(t) \end{aligned}$$

wobei

$$g_\varepsilon(t) := \sin(\varepsilon \cdot \bar{x}_\varepsilon(t) + \varepsilon \cdot \delta x_\varepsilon(t)) - \sin(\varepsilon \cdot \bar{x}_\varepsilon(t)) - r_\varepsilon(t). \quad (2.45)$$

Da die allgemeine Lösung des Anfangswertproblems (2.40) durch die Formel (2.41) gegeben ist, gilt insbesondere

$$\delta x(t) = \exp(-t) \cdot \int_0^t \exp(s) \cdot g_\varepsilon(s) \, ds. \quad (2.46)$$

Wir wollen nun Abschätzungen für g_ε ableiten und bemerken zunächst, dass

$$|\delta x_\varepsilon(t)| \leq C_1 + C_3 \quad \text{für alle } t \geq 0, \varepsilon \in I$$

wegen (2.42) und (2.44) gilt. Mit Hilfe von (2.45), (2.43) sowie der Eigenschaften der Sinusfunktion finden wir deshalb eine Konstante C_4 , so dass

$$|g_\varepsilon(t)| \leq C_4 \cdot \varepsilon^2 \quad \text{für alle } t \geq 0, \varepsilon \in I.$$

Durch Einsetzen in (2.46), Abschätzen und Berechnung der Integrale erhalten wir schließlich

$$|\delta x_\varepsilon(t)| = C_4 \cdot \varepsilon^2 \cdot \exp(-t) \cdot \int_0^t \exp(s) \cdot ds \leq C_4 \cdot \varepsilon^2 \quad (2.47)$$

für alle $t \geq 0, \varepsilon \in I$ und damit $\|\delta x_\varepsilon\|_\infty = o(\varepsilon)$ bzw. die gewünschte Konvergenzaussage.²⁷ \square

²⁶Man kann zum Beispiel wegen $-x_\varepsilon - 1 \leq \dot{x}_\varepsilon \leq -x_\varepsilon + 1$ leicht obere und untere Schranken aus dem Vergleichsprinzip ableiten.

²⁷Unser elementarer Beweis kann durch ausgefeiltere Werkzeuge (wie zum Beispiel das *Duhamel-Prinzip* und das *Lemma von Gronwall*) vereinfacht werden.

Bemerkung.

1. Die Abschätzung (2.47) für δx_ε kann nicht weiter verbessert werden, weil nur $r_\varepsilon \in \mathcal{O}(\varepsilon^2)$ gilt. Definiert man \bar{x}_ε zum Beispiel mit $\bar{x}_3(\varepsilon, x)$ an Stelle von $\bar{x}_1(\varepsilon, x)$, so kann man $\|r_\varepsilon\|_\infty \in \mathcal{O}(\varepsilon^4)$ sowie $\|\delta x_\varepsilon\|_\infty \in \mathcal{O}(\varepsilon^4)$ zeigen.
2. Insbesondere gilt: Die Aussage von Lemma 18 gilt sinngemäß für alle $K \in \mathbb{N}$, d.h. die oben beschriebene formale asymptotische Entwicklung liefert Approximationen \bar{x}_K die immer konsistent und konvergent zur Ordnung K sind.
3. Zur Beweisstrategie: Lemma 7 impliziert, dass die Lösung des Anfangswertproblems beliebig oft nach ε differenziert werden kann. Insbesondere ist damit klar, dass

$$x(\varepsilon, t) = \sum_{k=0}^K \varepsilon^k \cdot x_k(t) + \mathcal{O}(\varepsilon^{K+1})$$

für jedes feste t gilt, wobei die Fehlerterme $\mathcal{O}(\varepsilon^{K+1})$ dann aber von t abhängen. Der Nachweis, dass diese Formel sogar uniform in t gilt, ist nicht trivial und benötigt entweder abstrakte Hilfsmittel aus der Funktionalanalysis oder eben konkrete Argumente wie im Beweis von Lemma 18.

4. Für dieses Beispiel sind die Approximationsresultate sehr gut und gelten weil die Differentialgleichung (2.36)₁ die folgenden zwei strukturellen Eigenschaften besitzt:
 - (a) die rechte Seite der Differentialgleichung ist analytisch in x und ε ,
 - (b) alle Funktionen x_k klingen exponentiell in der Zeit ab.

Unter schwächeren Voraussetzungen kann man im Allgemeinen nur sehr viel schwächere Aussagen (endliche Zeitintervalle, Entwicklungen von nur kleiner Ordnung) über die Konsistenz und Konvergenz von asymptotischen Entwicklungen erwarten.

Beispiel für eine Gleichung zweiter Ordnung

Wir betrachten nun das Anfangswertproblem

$$\ddot{y} + y + 2 \cdot \varepsilon \cdot \dot{y} = 0, \quad y|_{t=0} = +1, \quad \dot{y}|_{t=0} = -\varepsilon, \quad (2.48)$$

und beginnen wieder mit dem Ansatz

$$y(\varepsilon, t) = y_0(t) + \varepsilon \cdot y_1(t) + \varepsilon^2 \cdot y_2(t) + \dots \quad (2.49)$$

Durch Einsetzen und Gleichsetzen aller Terme mit derselben ε -Potenz ergibt sich nun in diesem Beispiel die folgende Hierarchie von Anfangswertproblemen zweiter Ordnung:

$\mathcal{O}(\varepsilon^0):$	$\ddot{y}_0(t) + y_0(t) = 0$	$y_0(0) = +1$	$\dot{y}_0(0) = 0$
$\mathcal{O}(\varepsilon^1):$	$\ddot{y}_1(t) + y_1(t) = -2 \cdot \dot{y}_0(t)$	$y_1(0) = 0$	$\dot{y}_1(0) = -1$
$\mathcal{O}(\varepsilon^2):$	$\ddot{y}_2(t) + y_2(t) = -2 \cdot \dot{y}_1(t)$	$y_2(0) = 0$	$\dot{y}_2(0) = 0$

Um die Anfangswertprobleme für die y_k zu lösen, bemerken wir zunächst, dass die allgemeine Lösung des inhomogenen Anfangswertproblems

$$\ddot{z}(t) + z(t) = b(t), \quad z(0) = \zeta_1, \quad \dot{z}(0) = \zeta_2$$

durch

$$\begin{aligned} z(t) &= \cos(t) \cdot \left(\zeta_1 - \int_0^t b(s) \sin(s) \, ds \right) + \sin(t) \cdot \left(\zeta_2 + \int_0^t b(s) \cos(s) \, ds \right) \\ &= \cos(t) \cdot \zeta_1 + \sin(t) \cdot \zeta_2 + \int_0^t b(s) \cdot \sin(t-s) \, ds \end{aligned}$$

gegeben ist (Nachrechnen!). Damit ergibt sich zu nullter Ordnung

$$y_0(t) = \cos(t),$$

zu erster Ordnung

$$\begin{aligned} y_1(t) &= \cos(t) \left(0 + 2 \int_0^t \dot{y}_0(s) \cdot \sin(s) \, ds \right) + \sin(t) \cdot \left(-1 - 2 \int_0^t \dot{y}_0(s) \cdot \cos(s) \, ds \right) \\ &= -2 \cdot \cos(t) \cdot \int_0^t \sin(s) \cdot \sin(s) \, ds - \sin(t) + 2 \cdot \sin(t) \cdot \int_0^t \sin(s) \cdot \cos(s) \, ds \\ &\quad - \cos(t) \cdot \left(t - \cos(t) \cdot \sin(t) \right) - \sin(t) + \sin(t)^3 \\ &= -t \cdot \cos(t) - \sin(t) + \sin(t) \cdot \left(\cos(t)^2 + \sin(t)^2 \right) \\ &= -t \cdot \cos(t) \end{aligned}$$

und zu zweiter Ordnung

$$y_2(t) = \dots = \frac{1}{2} \cdot t^2 \cdot \cos(t) + \frac{1}{2} \cdot t \cdot \sin(t).$$

Insgesamt erhalten wir also mit

$$\bar{y}_2(\varepsilon, t) = \cos(t) \cdot \left(1 - \varepsilon \cdot t + \frac{1}{2} \cdot \varepsilon^2 \cdot t^2 \right) + \sin(t) \cdot \left(\frac{1}{2} \cdot \varepsilon^2 \cdot t \right)$$

eine Kandidaten für eine Approximation zweiter Ordnung, und es stellt sich wie im ersten Beispiel die Frage, ob dieser Kandidat wirklich eine gute Approximation ist.

Lemma 19. *Sei $\varepsilon \in I := (-1, +1)$. Für alle $K \in \mathbb{N}$ und jedes feste $0 < T < \infty$, liefert das obige Approximationsverfahren eine Näherungslösung \bar{x}_k , die in $\text{BC}([0, T])$ sowohl konsistent als auch konvergent zur Ordnung K ist. Die Fehlerterme hängen jedoch von T ab.*

Wir wollen dieses Resultat nicht beweisen sondern nur erwähnen, dass man es entweder

1. mit Methoden wie im Beweis von Lemma 18,
2. mittels abstrakter Argumente aus der Theorie der dynamischen Systeme,
3. oder mit Hilfe einer Taylor-Entwicklung der exakten Lösung nach ε

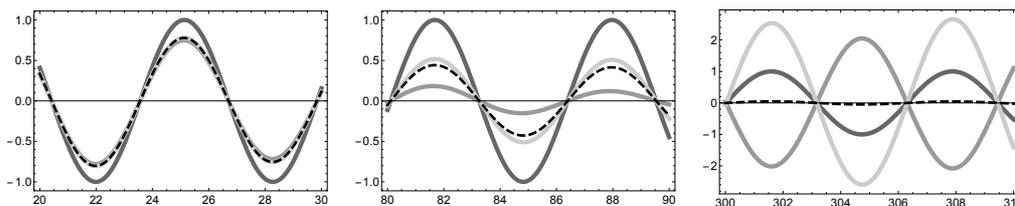


Abbildung 2.1: Exakte und approximative Lösungen des Anfangswertproblem (2.48) mit $\varepsilon = 0.01$: Die exakte Lösung (schwarz) ist zusammen mit den Approximationen \bar{x}_1 (Dunkelgrau), \bar{x}_2 (Mittelgrau) und \bar{x}_3 (Hellgrau) über verschiedenen Zeitintervallen dargestellt.

ableiten kann.

Die exakte Lösung des Anfangswertproblems (2.48) ist durch

$$y(\varepsilon, t) = \exp(-\varepsilon \cdot t) \cdot \cos\left(\sqrt{1 - \varepsilon^2} \cdot t\right)$$

gegeben, und wir wollen diese nun genauer mit den approximativen Lösungen vergleichen: Es ist nicht schwer zu sehen, dass eine asymptotische Analysis bis zur Ordnung ε^K eine approximative Lösung der Bauart

$$\bar{y}_K(\varepsilon, t) = \cos(t) \cdot P_K(\varepsilon, t) + \sin(t) \cdot Q_K(\varepsilon, t)$$

liefert, wobei P_K und Q_K Polynome in ε und t sind. Insbesondere gilt also

$$\lim_{t \rightarrow \infty} |y(\varepsilon, t)| = 0, \quad \limsup_{t \rightarrow \infty} |\bar{y}_K(\varepsilon, t)| = \infty,$$

d.h. jede Approximation \bar{y}_K hat ein vollkommen anderes Langzeitverhalten als die exakte Lösung. Wie in Lemma 19 formuliert und in Abbildung 2.1 angedeutet, gilt zwar für jedes feste T und jedes K die Konvergenz

$$\sup_{t \in [0, T]} |y(\varepsilon, t) - \bar{y}_K(\varepsilon, t)| \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0,$$

aber diese Konvergenz wird immer schlechter je größer T ist. Oder anders gesagt, um eine gute Approximation auf sehr großen Zeitintervallen $[0, T]$ zu erhalten, muss man K sehr gross machen und/oder ε sehr klein wählen. Es wird aber niemals gelingen, das Langzeitverhalten im Limes $\varepsilon \rightarrow 0$ richtig zu beschreiben. In diesem Zusammenhang beobachten wir auch, dass eine Taylor-Entwicklung der exakten Lösung nach sowohl ε als auch t mit

$$1 - \varepsilon \cdot t + \left(\varepsilon^2 - \frac{1}{2}\right) \cdot t^2 + \mathcal{O}(\varepsilon^3 + t^3)$$

eine noch viel schlechtere Approximation als die asymptotische Entwicklung nach ε liefert, da nun auch der Exponential- und der Kosinus-Term durch Polynome ersetzt werden.

Es gibt aber auch asymptotische Methoden, die das Langzeitverhalten richtig auflösen. Wir können diese hier nicht im Detail diskutieren sondern wollen nur erwähnen, dass man dazu den Ansatz (2.49) durch den *Mehrskalens-Ansatz*

$$y(\varepsilon, t) = y_0(t, \varepsilon \cdot t, \varepsilon^2 \cdot t, \dots) + \varepsilon \cdot y_1(t, \varepsilon \cdot t, \varepsilon^2 \cdot t, \dots) + \dots$$

ersetzen muss, bei dem die Koeffizienten y_k nun nicht mehr nur von t sondern auch noch von den reskalierten Zeiten $T_i := \varepsilon^i \cdot t$ abhängen.²⁸

²⁸Siehe zum Beispiel Mark H. Holmes, *Introduction to Perturbation Methods*, Springer.

Singulär gestörtes Randwertproblem und Grenzschichten

Alle bisher betrachteten Beispiele für Anfangwertprobleme waren regulär gestört in dem Sinne, dass eine asymptotische Entwicklung in Sinne von Definition 13 existierte. Wir wollen nun das Anfangwertproblem

$$\varepsilon \cdot \ddot{y} + \dot{y} + y = 0, \quad y|_{t=0} = 0, \quad \dot{y}|_{t=0} = 1, \quad (2.50)$$

studieren. Der kleine Störungsparameter ε steht diesmal vor der *höchsten* Ableitung und deshalb wird sich (2.50) als singulär gestörtes Problem erweisen.

Wir beginnen unsere Diskussion mit einem regulären asymptotischen Ansatz

$$y(\varepsilon, t) = y_0(t) + \varepsilon \cdot y_1(t) + \varepsilon^2 \cdot y_2(t) + \dots \quad (2.51)$$

und erhalten nach einigen elementaren Rechnungen die folgende Hierarchie von Anfangwertproblemen:

$$\begin{array}{l} \mathcal{O}(\varepsilon^0): \quad \dot{y}_0(t) + y_0(t) = 0 \qquad y_0(0) = 0 \qquad \dot{y}_0(0) = 1 \\ \hline \mathcal{O}(\varepsilon^1): \quad \dot{y}_1(t) + y_1(t) = -\ddot{y}_0(t) \qquad y_1(0) = 0 \qquad \dot{y}_1(0) = 0 \\ \mathcal{O}(\varepsilon^2): \quad \dot{y}_2(t) + y_2(t) = -\ddot{y}_1(t) \qquad y_2(0) = 0 \qquad \dot{y}_2(0) = 0 \end{array}$$

Im Gegensatz zu den bisherigen Beispielen erhalten wir diesmal zu nullter Ordnung ein *überbestimmtes* Anfangwertproblem, das aus einer Differentialgleichung *erster Ordnung* sowie *zwei* Anfangsbedingungen besteht. Man sieht nun leicht, dass es keine entsprechende Funktion y_0 geben kann: die allgemeine Lösung der Differentialgleichung lautet

$$y_0(t) = \zeta \exp(-t),$$

aber es gibt *keine* Wahl von ζ , so dass $y_0(0) = 0$ und $\dot{y}_0(0) = 1$ gilt.

Wir wollen nun genauer verstehen, ob und wie man für kleine ε eine gute Approximation der Lösung ableiten kann. Dazu bemerken wir, dass

$$y(\varepsilon, t) = \frac{2 \cdot \varepsilon}{\sqrt{1 - 4 \cdot \varepsilon}} \cdot \exp\left(-\frac{t}{2 \cdot \varepsilon}\right) \cdot \sinh\left(\frac{\sqrt{1 - 4 \cdot \varepsilon}}{2 \cdot \varepsilon} \cdot t\right) \quad (2.52)$$

eine explizite Formel für die exakte Lösung von (2.50) ist. Wir wollen nun diese Formel benutzen um Ideen zu entwickeln, die man auch bei anderen singulär gestörten Problemen (bei denen man die exakte Lösung in aller Regel nicht kennt) anwenden kann.

In Abbildung 2.2 sehen wir, dass die zeitliche Änderung der Lösung – also $\dot{y}(\varepsilon, t)$ – für kleine ε sehr steile Ableitungen in der Nähe von $t = 0$ aufweist und sehr schnell von 1 auf 0 abklingt. Wir sehen auch, dass dieser Abklingprozess mit kleinem ε immer schneller wird. Dies ist nicht überraschen, den setzen wir die Anfangsbedingungen in die Differentialgleichung ein, so erhalten

$$\ddot{y}(0) = \frac{-\dot{y}(0) - y(0)}{\varepsilon} = -\frac{1}{\varepsilon}.$$

Man sagt, die Lösung zum Anfangwertproblem (2.50) weist bei $t \approx 0$ eine *Grenzschicht* auf, in der sich – auf Grund der zu nullter Ordnung inkompatiblen Anfangsbedingungen – die Lösung und ihre zeitliche Ableitung *erheblich* ändern. Diese Grenzschicht

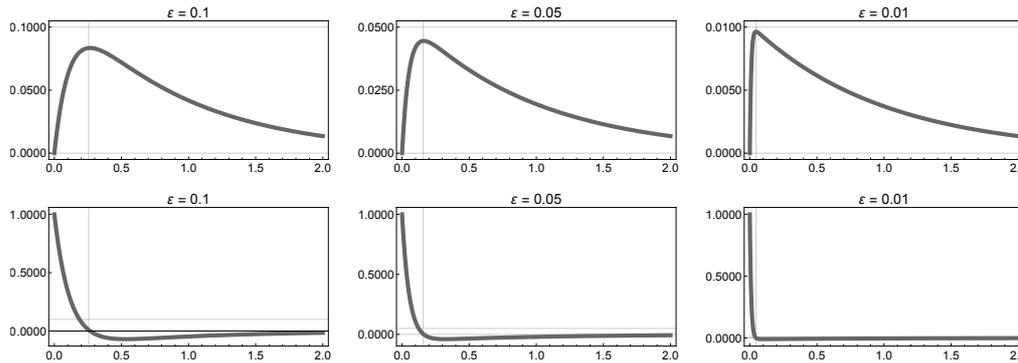


Abbildung 2.2: Lösung des Anfangswertproblems (2.50) mit verschiedenen Werten von ε über dem Zeitintervall $t \in [0, 2]$. Oben: $y(t, \varepsilon)$ als Funktion von t . Unten: $\partial_t y(t, \varepsilon)$ als Funktion von t .

verschwindet zwar im Limes $\varepsilon \rightarrow 0$, ist aber doch sehr wichtig und kann nicht vernachlässigt werden. Es liegt daher nahe, zunächst eine approximative Beschreibung für das Grenzschichtverhalten abzuleiten und diese dann mit Näherungsformeln für die Dynamik außerhalb der Grenzschicht zu kombinieren.

Asymptotik für die Grenzschicht (innere Entwicklung, inner expansion): Die wesentlich Idee ist, zunächst die Zeit und die Lösung innerhalb der Grenzschicht zu *reskalieren*. Dies führt auf den Ansatz

$$t = \varepsilon^\alpha \cdot T, \quad y(\varepsilon, t) = \varepsilon^\beta \cdot Y(\varepsilon, \varepsilon^{-\alpha} \cdot t) \quad (2.53)$$

wobei T bzw. Y die reskalierte Zeit bzw. Lösung bezeichnen und die Skalierungsexponenten α , β noch unbestimmt sind. Durch Einsetzen in die Differentialgleichung erhalten wir

$$\varepsilon^{1+\beta-2\alpha} \cdot \partial_T^2 Y(\varepsilon, T) + \varepsilon^{\beta-\alpha} \cdot \partial_T Y(\varepsilon, T) + \varepsilon^\beta \cdot Y(\varepsilon, T) = 0,$$

und die Anfangsbedingungen liefern

$$\varepsilon^\beta \cdot Y(\varepsilon, 0) = 0, \quad \varepsilon^{\beta-\alpha} \cdot \partial_T Y(\varepsilon, 0) = 1.$$

Unser Ziel ist es nun, α und β so zu wählen, dass wir die Dynamik von Y bzgl. T zu führender Ordnung in ε ablesen können bzw. durch eine reguläre asymptotische Entwicklung berechnen können. Im Allgemeinen kann es schwierig sein, α und β zu identifizieren, aber im konkreten Fall liefert die Wahl

$$\alpha = 1, \quad \beta = 1$$

das regulär gestörte Anfangswertproblem

$$\partial_T^2 Y(\varepsilon, T) + \partial_T Y(\varepsilon, T) + \varepsilon \cdot Y(\varepsilon, T) = 0, \quad Y(\varepsilon, 0) = 0, \quad \partial_T Y(\varepsilon, 0) = 1,$$

dessen Lösung in nullter Ordnung durch

$$Y(\varepsilon, T) = Y_0(T) + \mathcal{O}(\varepsilon), \quad Y_0 = 1 - \exp(-T)$$

approximiert werden kann. Im Kombination mit (2.53) erhalten wir damit

$$y(\varepsilon, t) \approx \varepsilon \cdot \left(1 - \exp\left(-\frac{t}{\varepsilon}\right) \right) \quad \text{für } t = \varepsilon T, \quad 0 < \varepsilon \ll 1, \quad T = \mathcal{O}(1) \quad (2.54)$$

als Beschreibung für die Grenzschicht (beachte, dass $T = \mathcal{O}(1)$ genau dann, wenn $t = \mathcal{O}(\varepsilon)$).

Asymptotik jenseits der Grenzschicht (äußere Entwicklung, outer expansion): Außerhalb der Grenzschicht soll y natürlich weiterhin eine Lösung der Differentialgleichung (2.50)₁ sein, aber wir brauchen nun nicht mehr die Randbedingungen zu erfüllen (dazu haben wir ja die Grenzschicht eingeführt). Wir können daher erwarten, dass wir y für alle hinreichend großen Zeiten durch einen Ansatz wie in (2.51) approximieren können. Zu nullter Ordnung muss dann $\dot{y}_0 + y_0(t) = 0$ bzw.

$$y_0(t) = c_\varepsilon \cdot \exp(-t),$$

gelten, wobei c_ε eine noch zu bestimmende Integrationskonstante ist (c_ε kann aber wegen der Grenzschicht nicht aus den Anfangsdaten bestimmt werden). Insgesamt erhalten wir mit

$$y(\varepsilon, t) \approx c_\varepsilon \cdot \exp(-t) \quad \text{für } t \gg \varepsilon T, 0 < \varepsilon \ll 1 \quad (2.55)$$

eine Näherungsformel für das Verhalten außerhalb der Grenzschicht.

Konsistenzbedingung (matching conditions): Wir haben nun mit (2.54) und (2.55) zwei verschiedene Approximationen abgeleitet, wobei die Konstante c_ε noch unbestimmt blieb.

Wir wollen nun c_ε so bestimmen, dass die innere und die äußere Einwicklung *zueinander passen*. Dazu bemerken wir, dass nach Konstruktion

$$Y_0(T) \xrightarrow{T \rightarrow \infty} \varepsilon, \quad y_0(t) \xrightarrow{t \rightarrow 0} c_\varepsilon$$

gilt, d.h. die innere Asymptotik liefert ε als den approximativen Wert von y am Ende der Grenzschicht, wohingegen die äußere Asymptotik c_ε als ungefähren Wert von ε unmittelbar hinter der Grenzschicht liefert. Beide Asymptotiken sind also nur dann *konsistent*, wenn wir c_ε durch

$$c_\varepsilon = \varepsilon$$

festlegen.

Kombinierte Entwicklung (combined expansion): Wir können die unterschiedlichen asymptotischen Formel für das Verhalten innerhalb und außerhalb der Grenzschicht wir folgt miteinander kombinieren: Man sieht leicht, dass die Formel

$$\bar{y}(\varepsilon, t) := \varepsilon \cdot Y_0\left(\frac{t}{\varepsilon}\right) + y_0(t) - \varepsilon = \varepsilon \cdot \left(\exp(-t) - \exp\left(-\frac{t}{\varepsilon}\right) \right) \quad (2.56)$$

sich für $t = \mathcal{O}(\varepsilon)$ auf $\bar{y}(\varepsilon, t) \approx \varepsilon Y_0(t/\varepsilon)$ reduziert, wohingegen wir für $t \in \mathcal{O}(1)$ mit $t \gg \varepsilon$ die Näherung $\bar{y}(\varepsilon, t) \approx \varepsilon \exp(-t)$ erhalten. Man sagt, (2.56) ist eine *kombiniert-asymptotische* Formel, da sie sowohl die innere als auch die äußere Asymptotik widerspiegelt und man deshalb

$$y(\varepsilon, t) \approx \bar{y}(\varepsilon, t)$$

erwarten kann. Insbesondere erlaubt es (2.56), die folgenden Nährungsformeln

$$\max y(\varepsilon, \cdot) \approx \varepsilon, \quad \operatorname{argmax} y(\varepsilon, \cdot) \approx -\varepsilon \ln \varepsilon$$

für das Maximum der exakten Lösung abzuleiten. Wir können hier nicht diskutieren, wie man die Konvergenz und Konsistenz der Formel (2.56) nachweisen kann, wollen aber erwähnen, dass sie für kleine ε eine sehr gute Approximation der exakten Lösung (2.52) liefert, siehe Abbildung 2.3.

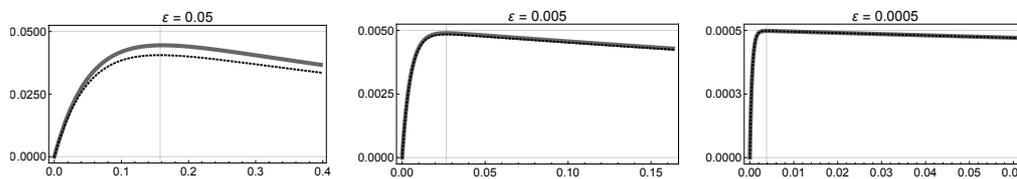


Abbildung 2.3: Exakte (grau) und approximative (schwarz) Lösung des Anfangswertproblems (2.50) für verschiedene Werten von ε auf einem jeweils anderen Zeitintervall.

2.4 Fourier-Methoden

In diesem Abschnitt ist x immer eine eindimensionale Ortsvariable und alle betrachteten Funktionen werden Werte in \mathbb{C} annehmen.

Exkurs über temperierte Distributionen

Eine umfassende Theorie der Fourier-Transformation kann nur innerhalb der *Theorie der temperierten Distributionen* entwickelt werden. Wir können hier die mathematischen Details nicht diskutieren, wollen aber kurz trotzdem kurz erklären, was eine temperierte Distribution²⁹ ist.

Grundlage aller Argumente ist der *Schwartz-Raum*³⁰

$$\mathcal{S}(\mathbb{R}) = \{\varphi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C} : \varphi \text{ ist glatt mit } \sup_{s \in \mathbb{R}} |s^m \cdot \varphi^{(k)}(s)| < \infty \text{ für alle } m, k \in \mathbb{N}\},$$

wobei wir sagen, eine Folge $(\varphi_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset \mathcal{S}(\mathbb{R})$ konvergiert in $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ für $n \rightarrow \infty$ gegen $\varphi_\infty \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$, falls

$$\sup_{s \in \mathbb{R}} |s^m \cdot (\varphi_n^{(k)}(s) - \varphi_\infty^{(k)}(s))| \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0 \quad \text{für alle } m, k \in \mathbb{N}.$$

Eine *temperierte Distribution* ψ ist eine lineare und stetige Abbildung $\mathcal{S}(\mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{C}$, aber man schreibt nicht $\psi(\varphi)$ für das Bild von $\varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ unter der Abbildung ψ sondern

$$\langle \psi | \varphi \rangle$$

und nennt dies die *Dualpaarung* der Distribution ψ mit der *Testfunktion* φ .³¹ Hierbei meint Linearität von ψ wie üblich

$$\langle \psi | \zeta_1 \cdot \varphi_1 + \zeta_2 \cdot \varphi_2 \rangle = \zeta_1 \cdot \langle \psi | \varphi_1 \rangle + \zeta_2 \cdot \langle \psi | \varphi_2 \rangle$$

für alle $\zeta_1, \zeta_2 \in \mathbb{C}$ und alle $\varphi_1, \varphi_2 \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$, und ψ heißt stetig, falls

$$\varphi_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \varphi_\infty \text{ in } \mathcal{S} \quad \implies \quad \langle \psi | \varphi_n \rangle \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \langle \psi | \varphi_\infty \rangle \text{ in } \mathbb{C}.$$

Die Menge aller temperierten Distributionen wird mit $\mathcal{S}'(\mathbb{R})$ bezeichnet. Außerdem konvergiert eine Folge $(\psi_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset \mathcal{S}'(\mathbb{R})$ von temperierten Distributionen gegen einen Grenzwert $\psi_\infty \in \mathcal{S}'(\mathbb{R})$, sofern

$$\langle \psi_n | \varphi \rangle \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \langle \psi_\infty | \varphi \rangle \quad \text{für alle } \varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$$

gilt. In diesem Fall spricht auch von *distributioneller Konvergenz*.

Obwohl das Konzept einer temperierten Distribution sehr abstrakt ist, kann man Distributionen als *verallgemeinerte Funktionen* auf \mathbb{R} betrachten. Wir wollen dies nun mit einigen heuristischen Argumenten verdeutlichen.

²⁹Temperierte Distributionen sind eigentlich ein Spezialfall allgemeiner Distributionen. Außerdem kann man temperierte Distributionen nicht nur auf \mathbb{R} sondern auch auf \mathbb{R}^d definieren.

³⁰Laurent Schwartz (1915 – 2002), französischer Mathematiker. Er begründete die mathematische Theorie der Distributionen und erhielt dafür 1950 die Fields-Medaille.

³¹Im Dirac-Kalkül der Quantenmechanik entspricht $\langle \psi |$ einem ‚bra‘, $|\varphi\rangle$ einem ‚ket‘ und $\langle \cdot | \cdot \rangle$ ist gerade die *bracket*.

Die erste wichtige Beobachtung ist, dass jede hinreichend reguläre Funktionen w – sagen wir, w ist mindestens stückweise stetig und wächst höchstens polynomial – auch eine temperierte Distribution ist, wobei die Dualpaarung durch

$$\langle w \mid \varphi \rangle := \int_{\mathbb{R}} w(s) \cdot \varphi(s) \, ds$$

gegeben ist. Darüber hinaus gibt auch Distributionen, die nicht durch Funktionen erzeugt werden. Prominentestes Beispiel ist die *Diracsche*³² *Delta-Distribution* in Punkt s_0 , die formal durch

$$\langle \delta_{s_0} \mid \varphi \rangle := \varphi(s_0)$$

definiert wird.

Die zweite wichtige Idee ist, dass man *jede* Distribution entweder als Funktion oder als *singulären* Grenzwert einer geeigneten Familie von Funktionen betrachten kann. Ist $\varrho \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ zum Beispiel nicht-negativ und integrierbar mit $\int_{\mathbb{R}} \varrho(s) \, ds$, so kann man für jedes $\varepsilon > 0$ die reskalierte Funktion

$$\varrho_{\varepsilon, s_0}(s) := \frac{1}{\varepsilon} \cdot \varrho\left(\frac{s - s_0}{\varepsilon}\right)$$

betrachten. Insbesondere gilt

$$\int_{\mathbb{R}} \varrho_{\varepsilon, s_0}(s) \, ds = 1$$

für alle $\varepsilon > 0$ sowie

$$\langle \varrho_{\varepsilon, s_0} \mid \varphi \rangle = \int_{\mathbb{R}} \varrho_{\varepsilon, s_0}(s) \cdot \varphi(s) \, ds \quad \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \quad \varphi(s_0) = \langle \delta_{s_0} \mid \varphi \rangle$$

für alle $\varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$, siehe Abbildung 2.4. In der Tat, mit Hilfe einer Integral-Transformation und der Taylor-Entwicklung von φ finden wir

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}} \varrho_{\varepsilon, s_0}(s) \cdot \varphi(s) \, ds &= \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{\varepsilon} \cdot \varrho\left(\frac{s - s_0}{\varepsilon}\right) \cdot \varphi(s) \, ds \\ &= \int_{\mathbb{R}} \varrho(\tilde{s}) \cdot \varphi(s_0 + \varepsilon \cdot \tilde{s}) \, d\tilde{s} \\ &= \int_{\mathbb{R}} \varrho(\tilde{s}) \cdot \left(\varphi(s_0) + \varphi'(s_0) \cdot \varepsilon \cdot \tilde{s} + \dots\right) \, d\tilde{s} \\ &= \varphi(s_0) \int_{\mathbb{R}} \varrho(\tilde{s}) \, d\tilde{s} + \varepsilon \cdot \varphi'(s_0) \int_{\mathbb{R}} \tilde{s} \varrho(\tilde{s}) \, d\tilde{s} + \dots \\ &= \varphi(s_0) + \mathcal{O}(\varepsilon). \end{aligned}$$

Die Dirac-Distribution δ_{s_0} kann also im distributionellen Sinne also als Grenzwert von $\varrho_{\varepsilon, s_0}$ betrachtet werden; in der Physik schreibt man daher häufig auch

$$\int_{\mathbb{R}} \delta_{s_0}(s) \cdot \varrho(s) \, ds \quad \text{an Stelle von} \quad \langle \delta_{s_0} \mid \varphi \rangle,$$

obwohl die linke Seite *kein* Integral ist und obwohl δ_{s_0} eigentlich *keine* Funktion, sondern nur eine Distribution ist.

³²Paul Adrien Maurice Dirac (1902–1984), britischer Physiker.

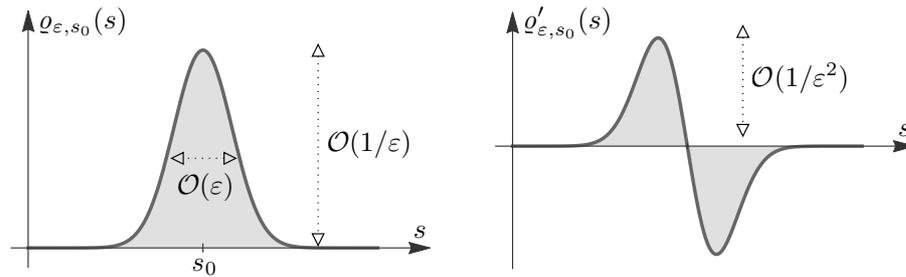


Abbildung 2.4: Die Funktion $\varrho_{\varepsilon, s_0}$ und ihre Ableitung, wobei $\int_{\mathbb{R}} \varrho_{\varepsilon, s_0}(s) \, ds = 1$. Im Limes $\varepsilon \rightarrow 0$ konvergieren ϱ_{ε} bzw. ϱ'_{ε} im Sinne der Distributionen gegen die Dirac-Distribution δ_{s_0} bzw. die Ableitung δ'_{s_0} derselben.

Diese Approximationsidee ist extrem fruchtbar und erlaubt es, viele der bekannten mathematischen Operationen auch für Distributionen zu definieren. Auf Grund der partiellen Integration gilt zum Beispiel

$$\int_{\mathbb{R}} \varrho'_{\varepsilon, s_0}(s) \cdot \varphi(s) \, ds = - \int_{\mathbb{R}} \varrho_{\varepsilon, s_0}(s) \cdot \varphi'(s) \, ds.$$

Im Limes $\varepsilon \rightarrow 0$ konvergiert die rechte Seite gegen $\langle \delta_{s_0} | \varphi' \rangle$ und es liegt nahe, den Grenzwert der linken Seite als die Ableitung der Dirac-Distribution δ_{s_0} zu bezeichnen. In diesem Sinne gilt

$$\langle \delta'_{s_0} | \varphi \rangle = - \langle \delta_{s_0} | \varphi' \rangle \quad \text{bzw.} \quad \int_{\mathbb{R}} \delta'_{s_0}(s) \cdot \varphi(s) \, ds = - \int_{\mathbb{R}} \delta_{s_0}(s) \cdot \varphi'(s) \, ds,$$

aber δ'_{s_0} existiert nicht im klassischen Sinne – also nicht als punktwiser Grenzwert von Differenzenquotienten – sondern nur in einem sehr verallgemeinerten, im distributionellen Sinne.

Definition 20 (Ableitung einer Distribution). *Für jede temperierte Distribution $\psi \in \mathcal{S}'(\mathbb{R})$ wird durch*

$$\langle \psi' | \varphi \rangle := - \langle \psi | \varphi' \rangle \tag{2.57}$$

eine weitere temperierte Distribution $\psi' \in \mathcal{S}'(\mathbb{R})$ definiert, die man die distributionelle Ableitung von ψ nennt.

Bemerkung. *Die distributionelle Ableitung ist in folgendem Sinne eine Verallgemeinerung der klassischen Ableitung :*

1. *Für jede stetig differenzierbare Funktion w ist die klassische Ableitung auch die distributionelle Ableitung.*
2. *Gilt $w_n \rightarrow \psi$ im Sinne der temperierten Distribution, so gilt auch $w'_n \rightarrow \psi'$ im Sinne der temperierten Distributionen.*

Insbesondere gilt mit (2.57) immer die Formel der partiellen Integration in einem verallgemeinerten Sinne.

Ein weiteres Beispiel ist die Funktion-Funktion sgn , die nicht stetig in 0 und daher nicht im klassischen Sinne differenzierbar ist. Sie ist aber auch Distribution mit

$$\langle \text{sgn} | \varphi \rangle = \int_{\mathbb{R}} \text{sgn}(s) \cdot \varphi(s) \, ds$$

und wir rechnen leicht nach, dass

$$\int_{\mathbb{R}} \operatorname{sgn}(s) \cdot \varphi'(s) \, ds = \int_0^{+\infty} \varphi'(s) \, ds - \int_{-\infty}^0 \varphi'(s) \, ds = -2 \cdot \varphi(0)$$

für jedes $\varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ erfüllt ist. Es gilt also

$$\langle \operatorname{sgn} \mid \varphi' \rangle = -\langle 2 \cdot \delta_0 \mid \varphi \rangle \quad \text{bzw.} \quad \int_{\mathbb{R}} \operatorname{sgn}(s) \cdot \varphi'(s) \, ds = - \int_{\mathbb{R}} 2 \cdot \delta_{s_0}(s) \cdot \varphi(s) \, ds$$

und daher

$$\operatorname{sgn}' = 2 \cdot \delta_0, \quad \operatorname{sgn}'' = 2 \cdot \delta_0'$$

im Sinne distributioneller Ableitungen. Man kann diese Formeln auch dadurch rechtfertigen, dass man sgn durch glatte Funktionen approximiert, zum Beispiel durch

$$\eta_\varepsilon(s) = \frac{2}{\pi} \cdot \arctan\left(\frac{x}{\varepsilon}\right),$$

und dann zum Grenzwert $\varepsilon \rightarrow 0$ übergeht; insbesondere gilt

$$\int_{\mathbb{R}} \eta_\varepsilon^{(k+1)}(s) \cdot \varphi(s) \, ds \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 2 \cdot \varphi^{(k)}(0)$$

für alle $\varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ und alle $k \in \mathbb{N}$.

Lemma 21 (Distributionelle Ableitung stückweise glatter Funktionen). *Die Funktion $w : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ besitze endliche viele Unstetigkeitsstellen s_1, s_2, \dots, s_M , so dass*

1. *w ist auf jedem der offenen Intervalle*

$$(-\infty, s_1), \quad (s_1, s_2), \quad \dots \quad (s_{M-1}, s_M), \quad (s_M, +\infty)$$

im klassischen Sinne stetig differenzierbar

2. *w besitzt in jeder Unstetigkeitsstelle sowohl einen linksseitigen als auch einen rechtsseitigen Grenzwert, so dass die i-te Sprunghöhe*

$$\alpha_i := \beta_i^{(+)} - \beta_i^{(-)}, \quad \beta_i^{(-)} := \lim_{\varepsilon \searrow 0} w(s - \varepsilon), \quad \beta_i^{(+)} := \lim_{\varepsilon \searrow 0} w(s + \varepsilon)$$

wohldefiniert ist,

3. *w(x) und die klassische Ableitung w'(x) wachsen höchstens polynomiell für $x \rightarrow \pm\infty$.*

Dann besitzt die distributionelle Ableitung von w einen regulären Anteil ϱ und einen singulären Anteil σ , d.h. es gilt $w' = \varrho + \sigma$ in $\mathcal{S}'(\mathbb{R})$, wobei die Funktion v stückweise durch

$$v(x) = w'(x) \quad \text{für alle} \quad x \in \mathbb{R} \setminus \{s_1, \dots, s_M\}$$

und die temperierte Distribution σ durch

$$\sigma = \alpha_1 \cdot \delta_{s_1} + \dots + \alpha_M \cdot \delta_{s_M}$$

definiert sind.

Beweis. Sei $\varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ beliebig aber fest. Aus dem Hauptsatz der Differential- und Integralrechnung auf dem Intervall (s_m, s_{m+1}) folgt

$$\int_{s_m}^{s_{m+1}} w(s) \cdot \varphi'(s) \, ds = - \int_{s_m}^{s_{m+1}} v(s) \cdot \varphi(s) \, ds + \varphi(s_{m+1}) \cdot \beta_{m+1}^{(-)} - \varphi(s_m) \cdot \beta_m^{(+)}$$

für alle $m = 1 \dots M-1$, sowie

$$\int_{-\infty}^{s_1} w(s) \cdot \varphi'(s) \, ds = +\beta_M^{(-)} \cdot \varphi(s_1), \quad \int_{s_M}^{+\infty} w(s) \cdot \varphi'(s) \, ds = -\beta_M^{(+)} \cdot \varphi(s_M),$$

wobei wir benutzt haben, dass $w(\pm\infty) \cdot \varphi(\pm\infty) = 0$ gilt. Außerdem gilt

$$\begin{aligned} \langle \psi | \varphi' \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} w(s) \cdot \varphi'(s) \, ds \\ &= \int_{-\infty}^{s_1} w(s) \cdot \varphi'(s) \, ds + \int_{s_1}^{s_2} w(s) \cdot \varphi'(s) \, ds + \dots + \int_{s_M}^{+\infty} w(s) \cdot \varphi'(s) \, ds \end{aligned}$$

und durch Umgruppieren der Terme erhalten wir

$$\langle \psi | \varphi' \rangle = 0 - \int_{-\infty}^{+\infty} v(s) \cdot \varphi(s) \, ds - \sum_{m=1}^{M-1} \alpha_m \cdot \varphi(s_m) = -\langle \varrho + \sigma | \varphi \rangle.$$

Die Behauptung folgt unmittelbar aus Definition 20 da φ beliebig war. \square

Die Theorie der temperierten Distributionen beruht ganz allgemein auf dem Konzept der *Dualität* zwischen Elementen des topologischen Raumes $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ und der Menge $\mathcal{S}'(\mathbb{R})$ aller linearen und stetigen Abbildungen $\mathcal{S}(\mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{C}$. Ganz salopp kann man sagen:

1. Die Elemente aus $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ – also die Testfunktionen – sind sehr regulär (Ableitungen existieren im klassischen Sinne und alle Ableitungen klingen sehr schnell für $s \rightarrow \pm\infty$ ab). Die Elemente aus $\mathcal{S}'(\mathbb{R})$ – also die temperierten Distributionen – müssen hingegen nicht regulär sein.
2. Die Konvergenz in $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ ist stark im Sinne von ‚sehr einschränkend‘ bzw. ‚sehr schwer nachzuweisen‘. Die Konvergenz in $\mathcal{S}'(\mathbb{R})$ ist hingegen sehr schwach, d.h. leicht zu zeigen bzw. schon aus sehr schwachen Voraussetzungen.

Einige Funktionenräume

Für die Darstellung der Fouriermethoden benötigen wir neben $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ und $\mathcal{S}'(\mathbb{R})$ noch die Lebesgue-Räume^{33,34}

$$L^p(I; \mathbb{C}) := \{w : I \rightarrow \mathbb{C} : w \text{ ist Lebesgue-messbar mit } \|w\|_p < \infty\}$$

die mit der jeweiligen p -Norm

$$\|w\|_p := \left(\int_I |w(s)|^p \, ds \right)^{1/p}, \quad \|w\|_\infty := \text{ess-sup}_{s \in I} |w(s)|$$

³³Henri Léon Lebesgue (1875–1941), französischer Mathematiker.

³⁴Wenn Sie nicht wissen, was ein Lebesgue-Raum ist: Salopp gesprochen enthält der Raum $L^p(I; \mathbb{C})$ (a) alle stückweise stetigen Funktionen $u : I \rightarrow \mathbb{C}$ die entweder beschränkt sind ($p = \infty$) oder deren Betrag p -fach integrierbar ist, sowie (b) alle Funktionen, die man als punktweise Grenzwerte der Funktionen aus (a) erhalten kann.

Banach-Räume sind, sowie

$$\text{BC}(I; \mathbb{C}) := \{w : I \rightarrow \mathbb{C} : w \text{ ist beschränkt und stetig}\},$$

der auch bzgl. der ∞ -Norm ein Banach-Raum ist. Hierbei gilt immer $p \in [1, \infty]$ und $I \subset \mathbb{R}$ ist ein Intervall (offen oder abgeschlossen, beschränkt oder unbeschränkt). Wir schreiben dabei häufig auch $L^p(I)$ statt $L^p(I; \mathbb{C})$.

In dem Abschnitt über Fourier-Reihen werden wir auch die Räume

$$L_L^2(\mathbb{R}; \mathbb{C}) := \{w : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C} : w \text{ ist } 2L\text{-periodisch und Leb.-messbar mit } \|w\|_p < \infty\}$$

betrachten, wobei $L > 0$ gegeben und die p -Norm nun durch

$$\|w\|_p := \left(\int_{-L}^{+L} |w(s)|^p \, ds \right)^{1/p}, \quad \|w\|_\infty := \text{ess-sup}_{s \in [-L, +L]} |w(s)|$$

definiert ist.³⁵ Außerdem sei

$$\ell^p(\mathbb{Z}; \mathbb{C}) = \{w : \mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{C} : \|w\|_p < \infty \text{ für alle } m, k \in \mathbb{N}\},$$

wobei

$$\|w\|_p := \left(\sum_{j \in \mathbb{Z}} |w_j|^p \right)^{1/p}, \quad \|w\|_\infty := \sup_{j \in \mathbb{Z}} |w_j|$$

die entsprechenden p -Normen liefert.

2.4.1 Fourier-Transformation

Mathematisch gesehen, sind die Fourier-Transformation³⁶ \mathcal{F} sowie ihre Inverse \mathcal{F}^{-1} (verallgemeinerte) Integraltransformationen, die jeweils für eine große Klasse von Funktionen definiert sind.

Die physikalische Sicht ist jedoch etwas anders: Es gibt neben der *Ortsvariablen* $x \in \mathbb{R}$ noch eine konjugierte Variable, die mit k bezeichnet und *Impulskoordinate* genannt wird. Die Idee ist dabei, dass jeder Wert von k der ebenen Welle

$$e^{-i \cdot k \cdot x} = \cos(k \cdot x) - i \cdot \sin(k \cdot x)$$

entspricht. Eine ausgesprochen wichtige und weitreichende Erkenntnis der Physik ist nun, dass sehr viele Funktionen u (in der Variablen x) in eindeutiger Weise als unendliche Superposition von ebenen Wellen dargestellt werden kann, wobei die entsprechenden Koeffizienten durch eine Funktion \hat{u} (in der Variablen k) ausgedrückt werden können.

Mit diesen Vorbemerkungen wollen wir nun die Fourier-Transformation \mathcal{F} und ihre inverse \mathcal{F}^{-1} formal wie folgt einführen.

³⁵Streng-genommen sollten die verschiedenen Varianten der p -Normen mit unterschiedlichen Symbolen bezeichnet werden, etwa $\|\cdot\|_{p,I}$ bzw. $\|\cdot\|_{p,\text{per},2L}$ für Funktionen auf I bzw. $2L$ -periodische Funktionen. Wir werden aber darauf verzichten um die Notationen möglichst einfach zu halten.

³⁶Jean Baptiste Joseph Fourier (1768–1830), französischer Mathematiker und Physiker.

Definition 22 (Formale Definition von \mathcal{F} und \mathcal{F}^{-1} für Funktionen auf \mathbb{R}). Die Fourier-Transformation \mathcal{F} und die Inverse Fourier-Transformation erfüllen die Formeln³⁷

$$u \xrightarrow{\mathcal{F}} \mathcal{F}u = \hat{u}, \quad \hat{u}(k) := \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} u(x) \cdot e^{+i \cdot k \cdot x} dx \quad (2.58)$$

und

$$v \xrightarrow{\mathcal{F}^{-1}} \mathcal{F}^{-1}v = \check{v}, \quad \check{v}(x) := \int_{\mathbb{R}} v(k) \cdot e^{-i \cdot k \cdot x} dk \quad (2.59)$$

für alle hinreichend regulären Funktionen u und v .

Dass die Operation \mathcal{F}^{-1} wirklich die inverse Transformation zu \mathcal{F} ist – dass also $\check{\check{u}} = u$ und $\hat{\hat{v}} = v$ gilt –, ist nicht so einfach zu sehen, kann aber damit begründet werden, dass

$$\frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} w(x) \cdot e^{\pm i \cdot k \cdot (y-x)} dk dx = w(y) \quad (2.60)$$

für alle hinreichend guten Funktionen w gilt.

Für die folgenden Betrachtungen ist es wichtig zu verstehen, dass bei Anwendung der Fourier-Transformation bzw. ihrer Inversen keine Information verloren geht. In diesem Sinne sind u und \hat{u} *konjugiert* bzw. *dual* zueinander und können als die verschiedenen Seiten ein und derselben Medaille betrachtet werden.³⁸ Wir werden daher von *Fourier-Paaren* (u, \hat{u}) bzw. (\check{v}, v) reden und schreiben oftmals auch

$$(u(x), \hat{u}(k)) \quad \text{bzw.} \quad (\check{v}(x), v(k))$$

um deutlich zu machen, dass x die Orts- und k die Impulsvariable ist.

Beispiel (Zum Unschärfepinzipp bei der Fourier-Transformation). Für jedes $\varepsilon > 0$ werden durch

$$u_\varepsilon(x) := \frac{1}{\sqrt{2\pi \cdot \varepsilon}} \exp\left(-\frac{x^2}{2 \cdot \varepsilon}\right), \quad \hat{u}_\varepsilon(k) := \frac{1}{2 \cdot \pi} \exp\left(-\frac{\varepsilon \cdot k^2}{2}\right) \quad (2.61)$$

und

$$\check{v}_\varepsilon(x) := \exp\left(-\frac{\varepsilon \cdot x^2}{2}\right), \quad v_\varepsilon(k) := \frac{1}{\sqrt{2\pi \cdot \varepsilon}} \exp\left(-\frac{k^2}{2 \cdot \varepsilon}\right) \quad (2.62)$$

zwei Fourier-Paare $(u_\varepsilon(x), \hat{u}_\varepsilon(k))$ und $(\check{v}_\varepsilon(x), v_\varepsilon(k))$ definiert, siehe Abbildung 2.5 und Lemma 28 zur Berechnung der Integrale. Insbesondere gilt

$$u_\varepsilon \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \delta_0, \quad \hat{u}_\varepsilon \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi}$$

und

$$\check{v}_\varepsilon \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 1, \quad v_\varepsilon \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \delta_0$$

im Sinne temperierter Distributionen.

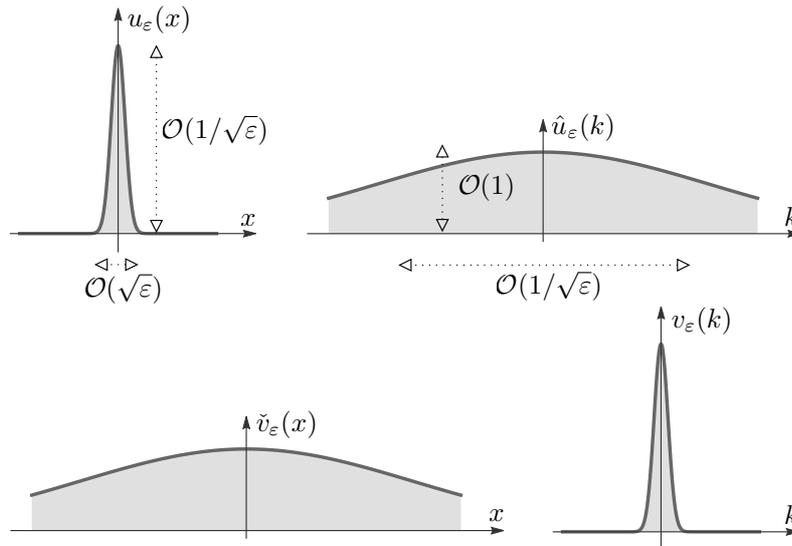


Abbildung 2.5: Die Funktionen aus (2.61) und (2.62) für kleine Werte von ε . Beachte, dass die Identitäten $\int_{\mathbb{R}} u_{\varepsilon}(x) dx = \int_{\mathbb{R}} v_{\varepsilon}(k) dk = 1$ sowie $\hat{u}_{\varepsilon}(0) = 1/(2\pi)$ und $\check{v}_{\varepsilon}(0) = 1$ gelten.

Die konkreten Beispiele in (2.61) und (2.62) illustrieren das folgende allgemeine Prinzip: Ist u (bzw. \hat{u}) sehr lokalisiert, so ist \hat{u} (bzw. u) nicht lokalisiert sondern ‚ausgeschmiert‘. In der Quantenmechanik wird dieses Prinzip die *Heisenbergsche Unschärferelation*³⁹ genannt.

Eine naheliegende aber auch delikate Frage ist nun, für welche Funktionen u die Fourier-Transformierte \hat{u} wohldefiniert ist, d.h. für welche Funktionen u das Integral in (2.58) für alle k in sinnvoller Weise definiert werden kann (analog für v und \mathcal{F}^{-1}). Mit dem Wissen aus den Grundvorlesungen zur Analysis sind zum Beispiel die Integrale für die konstante Funktion $u(x) \equiv \text{const}$ nicht definiert und man könnte meinen, dass konstante Funktion eben keine Fourier-Transformierte \hat{u} haben. Eine für die Physik fundamentale Erkenntnis ist aber, dass konstante Funktionen sehr wohl eine Fourier-Transformierte besitzen (nämlich Vielfache der Dirac-Distribution), nur muss man die Integrale in (2.58) und (2.59) in einem verallgemeinerten Sinne – d.h. in einem distributionellen Sinne – interpretieren.

Für Funktionen u bzw. v kann das wesentliche mathematische Resultat über die Existenz von \hat{u} bzw. \check{v} wie folgt formuliert werden.

Theorem 23 (Regularität der Fouriertransformation). *Für \mathcal{F} (und analog für \mathcal{F}^{-1}) gelten die folgenden Aussagen:*

1. Jede Funktion $u \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ besitzt eine Fourier-Transformierte $\hat{u} \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$.
2. Jede Funktion $u \in L^1(\mathbb{R})$ besitzt eine Fourier-Transformierte $\hat{u} \in BC(\mathbb{R})$.

³⁷Es gibt in der Literatur auch abweichende Definitionen, die aber letztlich nur einer Reskalierung von k entsprechen. In MATHEMATICA entspricht unsere Wahl der Option *Classical Physics* bzw. `FourierParameters` $\rightarrow \{-1, +1\}$. Mit fast denselben Formeln (nur der Vorfaktor $(2\pi)^{-1}$ muss durch $(2\pi)^{-d}$ ersetzt werden) kann man auch \mathcal{F} und \mathcal{F}^{-1} für Funktionen auf dem \mathbb{R}^d definieren, wobei dann immer $x \in \mathbb{R}^d$ und $k \in \mathbb{R}^d$ gilt und $x \cdot k$ das Skalar-Produkt von x und k meint.

³⁸In der Quantenmechanik ist dieses Konzept eng mit dem *Welle-Teilchen-Dualismus* verknüpft. Insbesondere entsprechen u bzw. \hat{u} der *Ortsdarstellung* bzw. der *Impulsdarstellung* einer Wellenfunktion. Die Dualität zwischen u und \hat{u} ist aber *nicht* die Dualität zwischen Funktionen und Distributionen.

³⁹Werner Karl Heisenberg (1901–1976), deutscher Physiker.

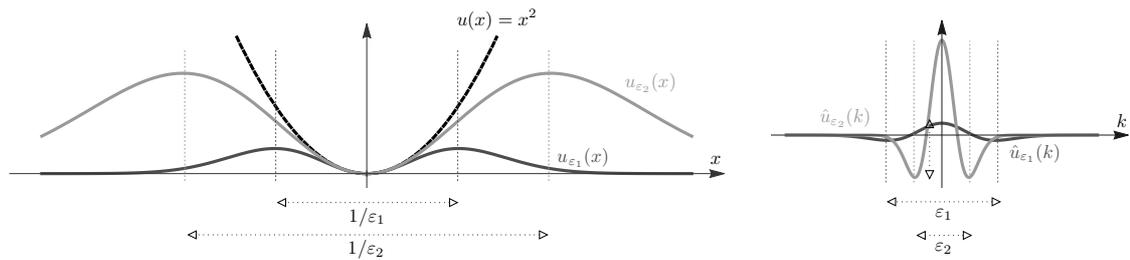


Abbildung 2.6: Die Fourier-Transformierte \hat{u} einer temperierten Distribution u kann als distributioneller Grenzwert von \hat{u}_ε betrachtet werden, wobei u_ε eine Familie von Schwarzfunktionen ist, die u approximiert. Hier dargestellt an der Distribution, die durch das Polynom $u(x) = x^2$ erzeugt wird.

3. Jede Funktion $u \in L^2(\mathbb{R})$ besitzt eine Fourier-Transformierte $\hat{u} \in L^2(\mathbb{R})$.

Insbesondere gilt die Plancherel-Identität⁴⁰

$$\int_{\mathbb{R}} u(x) \cdot \overline{\check{v}(x)} \, dx = 2 \cdot \pi \cdot \int_{\mathbb{R}} \hat{u}(k) \cdot \overline{v(k)} \, dk$$

für alle $u, v \in L^2(\mathbb{R})$, wobei \bar{z} die zu z konjugiert-komplexe Zahl ist.⁴¹

Bemerkung.

1. Nicht jede BC-Funktion ist die Fourier-Transformierte einer L^1 -Funktion, d.h. $\mathcal{F} : L^1(\mathbb{R}) \rightarrow \text{BC}(\mathbb{R})$ ist nicht surjektiv.
2. Besitzt u bzw. v einen kompakten Träger, so wird wegen dem Unschärfepinzipp der Träger von \hat{u} bzw. \check{v} nicht kompakt sein.
3. Auf Grund der Plancherel-Identität gilt $\|u\|_2 = \sqrt{2 \cdot \pi} \cdot \|\hat{u}\|_2$ für alle $u \in L^2(\mathbb{R})$. Insbesondere sind \mathcal{F} und \mathcal{F}^{-1} Isomorphismen von $L^2(\mathbb{R})$.
4. Die Plancherel-Identität kann für Schwarz-Funktionen $u, v \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ einfach mit Hilfe des Satzes von Fubini⁴² nachgerechnet werden. Insbesondere gilt

$$\langle u | \overline{\mathcal{F}^{-1}v} \rangle = 2 \cdot \pi \cdot \langle \mathcal{F}u | \bar{v} \rangle$$

bzw. nach Umstellung und Ersetzen von v durch \bar{v} auch

$$\langle \mathcal{F}u | v \rangle = \frac{1}{2 \cdot \pi} \cdot \langle u | \overline{\mathcal{F}^{-1}v} \rangle. \quad (2.63)$$

Man kann auch die Fourier-Transformation von temperierten Distributionen definieren, wobei man dann zwischen Distributionen im Ortsraum und Distributionen im Impulsraum unterscheiden muss. Insbesondere bezeichnen

$$\delta_{x_0}(x) \quad \text{bzw.} \quad \delta_{k_0}(k)$$

die Dirac-Distribution im Orts- bzw. Impulsraum.

⁴⁰Michel Plancherel (1885–1967), Schweizer Mathematiker.

⁴¹Es gilt also $\bar{z} = \text{Re}(z) - i \cdot \text{Im}(z)$.

⁴²Guido Fubini (1879–1943), italienischer Mathematiker.

Theorem 24 (Fourier-Transformation von temperierten Distribution). *Jede temperierte Distribution $u \in \mathcal{S}'(\mathbb{R})$ besitzt eine Fourier-Transformierte $\hat{u} \in \mathcal{S}'(\mathbb{R})$. Insbesondere gilt*

$$u_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} u_\infty \iff \hat{u}_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \hat{u}_\infty$$

im Sinne der Konvergenz von temperierten Distributionen. Analoges gilt für \mathcal{F}^{-1} .

Neben der bereits in der Formulierung der Aussage von Theorem 24 erwähnten Definition durch Approximation kann man auch die Fouriertransformation durch Dualität einführen: Die Formel (2.63) kann nämlich als Definition von $\mathcal{F}u \in \mathcal{S}'(\mathbb{R})$ für $u \in \mathcal{S}'$ verwendet werden, wobei die rechte Seite neben u nur die inverse Fouriertransformierte sowie die Konjugationsoperator bzgl. der Testfunktion $v \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ beinhaltet. Oder anders gesagt: Man verallgemeinert die Fouriertransformation gerade so, dass die Plancherel-Identität nicht nur für Funktionen u , sondern auch noch für Distributionen u gilt. Mit derselben Dualitätsstrategie hatten wir schon die Ableitung von Distributionen eingeführt (wobei die Formel der partiellen Integration die Stelle der Plancherel-Identität eingenommen hatte).

Nach Theorem 23 und Theorem 24 gibt es drei ‚natürliche‘ Räume für die Fourier-Analysis – nämlich den Schwartz-Raum, den L^2 -Raum und den Raum der temperierten Distributionen — denn es gilt

$$\begin{array}{ccccccc} \text{Ortsraum} & \mathcal{S}(\mathbb{R}) & \subsetneq & L^2(\mathbb{R}) & \subsetneq & \mathcal{S}'(\mathbb{R}) & \\ & \updownarrow & & \updownarrow & & \updownarrow & \mathcal{F} \text{ bzw. } \mathcal{F}^{-1} \\ \text{Impulsraum} & \mathcal{S}(\mathbb{R}) & \subsetneq & L^2(\mathbb{R}) & \subsetneq & \mathcal{S}'(\mathbb{R}) & \end{array}$$

wobei die Inklusionen zwischen den Räumen nach Definition gelten. Insbesondere kann man alle Argumente zunächst im kleinsten Raum $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ entwickeln bzw. überprüfen und dann in einem zweiten Schritt untersuchen, ob diese durch geeignete Approximationsargumenten auf die größeren Räume übertragen werden können.

Im Raum der temperierten Distributionen gelten die folgenden Identitäten, die entweder mit Approximationsargumenten, oder durch Dualitätsbeweise, oder durch die in Satz 26 formulierten Rechenregeln abgeleitet werden können (siehe unten).

Lemma 25 (Fourier-Paare im Sinne der Distributionen). *Im Sinne temperierter Distributionen sind auch*

1. $\left(x^m, (-i)^m \cdot \delta_0^{(m)}(k)\right)$ für jedes $m \in \mathbb{N}$,
2. $\left(\delta_0^{(m)}(x), \frac{(-i \cdot k)^m}{2 \cdot \pi}\right)$ für jedes $m \in \mathbb{N}$,
3. $\left(\text{sgn}(x), \frac{i}{\pi \cdot k}\right)$,
4. $\left(\sin(k_0 \cdot x), \frac{i}{2} \cdot \delta_{+k_0}(k) - \frac{i}{2} \cdot \delta_{-k_0}(k)\right)$ für alle $k_0 \in \mathbb{R}$,
5. $\left(\cos(k_0 \cdot x), \frac{1}{2} \cdot \delta_{+k_0}(k) + \frac{1}{2} \cdot \delta_{-k_0}(k)\right)$ für alle $k_0 \in \mathbb{R}$

Fourier-Paare.

Wir wollen nun einige wichtige Eigenschaften der Fourier-Transformation ableiten die es uns erlauben, mit Fourier-Transformierten von Funktionen oder temperierten Distributionen zu rechnen.

Satz 26 (Rechenregeln). *Ist $(u(x), \hat{u}(k))$ ein Fourier-Paar (im Sinne von Funktionen oder temperierten Distributionen), so sind auch*

$$(u'(x), -i \cdot k \cdot \hat{u}(k)), \quad (x \cdot u(x), -i \cdot \hat{u}'(k)) \quad (2.64)$$

und

$$(u(x - x_0), e^{+i \cdot k \cdot x_0} \cdot \hat{u}(k)), \quad (e^{-i \cdot k_0 \cdot x} \cdot u(x), \hat{u}(k - k_0)) \quad (2.65)$$

Fourier-Paare.

Beweis. Für alle hinreichend regulären Funktionen können die Formeln (2.64) einfach nachgerechnet werden. Mit Hilfe der partiellen Integration gilt zum Beispiel

$$(\mathcal{F}u')(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} u'(x) \cdot e^{+i \cdot k \cdot x} dx = -\frac{i \cdot k}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} u(x) \cdot e^{+i \cdot k \cdot x} dx = -i \cdot k \cdot \hat{u}(k)$$

für jede Funktion $u \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$. Umgekehrt, für $\hat{u} \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ gilt

$$(\mathcal{F}^{-1}\hat{u})(x) = \int_{\mathbb{R}} \hat{u}(k) \cdot e^{-i \cdot k \cdot x} dk = i \cdot x \cdot \int_{\mathbb{R}} \hat{u}'(k) \cdot e^{-i \cdot k \cdot x} dk = i \cdot x \cdot u(x)$$

und die zweite Formel in (2.64) folgt nach Multiplikation mit $-i$. Darüber hinaus gilt

$$\int_{\mathbb{R}} u(x - x_0) \cdot e^{+i \cdot k \cdot x} dx = \int_{\mathbb{R}} u(x) \cdot e^{+i \cdot k \cdot (x+x_0)} dx = e^{+i \cdot k \cdot x_0} \cdot \int_{\mathbb{R}} u(x) \cdot e^{+i \cdot k \cdot x} dx$$

sowie

$$\int_{\mathbb{R}} e^{-i \cdot k_0 \cdot x} \cdot u(x) \cdot e^{+i \cdot k \cdot x} dx = \int_{\mathbb{R}} u(x) \cdot e^{+i \cdot (k-k_0) \cdot x} dx$$

und dies liefert (2.65). Für nicht so gute Funktionen (oder gar Distributionen) braucht man Approximationsargumente um die Behauptungen nachzuweisen. \square

Wir wollen nun Satz 26 anwenden und die Formeln aus Lemma 25 nachrechnen. Dazu beginnen wir mit den beiden distributionellen Identitäten

$$u(x) = \delta_{x_0}(x) \iff \hat{u}(k) = \frac{1}{2 \cdot \pi} \cdot \int_{\mathbb{R}} \delta_{x_0}(x) \cdot e^{+i \cdot k \cdot x} dx = \frac{e^{+i \cdot k \cdot x_0}}{2 \cdot \pi} \quad (2.66)$$

und

$$v(k) = \delta_{k_0}(k) \iff \check{v}(x) = \int_{\mathbb{R}} \delta_{k_0}(k) \cdot e^{-i \cdot k \cdot x} dk = e^{-i \cdot k_0 \cdot x},$$

wobei wie schon oben bemerkt die Integrale nur in einem verallgemeinerten Sinne gelten und die zweite Implikation äquivalent ist zu

$$u(x) = e^{+i \cdot k_0 \cdot x} \iff \hat{u}(k) = \delta_{-k_0}(k). \quad (2.67)$$

Im distributionellen Sinne gilt nun

$$u(x) := x^m \cdot 1 \stackrel{(2.64)_2+(2.67)}{\implies} \hat{u}(x) = \left(-i \cdot \frac{d}{dk}\right)^m \delta_0(k) = (-1)^m \cdot \delta_0^{(m)}(k)$$

und

$$u(x) = \frac{d^m}{dx^m} \cdot \delta_0(x) \stackrel{(2.64)_1+(2.66)}{\implies} \hat{u}(k) = (-i \cdot k)^m \cdot \frac{1}{2 \cdot \pi}$$

und diese Identitäten implizieren die ersten beiden Formeln aus Lemma 25. Analog kann man mit

$$u(x) = \operatorname{sgn}(x) \implies u'(x) = 2 \cdot \delta_0(x) \stackrel{(2.64)_1+(2.66)}{\implies} -i \cdot k \cdot \hat{u}(k) = \frac{1}{\pi}$$

und

$$u(x) = \sin(k_0 \cdot x) = \frac{e^{+i \cdot k_0 \cdot x} - e^{-i \cdot k_0 \cdot x}}{2 \cdot i} \stackrel{(2.64)_1+(2.67)}{\implies} \hat{u}(k) = \frac{\delta_{-k_0}(k) - \delta_{+k_0}(k)}{2 \cdot i}$$

auch die anderen Formeln aus Lemma 25 ableiten.

Eine weitere wichtige Anwendung betrifft *Faltungsintegrale*.

Satz 27 (Faltungsformel). *Für alle hinreichend regulären Fourier-Paare (u_1, v_1) und (u_2, v_2) gilt*

$$\left((u_1 \cdot u_2)(x), (v_1 * v_2)(k) \right), \quad \left((u_1 * u_2)(x), \frac{(v_1 \cdot v_2)(k)}{2\pi} \right), \quad (2.68)$$

wobei die Funktionen $u_1 \cdot u_2$ und $u_1 * u_2$ durch

$$(u_1 \cdot u_2)(x) = u_1(x) \cdot u_2(x), \quad (u_1 * u_2)(x) = \int_{\mathbb{R}} u_1(\tilde{x}) \cdot u_2(x - \tilde{x}) \, d\tilde{x}$$

definiert sind und analoge Formeln für $v_1 \cdot v_2$ und $v_1 * v_2$ gelten.

Beweis. Im Falle von $u_i, v_i \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ kann dies wieder nachgerechnet werden. Für jedes $x \in \mathbb{R}$ gilt zum Beispiel (mit $\bar{k} := k - \tilde{k}$ in der Integraltransformation) die Formel

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}} \left(\int_{\mathbb{R}} v_1(\tilde{k}) \cdot v_2(k - \tilde{k}) \, d\tilde{k} \right) \cdot e^{-i \cdot k \cdot x} \, dx \\ &= \int_{\mathbb{R}^2} v_1(\tilde{k}) \cdot v_2(k - \tilde{k}) \cdot e^{-i \cdot k \cdot x} \, d\tilde{k} \, dk \\ &= \int_{\mathbb{R}^2} v_1(\tilde{k}) \cdot v_2(\bar{k}) \cdot e^{-i \cdot \bar{k} \cdot x - i \cdot \tilde{k} \cdot x} \, d\tilde{k} \, d\bar{k} \\ &= \left(\int_{\mathbb{R}} v_1(\tilde{k}) \cdot e^{-i \cdot \tilde{k} \cdot x} \, d\tilde{k} \right) \cdot \left(\int_{\mathbb{R}^2} v_2(\bar{k}) \cdot e^{-i \cdot \bar{k} \cdot x} \, d\bar{k} \right) \end{aligned}$$

und damit

$$\mathcal{F}^{-1}(v_1 * v_2) = (\mathcal{F}^{-1}v_1) \cdot (\mathcal{F}^{-1}v_2).$$

Für nicht so reguläre Fourier-Paare benötigt man wieder Approximationsargumente. \square

In Satz 27 ist es wichtig, dass mindestens ein Fourier-Paar hinreichend regulär ist. Das Produkt zweier Dirac-Distributionen ist zum Beispiel nicht definiert: das sieht man in gewisser Weise auch schon an (2.68), denn wenn $\delta_0(x) \cdot \delta_0(x)$ irgendeinen Sinn hätte, so müßte die entsprechende Fourier-Transformierte die Faltung der konstanten Funktion $1/(2\pi)$ mit der konstanten Funktion 1 sein. Das Ergebnis könnte aber nur die konstante Funktion mit Wert $+\infty$ sein, aber diese Funktion hat keinerlei mathematischen Sinn.

Eine spezielle Folgerung aus (2.68) ist

$$\delta_0 * \varphi = \varphi * \delta_0 = \varphi$$

für alle Funktionen φ , d.h. δ_0 ist das neutrale Element des *Faltungsproduktes* $*$.

Abschließend wollen wir noch ein technisches Hilfsresultat ableiten.

Lemma 28 (Einige Integrale). *Es gilt*

$$\begin{aligned} C(a, b) &:= \int_{\mathbb{R}} \cos(b \cdot k) \cdot \exp(-a \cdot k^2) \, dk = \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{a}} \cdot \exp\left(-\frac{b^2}{4 \cdot a}\right), \\ S(a, b) &:= \int_{\mathbb{R}} \sin(b \cdot k) \cdot \exp(-a \cdot k^2) \, dk = 0 \end{aligned}$$

für alle Parametern $a \in \mathbb{R}_+$ und $b \in \mathbb{R}$.

Beweis. Da der Sinus eine ungerade Funktion ist, sieht man sofort dass $S(a, b) = 0$ gilt, aber es bleibt $C(a, b)$ zu berechnen. Es gilt

$$\begin{aligned} \partial_b C(a, b) &= - \int_{\mathbb{R}} \sin(b \cdot k) \cdot k \cdot \exp(-a \cdot k^2) \cdot dk \\ &= \frac{1}{2 \cdot a} \int_{\mathbb{R}} \sin(b \cdot k) \cdot \frac{d}{dk} (\exp(-a \cdot k^2)) \, dk \\ &= -\frac{b}{2 \cdot a} \int_{\mathbb{R}} \cos(b \cdot k) \cdot \exp(-a \cdot k^2) \, dk = -\frac{b}{2 \cdot a} \cdot C(a, b). \end{aligned}$$

Wir können diese parametrisierte gewöhnliche Differentialgleichung zu

$$C(a, b) = C(a, 0) \cdot \exp\left(-\frac{b^2}{4 \cdot a}\right)$$

integrieren, wobei

$$C(a, 0) = \int_{\mathbb{R}} \exp(-a \cdot k^2) \, dk = \frac{1}{\sqrt{a}} \int_{\mathbb{R}} \exp(-s^2) \, ds = \sqrt{\frac{\pi}{a}}.$$

Insgesamt erhalten wir damit die Behauptung. \square

2.4.2 Anwendungen auf Partielle Differentialgleichungen

Wir wollen in diesem Abschnitt die Fourier-Transformation benutzen, um einfache partielle Differentialgleichungen in gewöhnliche Differentialgleichungen umzuwandeln. Leider kann nicht jede Differentialgleichung so gelöst werden, sondern die Fourier-Methode kann im Allgemeinen nur unter den folgenden Voraussetzungen angewendet werden:

1. Es gibt eine Ortsvariable x , die Werte in ganz \mathbb{R} annimmt (*Ganzraumlösung*).
2. Es gibt eine weitere skalare Variable t (meist die Zeit).
3. Die Gleichung ist linear und homogen und enthält nur Ableitungen nach x und t .
4. Die Koeffizienten in der Gleichung sind entweder konstant oder hängen höchstens von t ab.

Diffusions- bzw. Wärmeleitgleichung im \mathbb{R}^1

Unser erstes Beispiel ist das Anfangswertproblem für die lineare *Diffusionsgleichung* (bzw. die lineare *Wärmeleitgleichung*⁴³), d.h. wir suchen eine Funktion u in t und x , so dass

$$\partial_t u(t, x) - \partial_x^2 u(t, x) = 0, \quad u(0, x) = f(x), \quad t \geq 0, \quad x \in \mathbb{R}, \quad (2.69)$$

wobei die Funktion f als bekannt vorausgesetzt werden darf und hinreichend regulär sei.

Die wesentliche Idee ist, für jede Zeit t die Fourier-Transformierte von u als Funktion in x zu betrachten. Genauer gesagt: wir betrachten wir jedes t das Fourier-Paar

$$\left(u(t, x), \hat{u}(t, k) \right)$$

und wollen zunächst verstehen, was das Anfangswertproblem (2.69) für die Evolution von \hat{u} bedeutet. Wir wollen alle technischen Schwierigkeiten ignorieren und argumentieren heuristisch bzw. formal. Alle Argumente können aber im Rahme der Distributionentheorie rigoros begründet werden.

Da die Fourier-Transformation bzw. ihre Inverse nur die x -Abhängigkeit bzw. die k -Abhängigkeit betrifft, müssen die zeitlichen Änderungen von u und \hat{u} konsistent sein, d.h.

$$\partial_t u(t, x) \quad \text{entspricht} \quad \partial_t \hat{u}(t, k).$$

Oder anders gesagt: für jedes t ist $(\partial_t u(t, x), \partial_t \hat{u}(t, k))$ ein Fourier-Paar. Die x -Ableitungen transformieren sich jedoch anders, denn wie wir in Satz 26 gesehen hatten gilt:

$$\partial_x u(t, x) \quad \text{entspricht} \quad -i \cdot k \cdot \hat{u}(t, k)$$

sowie

$$\partial_x^2 u(t, x) \quad \text{entspricht} \quad (-i \cdot k)^2 \cdot \hat{u}(t, k) = -k^2 \cdot \hat{u}(t, k).$$

Mit anderen Worten: Durch Anwendung der Fourier-Transformation wird aus der partiellen Differentialgleichung in (2.69) die *parametrisierte gewöhnliche Differentialgleichung*

$$\partial_t \hat{u}(t, k) + k^2 \cdot \hat{u}(t, k) = 0, \quad (2.70)$$

⁴³Mathematisch gesehen sind die lineare Wärmeleitgleichung und die lineare Diffusionsgleichung identisch. Beide Modelle besitzen aber unterschiedliche physikalische Interpretationen und werden auf verschiedene Weisen hergeleitet.

bei der $k \in \mathbb{R}$ die Rolle eines Parameters spielt. Damit haben wir das Problem *vereinfacht*: Aus einer partiellen Differentialgleichung im Ortsraum wurde eine gewöhnliche Differentialgleichung im Impulsraum.

Wir können die Differentialgleichung (2.70) für jedes k lösen und erhalten

$$\hat{u}(t, k) = e^{-k^2 \cdot t} \cdot \hat{u}(0, k),$$

wobei

$$\hat{u}(0, k) = \hat{f}(k)$$

auf Grund der Anfangsbedingung in (2.69) gilt. Durch Anwendung der inversen Fourier-Transformation ergibt sich damit

$$\begin{aligned} u(t, x) &= \int_{\mathbb{R}} \hat{f}(k) \cdot e^{-k^2 \cdot t - i \cdot k \cdot x} dk \\ &= \int_{\mathbb{R}} \left(\frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} f(\tilde{x}) \cdot e^{i \cdot k \cdot \tilde{x}} d\tilde{x} \right) \cdot e^{-k^2 \cdot t - i \cdot k \cdot x} dk \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} f(\tilde{x}) \cdot e^{-k^2 \cdot t - i \cdot k \cdot x + i \cdot k \cdot \tilde{x}} dk d\tilde{x} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} f(\tilde{x}) \left(\int_{\mathbb{R}} e^{-k^2 \cdot t - i \cdot k \cdot x + i \cdot k \cdot \tilde{x}} dk \right) d\tilde{x} \\ &= \int_{\mathbb{R}} f(\tilde{x}) \cdot K(t, x - \tilde{x}) d\tilde{x}. \end{aligned}$$

Hierbei ist

$$K(t, x) := \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} e^{-k^2 \cdot t - i \cdot k \cdot x} dk = \frac{1}{\sqrt{4 \cdot \pi \cdot t}} \exp\left(-\frac{x^2}{4 \cdot t}\right) \quad (2.71)$$

K der sogenannte *Wärmeleitkern* bzw. die *Fundamentallösung der Wärmeleitgleichung*, wobei letzte Identität in (2.71) aus Lemma 28 folgt. Wir haben damit das folgende klassische Resultat abgeleitet.

Satz 29 (Lösung der Wärmeleitgleichung auf dem Gesamtraum). *Für jede hinreichend reguläre Funktion f ist durch*

$$u(t, \cdot) = f * K(t, \cdot), \quad (2.72)$$

die einzige physikalisch sinnvolle Lösung zum Anfangswertproblem (2.69) gegeben, wobei $$ die Faltung bzgl. x meint. Insbesondere ist u immer reell-wertig sofern f reell-wertig ist.*

Bemerkung.

1. Es kann für gegebenes f weitere Lösungen der Wärmeleitgleichung geben, aber diese sind physikalisch nicht sinnvoll, da sie für $x \rightarrow \pm\infty$ und /oder $t \rightarrow \infty$ zu schnell wachsen.
2. In den Übungsaufgaben werden wir wichtige Konsequenzen aus der Lösungsformel (2.72) ableiten.

3. K ist nach Konstruktion selbst Lösung der Wärmeleitgleichung, d.h. es gilt

$$\partial_t K(t, x) - \partial_x^2 K(t, x) = 0$$

im Sinne klassischer Ableitungen für alle $x \in \mathbb{R}$ und alle $t > 0$. Darüber hinaus gilt (mit $\bar{x} = x/\sqrt{4 \cdot \pi \cdot t}$ in der Integraltransformation)

$$\int_{\mathbb{R}} K(t, x) dx = \frac{1}{\sqrt{4 \cdot \pi \cdot t}} \cdot \int_{\mathbb{R}} \exp\left(-\frac{x^2}{4 \cdot t}\right) dx = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot \int_{\mathbb{R}} \exp(-\bar{x}^2) d\bar{x} = 1$$

sowie

$$K(t, \cdot) \xrightarrow{t \rightarrow 0} \delta_0$$

im Sinne temperierter Distributionen.

Wir haben bei der Herleitung des Satzes 29 stillschweigend einige Annahmen gemacht, nämlich (i) dass die Fourier-Transformation mit der Zeit-Ableitung vertauscht werden darf, und (ii) dass die üblichen Transformationsregeln für Integrale gelten. Streng genommen muss man diese Annahmen natürlich durch Theorem ersetzen, aber dies würde hier den Rahmen sprengen.

Wellengleichung auf dem Gesamtraum

Unser zweites Beispiel ist das Anfangswertproblem für die *Wellengleichung*, d.h. wir suchen u als Lösung von

$$\partial_t^2 u(t, x) - \partial_x^2 u(t, x) = 0, \quad u(0, x) = f(x), \quad \partial_t u(0, x) = g(x), \quad (2.73)$$

wobei f, g sind zwei gegebene Funktionen sind und wieder $x \in \mathbb{R}$ sowie $t \geq 0$ gelten soll. Analog zu oben können wir die entsprechende Gleichung im Impulsraum ableiten und erhalten die parametrisierte gewöhnliche Differentialgleichung

$$\partial_t^2 \hat{u}(t, k) + k^2 \cdot \hat{u}(t, k) = 0.$$

Deren allgemeine Lösung ist durch

$$\hat{u}(t, k) = \exp(-i \cdot k \cdot t) \cdot v_1(k) + \exp(+i \cdot k \cdot t) \cdot v_2(k) \quad (2.74)$$

gegeben, wobei die Anfangsbedingungen aus (2.73) die Identitäten

$$\hat{f}(k) = v_1(k) + v_2(k), \quad \hat{g}(k) = -i \cdot k \cdot v_1(k) + i \cdot k \cdot v_2(k)$$

implizieren. Bzgl. der Ortsvariablen x meint dies (siehe Lemma 26)

$$f(x) = \check{v}_1(x) + \check{v}_2(x), \quad g(x) = \check{v}'_1(x) - \check{v}'_2(x)$$

und eine einfache Rechnung ergibt

$$\begin{aligned} \check{v}_1(x) &= \frac{1}{2} \left(f(x) + \int_0^x g(\tilde{x}) d\tilde{x} \right) + C, \\ \check{v}_2(x) &= \frac{1}{2} \left(f(x) - \int_0^x g(\tilde{x}) d\tilde{x} \right) - C \end{aligned} \quad (2.75)$$

mit einer Integrationskonstanten C , die aber am Ende herausfallen wird.

Wir können nun alle bisherigen Teilresultate wie folgt zusammensetzen: Mit der inversen Fourier-Transformation wird (2.74) in die Formel

$$\begin{aligned} u(t, x) &= \int_{\mathbb{R}} v_1(k) \cdot e^{-i \cdot k \cdot t - i \cdot k \cdot x} dk + \int_{\mathbb{R}} v_2(k) \cdot e^{+i \cdot k \cdot t - i \cdot k \cdot x} dk \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} \check{v}_1(\tilde{x}) \cdot e^{+i \cdot k \cdot (\tilde{x} - t - x)} d\tilde{x} dk + \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} v_2(\tilde{x}) \cdot e^{+i \cdot k \cdot (\tilde{x} - x + t)} d\tilde{x} dk \end{aligned}$$

überführt, die mit Hilfe von (2.60) zu

$$u(t, x) = \check{v}_1(x + t) + \check{v}_2(x - t)$$

vereinfacht werden kann. Wegen (2.75) erhalten wir schließlich das folgende klassische Ergebnis.

Satz 30 (*d'Alembert-Formel*⁴⁴ für die Lösung der Wellengleichung im \mathbb{R}^1). *Für alle sinnvollen Anfangsbedingungen f und g ist durch*

$$u(t, x) = \frac{f(x - t) + f(x + t)}{2} + \frac{1}{2} \int_{x-t}^{x+t} g(\tilde{x}) d\tilde{x} \quad (2.76)$$

die eindeutige Lösung des Anfangswertproblems (2.73) gegeben.

Bemerkung.

1. Satz 30 kann auch anders – d.h. ohne Fourier-Transformation – abgeleitet werden und besitzt eine sehr intuitive Interpretation (Übungsaufgabe).
2. Die rechte Seite in der d'Alembert-Formel-Formel (2.76) kann auch für Funktionen f und g ausgewertet werden, die nicht differenzierbar oder sogar unstetig sind. In diesem Fall ist die linke Seite – also u – im Allgemeinen auch nicht differenzierbar und kann daher keine klassische Lösung von (2.73) sein. Die so erhaltene Funktion wird aber immer noch eine distributionelle Lösung der Wellengleichung sein, also (2.73) in einem verallgemeinerten Sinne erfüllen.
3. Im Gegensatz zur Diffusionsgleichung besitzt die Wellengleichung eine endliche Ausbreitungsgeschwindigkeit. Insbesondere gilt: Ist der Träger von f und g in der Menge $\{x \in \mathbb{R} : |x| \leq C\}$ enthalten, so ist der Träger von $u(t, \cdot) \subset \{x \in \mathbb{R} : |x| \leq C + t\}$.

⁴⁴Jean-Baptiste le Rond, genannt D'Alembert (1717–1783), französischer Mathematiker, Physiker und Philosoph. Er war einer der Herausgeber der *Encyclopédie ou Dictionnaire raisonné des sciences, des arts et des métiers*, meist einfach die Enzyklopädie genannt.

2.4.3 Fourier-Reihen

Eine wichtige Klasse von Funktionen, die man nicht im klassischen aber im distributionellen Sinne Fourier-transformieren kann, sind periodische Funktionen. Die wesentliche Beobachtung in diesem Zusammenhang kann wie folgt formuliert werden.

Satz 31 (Fourier-Transformation periodischer Funktionen). *Sei u eine $2L$ -periodische Funktion auf \mathbb{R} . Dann existiert \hat{u} im Sinne temperierter Distributionen und es gilt*

$$\hat{u}_j(k) = \sum_{j \in \mathbb{Z}} \mu_j \cdot \delta_{k_j}(k), \quad (2.77)$$

wobei

$$k_j := \frac{j \cdot \pi}{L} \quad (2.78)$$

und $\mu_j \in \mathbb{C}$ geeignete Gewichte sind, die für $j \rightarrow \pm\infty$ hinreichend schnell abklingen.

Man kann diese Aussage dieses Satz auch wie folgt verstehen: Ist u eine $2L$ -periodische Funktion, so sind die Integrale in (2.58) nicht wohl-definiert (weder im Riemann- noch im Lebesgues-Sinne). Man kann aber die periodische Funktion u durch Schwartz-Funktionen $u_\varepsilon \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ mit

$$u_\varepsilon(x) := u(x) \cdot \theta(\varepsilon \cdot x)$$

approximieren, wobei $\theta \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ gegeben ist und $\varepsilon > 0$ einen kleinen Parameter bezeichnet. Für hinreichend reguläres u und jedes $\varepsilon > 0$ ist Fourier-Transformierte $\hat{u}_\varepsilon \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ nun im klassischen Sinne wohldefiniert und kann – im Prinzip jedenfalls bzw. durch numerische Integration – berechnet werden. Man wird dann immer – siehe Abbildung 2.7 – beobachten, dass sich \hat{u}_ε in der Nähe der k_j 's aus (2.78) konzentrieren wird, wobei die Details von dem Abschneideprofil θ abhängen werden. Insbesondere kann \hat{u}_ε als die abzählbare Summe von ‚Peaks‘ betrachtet werden, wobei die Höhe bzw. Dicke des Peaks bei $k \approx k_j$ sich wie $1/\varepsilon$ bzw. ε skalieren werden. Das Integral des j -ten Peaks ist dabei zu führender Ordnung in ε gerade durch die Konstante $\mu_j \in \mathbb{C}$ aus (2.77) gegeben. Die Konzentration von \hat{u}_ε ist sehr einfach zu verstehen, denn Werte k_j aus (2.78) erfüllen

$$e^{i \cdot k_j \cdot (x+2 \cdot L)} = e^{i \cdot k_j \cdot x} \quad \text{für alle } x \in \mathbb{R}$$

und entsprechen genau den Werten von k , für die die ebene Welle $\exp(i \cdot k \cdot x)$ eine $2L$ -periodisch Funktion in x beschreibt. Oder anders gesagt: Die Fourier-Transformierte einer $2L$ -periodischen Funktion beinhaltet nur ebene Wellen, die selbst $2L$ -periodisch sind.

Für praktische Zwecke ist es sinnvoll, die Folge der Gewichte μ_j aus Satz 31 mit der temperierte Distribution \hat{u} zu identifizieren und \hat{u}_j statt μ_j zu schreiben. In diesem Sinne gilt:

$$\begin{array}{c} u \text{ ist } 2L\text{-periodische Funktion in } x \in \mathbb{R} \\ \updownarrow \\ \hat{u} \text{ ist Folge mit Index } j \in \mathbb{Z} \end{array}$$

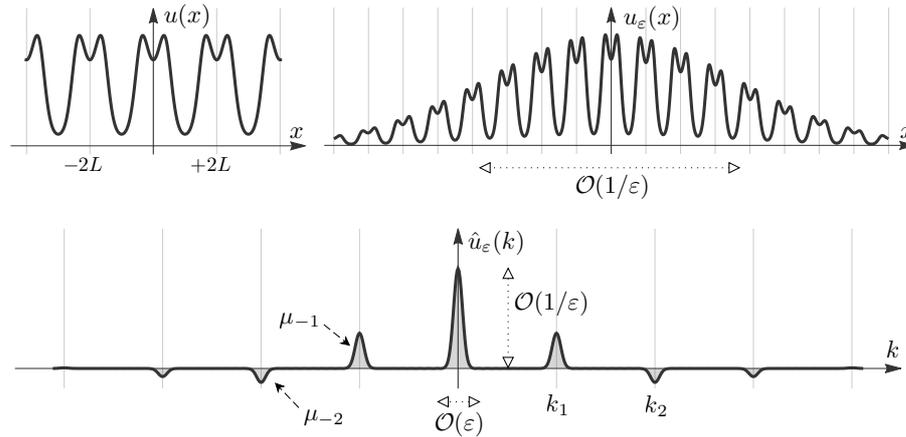


Abbildung 2.7: Links oben: Graph der $2L$ -periodischen Funktion u . Rechts oben: Graph von u_ε . Unten: Der Graph von \hat{u}_ε bildet in der Nähe von $k = k_j$ einen ‚Peak‘ aus, der im Limes ε durch die Dirac-Distributionen $\mu_j \cdot \delta_{k_j}(k)$ beschrieben werden kann.

Fourier-Reihen periodischer Funktionen

Definition 32 (Formale Definition von \mathcal{F} und \mathcal{F}^{-1} für $2L$ -periodische Funktionen). Die Fourier-Transformierte einer $2L$ -periodischen und lokal-integrierbare Funktion u ist durch die Formel

$$u \xrightarrow{\mathcal{F}} \mathcal{F}u = \hat{u}, \quad \hat{u}_j := \frac{1}{2L} \int_{-L}^{+L} u(x) \cdot e^{+i \cdot k_j \cdot x} dx$$

gegeben, wobei die Wellenzahlen k_j wie in (2.78) definiert sind, und

$$v \xrightarrow{\mathcal{F}^{-1}} \mathcal{F}^{-1}v = \check{v}, \quad \check{v}(x) := \sum_{j \in \mathbb{Z}} v_j \cdot e^{-i \cdot k_j \cdot x} dx$$

beschreibt in diesem Kontext die inverse Transformation \mathcal{F}^{-1} . Wir bezeichnen die Paare $(u(x), \hat{u}_j)$ bzw. $(\check{v}(x), v_j)$ als $2L$ -periodische Fourier-Paare und nennen

$$\sum_{j \in \mathbb{Z}} \hat{u}_j \cdot e^{-i \cdot k_j \cdot x}$$

die Fourier-Reihe von u und \hat{u}_j den j -ten Fourier-Koeffizienten⁴⁵ von u .

Bemerkung. Beachte: u und \check{v} sind $2L$ -periodische Funktionen (im Argument x und mit Werten in \mathbb{C}), \hat{u} und v sind Folgen auf \mathbb{Z} (mit Index j und mit Werten in \mathbb{C}).

Auch in diesem Fall gilt $\mathcal{F}^{-1} \circ \mathcal{F} = \text{id}$ und $\mathcal{F} \circ \mathcal{F}^{-1} = \text{id}$. Die erste Identität ist wieder alles andere als trivial, aber die zweite kann für alle hinreichend guten v aus den Orthogonalitätsrelationen

$$\frac{1}{2L} \int_{-L}^{+L} e^{-i \cdot k_m \cdot x} \cdot e^{i \cdot k_n \cdot x} dx = \delta_n^m = \begin{cases} 1 & \text{für } n = m \\ 0 & \text{für } n \neq m \end{cases},$$

⁴⁵Die Fourier-Reihe ist also eine Reihe von Funktionen in x , wohingegen die Fourier-Koeffizienten eine Folge über dem Index $j \in \mathbb{Z}$ sind.

wie folgt abgeleitet werden: Sei v_j gegeben (wobei j_j für $j \rightarrow \infty$ hinreichend schnell abklingen möge) und sei $u(x) := \check{v}(x)$. Durch Nachrechnen verifizieren wir

$$\hat{u}_j = \frac{1}{2L} \int_{-L}^{+L} \hat{v}(x) \cdot e^{i \cdot k_j \cdot x} dx = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{v_n}{2L} \int_{-L}^{+L} e^{+i \cdot k_n \cdot x} \cdot e^{i \cdot k_j \cdot x} dx = \sum_{n \in \mathbb{Z}} v_n \cdot \delta_j^n = v_j$$

für all $j \in \mathbb{Z}$, d.h. es gilt $\hat{u} = v$ und damit $\hat{\check{v}} = v$.

Das erste mathematische Resultat betrifft die Wohldefiniertheit sowie die Eigenschaften der Fourier-Koeffizienten.

Satz 33 (Regularität der Fourier-Koeffizienten). *Es gelten die folgenden Aussagen:*

1. Jede Funktion $u \in \mathbf{L}_L^2(\mathbb{R})$ besitzt eine Fourier-Transformierte $\hat{u} \in \ell^2(\mathbb{Z})$, und jede Folge $v \in \ell^2(\mathbb{Z})$ besitzt eine inverse Fourier-Transformierte $\check{v} \in \mathbf{L}_L^2(\mathbb{R})$.
2. Jede Funktion $u \in \mathbf{L}_L^1(\mathbb{R})$ besitzt eine Fourier-Transformierte $\hat{u} \in \ell^\infty(\mathbb{Z})$.
3. Jede Folge $v \in \ell^1(\mathbb{Z}; \mathbb{C})$ besitzt eine inverse Fourier-Transformierte $\check{v} \in \mathbf{L}_L^\infty(\mathbb{R})$.

Insbesondere gilt die Plancherel-Identität

$$\frac{1}{2 \cdot L} \int_{-L}^L u(x) \cdot \overline{\check{v}(x)} dx = \sum_{j \in \mathbb{Z}} \hat{u}_j \cdot \bar{v}_j$$

für alle $u \in \mathbf{L}_L^2(\mathbb{R})$ und $v \in \ell^2(\mathbb{Z})$.

Bemerkung.

1. Auf Grund der Plancherel-Identität gilt

$$\frac{1}{2L} \int_{-L}^L |u(x)|^2 dx = \sum_{j \in \mathbb{Z}} |\hat{u}_j|^2$$

für alle $u \in \mathbf{L}_L^2(\mathbb{R})$.

2. Die $2L$ -periodischen Funktionen können in natürlicher Weise mit den Funktionen auf der Einheitszelle $I_L := [-L, L)$ identifiziert werden, denn jede Funktion auf \mathbb{R} kann auf I_L eingeschränkt werden und jede Funktion auf I_L kann in eindeutiger Weise zu einer $2L$ -periodischen Funktion auf \mathbb{R} fortgesetzt werden.
3. Man kann auch wieder mit periodischen Distributionen rechnen, aber in diesem Abschnitt werden wir uns auf Funktionen beschränken. Insbesondere sind wir vor allem an Funktionen interessiert, die $2L$ -periodisch und stückweise stetig sind und damit auch zu $\mathbf{L}_L^2(\mathbb{R})$ gehören.

Mit periodischen Fourier-Paaren kann man im Prinzip genauso so rechnen wie mit Fourier-Integralen.

Satz 34 (Rechenregeln). *Ist $(u(x), \hat{u}_j)$ ein $2L$ -periodisches Fourier-Paar, so sind auch*

$$(u(x - x_0), e^{+i \cdot k_j \cdot x_0} \cdot \hat{u}_j), \quad (e^{-i \cdot k_{j_0} \cdot x} \cdot u(x), \hat{u}_{k_j - j_0})$$

$2L$ -periodische Fourier-Paare. Ist darüber hinaus u stetig und stückweise stetig-differenzierbar, so ist auch

$$(u'(x), -i \cdot k_j \cdot \hat{u}_j)$$

ein $2L$ -periodische Fourier-Paar.

Beweis. Alle Behauptungen können einfach nachgerechnet werden (Übungsaufgabe). \square

Ein neuer Aspekt bei der Fourier-Transformation periodischer Funktionen sind Fragen nach der Konvergenz der Fourier-Reihe bzw. der entsprechenden Folge von Partialsummen.

Theorem 35 (Konvergenz der Fourier-Reihe). *Für jedes $u \in \mathbf{L}_L^2(\mathbb{R})$ hat*

$$u_n(x) := \sum_{|j| \leq n} \hat{u}_j \cdot e^{-i \cdot k_j \cdot x} \quad \text{mit} \quad n \in \mathbb{N} \quad (2.79)$$

die folgenden Eigenschaften:

1. Es gilt

$$\frac{1}{2L} \int_{-L}^{+L} |u(x) - u_n(x)|^2 dx = \sum_{|j| \geq n+1} |\hat{u}_j|^2 \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0,$$

d.h. die Fourier-Reihe von u konvergiert absolut in $\mathbf{L}_L^2(\mathbb{R})$ gegen u .

2. In jedem Punkt $x \in \mathbb{R}$ gilt

$$u_n(x) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \frac{1}{2} \lim_{\varepsilon \searrow x} u(x + \varepsilon) + \frac{1}{2} \lim_{\varepsilon \searrow x} u(x - \varepsilon),$$

sofern sowohl ein linksseitiger als auch einen rechtsseitiger Grenzwert existieren.

3. Ist u darüber hinaus stetig auf dem offenen Intervall I , so gilt

$$\sup_{x \in J} |u(x) - u_n(x)| \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0,$$

für jedes abgeschlossene Intervall $J \subset I$, d.h. die Fourier-Reihe von u konvergiert gleichmäßig auf I und damit absolut in $\mathbf{BC}(J)$ gegen u .

Insbesondere tritt das sogenannte Gibbs-Phänomen⁴⁶

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} \sup_{x \in \mathbb{R}} |u(x) - u_n(x)| > 0$$

auf, sofern u in mindestens einem Punkt unstetig ist.

Beweis. Die erste bzw. die dritte Behauptung folgt aus der Plancherel-Identität bzw. aus dem Satz von Stone-Weierstraß^{47,48}.

Die zweite Behauptung wollen wir der Einfachheit halber an dem konkreten und 2π -periodischen Beispiel

$$u(x) = 1 - \frac{x}{\pi} + 2 \left\lfloor \frac{x}{2\pi} \right\rfloor$$

⁴⁶Josiah Willard Gibbs (1839–1903), US-amerikanischer Physiker.

⁴⁷Marshall Harvey Stone (1903–1989), US-amerikanischer Mathematiker

⁴⁸Karl Theodor Wilhelm Weierstraß (1815–1897), deutscher Mathematiker.

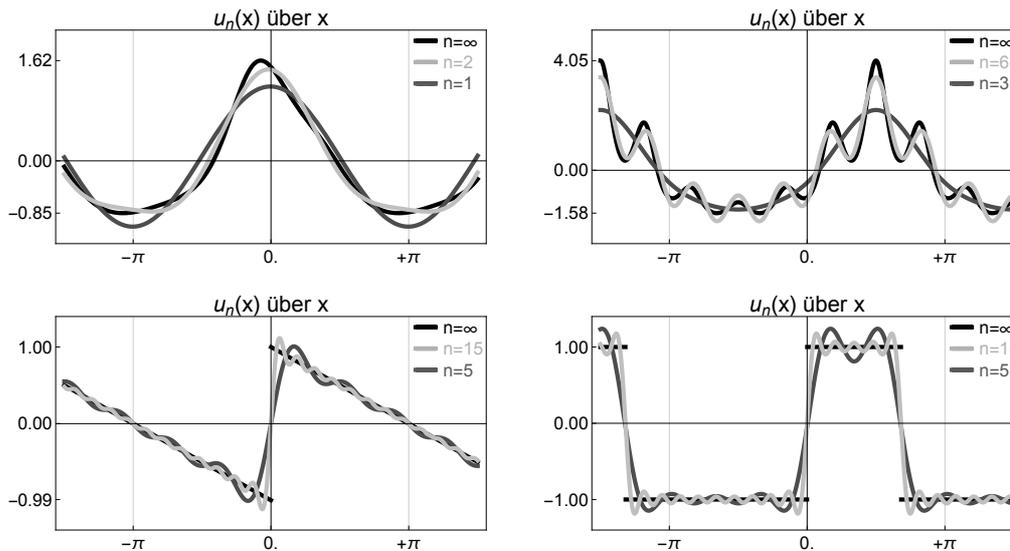


Abbildung 2.8: Vier Beispiele für Fourier-Reihen von 2π -periodischen Funktionen $u = u_\infty$ mit u_n wie in (2.79): *Oben:* Für glatte Funktionen u konvergiert u_n für $n \rightarrow \infty$ sogar gleichmäßig gegen u , also bzgl. der ∞ -Norm. *Unten:* Ist u unstetig, so konvergiert u_n nicht gleichmäßig aber immer noch punktweise fast überall und bzgl. der 2-Norm gegen u .

verstehen, wobei $\lfloor y \rfloor := \max\{k \in \mathbb{Z} : k \leq y\}$ der ganzzahlige Anteil von z ist, siehe Abbildung 2.8. Da

$$u(x) = -u(-x) = \frac{\pi - x}{\pi} \quad \text{für alle } x \in (0, \pi),$$

erhalten wir

$$\begin{aligned} \hat{u}_j &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} u(x) \cdot (\cos(j \cdot x) + i \cdot \sin(j \cdot x)) dx = \frac{i}{\pi} \int_0^\pi u(x) \cdot \sin(j \cdot x) dx \\ &= \frac{i}{\pi^2} \int_0^\pi (\pi - x) \cdot \sin(j \cdot x) dx \end{aligned}$$

und damit

$$\hat{u}_j = -\hat{u}_{-j} = \begin{cases} 0 & \text{für } j = 0 \\ \frac{i}{\pi \cdot j} & \text{für } j \neq 0 \end{cases}.$$

Auf Grund von

$$u_n(0) = \sum_{|j| \leq n} \hat{u}_j \cdot e^{i \cdot j \cdot 0} = \hat{u}_0 + \sum_{k=1}^n (\hat{u}_{-k} + \hat{u}_{+k}) = 0, \quad \lim_{\varepsilon \searrow 0} u(x \pm \varepsilon) = \pm 1$$

folgt nun die dritte Behauptung mit $x_* = 0$ in unserem Spezialfall. \square

Bemerkung (Glattheit und Konvergenzgeschwindigkeit). *Je glatter die Funktion u ist, desto schneller konvergiert die Fourier-Reihe. Ist u zum Beispiel m -mal stetig-differenzierbar, so ist $\partial_x^m u \in \mathbb{L}_L^2(\mathbb{R})$, und die Plancherel-Identität kombiniert mit Satz 34 garantiert*

$$\sum_{j \in \mathbb{Z}} |k_j^m \cdot \hat{u}_j|^2 = \frac{\|\partial_x^m u\|_2^2}{2L} < \infty.$$

Damit gilt auch auch

$$\|u - u_n\|_2^2 \leq 2L \sum_{|j|>n} |\hat{u}_j|^2 \leq \frac{2L}{|k_{n+1}|^{2m}} \sum_{|j|>n} |k_j^m \cdot \hat{u}_j|^2 \leq \frac{1}{n^{2m}} \cdot \frac{L^{2m} \cdot \|\partial_x^m u\|_2^2}{\pi^{2m}},$$

d.h. $\|u - u_n\|_2 = \mathcal{O}(1/n^m)$.

Für die untenstehenden Betrachtungen sowie für viele praktische Zwecke sind die folgenden beiden Resultate nützlich.

Lemma 36 (Symmetrie-Eigenschaften). *Sei (u, \hat{u}) ein $2L$ -periodisches Fourier-Paar und sei u stückweise stetig. Dann gilt*

1. *Ist u reell-wertig und gerade, so \hat{u} reell-wertig und gerade und es gilt*

$$\hat{u}_0 = \frac{1}{L} \int_0^L u(x) dx, \quad \hat{u}_{+j} = \hat{u}_{-j} = \frac{1}{L} \int_0^L u(x) \cdot \cos(k_j \cdot x) dx$$

für alle $j \in \mathbb{N}_+$.

2. *Ist u reell-wertig und ungerade, so \hat{u} imaginär-wertig und ungerade und es gilt*

$$\hat{u}_0 = 0, \quad \hat{u}_{+j} = -\hat{u}_{-j} = \frac{i}{L} \int_0^L u(x) \cdot \sin(k_j \cdot x) dx$$

3. *Ist u imaginär-wertig und gerade, so \hat{u} imaginär-wertig und gerade.*

4. *Ist u imaginär-wertig und ungerade, so \hat{u} reell-wertig und ungerade.*

Dabei meint gerade bzw. ungerade für u wie üblich $u(x) = u(-x)$ bzw. $u(x) = -u(-x)$ für alle $x \in \mathbb{R}$.

Beweis. Übungsaufgabe. □

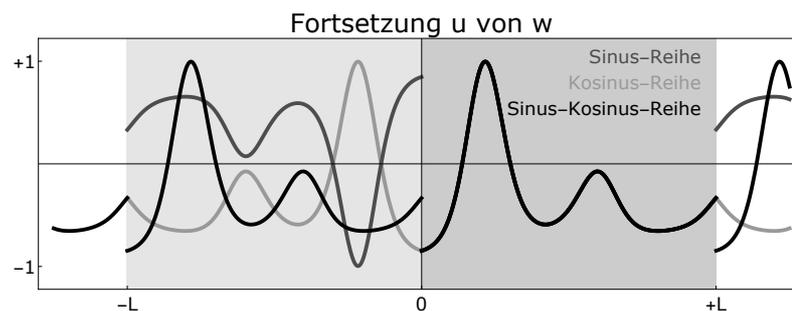


Abbildung 2.9: Die verschiedenen Reihen in Theorem 38 entsprechen unterschiedlichen Fortsetzungen u von w : Kosinus-Reihe: gerade und $2L$ -periodisch, Sinus-Reihe: ungerade und $2L$ -periodisch, Sinus-Kosinus-Reihe: L -periodisch.

Lemma 37 (Fourier-Reihe reell-wertiger und $2L$ -periodischer Funktionen). *Ist u reell-wertig, stückweise stetig und $2L$ -periodisch, so gilt*

$$u(x) = \alpha_0 + \sum_{j=1}^{\infty} 2 \cdot \alpha_j \cdot \cos(k_j \cdot x) + 2 \cdot \beta_j \cdot \sin(k_j \cdot x) \quad (2.80)$$

im Sinne absoluter L^2 -Konvergenz, wobei

$$\alpha_j = \frac{1}{2L} \int_{-L}^{+L} u(x) \cdot \cos(k_j \cdot x) dx, \quad \beta_j = \frac{1}{2L} \int_{-L}^{+L} u(x) \cdot \sin(k_j \cdot x) dx$$

für alle $j \in \mathbb{N}_+$. Ist u sogar stetig, so gilt (2.80) auch im Sinne vom gleichmäßiger Konvergenz.

Beweis. Wegen $k_{+j} = k_{-j}$ gilt

$$\begin{aligned} u(x) &= \hat{u}_0 \cdot 1 + \sum_{j=1}^{\infty} (\hat{u}_{+j} \cdot e^{-i \cdot k_j \cdot x} + \hat{u}_{-j} \cdot e^{+i \cdot k_j \cdot x}) \\ &= \hat{u}_0 \cdot 1 + \sum_{j=1}^{\infty} (\hat{u}_{+j} + \hat{u}_{-j}) \cdot \cos(k_j \cdot x) - i \sum_{j=1}^{\infty} (\hat{u}_{+j} - \hat{u}_{-j}) \cdot \sin(k_j \cdot x) \end{aligned}$$

und aus

$$\begin{aligned} \hat{u}_{+j} + \hat{u}_{-j} &= \frac{1}{2L} \int_{-L}^{+L} u(x) \cdot (e^{+i \cdot k_j \cdot x} + e^{-i \cdot k_j \cdot x}) dx \\ &= \frac{2}{2L} \int_{-L}^{+L} u(x) \cdot \cos(k_j \cdot x) dx = 2 \cdot \alpha_j \end{aligned}$$

sowie

$$\begin{aligned} -\hat{u}_{+j} + \hat{u}_{-j} &= \frac{1}{2L} \int_{-L}^{+L} u(x) \cdot (-e^{+i \cdot k_j \cdot x} + e^{-i \cdot k_j \cdot x}) dx \\ &= -\frac{2i}{2L} \int_{-L}^{+L} u(x) \cdot \sin(k_j \cdot x) dx = -2 \cdot i \cdot \beta_j \end{aligned}$$

folgt die Behauptung. □

Fourier-Reihen für Funktionen auf Intervallen

Bisher haben wir in diesem Abschnitt nur periodische $2L$ -Funktionen betrachtet. In vielen praktischen Fällen – insbesondere bei der Behandlung von Rand-Anfangswert-Problemen für lineare partielle Differentialgleichungen – ist man aber an Funktionen interessiert, die nur auf einem Intervall der Länge L definiert sind und darüber hinaus auch noch Bedingungen am linken und rechten Rand des Intervalls erfüllen. Wir wollen nun verstehen, wie man die Untersuchung solcher Funktionen durch geeignete Fortsetzungsargumente auf die Fourier-Analyse $2L$ -periodischer Funktionen zurückführen kann. Das wesentliche mathematische Resultat in diesem Zusammenhang betrifft reellwertige Funktionen und kann wie folgt formuliert werden.

Theorem 38 (Fourier-Reihe, Fourier-Kosinus-Reihe und Fourier-Sinus-Reihe). *Jede stückweise stetige und reellwertige Funktion w auf dem Intervall $[0, L]$ kann auf die folgenden drei Weisen als Reihe dargestellt werden, wobei $k_j = j \cdot \pi/L$ wie in (2.78):*

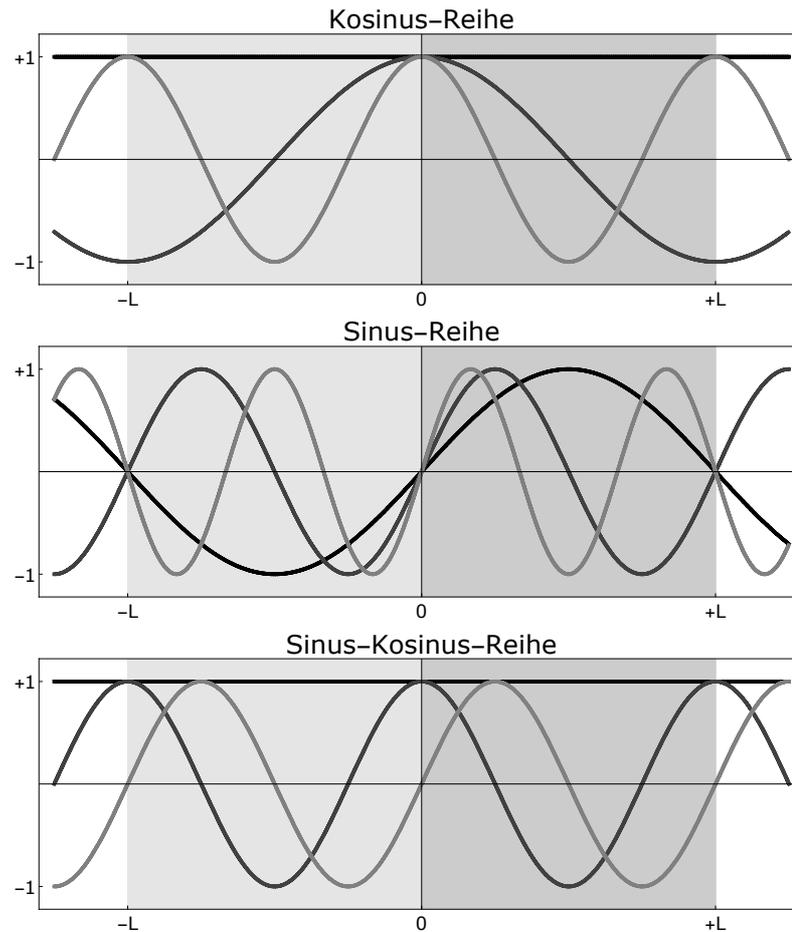


Abbildung 2.10: Die jeweils ersten drei Basisfunktionen für die verschiedenen Varianten einer reellen Fourier-Reihen. Die Basisfunktionen sind dabei in natürlicher Weise auf ganz \mathbb{R} definiert: Sie sind $2L$ -periodisch und gerade bei der Fourier-Kosinus-Reihe (*Oben*) aber $2L$ -periodisch und ungerade bei der Fourier-Sinus-Reihe (*Mitte*). Bei der Fourier-Kosinus-Reihe (*Unten*) sind die Basisfunktionen sogar L -periodisch aber können gerade oder ungerade sein.

1. Fourier-Kosinus-Reihe:

$$w(x) = \frac{1}{2} \cdot a_0 + \sum_{j=1}^{\infty} a_j \cdot \cos(k_j \cdot x), \quad a_j = \frac{2}{L} \int_0^L w(x) \cdot \cos(k_j \cdot x) dx$$

2. Fourier-Sinus-Reihe:

$$w(x) = \sum_{j=1}^{\infty} b_j \cdot \sin(k_j \cdot x), \quad b_j = \frac{2}{L} \int_0^L u(x) \cdot \sin(k_j \cdot x) dx$$

3. Fourier-Sinus-Kosinus-Reihe:

$$w(x) = \frac{1}{2} \cdot a_0 + \sum_{j=1}^{\infty} a_{2j} \cdot \cos(k_{2j} \cdot x) + b_{2j} \cdot \sin(k_{2j} \cdot x)$$

Dabei konvergieren alle Reihen absolut in $L^2([0, L])$. Ist w sogar stetig auf $[0, L]$ und gilt außerdem

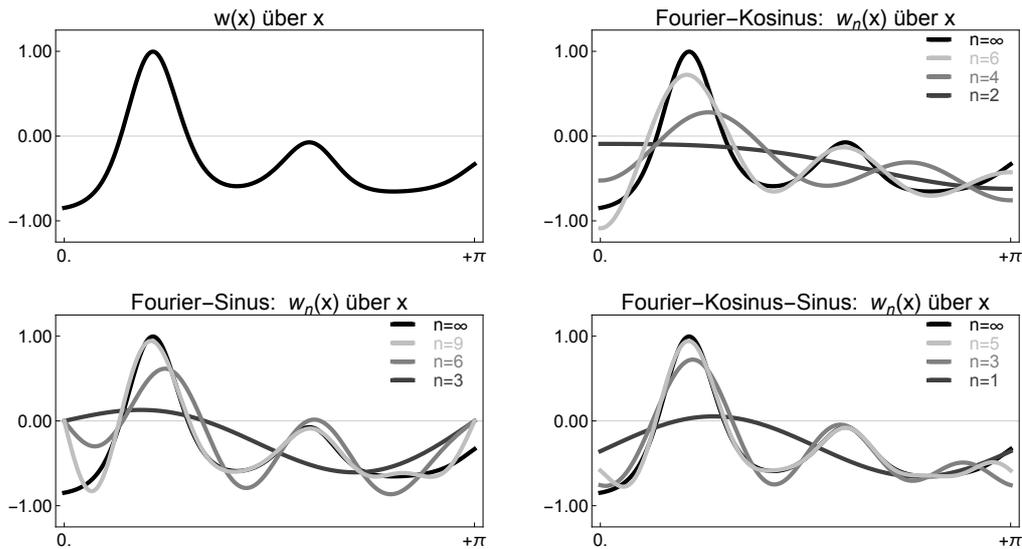


Abbildung 2.11: Jede Funktion w auf $[0, L]$ kann sowohl in eine Fourier-Kosinus-, eine Fourier-Sinus- und eine Fourier-Kosinus-Sinus-Reihe entwickelt werden. Beachte, dass das Randverhalten der jeweiligen Approximationen w_n fundamental anders ist.

1. (- keine Bedingung -)
2. $w(0) = w(L) = 0$,
3. $w(0) = w(L)$,

so konvergiert die entsprechende Reihe auch gleichmäßig auf $[0, L]$.

Beweis. Wir setzen die gegebene Funktion w auf $[0, L]$ wie folgt zu einer $2L$ -periodischen Funktion u auf ganz \mathbb{R} fort (siehe Abbildung 2.9), wobei wir im Allgemeinen Unstetigkeiten bei allen Vielfachen von π zulassen müssen :

1. Wir setzen w zuerst zu einer geraden Funktion auf $[-L, L]$ fort und anschließend $2L$ -periodisch auf ganz \mathbb{R} . Insbesondere ist die so definierte Fortsetzung u stetig auf ganz \mathbb{R} , sofern w stetig auf $[0, L]$ ist. Lemma 37 liefert dann die Reihenentwicklung (2.80) für u mit

$$2 \cdot \alpha_j = \frac{1}{L} \int_{-L}^{+L} u(x) \cdot \cos(k_j \cdot x) dx = \frac{2}{L} \int_0^{+L} u(x) \cdot \cos(k_j \cdot x) dx = \alpha_j$$

und

$$2 \cdot \beta_j = \frac{1}{L} \int_{-L}^{+L} u(x) \cdot \sin(k_j \cdot x) dx = 0,$$

wobei wir benutzt haben, dass sowohl $u(x)$ als auch $\cos(k_j \cdot x)$ gerade in x sind, $\sin(k_j \cdot x)$ jedoch ungerade in x ist.

2. Wir setzen w zuerst zu einer ungeraden Funktion auf $[-L, L]$ fort und anschließend wieder $2L$ -periodisch auf ganz \mathbb{R} . Insbesondere ist u stetig auf ganz \mathbb{R} , sofern w stetig auf $[0, L]$ ist und außerdem $u(0) = u(L) = 0$ gilt. Mit Lemma 37 sowie

$$2 \cdot \alpha_j = \frac{1}{L} \int_{-L}^{+L} u(x) \cdot \cos(k_j \cdot x) dx = 0$$

und

$$2 \cdot \beta_j = \frac{1}{L} \int_{-L}^{+L} u(x) \cdot \sin(k_j \cdot x) \, dx = \frac{2}{L} \int_0^{+L} u(x) \cdot \sin(k_j \cdot x) \, dx = b_j$$

ergibt sich wieder eine Reihendarstellung für u , die aber diesmal nur Sinus-Terme enthält.

3. Wir setzen w nun L -periodisch auf ganz \mathbb{R} fort, wobei diese Fortsetzung u genau dann stetig auf ganz \mathbb{R} ist, wenn w stetig auf $[0, L]$ ist und $w(0) = w(L)$ gilt. Für die Kosinus-Koeffizienten aus Lemma 37 ergibt sich in diesem Fall

$$\begin{aligned} 2 \cdot \alpha_j &= \frac{1}{L} \int_{-L}^0 u(x) \cdot \cos(k_j \cdot x) \, dx + \frac{1}{L} \int_0^{+L} u(x) \cdot \cos(k_j \cdot x) \, dx \\ &= \frac{1}{L} \int_0^{+L} u(x) \cdot \left(\cos(k_j \cdot x) + \cos(k_j \cdot x - k_j \cdot L) \right) \, dx \\ &= \begin{cases} a_j & \text{falls } j \text{ gerade,} \\ 0 & \text{falls } j \text{ ungerade,} \end{cases} \end{aligned}$$

denn es gilt

$$\cos(k_j \cdot x - k_j \cdot L) = \cos(k_j \cdot x - j \cdot \pi) = (-1)^j \cos(k_j \cdot x)$$

für alle $j \in \mathbb{N}$ und alle x . Analog zeigt man $2 \cdot \beta_j = b_j$ bzw. $2 \cdot \beta_j = 0$ für j gerade bzw. ungerade.

Alle Behauptungen bzgl. w folgen mit Lemma 2.80 aus den analogen Aussagen für u sowie der Tatsache, dass jede Reihendarstellung für u durch Einschränkung auf das Intervall $[0, L]$ eine entsprechende Reihendarstellung für w liefert. \square

Bemerkung.

1. Theorem 38 besagt, dass jede Funktion w , die auf einem Intervall $[0, L]$ auf drei verschiedene Arten als Reihe dargestellt werden kann, siehe Abbildung 2.11. Die jeweiligen Familien von Basisfunktionen sind in Abbildung 2.10 dargestellt.
2. Die Konvergenzeigenschaften (Norm, Geschwindigkeit usw.) jeder Reihe aus Theorem 38 hängt von der Regularität der jeweiligen Fortsetzung u von w ab.
3. Durch einfache Verschiebungsargumente kann man auch die drei Fourier-Reihen auch für Funktionen einführen, die auf einem Intervall $[a, b]$ definiert sind.

Die verschiedenen Systeme von Basisfunktionen sind in Abbildung 2.9 dargestellt.

2.4.4 Anwendungen auf Rand-Anfangswert-Probleme

Wir werden in diesem Abschnitt Fourier-Reihen verwenden, um räumlich eindimensionale partielle Differentialgleichungen auf räumlich beschränkten Gebieten – auf Intervallen – zu lösen. Wir werden also immer $x \in I$ annehmen, wobei $I = [a, b]$ ein gegebenes Intervall der Länge $L = b - a$ ist.

Der wesentliche Unterschied zur der Diskussion in §2.4.2 ist, dass wir nun neben Anfangsbedingungen zur Zeit $t = 0$ zusätzlich Randbedingungen für $x = a$ bzw. $x = b$ stellen dürfen. Wir werden weiter unten diskutieren, welche Typen von Randbedingungen es für welche Differentialgleichung gibt und was die entsprechende physikalische Interpretation ist.

Diffusionsgleichung mit Dirichlet-Randbedingungen

Unser erstes Beispiel

$$\partial_t w(t, x) - \partial_x^2 w(t, x) = h(t, x) \quad \text{für } t \geq 0 \quad \text{und } x \in [0, L] \quad (2.81)$$

beschreibt Diffusions- bzw. Wärmeleitprozesse in dem räumlichen Gebiet $I = [0, L]$, wobei die gegebene Funktion h einen sogenannten *Quellterm* bezeichnet und w die Unbekannte ist. Wir stellen neben den Anfangsbedingungen

$$w(0, x) = f(x) \quad (2.82)$$

auch sogenannte *Dirichlet-Randbedingungen*⁴⁹, d.h. wir suchen Lösungen u , so dass auch

$$w(t, 0) = d_1(t), \quad u(t, L) = d_2(t) \quad (2.83)$$

für alle $t \geq 0$ gilt. Hierbei sind d_1 und d_2 zwei gegebene Funktionen, die das Verhalten der Lösung w am linken bzw. rechten Rand der Intervalles I kontrollieren. Im Falle von $d_1 \equiv d_2 \equiv 0$ nennt man die Randbedingungen (2.83) *homogen*, andernfalls *inhomogen*.

Insgesamt beschreiben (2.81)+(2.82)+(2.83) ein *Rand-Anfangswert-Problem* für w mit den *Daten* h, f, d_1 und d_2 , das zumindest auf einer formalen Ebene mit Hilfe von Fourier-Reihen gelöst werden kann. Wir wollen auch erwähnen, dass alle nachfolgenden Argumente rigoros begründet werden können, aber die Darstellung der entsprechenden Beweise ist im Rahmen dieser Vorlesung nicht möglich.⁵⁰

Rückführung auf homogene Randbedingungen: Im ersten Schritt wollen das allgemeine Problem auf den Fall homogener Randbedingungen zurückführen (wir werden unten sehen, warum dies sinnvoll ist). Wir beginnen dazu mit dem Ansatz

$$w(t, x) = \tilde{w}(t, x) + W(t, x), \quad (2.84)$$

wobei \tilde{w} eine Funktion in $t \geq 0$ und $x \in [0, L]$ ist, die die inhomogenen Randbedingungen exakt erfüllt (aber im Allgemeinen weder die Differentialgleichung noch die Anfangsbedingungen). Im konkreten Fall können wir \tilde{w} als

$$\tilde{w}(t, x) := d_1(t) + x \cdot \frac{d_2(t) - d_1(t)}{L} \quad (2.85)$$

wählen, aber im Prinzip könnten wir auch andere Wahlen treffen (wichtig ist nur, dass $\tilde{w}(t, 0) = d_1(t)$ und $\tilde{w}(t, L) = d_2(t)$ für alle $t \geq 0$ gilt). Nach Konstruktion erfüllt die neue Unbekannte W die homogenen Randbedingungen

$$W(0, x) = 0, \quad W(0, L) = 0, \quad (2.86)$$

die modifizierten Anfangsbedingungen

$$W(0, x) = F(x) := f(x) - d_1(0) - x \cdot \frac{d_2(0) - d_1(0)}{L} \quad (2.87)$$

⁴⁹Johann Peter Gustav Lejeune Dirichlet (1805–1859), deutscher Mathematiker.

⁵⁰Wenn Sie später eine Vorlesung zur mathematischen Analysis von Rand-Anfangswert-Problemen besuchen, wird es sehr hilfreich sein zu wissen, was die formalen Lösungen von einfachen Rand-Anfangswert-Problemen sind.

sowie die modifizierte Differentialgleichung

$$\partial_t W(t, x) - \partial_x^2 W(t, x) = H(t, x), \quad (2.88)$$

mit

$$\begin{aligned} H(t, x) &= h(t, x) - \left(\partial_t \tilde{w}(t, x) - \partial_x^2 \tilde{w}(t, x) \right) \\ &= h(t, x) - \dot{d}_1(t) - x \cdot \frac{\dot{d}_2(t) - \dot{d}_1(t)}{L}. \end{aligned}$$

Wir wollen im nächsten Schritt das modifizierte aber homogene Rand-Anfangswert-Problem (2.88)+(2.87)+(2.86) für W lösen, da dies via (2.84)+(2.85) äquivalent zum ursprünglichen Problem für w ist.

Ansatz einer Fourier-Sinus-Reihe: Da W sowohl am linken Rand $x = 0$ als auch am rechten Rand $x = L$ verschwinden soll, liegt es nahe, $W(t, \cdot)$ für jedes $t \geq 0$ in eine Fourier-Sinus-Reihe zu entwickeln. Dies führt auf den Ansatz

$$W(t, x) = \sum_{j=1}^{\infty} B_j(t) \cdot \sin(k_j \cdot x) \quad (2.89)$$

mit *zeitabhängigen* Koeffizienten $B_j(t)$, deren Dynamik wir identifizieren wollen. Dazu bemerken wir, dass auch die Anfangsdaten F und der Quellterm H gemäß

$$W(0, x) = F(x) = \sum_{j=1}^{\infty} B_j(0) \cdot \sin(k_j \cdot x), \quad H(t, x) = \sum_{j=1}^{\infty} D_j(t) \cdot \sin(k_j \cdot x) \quad (2.90)$$

in eine Fourier-Sinus-Reihe entwickeln können. Insbesondere sind also $B_j(0)$ und $D_j(t)$ aus den Daten bekannt und unsere Aufgabe besteht darin, die Koeffizienten $B_j(t)$ von W für $t > 0$ zu bestimmen.

Berechnung der Fourier-Sinus-Koeffizienten für die Daten: Bevor wir B_j bestimmen, bemerken wir, dass explizite Formeln für $B_j(0)$ und $D_j(0)$ entweder aus Theorem 38 abgelesen oder mit Hilfe des folgenden Argument berechnet werden können: Wenn wir (2.90)₁ mit $\sin(k_m \cdot x)$ multiplizieren und dann über $x \in [0, L]$ integrieren, erhalten wir

$$\int_0^L F(x) \cdot \sin(k_m \cdot x) dx = \sum_{j=1}^{\infty} B_j(0) \cdot \int_0^L \sin(k_j \cdot x) \cdot \sin(k_m \cdot x) dx.$$

Fast alle Summanden in der Reihe auf der rechten Seite verschwinden aber, denn es gelten die *Orthogonalitätsrelationen*

$$\begin{aligned} \int_0^L \sin\left(\frac{j \cdot \pi}{L} \cdot x\right) \cdot \sin\left(\frac{m \cdot \pi}{L} \cdot x\right) dx &= \frac{L}{\pi} \cdot \int_0^{\pi} \sin(j \cdot y) \cdot \sin(m \cdot y) dy \\ &= \frac{L}{\pi} \cdot \frac{\pi}{2} \cdot \delta_m^j, \end{aligned}$$

wobei

$$\delta_m^j := \begin{cases} 1 & \text{für } j = m \\ 0 & \text{für } j \neq m \end{cases}$$

das sogenannte Kronecker-Delta ist. Insgesamt gilt also

$$B_m(0) = \frac{2}{L} \cdot \int_0^L F(x) \cdot \sin\left(\frac{m \cdot \pi}{L} \cdot x\right) dx \quad (2.91)$$

für alle $m \in \mathbb{N}$, und die Formel

$$D_m(t) = \frac{2}{L} \cdot \int_0^L H(t, x) \cdot \sin\left(\frac{m \cdot \pi}{L} \cdot x\right) dx \quad (2.92)$$

kann mit analogen Argumenten aus (2.90)₂ abgeleitet werden.

Evolutions der Fourier-Sinus-Koeffizienten B_j : Auf Grund unserer theoretischen Betrachtungen in §2.4.3 können wir erwarten, dass jede Koeffizientenfunktion B_j eine gewöhnliche Differentialgleichung erfüllt. Um diese zu identifizieren können wir entweder die abstrakten Argumente verwenden oder ganz konkret wir folgt argumentieren: Wenn wir den Reihen-Ansatz einmal nach der Zeit bzw. zweimal nach dem Ort differenzieren, erhalten wir

$$\partial_t W(t, x) = \sum_{j=1}^{\infty} \dot{B}_j(t) \cdot \sin(k_j \cdot x), \quad \partial_x^2 W(t, x) = \sum_{j=1}^{\infty} -k_j^2 \cdot B_j(t) \cdot \sin(k_j \cdot x),$$

wobei wir stillschweigend vorausgesetzt haben, dass die Differentiation und die Reihenbildung vertauscht werden können. Durch Einsetzen in in die Differentialgleichung ergibt sich damit

$$\sum_{j=1}^{\infty} \left(\dot{B}_j(t) + k_j^2 \cdot B_j(t) - D_j(t) \right) \cdot \sin(k_j \cdot x) = 0$$

und ein simpler Koeffizientenvergleich liefert

$$\dot{B}_j(t) + k_j^2 \cdot B_j(t) - D_j(t) = 0.$$

Die ist die gewünschte gewöhnliche Differentialgleichung für B_j als Funktion von t , deren Lösung als

$$B_j(t) = \exp(-k_j^2 \cdot t) \cdot \left(B_j(0) + \int_0^t \exp(+k_j^2 \cdot s) \cdot D_j(s) ds \right) \quad (2.93)$$

geschrieben werden kann.

Abschließende Bemerkungen: Alle bisher abgeleiteten Formeln können nun miteinander kombiniert werden. Insbesondere erhalten wir mit (2.91)+(2.92)+(2.93)+(2.89) eine komplizierte aber explizite Darstellungsformel für W und dann mit (2.84)+(2.85) eine analoge Formel für w . Wir wollen das Endergebnis nicht angeben, da die Ausdrücke für allgemeine Daten sehr lang sind. Bei konkreten Daten (siehe Übungsaufgaben) wird man durch finales Einsetzen und Berechnung der Integrale in (2.93) aber brauchbare Lösungsformeln erhalten.

Wir wollen auch erwähnen, dass es nicht wichtig war, dass wir an einigen Stellen benutzt haben, dass das Intervall I die Form $[0, L]$ hatte. Der allgemeinen Fall $I = [a, b]$ mit $L = b - a$ kann aber durch eine Verschiebung in x auf diesen Spezialfall zurückgeführt werden.

Wellengleichung mit Neumann-Randbedingungen

Wir betrachten nun eine Rand-Anfangswert-Problem für die Wellengleichung

$$\partial_t^2 w(t, x) - \partial_x^2 w(t, x) = h(t, x) \quad \text{für } t \geq 0 \quad \text{und } x \in [0, L] \quad (2.94)$$

mit Quellterm h , Anfangsdaten

$$w(0, x) = f(x), \quad \partial_t w(0, x) = g(x)$$

sowie den inhomogenen Randdaten

$$\partial_x w(t, 0) = -n_1(t), \quad \partial_x w(t, L) = +n_2(t)$$

Diese Randbedingungen heißen Neumann-Randbedingungen⁵¹ und schreiben nicht das Verhalten von w , sondern das der räumliche Ableitung $\partial_x w$ am linken und am rechten Rand vor.

Rückführung auf homogene Randbedingungen: Wir im vorangegangenen Beispiel setzen wir im ersten Schritt wieder

$$w(t, x) = \tilde{w}(t, x) + W(t, x),$$

wobei \tilde{w} diesmal durch

$$\tilde{w}(t, x) := -n_1(t) \cdot x + \frac{(n_2(t) + n_1(t)) \cdot x^2}{2 \cdot L}$$

festgelegt ist. Insbesondere erfüllt die neue Unbekannte W nach Konstruktion die homogenen Neumann-Randbedingungen

$$\partial_x W(0, x) = 0, \quad \partial_x W(0, L) = 0$$

die modifizierten Anfangsbedingungen

$$W(0, x) = F(x) := f(x) - \tilde{w}(t, x), \quad \partial_t W(0, x) = G(x) := g(x) - \partial_t \tilde{w}(t, x)$$

sowie die modifizierte Differentialgleichung

$$\partial_t^2 W(t, x) - \partial_x^2 W(t, x) = H(t, x) := h(t, x) - \left(\partial_t^2 \tilde{w}(t, x) - \partial_x^2 \tilde{w}(t, x) \right),$$

wobei die neuen Daten H , F und G explizit aus h , f , g und n_1 , n_2 berechnet werden können.

Ansatz einer Fourier-Kosinus-Reihe: Auf Grund der Neumann-Randbedingungen benutzen wir nun Fourier-Kosinus-Reihen. Genauer gesagt: Wir verwenden den Ansatz

$$W(t, x) = \frac{1}{2} \cdot A_0(t) + \sum_{j=1}^{\infty} A_j(t) \cdot \cos(k_j \cdot x) \quad (2.95)$$

und entwickeln die Daten in konsistenter Weise gemäß

$$H(t, x) = \frac{1}{2} \cdot C_0(t) + \sum_{j=1}^{\infty} C_j(t) \cdot \cos(k_j \cdot x). \quad (2.96)$$

⁵¹Carl Gottfried Neumann (1832–1925), deutscher Mathematiker.

und

$$\begin{aligned} F(x) &= \frac{1}{2} \cdot A_0(0) + \sum_{j=1}^{\infty} A_j(0) \cdot \cos(k_j \cdot x), \\ G(x) &= \frac{1}{2} \cdot \dot{A}_0(0) + \sum_{j=1}^{\infty} \dot{A}_j(0) \cdot \cos(k_j \cdot x). \end{aligned} \quad (2.97)$$

Analog zu oben – d.h. durch Multiplikation mit $\cos(k_m \cdot x)$ und anschließender Integration über $x \in [0, L]$ leitet man für $m \geq 0$ die Formeln

$$A_m(0) = \frac{2}{L} \cdot \int_0^L F(x) \cdot \cos(k_m \cdot x) dx, \quad \dot{A}_m(0) = \frac{2}{L} \cdot \int_0^L G(x) \cdot \cos(k_m \cdot x) dx$$

und

$$C_m(t) = \frac{2}{L} \cdot \int_0^L H(t, x) \cdot \cos(k_m \cdot x) dx$$

ab, wobei die Orthogonalitätsrelationen

$$\int_0^L \cos\left(\frac{j \cdot \pi}{L} \cdot x\right) \cdot \cos\left(\frac{m \cdot \pi}{L} \cdot x\right) dx = 0 \quad \text{für } m \neq j$$

sowie

$$\int_0^L \cos\left(\frac{0 \cdot \pi}{L} \cdot x\right)^2 dx = L, \quad \int_0^L \cos\left(\frac{m \cdot \pi}{L} \cdot x\right)^2 dx = \frac{L}{2} \quad \text{für } m \in \mathbb{N}$$

verwendet werden.

Evolution der Fourier-Kosinus-Koeffizienten A_j : Durch zweimalige Differentiation von (2.95) nach t bzw. x und Einsetzen in die Differentialgleichung (2.94) erhalten wir wegen (2.96) und (2.97) die Identität

$$\sum_{j=1}^{\infty} \left(\ddot{A}_j(t) + k_j^2 \cdot A_j(t) - C_j(t) \right) \cdot \cos(k_j \cdot x) = 0.$$

Ein einfacher Koeffizientenvergleich liefert auch in diesem Beispiel gewöhnliche Differentialgleichungen für die zeitabhängigen Reihen-Koeffizienten von W , nämlich

$$\ddot{A}_j(t) + k_j^2 \cdot A_j(t) - C_j(t) = 0,$$

deren Lösung für $j = 0$ als

$$A_0(t) = A_0(0) + \dot{A}_0(0) \cdot t + \int_0^t C_0(s) \cdot (t - s) ds$$

und sonst als

$$A_j(t) = A_j(0) \cdot \cos(k_j \cdot t) + \dot{A}_j(0) \cdot \frac{\sin(k_j \cdot t)}{k_j} + \int_0^t \frac{C_j(s)}{k_j} \cdot \sin(k_j \cdot (t - s)) ds$$

geschrieben werden kann. Durch Kombination aller Formeln kann man nun wieder explizite Lösungsformeln für W bzw. w herleiten, in denen nur die Daten h , f , n_1 und n_2 auftreten.

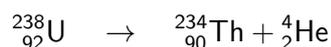
Kapitel 3

Modelle in den Naturwissenschaften

3.1 Reaktionen und kinetische Gleichungen

3.1.1 Einführende Beispiele

Wachstum und Zerfall Als prototypisches Beispiel für einen *Zerfallsprozess* betrachten wir den radioaktiven Zerfall eines Uran-238-Atoms (92 Protonen und 146 Neutronen) durch α -Strahlung.¹ Dabei entsteht gemäß



ein Thorium-Atom (90 Protonen und 144 Neutronen) sowie ein Helium-Atom (2 Protonen und 2 Neutronen), wobei das Thorium nun weiter zerfallen wird².

Wir betrachten nun ein sehr großes System mit sehr vielen Uran-238 Atomen (etwa die uranerzhaltige Schicht eines Gebirges) und wollen die Evolution der Urankonzentration X (= Anzahl der Teilchen pro Volumen) durch eine Formel beschreiben. Dabei wollen wir der Einfachheit halber annehmen, dass X beliebige positive reelle Werte annehmen kann, obwohl dies strenggenommen natürlich nicht möglich ist. Die wesentliche Modellierungsidee ist nun, dass pro Zeiteinheit immer ein gewisser Anteil der vorhandenen Uranatome spontan zerfallen wird. Insbesondere gilt

$$X(t + \delta t) \approx X(t) - \beta \cdot X(t) \cdot \delta t, \quad (3.1)$$

wobei β die *Zerfallsrate* ist, die wir (zumindest in erster Näherung) als zeitlich konstant annehmen können. Oder anders gesagt: $\beta \cdot \delta t$ liefert gerade die Wahrscheinlichkeit, dass ein Uran-238 Atom in der Zeit δt spontan zerfallen wird.

Das entsprechende mathematisches Modell ist sehr einfach und kann aus (3.1) abgelesen werden. Im Limes $\delta t \rightarrow 0$ erhalten wir die gewöhnliche Differentialgleichung

$$\dot{X} = -\beta \cdot X,$$

deren allgemeine Lösung durch

$$X(t) = \exp(-\beta \cdot (t - t_0)) \cdot X(t_0)$$

gegeben ist. Insbesondere ist

$$T_{\text{HWZ}} := \frac{\ln 2}{\beta}$$

¹Es gibt darüberhinaus noch den neutroneninduzierten Zerfall von Uran-235.

²Insgesamt entsteht durch fortgesetzten α -Zerfall die natürliche *Zerfallsreihe* des Uran.

die *Halbwertszeit*,³ denn es gilt $X(t + T_{\text{HWZ}}) = \frac{1}{2} \cdot X(t)$ für alle $t \geq 0$.

Ganz allgemein kann man sagen: Durch Gleichungen der Bauart

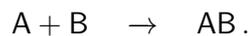
$$\dot{X}(t) = \alpha \cdot X(t) \quad \text{und damit} \quad X(t + \delta t) = X(t) + \alpha \cdot X(t) \cdot \delta t + \mathcal{O}((\delta t)^2)$$

werden für $\alpha < 0$ *Zerfalls-* oder *Sterbeprozesse* modelliert, wohingegen $\alpha > 0$ *Wachstums-* oder *Vermehrungsprozesse* beschreibt. Dabei gilt in der Regel

$$[X] = \frac{\mathbf{N}}{\mathbf{L}^3} \in \mathbb{R}_{0+}, \quad [\alpha] = \frac{1}{\mathbf{T}},$$

d.h. X ist eine Konzentration und α eine Rate.

Reaktionsprozesse In vielen realen Prozessen treten neben Wachstums- und Zerfallsphänomenen auch *Reaktionen* auf, wobei diese Reaktionen entweder einen realen chemischen Ursprung haben oder in einem abstrakten Sinne als solche interpretiert werden können. Im einfachsten Fall verbinden sich je ein ‚Molekül‘ der ‚Substanzen‘ A und B gemäß der Reaktionsgleichung



Wir wollen nun einen Container betrachten, der eine sehr große Anzahl von Molekülen

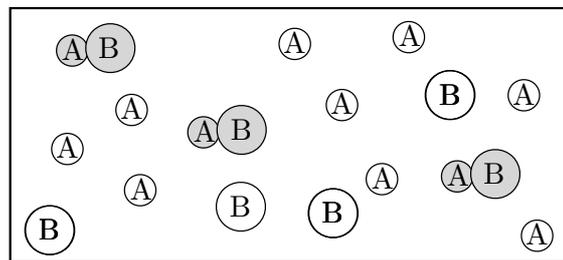


Abbildung 3.1: Schematische Darstellung eines Reaktionsreaktors.

enthält – siehe Abbildung 3.1 – und die Evolution der Konzentrationen X_A , X_B und X_{AB} durch Differentialgleichungen beschreiben. Dazu nehmen wir an, dass die Moleküle im Gesamtsystem immer gut durchmischt sind und die obige Reaktion immer dann mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit stattfindet, wenn ein Molekül der Sorte A auf ein Molekül der Sorte B trifft. Insbesondere postulieren wir das Ratengesetz

$$\dot{X}_A(t) = \dot{X}_B(t) = -\dot{X}_{AB}(t) = -R, \quad (3.2)$$

wobei k eine Konstante bezeichnet und die Reaktionsrate R durch

$$R = k \cdot X_A \cdot X_B \quad (3.3)$$

gegeben und damit proportional zu sowohl X_A als auch zu X_B ist. Insbesondere gilt

$$[X_A] = [X_B] = [X_{AB}] = \frac{\mathbf{N}}{\mathbf{L}^3}, \quad [R] = \frac{\mathbf{N}}{\mathbf{L}^3 \cdot \mathbf{T}}, \quad [k] = \frac{\mathbf{L}^3}{\mathbf{N} \cdot \mathbf{T}}$$

³Die Halbwertszeit von Uran-238 beträgt ca. $4,5 \cdot 10^9$ Jahre.

Das Ratenformel (3.3) beschreibt, dass die Kollisionswahrscheinlichkeit – also die Wahrscheinlichkeit dass zwei Moleküle zusammentreffen – proportional zu den Konzentrationen X_A und X_B ist. Wir haben darüber hinaus angenommen, dass der *Ratenfaktor* k eine Konstante ist. Dies ist für viele Reaktionen eine zulässige Vereinfachung; in anderen Fällen – zum Beispiel wenn die chemische Reaktionen eine nennenswerten Menge von Wärme absorbiert oder freisetzt – ist dies jedoch kein sinnvoller Ansatz mehr und man muss an Stelle von (3.3) kompliziertere Gesetze zur Berechnung der Rate R verwenden. In jedem Fall wird aber (3.2) gelten, denn jede stattfindende Reaktion vernichtet je ein Teilchen der Substanzen A und B und erzeugt ein Teilchen der Sorte AB. Wir werden chemische Reaktionen weiter unten genauer untersuchen.

SIR-Modell der Epidemiologie Reaktionsmodelle werden nicht nur bei der Beschreibung physikalischer oder chemischer Teilchen-Prozesse verwendet sondern können auch biologischer Phänome modellieren. Beispiele sind hier Räuber-Beute-Systeme wie die Lotka-Volterra-Gleichung oder epidemiologische Modelle zur Krankheitsausbreitung. Ein einfaches Beispiel aus der zweiten Klasse wird als *Kermack-McKendrick-Modell*⁴ bzw. als *SIR-Model*⁵ bezeichnet und besteht aus den drei Gleichungen

$$\dot{S} = -\mu \cdot S \cdot I, \quad \dot{I} = +\mu \cdot S \cdot I - \eta \cdot I, \quad \dot{R} = +\eta \cdot I.$$

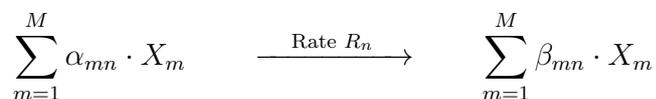
Hierbei sind S , I und R relative Konzentrationen innerhalb einer Population von Menschen oder Tieren. Genauer gesagt: S , I und R beschreiben jeweils den Anteil der nicht-infizierten, der erkrankten und der bereits genesenden Individuen. Die Ratenparameter μ bzw. η quantifizieren dabei die Ansteckung (= ‚Reaktion‘ zwischen Gesunden und Erkrankten) und die Genesungen (= ‚Zerfallsprozess‘)

3.1.2 Massenwirkungsgesetz für (chemische) Reaktionen

In diesem Abschnitt wollen die Modellierung komplexer Reaktionsprozesse genauer untersuchen. Dazu betrachten wir M Spezies (Molekülsorten, Substanzen, u.ä.), deren Konzentrationen wir mit

$$X_1, \dots, X_M$$

bezeichnen. Wir nehmen außerdem an, dass N verschiedene Reaktionen zwischen diesen Spezies möglich sind. Die n -te Reaktion wird dabei durch



beschrieben, wobei die *stöchiometrischen* Koeffizienten $\alpha_{1n}, \dots, \alpha_{Mn}$ und $\beta_{1n}, \dots, \beta_{Mn}$ in der Regel natürliche Zahlen (0 eingeschlossen), manchmal aber auch rationale Zahlen sein werden.

Die wesentliche Frage in der Modellierung ist nun, mit welcher Rate die einzelnen Reaktionen ablaufen. In Kontext chemischer Reaktionen wird dabei häufig das folgende Prinzip verwendet.

Prinzip 39 (Massenwirkungsgesetz). *Die Einzelreaktionen genügen den folgenden (idealisierten) Gesetzen:*

⁴Anderson Gray McKendrick (1876–1943), Schottischer Arzt und Epidemiologe; William Ogilvy Kermack (1898–1970), Schottischer Mathematiker und Epidemiologe.

⁵Die Buchstaben beziehen sich auf die englischen Worte *susceptible*, *ill* und *recovered*.

1. Die Reaktionsrate R_n der n -ten Reaktion ist durch die Formel

$$R_n(t) = k_n \cdot X_1(t)^{\alpha_{1n}} \cdot \dots \cdot X_M(t)^{\alpha_{Mn}} \quad (3.4)$$

gegeben, wobei k_n eine Konstante ist, die weder von t noch von den X_1, \dots, X_M abhängt.

2. Die momentane zeitliche Änderung von X_m auf Grund der n -ten Reaktion ist durch

$$\beta_{mn} \cdot R_n(t) - \alpha_{mn} \cdot R_n(t) \quad (3.5)$$

gegeben. Die zeitliche Gesamtänderung von X_m setzt sich additiv aus den Einzeländerungen zusammen.

Insbesondere gilt damit

$$\dot{X}_m(t) = \sum_{n=1}^N (\beta_{mn} - \alpha_{mn}) \cdot k_n \cdot \prod_{i=1}^M X_i(t)^{\alpha_{in}} \quad (3.6)$$

für alle $m = 1 \dots M$.

Bemerkung.

1. Das Massenwirkungsgesetz kann im Rahmen der thermodynamischen Mischungstheorie aus anderen, mehr fundamentalen Prinzipien abgeleitet werden.
2. Die Gleichung (3.4) resultiert aus der Annahme, dass die Reaktionswahrscheinlichkeit proportional zur Kollisionswahrscheinlichkeit ist. Die Gleichung (3.5) ist viel fundamentaler, da sie ausdrückt, dass sich die Konzentrationen durch chemische Reaktionen ändern; sie gilt selbst dann, wenn (3.4) nicht mehr gilt.
3. Die Ratenkonstanten k_1, \dots, k_N werden im Allgemeinen vom Druck und der Temperatur abhängen.⁶ Insbesondere gelten die Formeln aus Prinzip 39 nur dann, wenn der Druck und die Temperatur ungefähr konstant bleiben. Andernfalls können die Reaktionsterme nicht mehr durch einfache Monome beschrieben werden.

Die Formeln (3.6) können auch als

$$\dot{X}(t) = S \cdot R(t), \quad X(t) := (X_1(t), \dots, X_M(t))^T, \quad R(t) := (R_1(t), \dots, R_N(t))^T,$$

geschrieben werden, wobei

$$S = \begin{pmatrix} S_{11} & \dots & S_{1N} \\ \vdots & & \vdots \\ S_{M1} & \dots & S_{MN} \end{pmatrix} \in \mathbb{Q}^{M \times N} \quad \text{mit} \quad S_{mn} = \beta_{mn} - \alpha_{mn}$$

die sogenannte *Stöchiometrie-Matrix* ist.

Ein wichtiges Konzept bei der mathematischen Untersuchung von Reaktionssystemen sind Erhaltungssätze.

⁶Für diese Erkenntnis hat Fritz Haber (1868–1934), deutscher Chemiker, den Nobelpreis erhalten.

Lemma 40 (Lineare Erhaltungssätze). Sei $A \in \mathbb{Q}^M$ gegeben mit $S^T \cdot A = 0$. Dann ist

$$A \cdot X = \sum_{m=1}^M A_m \cdot X_m$$

eine Erhaltungsgröße, d.h. es gilt $A \cdot X(t) = A \cdot X(t_0)$ für alle $t \geq t_0$.

Beweis. Eine einfache Rechnung liefert

$$\frac{d}{dt} A \cdot X(t) = A \cdot \dot{X}(t) = A \cdot (S \cdot R(t)) = (S^T \cdot A) \cdot R(t) = 0$$

und damit die gewünschte Aussage. □

Bemerkung.

1. Ist R der Rang von S , so gilt $\dim \ker S^T = \text{codim im } S = M - R$.
2. Bei chemischen Reaktionen zwischen Molekülen besitzen die Erhaltungssätze meist eine sehr einfache Interpretation und beschreiben den Erhalt gewisser Atomsorten (siehe Beispiele unten).

Beispiel: Ammoniaksynthese

Ein klassisches Beispiel ist die Herstellung von Ammoniak aus Stickstoff und Wasserstoff, wobei es nach



eine Hin- sowie eine Rückreaktion gibt. Das Massenwirkungsgesetz liefert nun ein mathematisches Modell, das die Evolution der $N=3$ Konzentrationen

$$X_1 \quad (\text{für } \text{N}_2), \quad X_2 \quad (\text{für } \text{H}_2) \quad \text{und} \quad X_3 \quad (\text{für } \text{NH}_3).$$

auf Grund von $M=2$ chemischen Reaktionen beschreibt. Genauer gesagt: Mit den Stöchiometriedaten

$$\begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 3 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} \\ \beta_{21} & \beta_{22} \\ \beta_{31} & \beta_{32} \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 3 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}$$

bzw.

$$S := \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \\ S_{31} & S_{32} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & +1 \\ -3 & +3 \\ +2 & -2 \end{pmatrix}$$

ergeben sich die Ratenformeln

$$R_1 = k_1 \cdot X_1 \cdot X_2^3, \quad R_2 = k_2 \cdot X_3^2$$

und damit dann die Evolutionsgleichungen

$$\begin{aligned} \dot{X}_1 &= -1 \cdot R_1 + 1 \cdot R_2 = -1 \cdot k_1 \cdot X_1 \cdot X_2^3 + 1 \cdot k_2 \cdot X_3^2, \\ \dot{X}_2 &= -3 \cdot R_1 + 3 \cdot R_2 = -3 \cdot k_1 \cdot X_1 \cdot X_2^3 + 3 \cdot k_2 \cdot X_3^2, \\ \dot{X}_3 &= +2 \cdot R_1 - 2 \cdot R_2 = +2 \cdot k_1 \cdot X_1 \cdot X_2^3 - 2 \cdot k_2 \cdot X_3^2. \end{aligned}$$

Eine einfache Rechnung liefert außerdem

$$\text{kern } S^T = \text{span} \left\{ \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix} \right\},$$

d.h. es gibt zwei lineare Erhaltungsgrößen, nämlich

$$2 \cdot X_1(t) + X_3(t) = \text{const} =: C_1, \quad 2 \cdot X_2(t) + 3 \cdot X_3(t) = \text{const} =: C_2$$

die den Erhalt der Stickstoffatome bzw. der Wasserstoffatome beschreiben. Mit Hilfe dieser Erhaltungssätze kann nur die Dimension des Differentialgleichungssystem reduziert werden: Durch Einsetzen erhalten wir

$$\dot{X}_3 = P(X_3) := +2 \cdot k_1 \cdot \left(\frac{C_1 - X_3}{2} \right) \cdot \left(\frac{C_2 - 2 \cdot X_3}{3} \right)^3 - 2 \cdot k_2 \cdot X_3^2$$

und damit eine skalare Differentialgleichung erster Ordnung, wobei die Konstanten C_1 und C_2 aus den Anfangsdaten bestimmt werden können.

Beispiel: Enzym-Katalyse

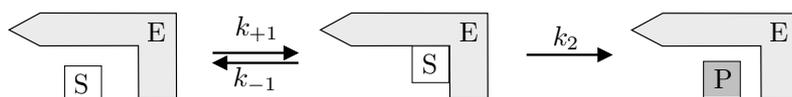


Abbildung 3.2: Schematische Darstellung der Michaelis-Menten-Reaktion: Ein Enzym E kann ein Substrat S binden und dann in ein Produkt P umwandeln.

Das vereinfachte Michaelis-Menten-Modell⁷ beschreibt – siehe Abbildung 3.2 – die enzymatische Katalyse einer Umwandlung $S \rightarrow P$ gemäß



Aus dem Massenwirkungsgesetz können nun die Gleichungen

$$\begin{aligned} \dot{S} &= + k_{-1} \cdot C - k_{+1} \cdot S \cdot E, \\ \dot{E} &= + k_{-1} \cdot C - k_{+1} \cdot S \cdot E + k_2 \cdot C, \\ \dot{C} &= - k_{-1} \cdot C + k_{+1} \cdot S \cdot E - k_2 \cdot C, \\ \dot{P} &= + k_2 \cdot C \end{aligned}$$

abgeleitet werden, wobei S , E , C , und P die Konzentrationen der Substanzen S, E, C, und P beschreiben. Wie sehen auch sofort, dass es mit

$$E(t) + C(t) = \text{const}, \quad S(t) + C(t) + P(t) = \text{const}$$

zwei linear unabhängige Erhaltungssätze gibt.

3.2 Diffusionsprozesse

In diesem Abschnitt werden wir zwei verschiedene Herleitungen für die Diffusionsgleichungen angeben. Wir werden uns dabei an vielen Stellen auf den räumlich eindimensionalen Fall konzentrieren, obwohl die meisten Argumente auch mühelos in höheren Dimensionen entwickelt werden können (siehe z.B. die Übungsaufgaben).

⁷Leonor Michaelis (1875–1949), deutsch-US-amerikanischer Biochemiker und Mediziner; Maud Leonora Menten (1879–1960), kanadische Medizinerin.

3.2.1 Random Walks

Als erstes wollen wir eine stochastische Interpretation von Diffusion im Rahmen von *Random Walks* geben. Die Idee ist, dass die Diffusion von Teilchen in einem Medium (Salz in Wasser, Staub in der Luft, Zucker im Tee) als *Brownsche Bewegung*⁸ und damit als Random Walk eines Einzelteilchens angesehen werden können. Im einfachsten Fall

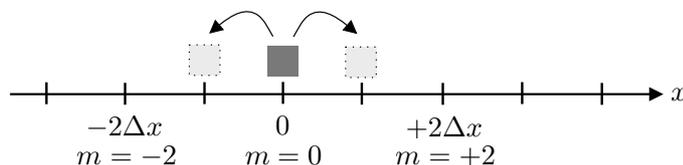


Abbildung 3.3: Schematische Darstellung des symmetrischen Random Walks in 1D.

betrachten wir ein *Gitter* in 1D, dh. die Menge aller Punkte $\Delta x \cdot \mathbb{Z}$, wobei Δx eine gegebene Konstante ist. Wir stellen uns außerdem ein Teilchen vor, dass zu jeder Zeit auf einem Gitterpunkt sitzt aber zu jedem Vielfachen einer gegebenen Zeit Δt auf einen Nachbarpunkt springt. Dabei soll das Teilchen jeweils mit Wahrscheinlichkeit $1/2$ um eine Position nach links oder nach rechts springen, siehe Abbildung 3.3. Insgesamt ergibt sich damit ein Zufallsprozess und verschiedene Realisierungen werden – wie in Abbildung 3.3 dargestellt – unterschiedlichen Teilchenwege liefern. Die Position des Teilchens nach dem n -ten Sprung ist damit nicht eindeutig festgelegt – siehe Abbildung 3.4 – und wir können nur die Wahrscheinlichkeiten

$w(n, m) :=$ Wahrscheinlichkeit, dass das Teilchen nach dem n -ten Sprung auf dem m -ten Gitterpunkt sitzt

betrachten. Um diese zu berechnen, werden wir zunächst den Fall deterministischer Anfangsdaten betrachten, bei denen die Position des Teilchen zur Zeit $t = 0$ eindeutig festgelegt ist (o.B.d.A. können wir annehmen, dass die Anfangsposition des Teilchens der Koordinatenursprung ist).

Annahme 41 (Deterministische Anfangsdaten). *Es gilt $w(0, 0) = 1$ und $w(0, m) = 0$ für alle $m \in \mathbb{Z} \setminus \{0\}$.*

Lemma 42 (Kombinatorische Formeln für $w(n, m)$). *Mit Annahme 41 gilt*

$$w(n, m) = \frac{1}{2^n} \begin{cases} \frac{n!}{\left(\frac{n-m}{2}\right)! \cdot \left(\frac{n+m}{2}\right)!} & \text{falls } |m| \leq n \text{ und falls } n \pm m \text{ gerade,} \\ 0 & \text{sonst,} \end{cases}$$

wobei $j! = 1 \cdot 2 \cdot \dots \cdot j$ wie üblich die Fakultät von $j \in \mathbb{N}$ bezeichnet.

Beweis. Jeder Weg, den das Teilchen in n Schritten zurücklegen kann, kann durch ein Wort der Länge n beschrieben werden, wobei jeder Buchstabe entweder L (für Sprung nach links) oder R (Sprung nach rechts) ist; siehe Tabelle 3.1. Kommt dabei der Buchstabe R genau k -mal vor, so wird das Teilchen insgesamt k mal nach rechts und $n - k$ mal nach links gesprungen sein und insgesamt die Gitterposition

$$m = (n - k) \cdot (-1) + k \cdot (+1) = 2 \cdot k - n \quad (3.7)$$

⁸Robert Brown (1773–1858), schottischer Botaniker.

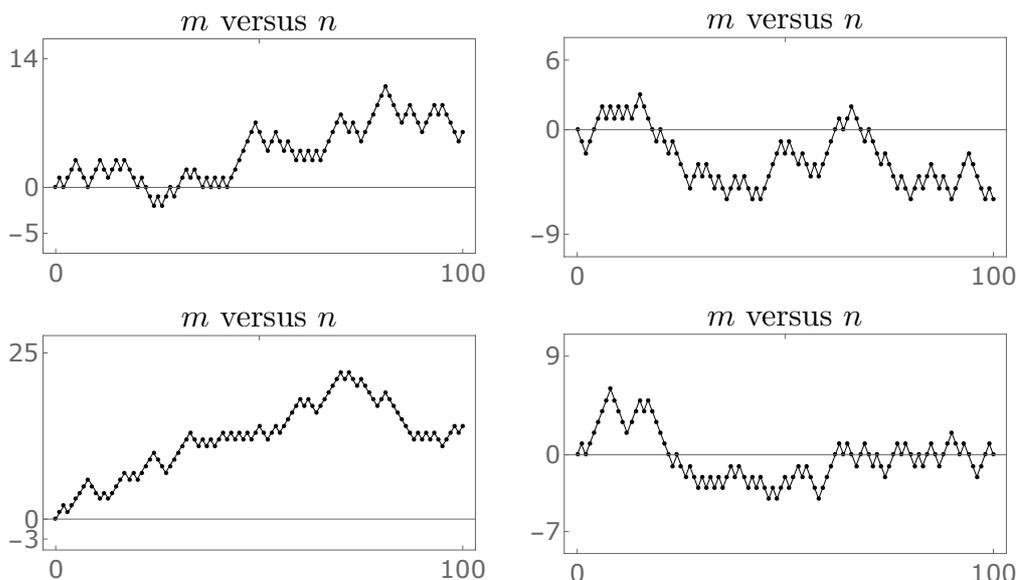


Abbildung 3.4: Vier verschiedene Realisierungen des Random Walks.

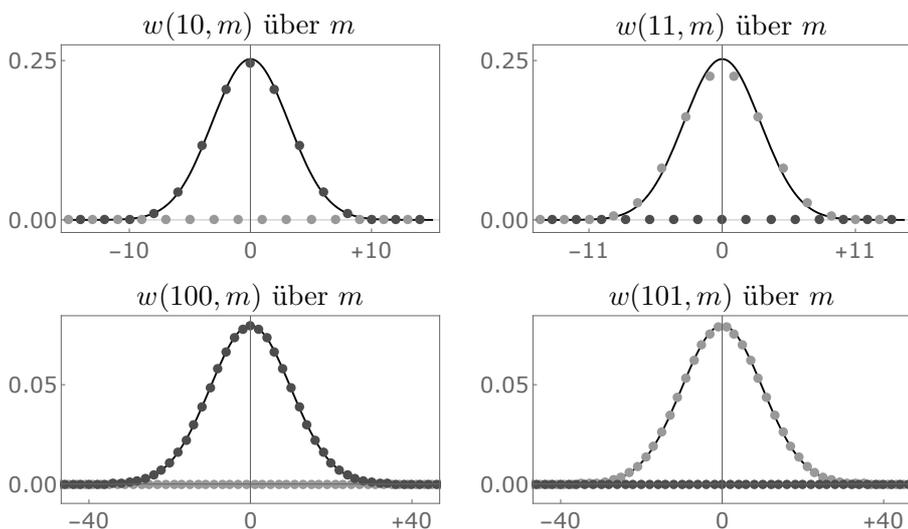


Abbildung 3.5: Die Wahrscheinlichkeiten $w(n, m)$ für verschiedene Werte von n über m aufgetragen: Dunkelgraue und hellgraue Punkte entsprechen geradem und ungeradem m ; die schwarze Kurve beschreibt die asymptotische Formel (3.8).

erreichen. Insbesondere gibt es bei festgehaltenem n für jedes k genau ein m und umgekehrt. Da k die Werte 0 bis n annehmen kann, kann das Teilchen nach n Sprüngen nur eine der Positionen

$$-n, \quad -n + 2, \quad -n + 4, \quad -n + 6, \quad \dots, n - 2, \quad n$$

erreichen. Insbesondere gilt also

$$w(n, m) = 0 \quad \text{falls } |m| > n \text{ oder falls } n \pm m \text{ ungerade,}$$

wobei $m + n$ genau dann gerade ist, wenn $m - n$ gerade ist. Wir wollen nun $w(n, m)$ in den verbleibenden Fällen berechnen. Dazu bemerken wir:

1. Aus den zwei Buchstaben L und R können insgesamt 2^n Worte der Länge n gebildet werden.

2. Von diesen werden genau

$$\binom{n}{k} = \binom{n}{n-k} = \frac{n!}{k! \cdot (n-k)!}$$

viele k mal den Buchstaben R und $n - k$ mal den Buchstaben L enthalten.

Da alle Wege bzw. Worte der Länge n gleich wahrscheinlich sind, ergibt sich damit

$$w(n, m) = \frac{n!}{k! \cdot (n-k)! \cdot 2^n},$$

wobei k und m für festes n durch (3.7) ineinander umgerechnet werden können. \square

$n = 1$	L $k = 0, m = -1$	R $k = 1, m = +1$		
$n = 2$	LL $k = 0, m = -2$	LR RL $k = 1, m = -0$	RR $k = 2, m = +2$	
$n = 3$	LLL $k = 0, m = -3$	LLR LRL RLL $k = 1, m = -1$	LRR RLR RRL $k = 2, m = +1$	RRR $k = 3, m = +3$

Tabelle 3.1: Zum Beweis von Lemma 42: Alle möglichen Teilchenwege der Längen $n = 1$, $n = 2$ und $n = 3$ mit den entsprechenden Werten von k und m .

Die Formel aus Lemma 42 ist für sehr große Werte von n nur schwer zu berechnen. Wir wollen daher nur vereinfachte asymptotische Formeln ableiten, siehe auch Abbildung 3.5.

Satz 43 (Asymptotische Formeln für $w(n, m)$). *Unter der Annahme 41 gilt die Approximation*

$$\bar{w}(n, m) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi \cdot n}} \cdot \exp\left(-\frac{m^2}{2 \cdot n}\right) \quad (3.8)$$

für alle (n, m) mit $n \gg 1$ und $m \ll n$, wobei $\bar{w}(n, m) := w(n, m) + w(n, m + 1)$.

Beweis. Die Stirling-Formel⁹

$$j! = \exp(-j) \cdot j^j \cdot \sqrt{2 \cdot \pi \cdot j} \cdot \left(1 + \frac{1}{12 \cdot j} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{j^2}\right)\right)$$

liefert

$$\bar{w}(n, m) = v(n, m) \cdot \sqrt{\frac{2 \cdot n}{\pi \cdot (n-m) \cdot (n+m)}} \cdot \left(1 + \mathcal{O}\left(\frac{1}{n}\right)\right)$$

⁹James Stirling (1692–1770), schottischer Mathematiker.

mit

$$v(n, m) := \left(\frac{n}{n-m}\right)^{(n-m)/2} \cdot \left(\frac{n}{n+m}\right)^{(n+m)/2},$$

und eine einfache Rechnung zeigt

$$\sqrt{\frac{2 \cdot n}{\pi \cdot (n-m) \cdot (n+m)}} = \sqrt{\frac{2}{\pi \cdot \left(1 - \frac{m}{n}\right) \cdot \left(1 + \frac{m}{n}\right)}} = \sqrt{\frac{2}{\pi \cdot n}} \cdot \left(1 + \mathcal{O}\left(\frac{m}{n}\right)\right).$$

Um asymptotische Ausdrücke für $v(n, m)$ zu erhalten, berechnen wir

$$\begin{aligned} \ln v(n, m) &= \frac{n-m}{2} \cdot \ln\left(\frac{n}{n-m}\right) + \frac{n+m}{2} \cdot \ln\left(\frac{n}{n+m}\right) \\ &= -\frac{n-m}{2} \cdot \ln\left(1 - \frac{m}{n}\right) - \frac{n+m}{2} \cdot \ln\left(1 + \frac{m}{n}\right) \\ &= -\frac{n-m}{2} \cdot \left(-\frac{m}{n} - \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{m}{n}\right)^2 + \mathcal{O}\left(\frac{m^3}{n^3}\right)\right) \\ &\quad - \frac{n+m}{2} \cdot \left(+\frac{m}{n} - \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{m}{n}\right)^2 + \mathcal{O}\left(\frac{m^3}{n^3}\right)\right), \end{aligned}$$

wobei wir benutzt haben, dass

$$\ln(1 \pm \delta) = \pm \delta + \frac{1}{2} \cdot \delta^2 + \mathcal{O}(\delta^3)$$

nach dem Satz von Taylor für alle kleinen $\delta > 0$ gilt. Es folgt schließlich

$$\begin{aligned} \ln v(n, m) &= \frac{m}{n} \cdot \left(\frac{n-m}{2} - \frac{n+m}{2}\right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{m^2}{n^2} \cdot \left(\frac{n-m}{2} + \frac{n+m}{2}\right) + \mathcal{O}\left(\frac{m^3}{n^2}\right) \\ &= \frac{m}{n} \cdot (-m) + \frac{1}{2} \cdot \frac{m^2}{n^2} \cdot (+n) + \mathcal{O}\left(\frac{m^3}{n^2}\right) \\ &= -\frac{1}{2} \cdot \frac{m^2}{n} + \mathcal{O}\left(\frac{m^3}{n^2}\right) = -\frac{1}{2} \cdot \frac{m^2}{n} \cdot \left(1 + \mathcal{O}\left(\frac{m}{n}\right)\right) \end{aligned}$$

und damit die Behauptung. □

Bemerkung. Da m bzw. n via $x := m \cdot \Delta x$ bzw. $t := n \cdot \Delta t$ eine Orts- bzw. Zeit-Koordinaten definieren, kann die Formel (3.8) aus Satz 43 auch als

$$\frac{\bar{W}(t, x)}{2 \cdot \Delta x} \approx \sqrt{\frac{1}{4 \cdot \pi \cdot D \cdot t}} \cdot \exp\left(-\frac{x^2}{4 \cdot D \cdot t}\right), \quad D = \frac{(\Delta x)^2}{2 \cdot \Delta t} \quad (3.9)$$

geschrieben werden, wobei $\bar{w}(n, m)$ gerade $\bar{W}(n \cdot \Delta t, m \cdot \Delta x)$ entspricht. Insbesondere kann die linke Seite in (3.9) als Wahrscheinlichkeit, das Teilchen zur Zeit t im Intervall $[x - \Delta x, x + \Delta x]$ zu finden, interpretiert werden und die rechte Seite in (3.9) ist für $D = 1$ gerade der Wärmeleitkern aus (2.71).

An Stelle von deterministischen Anfangsdaten kann man natürlich auch zufällige Anfangsdaten zulassen. Dies führt zu der folgenden Verallgemeinerung von Annahme 41.

Annahme 44 (Stochastische Anfangsdaten). *Es gilt $w(0, m) \geq 0$ für alle $m \in \mathbb{Z}$ sowie $\sum_{m \in \mathbb{Z}} w(0, m) = 1$.*

Eine wesentliche Erkenntnis der Stochastik ist, dass die Wahrscheinlichkeitsverteilungen zufälliger Größen in vielen Fällen einer *deterministischen* Dynamik gehorchen. In unserem Fall ist die entsprechende Gleichung sehr einfach und ermöglicht es, die Wahrscheinlichkeiten (n, \cdot) im n -ten Zeitschritt direkt aus den Wahrscheinlichkeiten des vorangegangenen Zeitschritts zu berechnen.

Lemma 45 (*Mastergleichung, Rekursionsformel bzgl n*). *Mit Annahme 44 gilt*

$$w(n, m) = \frac{1}{2} \cdot w(n-1, m-1) + \frac{1}{2} \cdot w(n-1, m+1)$$

Beweis. Diese Formel folgt unmittelbar aus folgender Beobachtung: Wenn das Teilchen im Schritt n auf dem Gitterpunkt m sitzt, so muss es im $n-1$ Schritt entweder auf dem Punkt $m-1$ oder dem Punkt $m+1$ gesessen haben, wobei beide Möglichkeiten dieselbe Wahrscheinlichkeit besitzen. \square

Der Kontinuumslimes

Wir wollen nun die Dynamik der Wahrscheinlichkeitsverteilung im Limes

$$\Delta t \rightarrow 0, \quad \Delta x \rightarrow 0 \tag{3.10}$$

verstehen. Dazu betrachten wir Familien von Random Walks mit kleinem Parameter $\varepsilon > 0$. Insbesondere setzen wir

$$\Delta x := \varepsilon, \quad \Delta t := \frac{\varepsilon^2}{2 \cdot D}, \tag{3.11}$$

wobei D eine von ε unabhängige Konstante ist (wir werden weiter unten sehen, warum wir Δx und Δt auf diese Weise miteinander koppeln). Für jede Wahl von ε können wir nun Anfangswahrscheinlichkeiten $w_\varepsilon(0, m)$ wie in Annahme 44 wählen, und dann sukzessive mittels der Mastergleichung aus Lemma 45 die diskreten Wahrscheinlichkeiten $w_\varepsilon(n, m)$ berechnen.

Unser Ziel ist es nun, zum Limes $\varepsilon \rightarrow 0$ überzugehen und einen geeigneten Grenzwert der diskreten Wahrscheinlichkeiten w_ε abzuleiten. Wir können aber nicht erwarten, dass $w_\varepsilon(m, s)$ für festes (m, n) gegen einen nichttrivialen Grenzwert konvergiert, sondern wir müssen die diskreten Zeitvariable n und die diskrete Ortsvariable m in geeigneter Weise *skalieren*. Dies geschieht wie folgt: Für jedes $\varepsilon > 0$ führen wir eine Funktionen $u_\varepsilon = u_\varepsilon(t, x)$ ein, so dass

$$w_\varepsilon(n, m) = \varepsilon \cdot u_\varepsilon\left(n \cdot \frac{\varepsilon^2}{2 \cdot D}, m \cdot \varepsilon\right) \quad \text{für alle } n, m \in \mathbb{Z} \tag{3.12}$$

gilt, wobei

$$t := n \cdot \frac{\varepsilon^2}{2 \cdot D} = n \cdot \Delta t, \quad x := m \cdot \varepsilon = m \cdot \Delta x \tag{3.13}$$

gerade die *kontinuierlichen* Zeit- und Ortskoordinaten sind, siehe Abbildung 3.6. Beachte, dass (3.12) zunächst nur die Werte von u_ε in abzählbar vielen Punkten festlegt; wir können aber durch eine geeignete Interpolation jede Funktion u_ε für alle $t \geq 0$

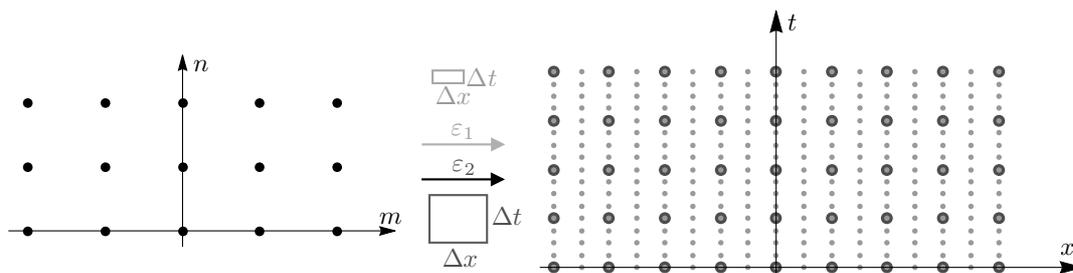


Abbildung 3.6: Die Skalierung (3.13) bildet die abstrakten und diskreten Zeit- und Ortskoordinaten $(n, m) \in \mathbb{N} \times \mathbb{Z}$ auf ein Gitter im kontinuierlichen (t, x) -Raum ab, wobei die Kantenlängen einer Gitterzelle gerade durch (3.11) festgelegt sind. Die hell- bzw. dunkelgrauen Gitterpunkte im rechten Bild entsprechen ε_1 bzw. ε_2 mit $\varepsilon_1 = \varepsilon_2/2$.

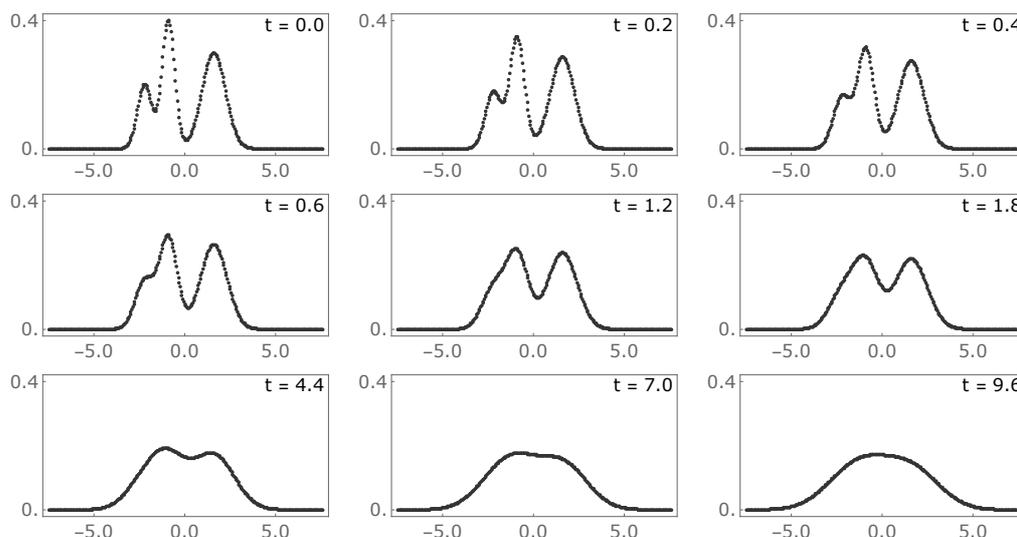


Abbildung 3.7: Beispiel für die Funktion u_ε aus (3.12), die die Wahrscheinlichkeiten $w_\varepsilon(n, m)$ in den reskalierten Koordinaten (3.13) repräsentieren; es gilt $\varepsilon = 0.05$ und $D = 1$ bzw. $\Delta x = 0.05$ und $\Delta t = 0.00125$. Nach Theorem 46 kann die Evolution von u_ε (bis auf kleine Fehlerterme in ε) durch die Diffusionsgleichung (3.14) beschrieben werden.

und alle $x \in \mathbb{R}$ definieren. Wir wollen auch betonen, dass der Vorfaktor ε in (3.12) sicherstellt, dass

$$\int_{\mathbb{R}} u_\varepsilon\left(\frac{n \cdot \varepsilon^2}{2 \cdot D}, x\right) dx \approx \varepsilon \cdot \sum_{m \in \mathbb{Z}} u_\varepsilon\left(\frac{n \cdot \varepsilon^2}{2 \cdot D}, m \cdot \varepsilon\right) = \sum_{m \in \mathbb{Z}} w_\varepsilon(n, m) = 1$$

und damit $\int_{\mathbb{R}} u_\varepsilon(t, x) dx \approx 1$ für alle $t \geq 0$ gilt.

Das wesentliche mathematische Resultat über den Grenzübergang $\varepsilon \rightarrow 0$ ist in Abbildung 3.7 illustriert und kann wie folgt formuliert werden.

Theorem 46 (Kontinuumslimites). *Konvergieren die Anfangsdaten $u_\varepsilon(0, \cdot)$ für $\varepsilon \rightarrow 0$ (in einem geeigneten Raum von Funktionen in x), so konvergiert u_ε gegen eine Funktion u (in einem geeigneten Raum von Funktionen in t und x). Darüber hinaus gilt*

$$\partial_t u(t, x) - D \cdot \partial_x^2 u(t, x) = 0, \quad (3.14)$$

d.h. der Grenzwert u ist Lösung der Diffusionsgleichung mit Diffusionskonstante D .

Wir können hier den rigorosen Beweis nicht führen, da dieser genauere Kenntnisse der Funktionalanalysis erfordert. Wir wollen aber zeigen, wie man die Diffusionsgleichung (3.14) mit *heuristischen* bzw. *formalen* Argumenten ableiten kann. Der Ausgangspunkt ist die reskalierte Mastergleichung

$$2 \cdot u_\varepsilon(t, x) = u_\varepsilon\left(t - \frac{\varepsilon^2}{2 \cdot D}, x - \varepsilon\right) + u_\varepsilon\left(t - \frac{\varepsilon^2}{2 \cdot D}, x + \varepsilon\right) + \text{e.t.}, \quad (3.15)$$

wobei e.t. kleine Korrekturterme bezeichnet, die von der oben erwähnten Interpolation herrühren. Wir wollen nun im folgenden diese Terme ignorieren und darüber hinaus annehmen, dass u_ε hinreichend glatt ist, so dass die Approximationen

$$\begin{aligned} u_\varepsilon\left(t - \frac{\varepsilon^2}{2 \cdot D}, x \pm \varepsilon\right) &= u_\varepsilon(t, x) \\ &\quad - \frac{\varepsilon^2}{2 \cdot D} \cdot \partial_t u_\varepsilon(t, x) \\ &\quad \pm \varepsilon \cdot \partial_x u_\varepsilon(t, x) \\ &\quad + \frac{\varepsilon^4}{8 \cdot D^2} \cdot \partial_t^2 u_\varepsilon(t, x) \\ &\quad \mp \frac{\varepsilon^3}{2 \cdot D} \cdot \partial_t \partial_x u_\varepsilon(t, x) \\ &\quad + \frac{\varepsilon^2}{2} \cdot \partial_x^2 u_\varepsilon(t, x) \\ &\quad + \mathcal{O}(\varepsilon^3) \end{aligned}$$

nach dem Satz von Taylor gelten. Durch Einsetzen dieser Identitäten in (3.15) ergibt sich dann

$$0 = -\frac{\varepsilon^2}{D} \cdot \partial_t u(t, x) + \varepsilon^2 \cdot \partial_x^2 u(t, x) + \mathcal{O}(\varepsilon^3)$$

und nach Multiplikation mit $-D/\varepsilon^2$ schließlich

$$0 = \partial_t u_\varepsilon(t, x) - D \cdot \partial_x^2 u_\varepsilon(t, x) + \mathcal{O}(\varepsilon).$$

Im Limes $\varepsilon \rightarrow 0$ erhalten wir also wirklich die partielle Differentialgleichung (3.14) und damit die Behauptung von Theorem 46.

Wir wollen abschließend erwähnen, dass man ohne (3.11) zu benutzen die reskalierte Mastergleichung als

$$2 \cdot u_\varepsilon(t, x) = u_\varepsilon(t - \Delta t, x - \Delta x) + u_\varepsilon(t - \Delta t, x + \Delta x) + \text{e.t.}$$

schreiben kann, und dann mit einer Taylor-Entwicklung bzgl. Δx und Δt zu führender Ordnung das Gesetz

$$0 = -2 \cdot \Delta t \cdot \partial_t u_\varepsilon(t, x) + (\Delta x)^2 \cdot \partial_x^2 u_\varepsilon(t, x) + (\Delta t)^2 \cdot \partial_t^2 u_\varepsilon(t, x) + \dots$$

ableiten kann. Man sieht nun leicht, dass (3.11) bzw.

$$\frac{(\Delta x)^2}{\Delta t} = \text{const} =: 2 \cdot D$$

die einzig sinnvolle Wahl für den Limes (3.10) ist: Denn gilt $\Delta t \gg (\Delta x)^2$ bzw. $\Delta t \ll (\Delta x)^2$, so erhält man zu führender Ordnung $\partial_t u_\varepsilon(t, x) \approx 0$ bzw. $\partial_x^2 u_\varepsilon(t, x) \approx 0$ und damit mit $\partial_t u(t, x) = 0$ bzw. $\partial_x^2 u(t, x) = 0$ eine degenerierte Gleichung im Limes $\varepsilon \rightarrow 0$.

3.2.2 Diffusion als Feldtheorie

In diesem Abschnitt entwickeln wir eine alternative Sicht auf Diffusionsprozesse. Diese wird es uns nicht nur erlauben, reale Diffusionsprozesse direkt durch partielle Differentialgleichungen zu modellieren, sondern stellt auch einen direkten Einstieg in die allgemeine Kontinuumsmechanik dar.

Wir betrachten im folgenden die Diffusion einer Substanz in einem Medium (zum Beispiel Salz oder Blütenpollen in Wasser). Obwohl wir es streng genommen mit *Vielteilchensystemen* zu tun haben, wollen wir nicht einzelne Atome oder Moleküle betrachten, sondern nur die effektive bzw. über die vielen Teilchen gemittelte Dynamik untersuchen. Eine wesentliche Grundidee ist dabei, dass es zwei unterschiedliche Sichtweisen bzw. Raum-Zeit-Skalen gibt:

1. Auf der *mikroskopischen Skala* wechselwirken einzelne Teilchen. Die charakteristischen Längen (z.B. der Abstand zweier Moleküle) und Zeiten (chemische Reaktionszeiten, Stoßzeiten von Molekülen) sind sehr klein; typische Größenordnungen sind z.B. Millimeter oder Mikrometer bzw. Bruchteile von Sekunden.
2. Unser alltägliches Leben findet auf der *makroskopischen Skala* statt und wir können bzw. wollen meist gar nicht so genau wissen, was im Einzelnen auf der molekularen Ebene passiert. Die typischen Längen (Größe eines Raumes oder Behälters, Breite eines Baches) sind vergleichsweise groß und werden zum Beispiel in Metern gemessen. Analoges gilt für die makroskopischen Zeiten, die üblicherweise in Minuten, Stunden usw. angegeben werden.

Fundamentale Prinzipien in einer Raumdimension

Wir entwickeln die makroskopische Feldtheorie zunächst im räumlich eindimensionalen Fall. Dazu stellen wir uns vor, dass die Substanz in einem sehr langen zylindrischen Behälter diffundiert, wobei der Durchmesser dieses Zylinders aber so klein ist, dass wir praktisch mit einer einzigen Ortsvariable auskommen können.

Postulat 47 (Existenz dreier Felder). *Es gibt drei Felder¹⁰ c , f und p , so dass:*

1. *Der Wert $c(t, x) \cdot \Delta x$ ist die (mittlere) Anzahl der Teilchen, die sich zur Zeit t im Ortsintervall $[x, x + \Delta x]$ befinden.¹¹ Insbesondere besitzt c als Teilchenkonzentration die Dimension $\mathbf{N} \cdot \mathbf{L}^{-1}$ und ist in der Regel nicht-negativ.*
2. *Der Wert $f(t, x) \cdot \Delta t$ liefert die (effektive und gemittelte) Anzahl der Teilchen, die während des Zeitintervalls $[t, t + \Delta t]$ die Position x passieren. Insbesondere ist f ein Teilchenfluss der Dimension $\mathbf{N} \cdot \mathbf{T}^{-1}$ und kann positive oder negative Werte annehmen (je nachdem, ob mehr Teilchen nach rechts oder nach links wandern).*
3. *Der Wert $p(t, x) \cdot \Delta t \cdot \Delta x$ quantifiziert die (effektive und gemittelte) Anzahl der Teilchen, die während des Zeitintervalls $[t, t + \Delta t]$ im Ortsintervall $[x, x + \Delta x]$ erzeugt oder vernichtet werden. Insbesondere ist p eine Teilchenproduktion der Dimension $[c] = \mathbf{N} \cdot \mathbf{L}^{-1} \cdot \mathbf{T}^{-1}$ und kann positive oder negative Werte annehmen.*

¹⁰Feld steht hier für eine Funktionen in t und x .

¹¹Die Anzahl der Teilchen wird meist in der Einheit mol angegeben, wobei 1 mol für ca. $6 \cdot 10^{23}$ Teilchen steht. Das molare Volumen eines idealen Gases bei Normalbedingungen beträgt ca. $2.2 \cdot 10^4$ Mol je Kubikmeter.

Hierbei bezieht sich ‚Teilchen‘ immer auf die diffundierende Substanz und Δx bezeichnet einen räumlichen Abstand, der

1. sehr klein im Vergleich zu den typischen makroskopischen Längen, aber
2. sehr groß im Vergleich zu den typischen mikroskopischen Längen ist.

Analoges gilt für Δt .

Prinzip 48 (Lokale Stoffbilanz). *Es gilt stets*

$$\partial_t c(t, x) + \partial_x f(t, x) = p(t, x), \quad (3.16)$$

sofern diese Gleichung ‚richtig‘ – d.h. gegebenenfalls in einem schwachen oder verallgemeinertem Sinne – interpretiert wird.

Herleitung. Die Anzahl der Teilchen in dem makroskopischen Kontrollintervall $[x_1, x_2]$ ist durch

$$\int_{x_1}^{x_2} c(t, x) dx$$

gegeben. Die zeitliche Änderung dieser Teilchenzahl setzt sich aus drei Teilen zusammen, nämlich

1. $+f(t, x_1)$ = die Teilchen, die gerade am linken Rand rein- oder rauswandern,
2. $-f(t, x_2)$ = die Teilchen, die gerade am rechten Rand rein- oder rauswandern,
3. $\int_{x_1}^{x_2} p(t, x) dx$ = die Teilchen, die gerade im Inneren des Kontrollvolumens erzeugt oder vernichtet werden,

und kann daher mittels

$$\frac{d}{dt} \int_{x_1}^{x_2} c(t, x) dx = +f(t, x_1) - f(t, x_2) + \int_{x_1}^{x_2} p(t, x) dx$$

bilanziert werden. Insbesondere gilt

$$\int_{x_1}^{x_2} \left(\partial_t c(t, x) + \partial_x f(t, x) - p(t, x) \right) dx = 0$$

für alle möglichen Werte von x_1 und x_2 . Das kann aber nur dann richtig sein, wenn schon (3.16) gilt. \square

Bemerkung.

1. Die Existenz der Felder ist im Rahmen dieser Vorlesung ein Postulat. Dieses kann aber – zumindest im Prinzip und mit Hilfe nichttrivialer asymptotischer Methoden – aus mikroskopischen Vielteilchen-Modellen abgeleitet werden.
2. Die Bilanzgleichung (3.16) ist ein fundamentales Prinzip der Kontinuumsmechanik, dass bei der Herleitung von mathematischen Modellen niemals verletzt werden sollte.

3. Für $p \equiv 0$ spiegelt (3.16) einen lokalen Erhaltungssatz wieder: Die Stoffmenge in einem Kontrollintervall $[x_1, x_2]$ kann sich dann nur dadurch ändern, das Teilchen über den Rand – d.h. an den Positionen x_1 und x_2 – in das Kontrollvolumen hinein- oder hinausströmen.
4. Die Felder c und f müssen nicht unbedingt stetig differenzierbar sein; unter Umständen können sie auch Unstetigkeiten aufweisen, wobei dann (3.16) in einem distributionellen Sinne interpretiert werden muss.¹² Analog kann die Produktion p distributionelle Anteile besitzen.

Obwohl (3.16) ein universelles Prinzip darstellt, legt diese Gleichung das räumliche und zeitliche Verhalten des Konzentrationsfeldes c nicht eindeutig fest. In vollständigen Modellen müssen daher – neben den weiter unten diskutierten Rand- und Anfangsbedingungen – zusätzlich sogenannte *konstitutive Gesetze*, d.h. Formeln für den Fluss f und die Produktion p , bereitgestellt werden. Diese sind aber *nicht universell*, sondern können von vielen anderen Aspekten und Größen abhängen: vom Stoff (Material), von der Prozessführung (Temperatur, Druck), von der Umgebung (z.Bsp. Strömung und chemische Zusammensetzung des Trägermediums).

Bevor wir solche konstitutiven Gesetze im Detail diskutieren, wollen wir die in diesem Abschnitt entwickelten Konzepte auf höhere Raumdimensionen übertragen.

Verallgemeinerungen auf N Raumdimensionen

Wir schreiben im Folgenden

$$x = (x_1, x_2, \dots, x_N)$$

für die N -dimensionale Ortsvariable (physikalisch relevant sind die Fälle $N = 3$ und $N = 2$) und verabreden folgende Sprechweise: *Skalare Felder* bzw. *Vektorfelder* sind Funktionen, die in jedem Punkt x (bzw. in jedem Punkt x und zu jeder Zeit t) Werte in \mathbb{R} bzw. \mathbb{R}^N annehmen. Darüber hinaus gibt es auch Tensorfelder (der verschiedensten Stufen), die aber hier zunächst keine Rolle spielen.

Für die folgenden Betrachtungen ist es auch wichtig, einige Grundtatsachen der Vektoranalysis zu wiederholen: Für eine (hinreichend glatte) skalare Funktionen $u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ wird das Vektorfeld des *Gradienten* $\text{grad}_x u = \nabla_x u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^N$ durch

$$\text{grad}_x u(x) := \left(\partial_{x_1} u(x), \dots, \partial_{x_N} u(x) \right)^T.$$

definiert, und für jedes (hinreichend glatte) Vektorfeld $v : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^N$ ist *Divergenz* $\text{div}_x v = \nabla_x \cdot v : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ eine skalare Funktion mit

$$\text{div}_x v(x) := \partial_{x_1} v_1(x) + \dots + \partial_{x_N} v_N(x),$$

wobei $v_n : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ die n -te Komponente von v ist. Desweiteren wird $\Delta_x := \text{div}_x \circ \text{grad}_x$ als *Laplace-Operator* bezeichnet, d.h. es gilt

$$\Delta_x u(x) = \text{div}_x \text{grad}_x u(x) = \partial_{x_1}^2 u(x) + \dots + \partial_{x_N}^2 u(x).$$

Ein integraler Bestandteil unserer Betrachtungen wird der Gaußsche Satz sein, siehe dazu Abbildung 3.8.

¹²Die Bilanzgleichung (3.16) impliziert dann sogenannte *Spungbedingungen* in Unstetigkeitsstellen.

Definition 49 (Kontrollvolumen). *Ein Kontrollvolumen ist ein Gebiet¹³ $\Xi \subset \mathbb{R}^N$, so dass der Gaußsche Satz*

$$\int_{\Xi} \operatorname{div}_x v(x) \, dx = \int_{\partial\Xi} v(x) \cdot \nu \, dS(x) \quad (3.17)$$

für alle hinreichend regulären Vektorfelder $v : \Xi \rightarrow \mathbb{R}^N$ gilt. Hierbei bezeichnen $\partial\Xi$ bzw. Ξ den topologischen Rand bzw. Abschluss von Ξ und $\nu : \partial\Xi \rightarrow \mathbb{R}^N$ ist das äußere Normalenvektorfeld an $\partial\Xi$.

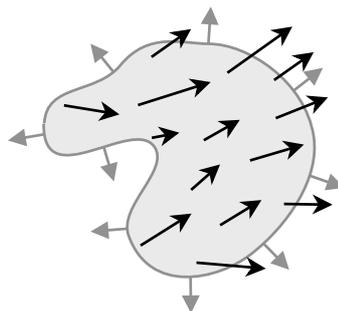


Abbildung 3.8: Ein zweidimensionales Kontrollvolumen Ξ mit glattem Rand $\partial\Xi$ und äußeren Normalenvektorfeld ν (Grau) sowie ein Vektorfeld (Schwarz). Da $\partial\Xi$ durch eine glatte Kurve beschrieben werden kann, ist $\nu(x)$ in jedem Punkt $x \in \partial\Xi$ wohldefiniert. Insbesondere steht $\nu(x)$ immer senkrecht auf $\partial\Xi$ und ist durch $|\nu(x)| = 1$ normalisiert.

Bemerkung (Hinreichende Bedingungen an Ξ). *Es stellt sich nun die Frage, ob ein gegebenes Gebiet Ξ ein Kontrollvolumen im Sinne von Definition 49 ist. Im Rahmen der klassischen Analysis wird der Gaußsche Satz (3.17) unter geeigneten Regularitätsannahmen an Ξ bzw. $\partial\Xi$ bewiesen. Insbesondere ist Ξ ein Kontrollvolumen, sofern eine der folgenden Bedingungen erfüllt ist:*

1. $\partial\Xi$ ist eine glatte Mannigfaltigkeit (d.h. $\partial\Xi$ ist eine glatte Kurve im \mathbb{R}^2 falls $N = 2$ bzw. eine glatte aber gekrümmte Fläche im \mathbb{R}^3 für $N = 3$)
2. Ξ ist ein N -dimensionaler Polyeder (Quader, Pyramiden u.ä. bzw. die N -dimensionalen Analoga) oder ein N -dimensionaler Kegel mit regulärer Grundfläche.¹⁴
3. Ξ kann aus endlich vielen solcher Gebiete zusammengesetzt werden.

Salopp kann man sagen: (3.17) gilt zwar nicht auf allen denkbaren Gebieten (z. Bsp. nicht auf solchen mit fraktalen Rändern) aber auf allen, die mit einfachen Mitteln hergestellt bzw. konstruiert werden können.

Wir können nun schließlich die im vorangegangenen Abschnitt beschriebenen Konzepte und Ideen wie folgt auf mehrere Raumdimensionen übertragen; siehe dazu auch Abbildung 3.9.

Postulat 50 (Existenz dreier Felder). *Es existieren die folgenden drei Felder:*

¹³Ein Gebiet ist eine offene und zusammenhängende Menge.

¹⁴Auf Polyedern und Kegeln ist der äußere Normalenvektor $\nu(x)$ zwar nicht in allen, aber immer noch in fast allen Punkten $x \in \partial\Xi$ definiert.

1. Die Teilchenkonzentration¹⁵ $c = c(t, x)$ ist skalar und besitzt die physikalische Dimension $\mathbf{N} \cdot \mathbf{L}^{-N}$.
2. Der Teilchenfluss $f = f(t, x)$ ist vektorwertig, wobei jede Komponente die Dimension $\mathbf{N} \cdot \mathbf{T}^{-1} \cdot \mathbf{L}^{-N+1}$ besitzt. Dabei beschreibt für jedes $n = 1 \dots N$ der Wert $f_n(t, x) \cdot \Delta t \cdot \Delta A$ die Anzahl der Teilchen, die während des Zeitintervalls $[t, t + \Delta t]$ senkrecht durch eine (gedachte) Kontrollhyperfläche fließen, wobei diese Kontrollhyperfläche die Dimension $N - 1$ sowie den Flächeninhalt ΔA besitzt und senkrecht zur n -ten Koordinatenrichtung steht. Oder anders gesagt: $f(t, x) \in \mathbb{R}^N$ beschreibt sowohl die Richtung als auch die Intensität des effektiven Teilchenstroms zur Zeit t im Punkte x .
3. Die Teilchenproduktion $p = p(t, x)$ ist skalar und besitzt die physikalische Dimension $\mathbf{N} \cdot \mathbf{T}^{-1} \cdot \mathbf{L}^{-N}$.

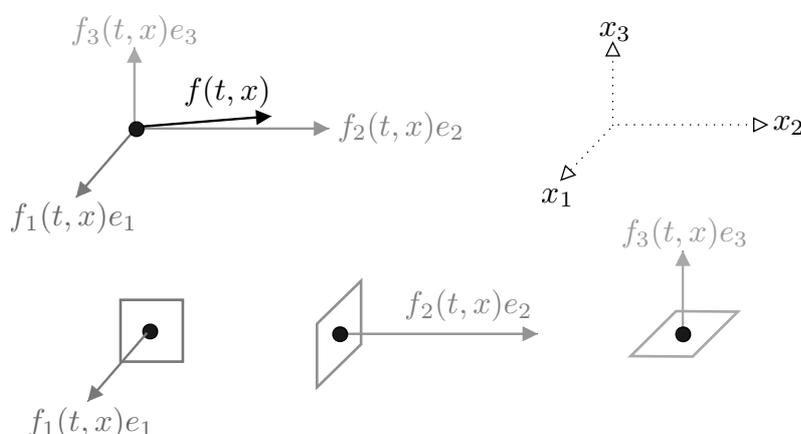


Abbildung 3.9: Zur Bedeutung des Flusses für $N = 3$: Jede der Komponenten von $f(t, x)$ beschreibt die Intensität des effektiven Teilchenstromes durch eine axenparallele Kontrollfläche; e_n ist dabei der n -te Einheitsvektor.

Prinzip 51 (Lokale Stoffbilanz). *Es gilt stets*

$$\partial_t c(t, x) + \operatorname{div}_x f(t, x) = p(t, x), \quad (3.18)$$

sofern diese Gleichung richtig interpretiert wird.

Herleitung. Auf jedem Kontrollvolumen Ξ kann die zeitliche Änderung der Stoffmenge durch

$$\frac{d}{dt} \int_{\Xi} c(t, x) dx = - \int_{\partial\Xi} f(t, x) \cdot \nu(x) dS(x) + \int_{\Xi} p(t, x) dx$$

bilanziert werden; hierbei liefert das Randintegral die Anzahl Teilchen, die gerade durch den Rand $\partial\Xi$ rein- oder rauslaufen, und das zweite Integral auf der rechten Seite beschreibt Produktionsprozesse im Inneren von Ξ . Auf Grund des Gaußschen Satzes gilt damit

$$\int_{\Xi} \left(\partial_t c(t, x) + \operatorname{div}_x f(t, x) - p(t, x) \right) dx = 0$$

für jedes Kontrollvolumen Ξ und damit auch (3.18). □

¹⁵Die Teilchenkonzentration c kann man auch als *Zahldichte* interpretieren.

Wie bereits oben für $N = 1$ erwähnt, muss die allgemeine Stoffbilanz aus Prinzip 51 noch durch *konstitutive Gesetze* ergänzt werden.

Konstitutive Gesetze für den Teilchenfluss

Das *Ficksche Gesetz*¹⁶

$$f = -D \cdot \text{grad}_x c \quad (3.19)$$

besagt, dass die Teilchen der diffundierenden Substanz sich im Mittel von Teilgebieten mit hoher Konzentration zu Teilgebieten mit niedriger Konzentration bewegen. Dies ist eine sehr sinnvolle Modellierungsannahme, denn die Diffusion von Teilchen wird immer die Tendenz haben, bestehende Konzentrationsunterschiede auszugleichen. Auf der mikroskopischen Skala kann man dies wie folgt verstehen: Die Bewegung eines einzelnen Substanzteilchens kann auf Grund der vielen Kollisionen mit den Molekülen des Mediums in idealisierter Näherung als Brownsche Bewegung bzw. als Random Walk betrachtet werden kann.

Die Diffusionskonstante D besitzt die Dimension \mathbf{L}^2/\mathbf{T} und hängt von der Substanz, dem Medium und der Temperatur ab. Sie kann entweder gemessen¹⁷ oder aus anderen Theorien abgeleitet werden. Für die Diffusion in einem *gasförmigen Medium* D kann zum Beispiel im Rahmen der kinetischen Gastheorie die *Smoluchowski-Einstein-Gleichung*¹⁸¹⁹

$$D = \frac{\lambda^2}{2 \cdot \tau}$$

begründet werden. Hierbei sind λ bzw. τ die mittlere freie Weglänge bzw. die mittlere freie Flugzeit zwischen zwei Kollisionen und entsprechen Δx bzw. Δt im vorangegangenen Abschnitt über Random Walks. Diffundiert die Substanz in einem *flüssigen Medium*, so gilt oftmals die *Stokes-Einstein-Gleichung*²⁰

$$D = \frac{k \cdot T}{6 \cdot \pi \cdot r \cdot \eta},$$

wobei T die absolute Temperatur, k die Boltzmann-Konstante, r der mittlere Radius der Substanzteilchen und η die Viskosität der Flüssigkeit ist. Bei der *Diffusion in einem Festkörper*²¹ wird häufig ein approximatives Gesetz der Form

$$D = C_1 \cdot \exp\left(-\frac{C_2}{T}\right),$$

verwendet, wobei die Materialkonstanten C_1 , C_2 sowohl von der Substanz als von der Kristallstruktur des Mediums abhängen.

¹⁶Adolf Eugen Fick (1829–1901), deutscher Physiologe.

¹⁷Typische Größenordnungen für die Diffusionskonstante D sind: $10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$ in Luft, $10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ in Wasser

¹⁸Marian von Smoluchowski (1872–1917), österreichisch-polnischer Physiker.

¹⁹Albert Einstein (1879–1955), deutscher Physiker. Im *annus mirabilis* 1905 schrieb Einstein vier sehr bedeutende Arbeiten, wobei eine der brownischen Molekularbewegung gewidmet war. In den anderen erklärte er den photoelektrischen Effekt, begründete die spezielle Relativitätstheorie bzw. promovierte über den molekularen Aufbau der Materie.

²⁰George Gabriel Stokes (1819–1903), irischer Mathematiker und Physiker.

²¹Stahl kann zum Beispiel dadurch gehärtet werden, dass man Kohlenstoffatome diffusiv in den Festkörper einbringt.

Das Ficksche Gesetz erlaubt viele *Verallgemeinerungen*. Zum einen kann die skalare Größe D durch eine symmetrische $N \times N$ -Matrix ersetzt werden, um *anisotrope* Diffusionsprozesse zu beschreiben. In anderen Modellen hängt D explizit von (t, x) oder gar von c oder $\text{grad}_x c$ ab. Mit anderen Worten: die konstitutiven Gesetze für den Teilchenfluss bzw. die Diffusionskonstante D sind alles andere als universell sondern in hohem Maße *material-* und *prozessabhängig*. Analoges gilt für die Gesetze der Teilchenproduktion.

Bei *Drift-Diffusionsprozessen* bewegen sich die einzelnen Substanzteilchen nicht nur durch die Brownsche Bewegung (bei der die Geschwindigkeiten der Einzelteilchen unkorreliert sind), sondern auch dadurch, dass es eine *kollektive Geschwindigkeit* gibt. Diese resultiert zum Beispiel aus der Geschwindigkeit des Trägermediums (Wind, Fließgeschwindigkeit o.ä.) oder aus der Wirkung äußerer Kräfte. In diesem Fall postuliert man

$$f = f_{\text{diff}} + f_{\text{drift}},$$

wobei der Diffusionsfluss wieder mit dem Fickschen Gesetz berechnet werden kann.

In einem sich bewegenden Trägermedium wird – zumindest bei moderaten Geschwindigkeiten sowie relativ kleinen Konzentrationen – oftmals das Gesetz

$$f_{\text{drift}} = c \cdot v$$

verwendet, wobei v ist Geschwindigkeit des Mediums bezeichnet (beachte, dass das Produkt einer Geschwindigkeit und einer Konzentration eine vektorielle Größe ist, die die Dimension eines Flusses besitzt). Insgesamt ergibt sich damit

$$f = -D \cdot \text{grad}_x c + c \cdot v \quad (3.20)$$

als konstitutives Gesetz für den Fluss der Substanzteilchen.

Im Rahmen der Elektrochemie nimmt man meist an, dass die Drift der elektrisch geladenen Substanzteilchen proportional zur elektrischen Feldstärke E ist, wobei μ ein materialabhängiger Mobilitätsparameter ist. Insbesondere gilt wieder (3.20) mit $v = \mu \cdot E$ und ist unter dem Namen Nernst-Planck-Gesetz²² bekannt.

Mögliche Randbedingungen

Die Kombination der allgemeinen Stoffbilanz (3.18) mit einem konstitutiven Gesetz wie in (3.19) oder (3.20) liefert eine einzelne partielle Differentialgleichung für die Konzentration c als Funktion von t und x . In den meisten praktischen Fällen kann aber x nicht beliebige Werte aus dem \mathbb{R}^N annehmen; vielmehr gilt

$$x \in \Omega,$$

wobei Ω ein gegebenes (beschränktes oder unbeschränktes) makroskopisches Gebiet ist. Ω kann zum Beispiel einen Container beschreiben und wir wollen im Folgenden immer voraussetzen, dass Ω ein Kontrollvolumen im Sinne von Definition 49 ist.

²²Max Karl Ernst Ludwig Planck (1858–1947), deutscher Physiker; Walther Nernst (1864–1941), deutscher Physiker und Chemiker.

Man kann nun zum einen *Anfangsbedingungen* der Form

$$u(t_0, x) = g(x)$$

in Form einer Funktion $g : \Omega \rightarrow \mathbb{R}_+$ vorschreiben, wobei $t_0 \in \mathbb{R}$ gerade die Anfangszeit ist. Darüber hinaus muss man aber auch festlegen, was am Rand $\partial\Omega$ passieren soll, wobei es mehrere sinnvolle Möglichkeiten gibt.

Bei Neumann-Randbedingungen wird die Normalkomponentes des Fluss auf $\partial\Omega$ durch eine Funktion $n : [t_0, \infty) \times \partial\Omega \rightarrow \mathbb{R}$ vorgeschrieben, d.h. wir suchen Konzentrationen c , so dass

$$f(t, x) \cdot \nu(x) = n(t, x) \quad \text{für alle } t \geq t_0, x \in \partial\Omega.$$

Dabei entscheidet das Vorzeichen von $n(t, x)$ darüber, ob zur Zeit t im Punkte x die Teilchen rein- oder rausfließen. Bei Dirichlet-Randbedingungen wird hingegen die Konzentration auf dem Rand vorgeschrieben, d.h. es soll

$$c(t, x) = d(t, x) \quad \text{für alle } t \geq t_0, x \in \partial\Omega$$

gelten, wobei nun $d : [t_0, \infty) \times \partial\Omega \rightarrow \mathbb{R}_{0+}$ gegeben ist. Manchmal ist es auch sinnvoll, eine Kombination von Konzentration und Normalenfluss vorzuschreiben. Dies führt dann auf die Robin-Randbedingungen²³

$$f(t, x) \cdot \nu(x) = r_1(t, x) + r_2(t, x) \cdot c(t, x) \quad \text{für alle } t \geq 0, x \in \partial\Omega,$$

wobei nun $r_1, r_2 : [t_0, \infty) \times \partial\Omega \rightarrow \mathbb{R}$ bekannt sind.

Desweiteren gibt es auch gemischte Randbedingungen, d.h. eine disjunkte Zerlegung von $\Gamma := \partial\Omega$ in Teilstücke $\Gamma_1, \dots, \Gamma_M$, auf denen jeweils andere Randbedingungen gefordert werden. Einen Sonderfall stellen in gewisser Weise periodische Randbedingungen dar: Ist Ω ein N -dimensionaler Quader mit den Kanten Längen L_1, \dots, L_N , so beschreiben die Bedingungen

$$c(t, x) = c(t, x + L_1 \cdot e_1) = c(t, x + L_2 \cdot e_2) = \dots = c(t, x + L_N \cdot e_N),$$

dass wir eigentlich an periodischen Lösungen auf ganz \mathbb{R}^N interessiert sind, wobei Ω gerade die Periodizitätszelle ist.

Einige einfache Beispiele

Um die Diffusion einer Substanz in einem abgeschlossenen Container Ω zu beschreiben, kombinieren wir das Ficksche Gesetz (3.19) mit dem Produktionsgesetz $p \equiv 0$ (keine Produktion) und homogenen Neumann-Randbedingungen ($n = 0$, d.h. kein Teilchenfluss durch die Containerwand). Wir erhalten damit Rand-Anfangswertproblem

$$\begin{cases} \partial_t c(t, x) - D \cdot \Delta_x c(t, x) = 0 & \text{in } \Omega, \\ c(t_0, x) = g(t, x) & \text{zur Zeit } t_0, \\ \partial_\nu c(t, x) = 0 & \text{auf } \partial\Omega, \end{cases}$$

wobei

$$\partial_\nu c(t, x) := \text{grad}_x c(t_0, x) \cdot \nu(x)$$

²³Victor Gustave Robin (1855–1897), französischer Mathematiker.

gerade die *Normalenableitung* von c ist. Insbesondere gilt

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} c(t, x) dx &= \int_{\Omega} \partial_t c(t, x) dx = -D \int_{\Omega} \operatorname{div}_x \operatorname{grad}_x c(t, x) dx \\ &= -D \int_{\partial\Omega} \partial_\nu c(t, x) dS(x) = 0, \end{aligned}$$

d.h. die Gesamtstoffmenge ist eine globale Erhaltungsgröße.

Wir können dieses Modell natürlich auch um Produktionsterme erweitern. Wird zum Beispiel die Substanz durch Licht erzeugt, das durch einen durchsichtigen Teil des Randes in eine Teilgebiet $\tilde{\Omega} \subset \Omega$ eindringt, so kann die erste der obigen Gleichungen durch

$$\partial_t c(t, x) - D \cdot \Delta_x c(t, x) = p(t, x)$$

ersetzt werden. Hierbei ist p eine gegebene Funktion auf Ω mit $p(t, x) = 0$ für $x \in \Omega \setminus \tilde{\Omega}$ die beschreibt, wie groß die Intensität des einfallenden Lichts und damit die Teilchenproduktion im Punkt x zur Zeit t ist.

In vielen Anwendungen spielen Reaktions-Diffusionsprozesse eine wichtige Rolle. In diesem Zusammenhang ist Ω zum Beispiel ein Behälter, in dem drei Substanzen A, B und C sowohl diffundieren als auch via



miteinander reagieren können. Wir können nun drei Konzentrationen c_A , c_B und c_C betrachten, wobei wir im Allgemeinen auch drei verschiedene Diffusionskonstanten D_A , D_B und D_C zulassen sollten. Unter der Annahme, dass die Behälterwand für alle Substanzen undurchdringlich ist und dass die Reaktionsraten durch das Massenwirkungsgesetz – siehe Prinzip 39 – berechnet werden können, erhalten wir das gekoppelte System

$$\begin{cases} \partial_t c_A(t, x) - D_A \cdot \Delta_x c_A(t, x) = +k_- \cdot \alpha \cdot c_C(t, x)^\gamma - k_+ \cdot \alpha \cdot c_A(t, x)^\alpha \cdot c_B(t, x)^\beta, \\ \partial_t c_B(t, x) - D_B \cdot \Delta_x c_B(t, x) = +k_- \cdot \beta \cdot c_C(t, x)^\gamma - k_+ \cdot \beta \cdot c_A(t, x)^\alpha \cdot c_B(t, x)^\beta, \\ \partial_t c_C(t, x) - D_C \cdot \Delta_x c_C(t, x) = -k_- \cdot \gamma \cdot c_C(t, x)^\gamma + k_+ \cdot \gamma \cdot c_A(t, x)^\alpha \cdot c_B(t, x)^\beta, \end{cases}$$

wobei k_- bzw. k_+ die Ratenkoeffizienten für die Rück- bzw. Hinreaktion mit sind. Diese Differentialgleichung können dann durch homogene Neumann-Randbedingungen für c_A , c_B , c_C sowie durch geeignete Anfangsdaten komplementieren werden.

Die Dynamik von Reaktions-Diffusionsprozesse kann sehr kompliziert sein und komplexe räumliche und zeitliche Muster produzieren.²⁴

Wird ein poröser Körper Ω (z.B. ein Betonklotz oder ein großer Badeschwamm) in ein Wasserbasin getaucht, so werden die Wasseratome durch Diffusion in diesen Körper eindringen. Um diesen Durchnässungsprozess zu modellieren, wollen wir ein einfaches Ficksches Gesetz für die Wasserfluss innerhalb von Ω verwenden. Wir nehmen außerdem an, dass der Rand $\Gamma = \partial\Omega$ aus zwei disjunkten Teilen besteht, nämlich aus einem irgendwie beschichteten Teil Γ_1 , durch den kein Wasser eindringen kann, sowie einem

²⁴Ist in der angewandten Mathematik von *Musterbildung* oder *Pattern Formation* die Rede, so geht es oftmals um die Eigenschaften von Reaktions-Diffusionsgleichungen.

Teil $\Gamma_2 = \Gamma \setminus \Gamma_1$ ohne Beschichtung. Insbesondere macht es Sinn, homogene Neumann-Randbedingungen auf Γ_1 aber inhomogene Dirichlet-Randbedingungen auf Γ_2 zu fordern, wobei der Randwert c_* auf Γ_2 der maximal möglichen Wasserkonzentration bei vollständiger Durchnässung entspricht.²⁵ Wir erhalten damit das Rand-Anfangswert-Problem

$$\begin{cases} \partial_t c(t, x) - D \cdot \Delta_x c(t, x) = 0 & \text{in } \Omega, \\ c(t_0, x) = 0 & \text{zur Zeit } t_0, \\ \partial_\nu c(t, x) = 0 & \text{auf } \Gamma_1, \\ c(t, x) = c_* & \text{auf } \Gamma_2, \end{cases}$$

wobei die verschwindenden Anfangsdaten beschreiben, dass vor dem Eintauchen der Körper vollständig durchgetrocknet ist.

Man kann natürlich argumentieren, dass sich auch am Rand Γ_2 die maximale Konzentration c_* nicht sofort, sondern erst allmählich einstellen wird. An Stelle der Dirichlet-Randbedingung kann man daher auch die Robin-Randbedingung

$$f(t, x) \cdot \nu(x) = -\kappa \cdot (c_* - c(t, x)) \quad \text{auf } \Gamma_2$$

mit Materialkonstante κ verwenden. Dieses Randgesetz beschreibt, dass um so mehr Wasser durch den Rand eindringen wird, je trockener dieser ist, und dass bei vollständiger Randdurchnässung kein Wasser mehr von außen eindringen kann. Insgesamt ergibt damit das realistischere Rand-Anfangswert-Problem

$$\begin{cases} \partial_t c(t, x) - D \cdot \Delta_x c(t, x) = 0 & \text{in } \Omega, \\ c(t_0, x) = 0 & \text{zur Zeit } t_0, \\ \partial_\nu c(t, x) = 0 & \text{auf } \Gamma_1, \\ c(t, x) + D \cdot \kappa^{-1} \cdot \partial_\nu c(t, x) = c_* & \text{auf } \Gamma_2, \end{cases}$$

das aber für sehr große $\kappa \gg 1$ fast identisch zur ersten Variante ist.

Ein (einfaches) Problem zur *Umweltverschmutzung* beschreibt die Ausbreitung von Schadstoffen, die durch ein Zulaufrohr in einen Fluss²⁶ eingebracht werden. Im einfachsten Fall ist der (unendliche lange) Fluss Ω ein unbeschränktes Teilgebiet des \mathbb{R}^2 mit den beiden (glatten) Uferkurven Γ_1 und Γ_2 , wobei das Geschwindigkeits- bzw. Strömungsfeld $v : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^2$ als bekannt vorausgesetzt wird. Auf einem kleinen Uferstück $\Gamma_* \subset \Gamma_1$ wird nun durch ein Rohr kontinuierlich schadstoffhaltiges Wasser hineingepumpt, wobei wir der Einfachheit halber annehmen, dass das Wasser aus dem Rohr mit konstantem Geschwindigkeitsbetrag η_* und konstanter Schadstoffkonzentration c_* hineingepumpt wird. Insgesamt ergeben sich die Kompatibilitätsbedingungen

$$v(t, x) \cdot \nu(x) = 0 \quad \text{für alle } t \geq t_0, x \in (\Gamma_1 \cup \Gamma_2) \setminus \Gamma_*$$

und

$$v(t, x) = -\eta_* \cdot \nu(x) \quad \text{für alle } t \geq t_0, x \in (\Gamma_1 \cup \Gamma_2) \setminus \Gamma_*$$

²⁵ c_* ist eine Materialkonstante, die von der ‚Porosität‘ abhängt. Es wird stets $c_* \ll c_0$ gelten, wobei $c_0 \approx (1 \cdot 10^{+3} \cdot \text{kg} \cdot \text{m}^{-3}) / (1.8 \cdot 10^{-2} \cdot \text{kg} \cdot \text{mol}^{-1}) \approx 5.5 \cdot 10^{+4} \cdot \text{kg} \cdot \text{mol}^{-1}$ der Kehrwert des molaren Volumens von Wasser ist.

²⁶Wir beziehen uns hier offensichtlich auf unterschiedliche Bedeutungen des deutschen Wortes *Fluss*. Das Englische ist hier wesentlich klarer: es gibt *river* (Fluss im landläufigen Sinne), *flux* (Fluss im Sinne von Prinzip 50) und auch noch *flow* (Fluss im Sinne der Theorie gewöhnlicher Differentialgleichungen).

für die Fließgeschwindigkeit v des Wassers. Um die Evolution der Schadstoffkonzentration c zu beschreiben, verwenden wir das konstitutive Gesetz (3.20) und fordern unterschiedliche Neumann-Bedingungen auf den verschiedenen Randstücken. Zum einen soll

$$f(t, x) \cdot \nu(x) = 0 \quad \text{für alle } t \geq t_0, x \in (\Gamma_1 \cup \Gamma_2) \setminus \Gamma_*$$

gelten, d.h. wir ignorieren, dass Schadstoffe am Ufer in das Erdreich eindringen können. Andererseits fordern wir

$$f(t, x) \cdot \nu(x) = -\eta_* \cdot c_* \quad \text{für alle } t \geq t_0, x \in \Gamma_*,$$

denn es soll ja immer Schadstoffe mit Rate $\eta_* \cdot c_*$ hineingepumpt werden. Nach Elimination von f erhalten wir insgesamt das Rand-Anfangswertproblem

$$\left| \begin{array}{ll} \partial_t c(t, x) + \operatorname{div}_x (c(t, x) \cdot v(t, x) - D \cdot \operatorname{grad}_x c(t, x)) = 0 & \text{in } \Omega, \\ c(t_0, x) = g(x) & \text{zur Zeit } t_0, \\ \partial_\nu c(t, x) = 0 & \text{auf } (\Gamma_1 \cup \Gamma_2) \setminus \Gamma_*, \\ c(t, x) + D \cdot \eta_*^{-1} \cdot \partial_\nu c(t, x) = c_* & \text{auf } \Gamma_*, \end{array} \right.$$

wobei g eine beliebige Anfangskonzentration beschreibt. Insbesondere gilt wegen (3.18) sowie der Randbedingungen die globale Stoffbilanz

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} c(t, x) \, dx &= - \int_{\Omega} \operatorname{div}_x f(t, x) \, dx = - \int_{\partial\Omega} f(t, x) \cdot \nu(x) \, dS(x) \\ &= \int_{\Gamma_*} \eta_* \cdot c_* \, dS(x) = \eta_* \cdot c_* \cdot |\Gamma_*|, \end{aligned}$$

d.h. die Gesamtschadstoffmenge erhöht sich zu jeder Zeit t in der Tat nur um den Betrag, der gerade durch das Rohr mit Querschnitt $|\Gamma_*|$ in den Fluss gepumpt wird.

3.3 Kontinuumsmechanik und Thermodynamik

In der Kontinuumsmechanik bzw. der Rationalen Thermodynamik wird die makroskopische Evolution eines materiellen Kontinuums – d.h. eines Gases, einer Flüssigkeit oder eines Festkörpers – durch im Allgemeinen mehrere Bilanzgleichungen der Bauart

$$\partial_t \text{dens}_Q(t, x) + \text{div}_x \text{flux}_Q(t, x) = \text{prod}_Q(t, x) \quad (3.21)$$

beschrieben, wobei jeder bilanzierte Größe Q in der Regel einer der folgenden Bedeutungen besitzt:

1. Masse oder Stoffmenge (ggf. für mehrere Substanzen separat),
2. Komponenten des Impulses oder Drehimpulses,
3. Energie,
4. Ladung.

Was immer die konkrete Interpretation von Q ist, nach dem Gaußschen Integralsatz gilt stets

$$\frac{d}{dt} \int_{\Xi} \text{dens}_Q(t, x) dx = - \int_{\partial \Xi} \text{flux}_Q(t, x) \cdot \nu(x) dS(x) + \int_{\xi} \text{prod}_Q(t, x) dx \quad (3.22)$$

für jedes Kontrollvolumen Ξ , und im Falle von $\text{prod}_Q \equiv 0$ spricht man auch von einem *Lokalen Erhaltungssatz für Q* .

Die Gleichungen (3.21) bzw. (3.22) beschreiben – wie im Falle der Diffusionsprozesse – wieder universelle Prinzipien der Physik, legen aber die Dynamik nicht eindeutig fest. Sie müssen daher wieder um material- und prozessabhängige *konstitutive Gesetze* ergänzt werden, d.h. um weitere Relationen zwischen den *Dichten* dens_Q , den *Flüssen* flux_Q , den *Produktionen* prod_Q sowie den makroskopischen Koordinaten t und x . Darüber hinaus kann bzw. muss man auch geeignete Rand- und Anfangsbedingungen identifizieren.

Die konstitutive Gesetze können entweder postuliert oder aus anderen, mikroskopischen Vielteilchenmodellen abgeleitet werden. Es gibt dabei aber gewisse Spielregeln, die sich aus anderen fundamentalen Prinzipien der Physik (Symmetrien, Beobachterinvarianz, Materielle Objektivität usw.) ergeben.

3.3.1 Kontinuumsmechanik in einer Raumdimension

In diesem Abschnitt entwickeln wir die Grundlagen der Kontinuumsmechanik und leiten dabei die Bilanzgleichungen für die Masse und den Impuls in allgemeiner Form her. Im Anschluss diskutieren wir die konstitutiven Gesetze für einen elastischen Festkörper und werden sehen, welche Form die Bilanzgleichung der Energie in diesem speziellen Fall annimmt.

Der Einfachheit halber beschränken wir uns in diesem Abschnitt auf den Fall einer Raumdimension, obwohl reale Körper natürlich immer drei-dimensional sind.

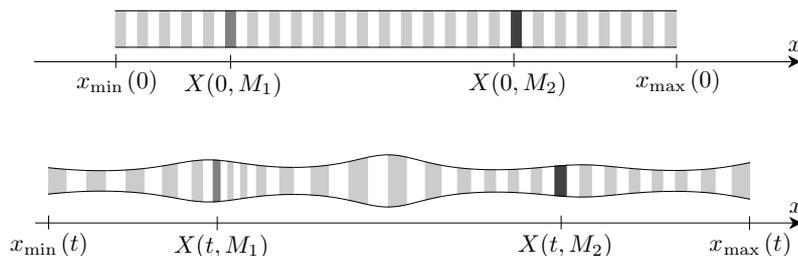


Abbildung 3.10: Schematische Darstellung der Deformation eines im Wesentlichen ein-dimensionalen Körpers, der in diesem Abschnitt als *materielles Kontinuum* modelliert wird. Dazu stellen wir uns zunächst vor, dass der Körper aus einer großen Anzahl sehr dünner ‚Scheibchen‘ zusammengesetzt ist, wobei jedes Scheibchen im Laufe der Zeit verschoben und deformiert werden kann. Die materielle Koordinate ist dann eine Art Scheibchenindex und nimmt im Limes Scheibchendicke $\rightarrow 0$ und Scheibchenzahl $\rightarrow \infty$ kontinuierliche Werte in einem Intervall $[M_{\min}, M_{\max}]$ an. Dabei gilt: Haben die einzelnen Scheibchen immer dieselbe Masse (*natürliche Interpretation*), so kann die materielle Koordinate zu jeder Zeit durch Integration der räumlichen Feld der Massendichte ρ berechnet werden, siehe Prinzip 57.

Räumliche und materielle Koordinaten

Wie in Abbildung 3.10 dargestellt, betrachten wir im Folgenden ein eindimensionales materielles Kontinuum, das sich zur Zeit t zwischen den beiden Positionen $x_{\min}(t)$ und $x_{\max}(t)$ befindet und damit die Länge

$$L(t) := x_{\max}(t) - x_{\min}(t)$$

besitzt. Punkte in diesem materiellen Kontinuum können nun zum einen durch eine *materielle* Koordinate $M \in [M_{\min}, M_{\max}]$ und zum anderen durch die entsprechende räumliche Position ausgezeichnet werden, wobei M_{\min} und M_{\max} nicht von der Zeit abhängen. Insbesondere gibt es das *Platzierungsfeld*²⁷

$$X(t, M)$$

dessen Wert gerade für jeden materiellen Punkt angibt, an welcher räumlichen Position x sich dieser zur Zeit t befindet. Aus Konsistenzgründen muss dabei

$$x_{\min}(t) = X(t, M_{\min}), \quad x_{\max}(t) = X(t, M_{\max})$$

gelten und

$$V(t, M) := \partial_t X(t, M) \tag{3.23}$$

ist gerade die *Geschwindigkeit*, mit der sich der materielle Punkt mit Koordinate M zur Zeit t im Raum bewegt.

Wir wollen immer annehmen, dass sich die materiellen Punkte im Laufe der Zeit nicht durchdringen können, d.h. das

$$\partial_M X(t, M) > 0 \quad \text{für alle } t \geq 0, M \in [M_{\min}, M_{\max}]$$

gilt. Deshalb ist für jedes feste t die Abbildung

$$M \mapsto x = X(t, M)$$

²⁷ *Feld* meint im einfachsten Fall einfach *hinreichend reguläre Funktion*. In einem allgemeineren Zusammenhang kann *Feld* auch für *Distribution* stehen.

strikt monoton wachsend und kann invertiert werden. Dies liefert ein Feld m in den Variablen t und x , so dass

$$m(t, X(t, M)) = M \quad \text{und} \quad X(t, m(t, x)) = x \quad (3.24)$$

für alle t und alle $M \in [M_{\min}, M_{\max}]$ bzw. $x \in [x_{\min}(t), x_{\max}(t)]$ gilt.

Materielle und räumliche Felder

In der Kontinuumsmechanik gibt es zwei Sichtweisen, nämlich die räumliche und die materielle, und man muss oft zwischen beiden wechseln.

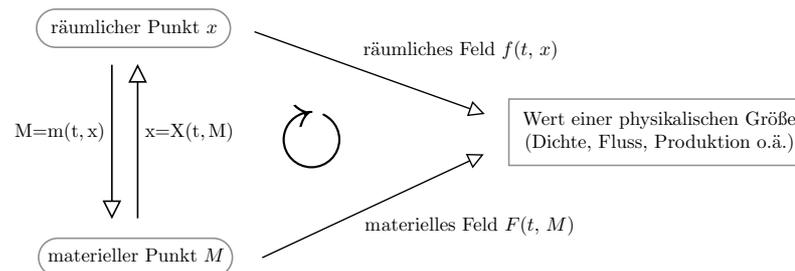


Abbildung 3.11: Die Felder f und F aus Prinzip 52 können durch den Koordinatenwechsel $x \leftrightarrow M$ ineinander umgerechnet werden.

Prinzip 52 (materielle und räumliche Felder). *Zu jeder Funktion f in den Variablen t und x existiert eine Funktion F in den Variablen t und M , so dass*

$$F(t, M) = f(t, X(t, M)), \quad f(t, x) = F(t, m(t, x)). \quad (3.25)$$

und damit $[f] = [F]$ gilt, siehe Abbildung 3.11. Dabei wird x die räumliche Koordinate und M die materielle Koordinate genannt. Insbesondere gilt es zu jedem räumlichen Feld f ein entsprechendes materielles Feld F und umgekehrt.

Die Geschwindigkeit hatten wir in (3.23) zunächst als materielles Feld V definiert; es gibt aber auch das entsprechende räumliche Feld v mit

$$v(t, x) = V(t, m(t, x)), \quad V(t, M) = v(t, X(t, M)). \quad (3.26)$$

Außerdem ist die materielle Koordinate M gerade die materielle Version des räumlichen Feldes m und X kann als das materielle Feld der räumlichen Koordinate x betrachtet werden.

Lemma 53 (Evolution der materiellen Koordinate m). *Es gilt*

$$\partial_t m + v \partial_x m = 0, \quad (3.27)$$

d.h.

$$\partial_t m(t, x) + v(t, x) \partial_x m(t, x) = 0$$

für alle $t \geq 0$ und jedes $x \in [x_{\min}(t), x_{\max}(t)]$. Insbesondere erfüllt m die Transportgleichung zum Geschwindigkeitsfeld v .

Beweis. Differenzieren wir die erste Gleichung in (3.24) nach t , so erhalten wir

$$\partial_t m(t, X(t, M)) + \partial_x m(t, X(t, M)) \partial_t X(t, M) = 0$$

und wegen (3.23) und (3.26) auch

$$\partial_t m(t, X(t, M)) + v(t, X(t, M)) \partial_x m(t, X(t, M)) = 0$$

für alle t und alle M . Die Behauptung folgt mit $x = X(t, M)$. \square

Von besonderem Interesse sind Zeitableitungen bei festgehaltener materieller Koordinate. Für ein materielles Feld F gilt nach (3.25)

$$\begin{aligned} \partial_t F(t, M) &= \partial_t f(t, X(t, M)) + \partial_x f(t, X(t, M)) \partial_t X(t, M) \\ &= (\partial_t f + v \partial_x f)(t, X(t, M)), \end{aligned}$$

wobei das durch

$$\frac{Df}{Dt}(t, x) := \partial_t f(t, x) + v(t, x) \partial_x f(t, x) \quad (3.28)$$

definierte räumliches Feld die *materielle Ableitung* von f genannt wird. Die Identität (3.27) kann nun auch als $\frac{D}{Dt}m = 0$ geschrieben werden.

Wir formulieren außerdem zwei Hilfsresultate; diese sind sehr wichtige Hilfsmittel in der Kontinuumsmechanik und beruhen auf elementaren mathematischen Argumenten.

Lemma 54 (Lemma von du Bois-Reymond²⁸). *Sei t fest und f ein räumliches Feld mit*

$$\int_{x_1}^{x_2} f(t, x) dx = 0$$

für alle x_1 und x_2 . Dann gilt $f(t, x) = 0$ für alle x .

Ist f eine stückweise stetige Funktion, so folgt die Behauptung unmittelbar aus einem Widerspruchsbeweis. Eine analoge Aussage gilt aber für viel allgemeinere Felder. Auch das folgende Prinzip hat einen sehr einfachen mathematischen Kern, nämlich den Hauptsatz der Differential und Integralrechnung.

Lemma 55 (Reynolds'sches Transport-Theorem²⁹). *Es gilt*

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{X(t, M_1)}^{X(t, M_2)} f(t, x) dx &= \int_{X(t, M_1)}^{X(t, M_2)} \partial_t f(t, x) dx \\ &\quad + F(t, M_2) \cdot V(t, M_2) - F(t, M_1) \cdot V(t, M_1) \end{aligned}$$

für jedes räumliche Felder f und alle t , M_1 und M_2 .

Beweis. Auf Grund der Differentiationsregeln gilt

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{X(t, M_1)}^{X(t, M_2)} f(t, x) dx &= \int_{X(t, M_1)}^{X(t, M_2)} \partial_t f(t, x) dx \\ &\quad + f(t, X(t, M_2)) \partial_t X(t, M_2) - f(t, X(t, M_1)) \partial_t X(t, M_1) \end{aligned}$$

und die Behauptung folgt aus (3.23) und Prinzip 52. \square

²⁸Emil Heinrich du Bois-Reymond (1818–1896), deutscher Physiologe und Mediziner.

²⁹Osborne Reynolds (1842–1912), britischer Physiker.

Die Massebilanz

Wir wollen nun eine Evolutionsgleichung für die *Massendichte* ρ eines materiellen Kontinuums ableiten. Die wesentliche Beobachtung ist dabei, dass aus physikalischen Gründen

$$\int_{X(t, M_1)}^{X(t, M_2)} \rho(t, x) \, dx = \int_{X(0, M_1)}^{X(0, M_2)} \rho(0, x) \, dx \quad (3.29)$$

für alle Zeiten t und alle M_1, M_2 gelten muß. Diese Gleichung beschreibt, dass die Masse zwischen zwei festgehaltenen materiellen Punkten M_1 und M_2 sich nicht mit der Zeit ändert sondern nur durch die Bewegung der materiellen Punkte immer anders im Raum verteilt wird. Insbesondere hängt die *Gesamtmasse* μ nicht von der Zeit ab, d.h. es gilt

$$\int_{x_{\min}(t)}^{x_{\max}(t)} \rho(t, x) \, dx = \mu$$

für alle t .

Wir werden nun aus dem physikalischen Gesetz (3.29) eine partielle Differentialgleichung für das räumliche Feld ρ ableiten.

Prinzip 56 (Massebilanz in räumlichen Koordinaten, Kontinuitätsgleichung). *Die Gleichungen*

$$\partial_t \rho + \partial_x(\rho v) = 0, \quad (3.30)$$

und

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho \partial_x v \quad (3.31)$$

sind stets erfüllt und beschreiben, dass Masse weder erzeugt noch vernichtet wird.

Herleitung. Nach (3.29) gilt

$$0 = \frac{d}{dt} \int_{X(t, M_1)}^{X(t, M_2)} \rho(t, x) \, dx$$

für alle M_1, M_2 und das Reynoldschen Transporttheorem liefert

$$0 = \int_{X(t, M_1)}^{X(t, M_2)} \partial_t \rho(t, x) \, dx + (\rho v)(t, X(t, M_2)) - (\rho v)(t, X(t, M_1)),$$

wobei wir die Randterme nicht materiell, sondern räumlich geschrieben haben. Anstatt M_1 und M_2 können auch $x_1 = X(t, M_1)$ und $x_2 = X(t, M_2)$ beliebig gewählt werden. Insbesondere muss die Identität

$$0 = \int_{x_1}^{x_2} \partial_t \rho(t, x) \, dx + (\rho v)(t, x_2) - (\rho v)(t, x_1) = \int_{x_1}^{x_2} (\partial_t \rho + \partial_x(\rho v))(t, x) \, dx,$$

für alle x_1, x_2 erfüllt sein, und (3.30) folgt unmittelbar aus Lemma 54. Die Identität (3.31) folgt mit (3.28) direkt aus (3.30) \square

Interpretation der materiellen Koordinate

Wir haben eine gewisse Freiheit, die materielle Koordinate M einzuführen, wobei aber immer (3.27) und (3.29) gelten werden. Wir wollen bei unseren Betrachtungen die *natürliche Interpretation* von M verwenden, die wie folgt formuliert werden kann; siehe auch die Erklärungen zu Abbildung 3.10.

Prinzip 57 (Natürlicher Zusammenhang zwischen m und ϱ). *Es gilt $M_{\min} = 0$ und $M_{\max} = \mu$ sowie*

$$m(t, x) = \int_{x_{\min}(t)}^x \varrho(t, \tilde{x}) d\tilde{x}. \quad (3.32)$$

und damit $[m] = [M] = \mathbf{M}$.

Bemerkung.

1. Das Feld m erfüllt die Differentialgleichungen

$$\partial_x m = \varrho, \quad \partial_t m = -\varrho v, \quad (3.33)$$

wobei (3.33)₁ direkt aus (3.32) folgt und (3.33)₂ mit Hilfe von (3.30) abgeleitet werden kann.

2. Es gilt³⁰

$$\partial_M X = P^{-1} = \frac{1}{P}, \quad (3.34)$$

denn (3.24)₁ impliziert $\partial_x m(t, X(t, M)) \partial_M X(t, M) = 1$ und außerdem gilt $\partial_x m(t, X(t, M)) = P(t, M)$ nach (3.33)₁ und (3.25).

3. Die oben erwähnte Freiheit in der Wahl der materiellen Koordinate bedeutet aus mathematischer Sicht, dass man das Feld m zur Zeit $t = 0$ im Prinzip durch eine beliebige monoton wachsende Funktion vorschreiben kann. In diesem Fall kann man mit (3.29) eine zu (3.32) analoge Formel etablieren, muss aber auch viele der weiten unten abgeleiteten Gesetze abändern.

Folgerung 58 (Massebilanz in materiellen Koordinaten). *Es gilt*

$$\partial_t P^{-1} - \partial_M V = 0, \quad (3.35)$$

wobei P^{-1} das materielle Feld der spezifischen Länge ist.

Beweis. Nach (3.34) und (3.23) gilt $\partial_t P^{-1} = \partial_t \partial_M X = \partial_M V$. □

Unser nächstes Resultat erlaubt es uns, allgemeine Bilanzgleichungen in materiellen (bzw. räumlichen) Koordinaten in entsprechende partielle Differentialgleichungen für räumliche (bzw. materielle) Felder umzuwandeln.

Theorem 59 (materielle und räumliche Bilanzgleichungen). *Die Gleichungen*

$$\partial_t F_1 + \partial_M F_2 = F_3 \quad (3.36)$$

und

$$\partial_t(\varrho f_1) + \partial_x(\varrho f_1 v + f_2) = \varrho f_3 \quad (3.37)$$

sind äquivalent, wobei die F_i 's beliebige materielle Felder und die f_i 's die entsprechenden räumlichen Felder sind.

³⁰Der Buchstabe 'P' ist auch das Symbol für das große griechische *Rho*.

Beweis. Wir zeigen die Implikation (3.36) \implies (3.37), wobei alle Schritte umgekehrt werden können. Aus

$$F_i(t, M) = f_i(t, X(t, M))$$

können die Identitäten

$$\partial_t F_i(t, M) = \partial_t f_i(t, X(t, M)) + v(t, X(t, M)) \partial_x f_i(t, X(t, M))$$

sowie

$$\partial_M F_i(t, M) = \varrho^{-1}(t, X(t, M)) \partial_x f_i(t, X(t, M))$$

durch Differentiation und Verwendung von (3.23), (3.26) und (3.34) abgeleitet werden. Insbesondere impliziert (3.36) nach Multiplikation mit ϱ die Gleichung

$$(\varrho \partial_t f_1)(t, x) + (\varrho v \partial_x f_1)(t, x) + (\partial_x f_2)(t, x) = (\varrho f_3)(t, x),$$

wobei wir $X(t, M)$ durch x ersetzt haben. Andererseits kann die Massebilanz (3.30) als

$$(f_1 \partial_t \varrho)(t, x) + (f_1 \partial_x (\varrho v))(t, x) = 0,$$

geschrieben werden, und (3.37) folgt mit der Produktregel nach Addition der letzten beiden Differentialgleichungen. □

Die Impulsbilanz

Die Impulsbilanz in einem materiellen Kontinuum beschreibt die Evolution der *Impulsdichte* ϱv . Die wesentliche Beobachtung ist dabei, dass nach dem Newtonschen Gesetz die zeitliche Änderung des Impulses eines materiellen Punktes M bzw. eines materiellen Segments $[M_1, M_2]$ gerade die Summe der wirkenden Kräfte ist.³¹ In der Kontinuumsmechanik unterscheidet man dabei zwischen den folgenden Arten von Kräften:

1. Externe Volumenkräfte – wie zum Beispiel die Gravitationskraft – werden durch ein räumliches Feld g bzw. durch das entsprechende materielle Feld G beschrieben. Hierbei gibt g an, welche Kraft pro Masse zur Zeit t am Ort x wirkt, d.h. g ist eine Beschleunigung. Es ist meist klar, wie g von t und x abhängt.
2. Die inneren Kräfte wirken zwischen den materiellen Punkten und werden durch den materiellen Spannungstensor Σ bzw. sein räumliches Gegenstück σ beschrieben. Hierbei gibt Σ an, welche Kraft ein kleines materielles Segment auf ein benachbartes Segment ausübt. Konstitutive Gesetze für die Spannung werden meist in materiellen Koordinaten – d.h. durch explizite Formeln für Σ – angegeben.
3. Externe Oberflächenkräfte – wie zum Beispiel Zug- oder Kompressionskräfte – werden durch Randbedingungen modelliert und erscheinen daher nicht in der Differentialgleichung für die Impulsdichte.

³¹Ganz Allgemein kann man sagen: Viele physikalische Prinzipien können am einfachsten in materiellen Koordinaten formuliert und hergeleitet werden, wohingegen unsere Messungen und Beobachtungen sich in der Regel auf die räumlichen Koordinaten beziehen. Die materielle bzw. räumliche Sicht werden manchmal als *Lagrange-Bild* bzw. *Euler-Bild* bezeichnet und das Umrechnen zwischen beiden 'Bildern' ist eine wesentlicher Teil der mathematischen Kontinuumsmechanik.

Prinzip 60 (Impulsbilanz in räumlichen Koordinaten). *Die Gleichungen*

$$\partial_t(\varrho v) + \partial_x(\varrho v^2 - \sigma) = \varrho g \quad (3.38)$$

und

$$\varrho \frac{Dv}{Dt} = \varrho g + \partial_x \sigma \quad (3.39)$$

sind stets erfüllt und spiegeln Newtons Axiome wider.

Herleitung. Wir betrachten ein materielles Segment $[M_1, M_2]$, dessen Gesamtimpuls durch

$$\int_{X(t, M_1)}^{X(t, M_2)} (\varrho v)(t, x) dx$$

gegeben ist. Die äußeren Volumenkräfte summieren sich zu

$$\int_{X(t, M_1)}^{X(t, M_2)} (\varrho g)(t, x) dx,$$

wohingegen der Beitrag der inneren Kräfte³² durch

$$\Sigma(t, M_2) - \Sigma(t, M_1) = \sigma(t, X(t, M_2)) - \sigma(t, X(t, M_1))$$

gegeben ist. Insgesamt erhalten wir mit dem Newtonsches Gesetz die Formel

$$\frac{d}{dt} \int_{X(t, M_1)}^{X(t, M_2)} (\varrho v)(t, x) dx = +\sigma(t, X(t, M_2)) - \sigma(t, X(t, M_1)) + \int_{X(t, M_1)}^{X(t, M_2)} (\varrho g)(t, x) dx$$

als Impulsbilanz des materiellen Segments $[M_1, M_2]$. Die linke Seite kann mit dem Reynoldssches Transporttheorem – siehe Lemma 55 – als

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{X(t, M_1)}^{X(t, M_2)} (\varrho v)(t, x) dx &= \int_{X(t, M_1)}^{X(t, M_2)} (\partial_t(\varrho v))(t, x) dx \\ &\quad (\varrho v^2)(t, X(t, M_2)) - (\varrho v^2)(t, X(t, M_1)) \end{aligned}$$

geschrieben werden. Wir erhalten somit

$$\begin{aligned} \int_{x_1}^{x_2} (\partial_t(\varrho v))(t, x) dx + (\varrho v^2)(t, x_2) - (\varrho v^2)(t, x_1) = \\ + \sigma(t, x_2) - \sigma(t, x_1) + \int_{x_1}^{x_2} (\varrho g)(t, x) dx, \end{aligned}$$

³²Im Inneren des Segments – d.h. in jedem materiellen Punkt M mit $M_1 < M < M_2$ – heben sich die inneren Kräfte nach dem dritten Newtonsches Axiom (*actio=reactio*) auf, so dass in der Tat nur ‚Randterme‘ zu berücksichtigen sind.

wobei $x_1 := X(t, M_1)$ und $x_2 := X(t, M_2)$, und nach elementaren Transformationen auch

$$\int_{x_1}^{x_2} \left(\partial_t(\varrho v) + \partial_x(\varrho v^2 - \sigma) - \varrho g \right)(t, x) dx = 0.$$

Da x_1 und x_2 letztlich beliebig sind, folgt (3.38) aus Lemma 54. Mit Hilfe der Produktregel, der Massenbilanz (3.30) sowie (3.28) verifizieren wir außerdem

$$\begin{aligned} \partial_t(\varrho v) + \partial_x(\varrho v^2) &= \varrho \partial_t v + v \partial_t \varrho + v \partial_x(\varrho v) + \varrho v \partial_x v \\ &= \varrho \left(\partial_t v + v \partial_x v \right) + v \left(\partial_t \varrho + \partial_x(\varrho v) \right) = \varrho \frac{Dv}{Dt} + 0, \end{aligned}$$

wobei wir die Abhängigkeit von (t, x) der besseren Übersichtlichkeit wegen nicht explizit angeben haben. Die Gleichung (3.39) ist damit nur eine Umformulierung von (3.38). \square

Folgerung 61 (Impulsbilanz in materiellen Koordinaten).

$$\partial_t V - \partial_M \Sigma = G \quad (3.40)$$

Beweis. Die Behauptung folgt mit Theorem 59 aus (3.38). \square

Abschließend wollen wir noch die physikalischen Dimensionen aller in der Masse- und der Impulsbilanz auftretenden Felder zusammenfassen. In einer Raumdimension³³ gilt

$$[t] = \mathbf{T}, \quad [x] = \mathbf{L}, \quad [m] = \mathbf{M}$$

sowie

$$[\varrho] = \frac{\mathbf{M}}{\mathbf{L}}, \quad [v] = \frac{\mathbf{L}}{\mathbf{T}}, \quad [g] = \frac{\mathbf{L}}{\mathbf{T}^2}, \quad [\varrho v] = \frac{\mathbf{M}}{\mathbf{T}}, \quad [\varrho v^2] = [\sigma] = \frac{\mathbf{M} \cdot \mathbf{L}}{\mathbf{T}^2} = [\text{Kraft}].$$

Beachte, dass die entsprechenden materiellen Felder die gleichen Dimensionen besitzen, d.h. es gilt $[V] = [v]$ usw.

3.3.2 Elastizitätstheorie in einer Raumdimension

Für alle bisherigen Betrachtungen war es nicht wichtig, von welcher Art das materielle Kontinuum war – d.h. ob es sich um ein Gas, eine Flüssigkeit oder einen Festkörper handelt. Die konstitutiven Gesetze für die Spannung hängen aber sehr stark von Art und Material des Kontinuums ab.

Wir wollen im Folgenden die Mechanik eines Festkörpers beschreiben und dabei ein sehr einfaches konstitutives Gesetz voraussetzen.

Gesetz 62 (Elastisches Material). *In einem elastischen Material hängt die Spannung nur vom Gradienten des materiellen Platzierungsfeldes ab. Insbesondere gilt*

$$\Sigma(t, M) = \varphi(\partial_M X(t, M)) = \varphi(P^{-1}(t, M)) \quad (3.41)$$

für eine materialabhängige und monoton wachsende Funktion φ , wobei das letzte Gleichheitszeichen wegen (3.34) gilt.

³³In zwei oder drei Raumdimensionen ergeben sich leicht andere Dimensionen. Für $N = 3$ besitzt ϱ zum Beispiel die Dimension $\mathbf{M} \cdot \mathbf{L}^{-3}$ und σ ist eine Spannung=Kraft pro Fläche mit Dimension $\mathbf{M} \cdot \mathbf{L}^{-1} \cdot \mathbf{T}^{-2}$.

Es gibt natürlich nicht nur elastische sondern auch plastische Verformungen eines Festkörpers. Diese können aber nicht mit (3.41) sondern nur durch kompliziertere konstitutive Gesetze beschrieben werden.

Eine wesentliche Eigenschaft elastischer Materialien ist, dass die Masse und die Impulsbilanz schon die Bilanz der mechanischen Energie implizieren. Im Allgemeinen – d.h. ohne das Gesetz 62 oder wenn zusätzlich auch noch Wärmeenergie bilanziert werden muss – kann die Energiebilanz aber nicht aus der Massen- und Impulsbilanz abgeleitet werden.³⁴

Theorem 63 (Mechanische Energiebilanz eines elastischen Körpers). *Mit dem Materialgesetz 62 gelten auch die Gleichungen*

$$\partial_t \left(\frac{1}{2} V^2 + \Phi(P^{-1}) \right) - \partial_M \left(\varphi(P^{-1}) V \right) = G V \quad (3.42)$$

und

$$\partial_t \left(\frac{1}{2} \varrho v^2 + \varrho \Phi(\varrho^{-1}) \right) + \partial_x \left(\frac{1}{2} \varrho v^3 + \varrho \Phi(\varrho^{-1}) v - \varphi(P^{-1}) v \right) = \varrho g v, \quad (3.43)$$

wobei Φ eine Stammfunktion von φ ist. Insbesondere bilanzieren (3.42) bzw. (3.43) die mechanische Energie in materiellen bzw. räumlichen Koordinaten.³⁵

Beweis. Mit Hilfe der Kettenregel sowie (3.35) und (3.40) erhalten wir

$$\begin{aligned} \partial_t \left(\frac{1}{2} V^2 + \Phi(P^{-1}) \right) &= V \partial_t V + \varphi(P^{-1}) \partial_t P^{-1} \\ &= V \left(\partial_M \varphi(P^{-1}) + G \right) + \varphi(P^{-1}) \partial_M V = \partial_M \left(\varphi(P^{-1}) V \right) + G V \end{aligned}$$

und damit (3.42). Theorem 59 liefert dann auch (3.43). \square

Spannungs-Dehnungs-Relationen

Bisher waren alle räumlichen Felder immer zeit- und ortsabhängig. Man kann aber natürlich auch stationäre, d.h. zeitunabhängige Felder betrachten. Ein wichtiges Beispiel sind die in Abbildung 3.12 illustrierten *Spannungs-Dehnungs-Experimente*: Ein gegebenes Materialstück wird auf der einen Seite fest eingespannt und auf der anderen Seite mit einer zeitlich konstanten Zugkraft τ belastet. Nach einer (kurzen) Relaxationszeit wird sich ein mechanisches Gleichgewicht einstellen, das heißt der Körper wird sich ausdehnen und dann eine feste Länge annehmen, die aber natürlich von τ abhängen wird. Für jedes τ gibt es also eine stationäre *Gleichgewichtsplatzierung* $X_\tau(M)$, wobei X_0 gerade die stationäre Platzierung ohne äußere Zugkraft beschreibt.

In der technischen Mechanik ist es sehr wichtig zu verstehen, wie die *Dehnung*

$$\varepsilon_\tau := \frac{L_\tau - L_0}{L_0}$$

von der Randspannung τ abhängt bzw. welche Kraft aufgebracht werden muss, um bei einem gegebenen Material eine bestimmte Dehnung zu erzielen. Wir wollen nun verstehen, wie dieses Problem im Rahmen der Kontinuumsmechanik elastischer Materialien beschrieben werden kann.

³⁴Analog gilt: In der klassischen Mechanik der Massenpunkte kann der Energiesatz aus dem Newtonschen Gesetz (Impulssatz) abgeleitet werden. In der Thermodynamik ist der Energiesatz aber unabhängig vom Impulssatz, eben weil nun auch thermische Energie berücksichtigt wird.

³⁵ $\Phi(P^{-1})$ ist die *spezifische innere Energiedichte*, $\varrho \Phi(\varrho^{-1})$ die *innere Energiedichte* ist. Spezifische bzw. unspezifische Dichten beziehen sich immer auf Massen bzw. Volumen.

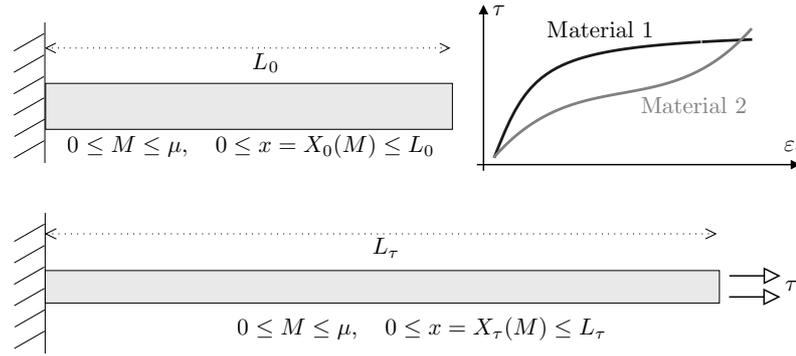


Abbildung 3.12: Schematische Darstellung eines Zugversuchs sowie des resultierenden Spannungs-Dehnungs-Diagramms.

Die Stationarität impliziert $\partial_t X_\tau = V \equiv 0$ und damit auch

$$v_\tau(x) = 0 \quad \text{für alle } x \in [0, L_\tau].$$

Insbesondere reduziert sich die Impulsbilanz auf die Differentialgleichung

$$\partial_x \sigma_\tau(x) \equiv 0$$

und auf Grund der Randbedingungen erhalten wir

$$\sigma_\tau(x) = \tau \quad \text{für alle } x \in [0, L_\tau].$$

Auf Grund der Elastizität gilt außerdem

$$\partial_x \sigma_\tau \equiv 0 \quad \implies \quad \partial_x \varphi(\varrho_\tau^{-1}) \equiv 0 \quad \implies \quad \partial_x \varrho_\tau \equiv 0$$

d.h. die Massendichte ist auch konstant und hängt nicht von x ab. Aus Konsistenzgründen muss dabei

$$\varrho_\tau = \frac{\mu}{L_\tau}$$

gelten, wobei μ wieder die Gesamtmasse ist. Insgesamt – siehe (3.34) – ergibt sich

$$X_\tau(M) = \frac{L_\tau M}{\mu} \quad \text{bzw.} \quad \partial_M X_\tau(M) = \left(1 + \frac{L_\tau - L_0}{L_0}\right) \frac{L_0}{\mu} = (1 + \varepsilon_\tau) \varrho_0^{-1}$$

und (3.41) kann als

$$\tau = \sigma_\tau = \varphi\left((1 + \varepsilon_\tau) \varrho_0^{-1}\right) =: \psi(\varepsilon_\tau). \quad (3.44)$$

geschrieben werden. Die konstitutive Funktion φ ist also bis auf triviale Transformationen gerade der funktionale Zusammenhang ψ aus dem Spannungs-Dehnungsdiagramm und kann daher in Zugversuchen experimentell bestimmt werden. Mit dieser so gewonnenen Funktion können dann im Anschluss auch die dynamischen Aspekte untersucht werden.

Die Wellengleichung für elastischer Körper

Die durch die Gleichgewichtsplatzierung X_0 beschriebene Konfiguration des elastischen Körpers wird oftmals auch als *spannungsfreie Referenzplatzierung* bezeichnet und an Stelle des zeitabhängigen Platzierungsfelds $X(t, M)$ betrachtet man dann das *Verschiebungsfeld*

$$U(t, M) := X(t, M) - X_0(M).$$

Dieses beschreibt die lokalen Abweichungen vom spannungsfreien Referenzzustand und das Materialgesetz (3.41) kann als

$$\Sigma(t, M) = \varphi(\partial_M U(t, M) + \varrho_0^{-1}) \quad (3.45)$$

geschrieben werden.

Die *Lineare Elastizitätstheorie* beruht auf der Annahme, dass der Verschiebungsgradient immer klein ist. In diesem Fall kann das nichtlineare Gesetz (3.45) durch die lineare Taylor-Approximation

$$\Sigma(t, M) = C_{\text{elast}} \partial_M U(t, M), \quad C_{\text{elast}} := \varphi'(\varrho_0^{-1}) \quad (3.46)$$

ersetzt werden, wobei wir benutzt haben, dass $\varphi(\varrho_0) = 0$ wegen (3.44) gelten muss. Insbesondere wird aus (3.40) nun die *lineare Wellengleichung*

$$\partial_t^2 U = C_{\text{elast}} \partial_M^2 U \quad (\text{Impulsbilanz}) \quad (3.47)$$

in materiellen Koordinaten; der Zusammenhang (3.46) wird auch *Hookesches Gesetz*³⁶ genannt und C_{elast} ist der *Elastizitätsmodul*. Im Allgemeinen erhält man aber mit

$$\partial_t^2 U = \partial_M \psi(\partial_M U) \quad (3.48)$$

die *nichtlineare elastische Wellengleichung* mit ψ wie in (3.44). Beachte, dass

$$P(t, M) = \frac{1}{\partial_M U(t, M) + \varrho_0^{-1}}$$

wegen (3.34) gilt und daher bei den Wellengleichungen (3.47) oder (3.48) sich die Massendichte in Raum und Zeit ändern wird; ein elastisches Material ist also immer kompressibel.

³⁶Robert Hooke (1635–1702), englischer Universalgelehrter.

3.3.3 Thermomechanischer Körper in 3 Raumdimensionen

In diesem Abschnitt wollen wir exemplarisch zeigen, dass viele partielle Differentialgleichungen der Mathematischen Physik durch konstitutive und/oder vereinfachende Annahmen aus universellen Bilanzgleichungen abgeleitet werden können. Wir beginnen mit der Formulierung der Bilanzen für Masse, Impuls und Energie in drei Raumdimensionen. Diese können entweder postuliert oder analog zu unseren Betrachtungen im eindimensionalen Fall aus allgemeineren Prinzipien abgeleitet werden.

Prinzip 64 (Universelle Bilanzgleichungen). *In einem materiellen Kontinuum der realen Welt gelten die fundamentalen Bilanzgleichungen*

$$\begin{aligned} \partial_t \varrho &+ \operatorname{div}_x (\varrho v) &= 0 && \text{(Masse)} \\ \partial_t (\varrho v) &+ \operatorname{div}_x (\varrho v \otimes v - \sigma) &= \varrho g && \text{(Impuls)} \\ \partial_t \left(\frac{1}{2} \varrho v \cdot v + \varrho u \right) &+ \operatorname{div}_x \left(\frac{1}{2} \varrho (v \cdot v) v + \varrho u v - \sigma v + q \right) &= \varrho g \cdot v + \varrho \zeta && \text{(Energie)} \end{aligned}$$

sofern keine elektromagnetischen oder chemischen Prozesse stattfinden und die Gleichungen ggf. im Sinne von Distribution interpretiert werden.

Die auftretenden Größen haben dabei die folgenden Interpretationen:

ϱ	Massendichte	skalar	
u	spezifische innere Energiedichte	skalar	
ζ	äußere Wärmestahlung	skalar	
v	Geschwindigkeit	vektoriell	$v = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix}$
g	Beschleunigung durch externe Kräfte	vektoriell	$g = \begin{pmatrix} g_1 \\ g_2 \\ g_3 \end{pmatrix}$
q	Wärmefluss	vektoriell	$q = \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ q_3 \end{pmatrix}$
τ	Spannung	tensoriell	$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{pmatrix}$

Außerdem gilt

$$v \otimes v := \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 & v_2 & v_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_1^2 & v_1 v_2 & v_1 v_3 \\ v_1 v_2 & v_2^2 & v_2 v_3 \\ v_1 v_3 & v_2 v_3 & v_3^2 \end{pmatrix}, \quad v \cdot v = v_1^2 + v_2^2 + v_3^2.$$

und die Divergenz eines Tensors w ist durch

$$\begin{aligned} \operatorname{div}_x \begin{pmatrix} w_{11} & w_{12} & w_{13} \\ w_{21} & w_{22} & w_{23} \\ w_{31} & w_{32} & w_{33} \end{pmatrix} &:= (\partial_{x_1} \quad \partial_{x_2} \quad \partial_{x_3}) \begin{pmatrix} w_{11} & w_{12} & w_{13} \\ w_{21} & w_{22} & w_{23} \\ w_{31} & w_{32} & w_{33} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \partial_{x_1} w_{11} + \partial_{x_2} w_{21} + \partial_{x_3} w_{31} \\ \partial_{x_1} w_{12} + \partial_{x_2} w_{22} + \partial_{x_3} w_{32} \\ \partial_{x_1} w_{13} + \partial_{x_2} w_{23} + \partial_{x_3} w_{33} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

definiert.

Die Wärmeleitgleichung

Will man die Ausbreitung von Wärme innerhalb eines Gases, einer Flüssigkeit oder eines Festkörpers beschreiben, so kann man häufig

$$\varrho \equiv \text{const} = \varrho_*, \quad v \equiv 0, \quad \sigma \equiv \text{const} = \sigma_*, \quad g \equiv 0 \quad (3.49)$$

annehmen. Außerdem kann man oft die innere Energie pro Masse als

$$u(t, x) = u_* + \mu \theta(t, x) \quad (3.50)$$

berechnen, wobei θ die Temperatur ist und die Konstante u_* für alle energetischen Beiträge steht, die eigentlich von ϱ abhängen aber hier wegen (3.49) räumlich und zeitlich konstant sind. Postuliert man darüber hinaus noch das *Fouriersche Gesetz*

$$q(t, x) = -\eta \operatorname{grad}_x \theta(t, x), \quad (3.51)$$

nach dem Wärme sich immer entgegen dem Temperaturgradienten ausbreitet, erhält man einen vollständigen Satz von konstitutiven Gleichungen. Insbesondere sind mit (3.49), (3.50) sowie (3.51) die Masse- und die Impulsbilanz aus Prinzip 64 trivialerweise erfüllt und die Energiebilanz kann als

$$\partial_t \theta - \frac{\eta}{\varrho_* \mu} \Delta_x^2 \theta = \frac{\zeta}{\mu} \quad (\text{Energiebilanz})$$

geschrieben werden. Dies ist aber gerade die *lineare Wärmeleitgleichung mit Produktionsterm*.

Die hydrodynamischen Gleichungen

Ideale Flüssigkeiten sind *inkompressibel*, d.h. es gilt

$$\varrho \equiv \text{const} = \varrho_* \quad \text{und damit} \quad \partial_t \varrho \equiv \partial_x \varrho \equiv 0.$$

Insbesondere reduziert sich die Massebilanz auf

$$\operatorname{div}_x v \equiv 0 \quad (\text{Masseerhaltung}), \quad (3.52)$$

d.h. das Geschwindigkeitsfeld ist zu jeder Zeit t und in jedem Raumpunkt $x \in \mathbb{R}^3$ divergenzfrei.³⁷ Die zweite wesentliche Eigenschaft von idealen Flüssigkeiten³⁸ ist, dass der Spannungstensor der inneren Kräfte durch

$$\sigma = -p \operatorname{Id} + \sigma_{\text{visc}}$$

³⁷Hydrodynamik in einer Raumdimension ist trivial, denn $\partial_x v \equiv 0$ impliziert schon, dass v räumlich konstant sein muss.

³⁸Es gibt natürlich auch nicht-ideale, die sogenannten nicht-Newtonischen Flüssigkeiten.

gegeben ist, wobei p das skalare Feld des Druckes bezeichnet und σ_{visc} die Spannungen bzw. Kräfte beschreibt, die aus der *Viskosität* und damit aus der inneren Reibung entstehen. Die genaue Darstellung von σ_{visc} soll uns hier nicht interessieren; wir benötigen nur, dass

$$\operatorname{div}_x \sigma_{\text{visc}} = \eta \Delta_x v = \eta \begin{pmatrix} \Delta_x v_1 \\ \Delta_x v_2 \\ \Delta_x v_3 \end{pmatrix}$$

gilt, wobei der skalare Materialparameter μ gerade die *Viskosität* ist. Insgesamt reduziert sich (3.38) auf die *Navier-Stokes-Gleichung*³⁹

$$\varrho_* \partial_t v + \varrho_* \operatorname{div}_x (v \otimes v) = g - \operatorname{grad}_x p + \eta \Delta_x v \quad (\text{Impulsbilanz}),$$

die nach einigen Transformationen auch als

$$\varrho_* \partial_t v + \varrho_* (v \cdot \operatorname{grad}_x) v - \eta \Delta_x v = g - \operatorname{grad}_x p$$

geschrieben werden kann. Beachte, dass hier kein konstitutives Gesetz für den Druck benötigt wird, da p – zumindest auf einer formalen Ebene – bereits durch die Nebenbedingung (3.52) festgelegt ist. Im Grenzfall $\eta = 0$ erhält man die *inkompressiblen Euler-Gleichungen*⁴⁰

Die Euler-Gleichungen der Gasdynamik

Ideale Gase sind hochgradig kompressibel, d.h. man kann – im Gegensatz zu Flüssigkeiten – nicht mehr annehmen, dass ϱ konstant ist. Man kann aber wieder räumliche Isotropie voraussetzen und meist auch die inneren Reibungskräfte vernachlässigen. In diesem vereinfachten Fall kann der Spannungstensor σ mittels

$$\sigma = -p \operatorname{Id}, \quad (3.53)$$

aus dem Druck p berechnen werden. Diese Formel beschreibt, dass die inneren Kräfte in allen Richtungen gleich sind, aber via p von t und x abhängen. Aus den Zustandsgleichungen des idealen Gases⁴¹ kann außerdem das *konstitutive Gesetz*

$$p = \beta \varrho u \quad (3.54)$$

mit einer dimensionslosen Materialkonstante β abgeleitet werden. Durch Einsetzen in die fundamentalen Bilanzgleichungen aus Prinzip 64 erhalten wir dann nichtlineare partielle Differentialgleichungen für die Felder ϱ , v und u . Insbesondere ergibt sich in einer Raumdimension mit (3.53) und (3.54) sowie unter Vernachlässigung äußerer Kräfte (d.h. $g \equiv 0$) sowie von Wärmestrahlung und -leitung (d.h. $\zeta \equiv 0$ und $q \equiv 0$) das hyperbolische Differentialgleichungssystem

$$\left. \begin{aligned} \partial_t \varrho + \partial_x (\varrho v) &= 0 && (\text{Masseerhaltung}) \\ \partial_t (\varrho v) + \partial_x (\varrho^2 v + \beta \varrho u) &= 0 && (\text{Impulserhaltung}) \\ \partial_t \left(\frac{1}{2} \varrho v^2 + \varrho u \right) + \partial_x \left(\frac{1}{2} \varrho v^3 + \varrho u v + \beta \varrho u v \right) &= 0 && (\text{Energieerhaltung}) \end{aligned} \right\} (3.55)$$

Beachte, dass in diesen nichtlinearen Gleichungen nur *erste Ableitungen* aber kein diffusiver Term mit Δ_x auftritt. Die Dynamik der Gleichungen (3.55) ist deshalb sehr kompliziert und weist die folgenden Effekte auf:

³⁹Claude Louis Marie Henri Navier (1785–1836), französischer Mathematiker und Physiker.

⁴⁰Leonhard Euler (1707–1783), schweizer Mathematiker und Physiker.

⁴¹Es gilt $p/(\varrho \theta) \equiv \text{const}$ und $u/\theta \equiv \text{const}$, wobei θ die Temperatur ist.

1. Selbst wenn man mit glatten Anfangsdaten startet, so wird die Lösung im Allgemeinen in endlicher Zeit Unstetigkeiten – sogenannte *Schockwellen* oder *Stoßwellen* – entwickeln.
2. In Unstetigkeitsstellen können die Differentialgleichungen natürlich nicht mehr in einem klassischen Sinne erfüllt sein. Die Erhaltungssätze für Masse, Impuls und Energie werden aber *immer noch* in einem *distributionellen Sinne* gelten.
3. Treten Schockwellen auf, so ist die distributionelle Lösung nicht mehr eindeutig bestimmt. Man muss daher noch *Selektions-* oder *Entropie-Bedingungen* fordern, um die physikalisch relevanten Lösungen auszuwählen.

Wir können hier die Theorie distributioneller Lösungen nicht entwickeln, wollen aber zwei wichtige Aspekte ansprechen. Zunächst definieren wir, in welchen Sinne unstetige Felder eine Differentialgleichung erfüllen können.

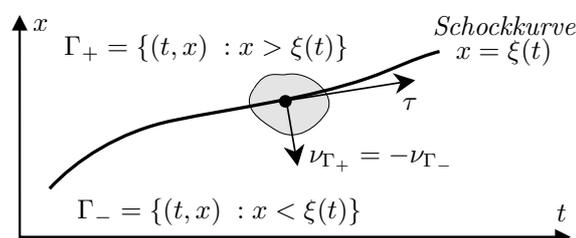


Abbildung 3.13: Schematische Darstellung einer Schockkurve $x = \xi(t)$ in der (t, x) -Ebene mit $\Gamma = \mathbb{R}^2$, wobei die schraffierte Menge den Träger einer Testfunktion ϕ illustriert. In jedem Punkt der Schockkurve gilt offensichtlich $\tau = (1, \dot{\xi})^T$ sowie $\nu_{\Gamma_+} = -\nu_{\Gamma_-} = |\tau|^{-1} (\dot{\xi}, -1)^T$, wobei τ der Tangentialvektor an die Schockkurve ist.

Definition 65 (Distributionelle Lösung einer Erhaltungsgleichung in einer Raumdimension). *Zwei skalare Felder f_1 und f_2 heißen distributionelle Lösung der Erhaltungsgleichung*

$$\partial_t f_1(t, x) + \partial_x f_2(t, x) = 0$$

auf einem offenen Zeit-Raum-Gebiet $\Gamma \subset \mathbb{R} \times \mathbb{R}$, falls

$$\int_{\Gamma} f_1(t, x) \partial_t \phi(t, x) + f_2(t, x) \partial_x \phi(t, x) dt dx = 0$$

für alle Testfunktionen $\phi \in C_c^\infty(\Gamma)$ gilt. Insbesondere implizieren die Regeln der partiellen Integration, dass jede klassische Lösung auch distributionelle Lösung ist.

Lemma 66 (Rankine-Hugoniot-Bedingungen⁴² in einer Raumdimension). *Die Felder skalaren f_1 und f_2 seien stückweise glatt in Γ aber unstetig entlang einer glatten Schockkurve $x = \xi(t)$ (siehe Abbildung 3.13). Dann gilt die Gleichung*

$$\partial_t f_1 + \partial_x f_2 = 0 \quad \text{in } \Gamma \tag{3.56}$$

im Sinne der Distributionen (siehe Definition 65), sofern

$$\partial_t f_1(t, x) + \partial_x f_2(t, x) = 0 \quad \text{für alle } (t, x) \in \Gamma_- \cup \Gamma_+$$

⁴²William John Macquorn Rankine (1820–1872), ein schottischer Physiker und Ingenieur; Pierre-Henri Hugoniot (1851–1887), französischer Ballistiker.

im klassischen Sinne gilt und falls die Sprungbedingung⁴³

$$-\dot{\xi}(t) \llbracket f_1 \rrbracket(t) + \llbracket f_2 \rrbracket(t) = 0 \quad \text{für alle } t \text{ mit } (t, \xi(t)) \in \Gamma.$$

erfüllt sind. Hierbei gilt $\Gamma_{\pm} := \{(t, x) \in \Gamma : x \gtrless \xi(t)\}$ und

$$\llbracket f_i \rrbracket(t) := \lim_{\delta \searrow 0} f_i(t, \xi(t) + \delta) - \lim_{\delta \searrow 0} f_i(t, \xi(t) - \delta)$$

ist der Sprung von f_i .

Herleitung. Wir können hier nur die wesentlichen Schritte skizzieren. Zunächst bemerken wir, dass f_1 und f_2 genau dann eine distributionelle Lösung von (3.56) darstellt, wenn

$$0 = \int_{\Gamma} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} \cdot \text{grad}_{t,x} \phi \, dV \quad (3.57)$$

für jede glatte Testfunktion ϕ mit kompaktem Träger in Γ gilt, wobei dV nur eine Abkürzung für $dt \, dx$ ist. Außerhalb der Schockkurve – wo f_1 und f_2 nach Voraussetzung glatt sind – kann man nun durch einen einfachen Widerspruchsbeweis zeigen, dass die Differentialgleichung schon in einem klassischen Sinne erfüllt ist, d.h. es gilt

$$\text{div}_{t,x} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} (t, x) = 0 \quad \text{für alle } (t, x) \in \Gamma_- \cup \Gamma_+. \quad (3.58)$$

Insbesondere ergibt sich aus (3.57) nach Aufspalten des Integrals und mit Hilfe der partiellen Integration die Formel

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{\Gamma_-} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} \cdot \text{grad}_{t,x} \phi \, dV + \int_{\Gamma_+} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} \cdot \text{grad}_{t,x} \phi \, dV \\ &= \int_{\partial\Gamma_-} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} \cdot \nu_{\Gamma_-} \phi \, dS + \int_{\partial\Gamma_+} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} \cdot \nu_{\Gamma_+} \phi \, dS, \end{aligned}$$

wobei dS das Kurvenelement auf der Shockkurve bezeichnet und wir benutzt haben, dass die anderen Integrale über Γ_- und Γ_+ wegen (3.58) verschwinden.

Auf der Schockkurve gilt $\nu_{\Gamma_+} = -\nu_{\Gamma_-}$ und beide Vektoren stehen senkrecht auf den Tangentialvektor τ , siehe Abbildung 3.13. Die Oberflächenintegrale – die ja in einer Raumdimension Kurvenintegral sind – können damit zu

$$\int_{\partial\Gamma_{\pm}} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} \cdot \nu_{\Gamma_{\pm}} \phi \, dS = \pm \int_{\mathbb{R}} \begin{pmatrix} f_1(t, \xi(t)) \\ f_2(t, \xi(t)) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \dot{\xi}(t) \\ -1 \end{pmatrix} \phi(t, \xi(t)) \, dt$$

berechnet werden, wobei wir benutzt haben, dass $dS = |\tau| \, dt$ gilt. Insgesamt erhalten wir

$$\int_{\mathbb{R}} \left(-\dot{\xi}(t) \llbracket f_1 \rrbracket(t) + \llbracket f_2 \rrbracket(t) \right) \phi(t, \xi(t)) \, dt = 0,$$

und weil die Testfunktion ϕ beliebig gewählt werden kann, folgt die Behauptung. \square

⁴³In höheren Raumdimensionen gibt es analoge Bedingungen, die normal zu einer sich bewegenden Unstetigkeitshyperebene gelten.

Der zweite wichtige Aspekt ist der folgende: Glatte Lösungen der Euler-Gleichungen (3.55) erfüllen einen weiteren Erhaltungssatz, nämlich den der Entropie. Bei nicht-glaten Lösungen fordert man üblicherweise eine positive Entropieproduktion im Schock, um die physikalisch sinnvollen Lösungen auszuwählen.

Theorem 67 (Entropiebilanz für die Eulergleichung). *Für jede Lösung von (3.55) gilt*

$$\partial_t(\varrho s) + \partial_x(\varrho s v) = 0$$

in jedem Glattheitspunkt (t, x) , wobei

$$s := c_1 \ln \left(c_2 \frac{u}{\varrho^\beta} \right) = c_1 \ln c_2 + c_1 \ln u + \beta c_1 \ln \left(\frac{1}{\varrho} \right)$$

die spezifische Entropiedichte bezeichnet und c_1, c_2 zwei dimensionsbehaftete Konstanten sind.

Beweis. Die Gleichung kann mit Hilfe der Kettenregel nachgerechnet werden. Die Rechnungen werden allerdings erheblich einfacher, wenn wir (3.55) zunächst in materielle Koordinaten transformieren. Mit Prinzip 57 und Theorem 59 gilt dann

$$\begin{aligned} \partial_t(P^{-1}) - \partial_M V &= 0, \\ \partial_t V + \partial_M(\beta P U) &= 0, \\ \partial_t\left(\frac{1}{2} V^2 + U\right) + \partial_M(\beta P U V) &= 0, \end{aligned}$$

wobei P hier für *Rho* steht, also das materielle Analogon zur Dichte ϱ und nicht zum Druck p ist. Durch einfache Rechnungen zeigen wir

$$\partial_t U = -\partial_M(\beta P U V) + V \partial_M(\beta P U)$$

und mit

$$\begin{aligned} \partial_t S &= \frac{c_1 \partial_t U}{U} + c_1 \beta P \partial_t(P^{-1}) \\ &= \frac{c_1}{U} (\partial_t U + \beta P U \partial_t(P^{-1})) \\ &= \frac{c_1}{U} \left(-\partial_M(\beta P U V) + V \partial_M(\beta P U) + \beta P U \partial_M V \right) = 0 \end{aligned}$$

folgt die Behauptung nach Rücktransformation in räumliche Koordinaten. \square

Bemerkung. *Eine physikalisch sinnvolle Lösung von (3.55) mit Schockkurve ξ wird*

$$-\dot{\xi}(t)[[\varrho s]](t) + [[\varrho s v]](t) \geq 0$$

erfüllen und damit eine positive und distributionelle Entropie-Produktion auf der Kurve ξ aufweisen.

Die Freiflug- bzw. Burgers-Gleichung

Eine für theoretische Betrachtungen wichtige Gleichung beschreibt ein hypothetisches Gas, in dem es überhaupt keine Wechselwirkungen zwischen den einzelnen Teilchen gibt. Insbesondere gibt es weder eine innere Energie noch innere Kräfte, d.h. man postuliert

$$u \equiv 0, \quad \sigma \equiv 0$$

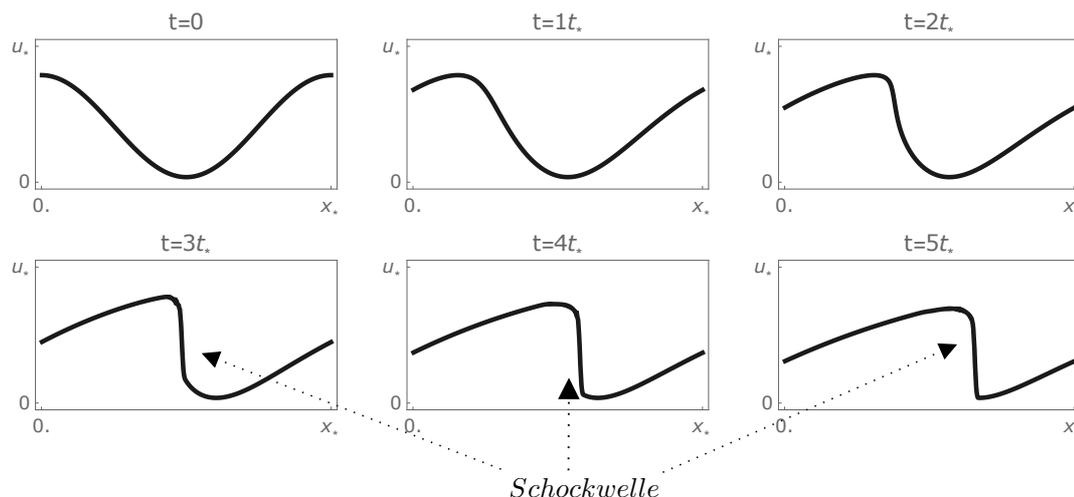


Abbildung 3.14: Numerische Simulation der Burgers-Gleichung mit periodischen Randbedingungen: Selbst bei glatten Anfangsdaten entsteht nach einer endlichen Zeit eine Schockwelle.

und kann daher die Gleichungen (3.55) als

$$\partial_t \varrho + \partial_x(\varrho v) = 0, \quad \partial_t(\varrho v) + \partial_x(\varrho v^2) = 0, \quad \partial_t\left(\frac{1}{2}\varrho v^2\right) + \partial_x\left(\frac{1}{2}\varrho v^3\right) = 0$$

schreiben. Mit elementaren Rechnungen (Ketten- und Produktregel) kann man die Massendichte ϱ in Glattheitspunkten der Lösung eliminieren und erhält

$$\partial_t v + v \partial_x v = 0 \quad \text{bzw.} \quad \partial_t v + \partial_x\left(\frac{1}{2}v^2\right) = 0. \quad (3.59)$$

Die erste Gleichung wird auch die *Freifluggleichung* genannt; die zweite Gleichung ist die berühmte *Burgers-Gleichung*⁴⁴, die auch in anderen Zusammenhängen hergeleitet werden kann (zum Beispiel in der Theorie der Wasserwellen). An dieser Gleichung können Schockwellen besonders gut studiert werden, siehe Abbildung 3.14.

Bemerkung. Die Gleichungen (3.59)₁ und (3.59)₂ sind nur in Glattheitspunkten äquivalent. Die Gleichung (3.59)₂ erlaubt aber auch unstetige (d.h. distributionelle) Lösungen, wobei die Sprungbedingung

$$-\dot{\xi} [[u]] + \frac{1}{2} [[u^2]] = 0$$

entlang der Unstetigkeitskurve $x = \xi(t)$ gilt.

⁴⁴Johannes Martinus Burgers, (1895–1981), niederländischer Physiker