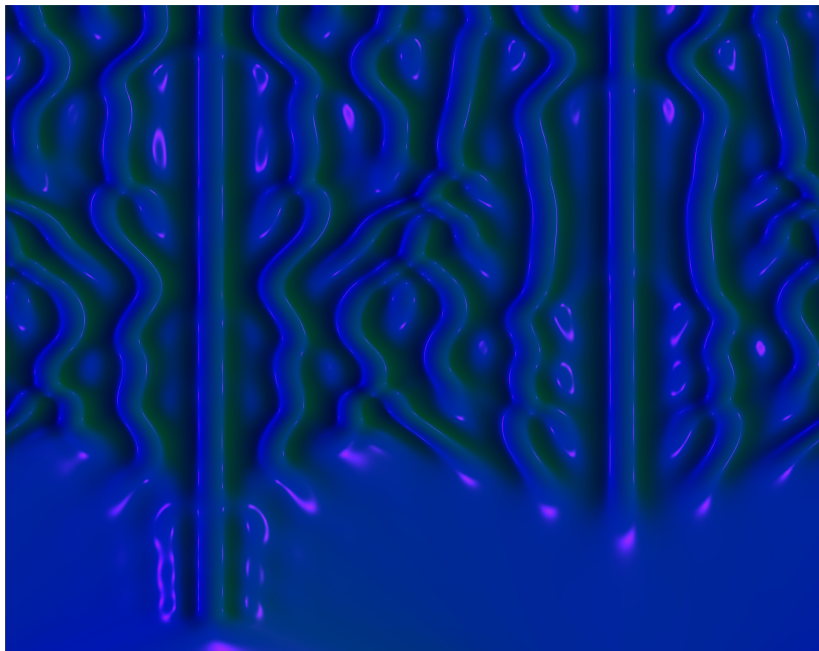


Kompendium zur Lehrveranstaltung

**Mathematische Modellierung
mit gewöhnlichen und partiellen
Differentialgleichungen**

Mechthild Thalhammer



Leopold–Franzens Universität Innsbruck

Sommersemester 2015

Das vorliegende Kompendium faßt die im Rahmen der Lehrveranstaltung **Mathematische Modellierung mit gewöhnlichen und partiellen Differentialgleichungen** im Sommersemester 2015 an der Universität Innsbruck behandelten Themen zusammen. Ohne Anspruch auf Allgemeinheit und Vollständigkeit werden verschiedene mathematische Modelle, welche auf nichtlinearen gewöhnlichen oder partiellen Differentialgleichungen basieren, eingeführt. Zur Illustration wesentlicher Aspekte werden vereinfachte Modelle analysiert. Die Entwicklung und Implementierung effizienter numerischer Verfahren wird anhand von speziellen Problemen mit regulären Lösungen besprochen.

Das Kompendium beruht vorwiegend auf Teilen der von Martin Burger verfaßten Skripten *Mathematische Modellierung* (Wintersemester 2012/2013 bzw. 2006/2007), welche unter http://wwwmath.uni-muenster.de/num/Vorlesungen/Modellierung_WS12/skript.pdf sowie http://wwwmath.uni-muenster.de/num/Vorlesungen/Modellierung_06/skript.pdf frei verfügbar sind.

Im Rahmen des Proseminares werden Teile des Buches *Ordinary Differential Equations and Dynamical Systems* von Gerald Teschl besprochen. Dieses ist unter http://www4.ncsu.edu/~schecter/ma_732_sp13/teschl_ode.pdf frei verfügbar.

Als zusätzliche Literatur zu theoretischen Grundlagen wird das von Lawrence Evans verfaßte Buch *Partial Differential Equations*, erschienen bei American Mathematical Society (AMS) im Rahmen der Reihe Graduate Studies in Mathematics (Band 19, 2. Edition, 2010), empfohlen. Das von Wolfgang Arendt und Karsten Urban verfaßte einführende Lehrbuch *Partielle Differenzialgleichungen*, erschienen bei Spektrum Akademischer Verlag (Heidelberg, 2010), behandelt sowohl analytische als auch numerische Aspekte.

Als weitere Quelle sei *The (Unfinished) PDE Coffee Table Book*, herausgegeben von Nick Trefethen und Kristine Embree, erwähnt. Diese mit farbenprächtigen Illustrationen versehenen Kurzdarstellungen verschiedener partieller Differentialgleichungen, beginnend mit der zweidimensionalen Laplace-Gleichung bis zur Klein–Gordon-Gleichung, sind unter <http://people.maths.ox.ac.uk/trefethen/pdectb.html> frei verfügbar.

Graphik. Eine für ihre charakteristische Musterbildung bekannte zeitabhängige nichtlineare partielle Differentialgleichung ist die Kuramoto–Sivashinsky-Gleichung, welche in einer Raumdimension durch

$$\partial_t u(x, t) = -\partial_{xxxx} u(x, t) - \partial_{xx} u(x, t) - u(x, t) \partial_x u(x, t), \quad (x, t) \in (-a, a) \times (0, T),$$

gegeben ist; zusätzlich werden periodische Randbedingungen und die Anfangsbedingung

$$u(x, 0) = \cos\left(\frac{\pi}{a} x\right) \left(1 + \sin\left(\frac{\pi}{a} x\right)\right), \quad x \in [-a, a],$$

vorgegeben. Die Graphik illustriert den Lösungsverlauf für $a = 16\pi$ und $T = 150$ (Ortsdiskretisierung mittels des Fourier-Spektralverfahrens, Zeitdiskretisierung mittels eines exponentiellen Integrators höherer Ordnung).

Inhaltsverzeichnis

I	Grundlegende Konzepte und Modelle	5
1	Entwicklung mathematischer Modelle	6
	Ergänzungen (Anwendungsgebiete)	10
2	Newton'sche Bewegungsgleichungen (Ballwurf)	12
	Ergänzungen (Hamilton-Systeme)	20
3	Master-Gleichungen, Kontinuitätsgleichungen (Chemische Reaktionen)	25
	Ergänzungen (Langzeitverhalten)	33
II	Grundlegendes zu partiellen Differentialgleichungen	37
1	Klassifizierung und Lösungsbegriffe	38
2	Relevante partielle Differentialgleichungen	42
3	Allgemeine Lösungsdarstellungen	48
4	Spezielle Lösungsdarstellungen	58
4.1	Lineare Advektionsgleichungen	59
4.2	Lineare Diffusionsgleichungen	65
4.3	Lineare Schrödinger-Gleichungen	72
4.4	Lineare Wellengleichungen	73
4.5	Burgers-Gleichung	75
III	Parabolische Probleme und Schrödinger-Gleichungen	77
1	Parabolische Gleichungen (Diffusionsprozesse)	78

1.1	Zufällige Sprungprozesse (Random Walks)	80
1.2	Grundprinzipien der Thermodynamik	87
1.3	Kontinuierliche Modelle (Thermodynamik)	89
1.4	Diffusions-Advektions-Reaktions-Gleichungen	92
1.5	Charakteristisches Lösungsverhalten	93
2	Schrödinger-Gleichungen (Quantenphysikalische Phänomene)	96
	Literatur	97

Teil I

Grundlegende Konzepte und erste einfache mathematische Modelle

Kapitel 1

Entwicklung mathematischer Modelle

Dynamische Prozesse. Eine wesentliche Aufgabe der Angewandten Mathematik ist es, mathematische Modelle zur Beschreibung von verschiedenen dynamischen Prozessen zu entwickeln und diese zu analysieren. Neben einem besseren Verständnis der grundlegenden Mechanismen geht es meist um das gezielte Steuern von gewissen Einflußfaktoren und die Optimierung von Abläufen.

Anwendungsgebiete. Zu den Anwendungsgebieten der mathematischen Modellierung zählen in erster Linie die Bereiche Physik und Chemie sowie die Technischen Wissenschaften und die Geowissenschaften. Aufgrund des enormen Fortschrittes bei Rechnerleistungen, wozu die Film- und Unterhaltungsindustrie wesentlich beigetragen hat, können mathematische Modelle auch vermehrt in den Biowissenschaften (*Life sciences*) wie Biologie, Medizin und der Sportwissenschaft genützt werden. Weitere Anwendungsgebiete sind die Finanz- und Wirtschaftswissenschaften sowie die Logistik.

Mathematische Modelle. Mathematische Modelle sind durch Funktionen, Gleichungen und Ungleichungen gegeben, welche die für die betrachteten Prozesse wesentlichen Einflußgrößen in Zusammenhang setzen.

Klassifizierungen. Üblicherweise werden mathematische Modelle in folgender Hinsicht klassifiziert:

- Quantitative Modelle versus qualitative Modelle (z.B. konkrete Berechnung der Werte von Einflußgrößen versus qualitative Aussagen zum Langzeitverhalten).
- Diskrete Modelle versus kontinuierliche Modelle (z.B. mikroskopische Beschreibung eines Prozesses durch eine endliche Anzahl von Teilchen und deren Eigenschaften versus makroskopische Beschreibung durch Dichtefunktionen).

- Deterministische Modelle versus stochastische Modelle (z.B. Beschreibung von gewissen Einflußfaktoren mittels Zufallsgrößen).

Computersimulationen. Die Komplexität der in den Anwendungen auftretenden mathematischen Modelle erfordert den Einsatz leistungsstarker Rechner. Computersimulationen ermöglichen die Verifizierung mathematischer Modelle durch Vergleiche mit experimentellen Daten; sie dienen dazu, gewisse Aspekte genauer zu analysieren, und ersetzen teilweise aufwendige Experimente.

Realisierbarkeit. Die Angabe von mathematischen Modellen, für welche mittels Computersimulationen in überschaubaren Zeiträumen und mit praktikablem Aufwand Näherungslösungen berechnet werden können, erfordert es, komplexe Prozesse zu abstrahieren und auf einige wenige Aspekte zu reduzieren. Trotz der notwendigen Vereinfachungen sollen die mathematischen Modelle jedoch die für die jeweiligen Anwendungen relevanten quantitativen und qualitativen Eigenschaften von Prozessen wiedergeben.

Partielle Differentialgleichungen und numerische Lösungsverfahren. In vielen Fällen, insbesondere bei der Beschreibung physikalischer Phänomene, beruhen mathematische Modelle auf zeitabhängigen nichtlinearen partiellen Differentialgleichungen oder Erweiterungen davon.¹ Eine grundlegende Aufgabe der Numerischen Mathematik ist die Konstruktion und Analyse von numerischen Verfahren, die den verschiedenen Klassen von partiellen Differentialgleichungen angepaßt sind und auch bei Langzeitintegrationen auf zuverlässige Ergebnisse führen. In Hinblick auf eine effiziente Lösung ist außerdem eine optimale Abstimmung der Implementierung auf die verwendete Soft- und Hardware wesentlich.

Allgemeine Form. Ein mathematisches Modell läßt sich in die allgemeine Form

$$y = \mathcal{M}(x(p), p), \quad x(p) \in \mathcal{X}, \quad p \in \mathcal{P}, \quad y \in \mathcal{Y},$$

bringen; dabei umfaßt $x(p) \in \mathcal{X}$ die Eingabegrößen, welche von zusätzlichen (physikalischen) Parametern $p \in \mathcal{P}$ abhängen, und $y \in \mathcal{Y}$ die gesuchten Ausgabegrößen. In den betrachteten Anwendungen erfordert die Berechnung von $y = \mathcal{M}(x(p), p)$ die numerische Lösung einer gewöhnlichen oder partiellen Differentialgleichung.

Dimensionslose Formulierung mit geeigneten Skalierungen. In vielen Situationen ist es sinnvoll, sämtliche Eingabe- und Ausgabegrößen als von den gewählten physikalischen Einheiten unabhängige Größen zu formulieren

$$y_{\text{neu}} = \mathcal{M}_{\text{neu}}(x_{\text{neu}}(p), p), \quad x_{\text{neu}}(p) \in \mathcal{X}_{\text{neu}}, \quad p \in \mathcal{P}, \quad y_{\text{neu}} \in \mathcal{Y}_{\text{neu}},$$

¹Vgl. auch Delay-Differentialgleichungen, Differentialgleichungen mit zusätzlichen zeitlich nichtlokalen Termen (memory terms), Gleichungen mit gebrochenen Zeitableitungen.

wobei $(\mathcal{X}_{\text{neu}}, \|\cdot\|_{\mathcal{X}_{\text{neu}}})$ und $(\mathcal{Y}_{\text{neu}}, \|\cdot\|_{\mathcal{Y}_{\text{neu}}})$ normierte Räume bzw. Banachräume bezeichnen. In Hinblick auf numerische Berechnungen sollte man außerdem die Eingabe- und Ausgabegrößen so skalieren, daß typische Werte wie etwa Durchschnittswerte oder Maximalwerte näherungsweise Einheitswerte haben

$$\|x_{\text{neu}}^*(p)\|_{\mathcal{X}_{\text{neu}}} \approx 1, \quad \|y_{\text{neu}}^*\|_{\mathcal{Y}_{\text{neu}}} \approx 1.$$

Vereinfachte Modelle. Da realistische Anwendungen meist auf komplexe mathematische Modelle führen, die in verschiedener Hinsicht eine Herausforderung darstellen, ist es sinnvoll, zunächst vereinfachte Modelle zu betrachten, welche einzelne Aspekte eines Prozesses wiedergeben. Solche vereinfachten Modelle können insbesondere zum Testen der verwendeten numerischen Verfahren genutzt werden.

Sensitivitätsanalyse und Modellreduktion. Die Sensitivitätsanalyse eines mathematischen Modelles dient dazu, die für einen Prozeß wesentlichen Einflußgrößen zu bestimmen; dazu untersucht man, wie sich kleine Änderungen der Eingabegrößen und zusätzlicher Parameter auf die Ausgabegrößen auswirken. Die Vernachlässigung unwesentlicher Einflußgrößen ermöglicht dann eine Reduktion des Modelles.

In Situationen, wo gewisse Regularitätsforderungen erfüllt sind, nützt man die folgenden Überlegungen; dabei bezeichnet $F : (X, \|\cdot\|_X) \rightarrow (Y, \|\cdot\|_Y) : x \mapsto F(x)$ eine reguläre Funktion mit zugehöriger Fréchet-Ableitung $F'(x) \in \mathcal{L}(X, Y)$ und I den Identitätsoperator.

- (i) *Sensitivität.* Eine Taylorreihenentwicklung gibt an, wie sich Änderungen des Argumentes auf das Ergebnis auswirken (affin-lineare Approximation)

$$F(x + \Delta x) = F(x) + F'(x) \Delta x + \mathcal{O}(\|\Delta x\|_X^2).$$

Bei Vernachlässigung des Resttermes erhält man folgende Näherung durch den Wert der ersten Ableitung (Sensitivität, Verwendung des Symbols \leq bei alleiniger Angabe des führenden Termes)

$$\frac{\|F(x + \Delta x) - F(x)\|_Y}{\|\Delta x\|_X} \leq \|F'(x)\|_{Y \leftarrow X}.$$

- (ii) *Differentialgleichung und zugehörige Variationsgleichung.* Zur Untersuchung der Sensitivität der (unbekannten) Lösung $u : [0, T] \rightarrow X$ eines Anfangswertproblems der Form

$$\begin{cases} u'(t) = F(u(t)), & t \in (0, T), \\ u(0) = u_0, \end{cases}$$

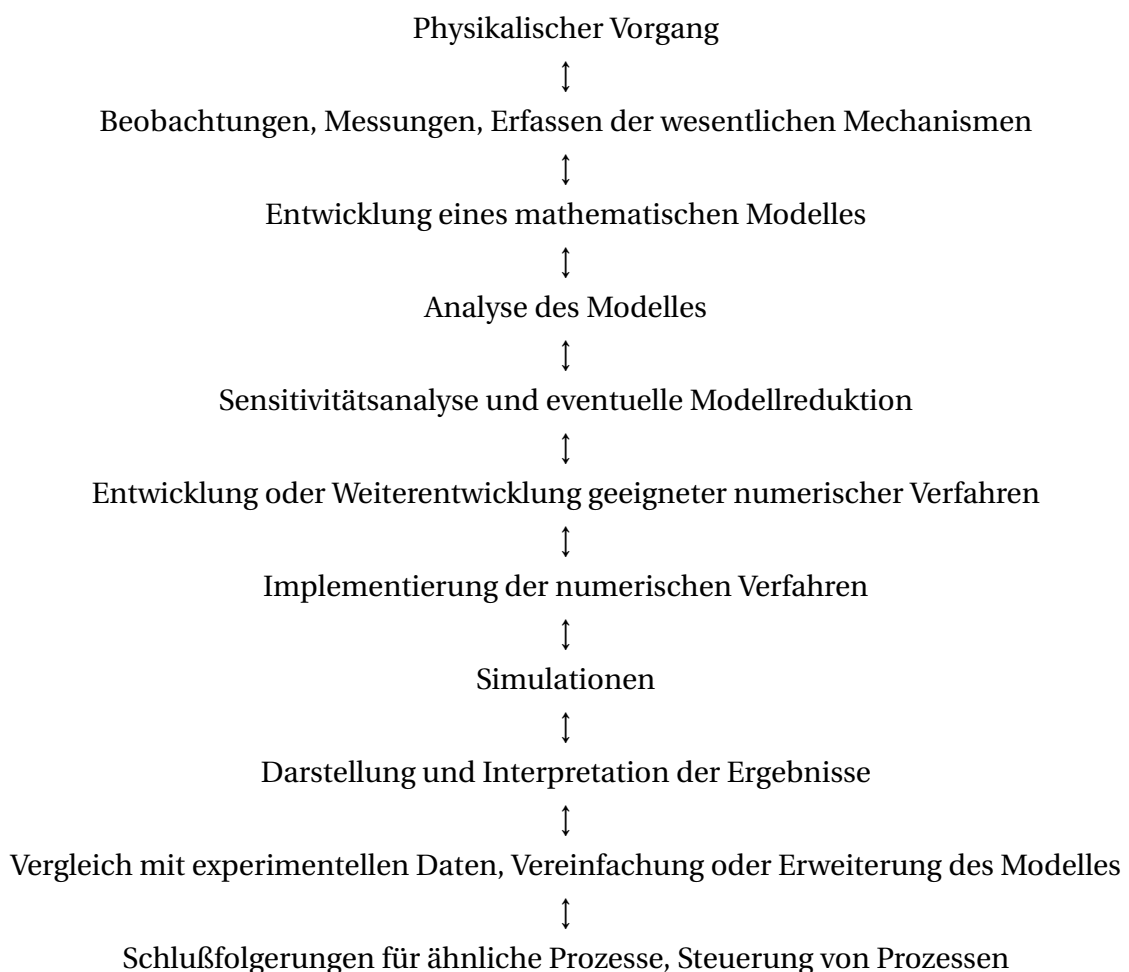
bezüglich des vorgegebenen Anfangswertes $u_0 \in X$ betrachtet man die zugehörige Variationsgleichung für $U(t) = \partial_{u_0} u(t)$ (lineare nichtautonome Differentialgleichung)

$$\begin{cases} U'(t) = F'(u(t)) U(t), & t \in (0, T), \\ U(0) = I. \end{cases}$$

Analoge Überlegungen gelten für die Sensitivität der Lösung einer Differentialgleichung bezüglich eines Parameters.

Da die Sensitivitätsanalyse eines komplexen Modelles mit hohem rechnerischen Aufwand verbunden ist, versucht man oft, quantitative durch qualitative Aussagen zu ersetzen, und analysiert anstelle des ursprünglichen Modelles ein vereinfachtes Modell.

Entwicklung mathematischer Modelle. Im Idealfall umfaßt die Entwicklung und Weiterentwicklung mathematischer Modelle die folgenden, sich gegenseitig beeinflussenden, grundlegenden Schritte:



Auswahl an mathematischen Modellen. Aufgrund der großen Vielfalt von Anwendungen, welche Differentialgleichungen zur mathematischen Modellierung verwenden, ist es nicht möglich, das Thema Mathematische Modellierung mit Differentialgleichungen umfassend zu behandeln, und auch nicht sinnvoll, allgemeingültige Aussagen zu treffen. Vielmehr sollen

einige wesentliche Differentialgleichungen angegeben werden und für spezielle Situationen detaillierter diskutiert und illustriert werden.

Ergänzungen (Anwendungsgebiete)

Überblick (Wissenschaftszweige).

- (i) *Einteilung der Wissenschaften.* Die Wissenschaften werden meist in folgende Bereiche eingeteilt:

Geisteswissenschaften

Medizinische Wissenschaften

Naturwissenschaften

Sozialwissenschaften

Technische Wissenschaften

- (ii) *Naturwissenschaften und Technische Wissenschaften.* Bei den Naturwissenschaften werden üblicherweise die folgenden Hauptrichtungen unterschieden:

- Astronomie
- Biowissenschaften
- Chemie
- Geowissenschaften
- Informatik
- Mathematik
- Physik

Wesentliche Gebiete der Technischen Wissenschaften sind beispielsweise:

- Architektur
- Bauingenieurwesen
- Elektrotechnik
- Maschinenbau

- (iii) *Fachrichtungen.* Als weitere Bereiche der Naturwissenschaften und der Medizinischen Wissenschaften seien die folgenden Fachrichtungen (mit fließenden Übergängen) genannt und insbesondere die der Physik nahestehenden Gebiete hervorgehoben:²

²Vgl. Wikipedia. Thematische Anordnung nach den Forschungsbereichen Universum, Erde, Ökosystem, Mensch, Lebensformen, Zelle, Moleküle, Atome, Atomkerne, Elementarteilchen.

Kosmologie, Astrophysik, Exobiologie, Planetologie, Geophysik, Geodäsie, Physische Geographie, Meteorologie, Klimatologie, Geologie, Mineralogie, Geochemie, Geographie, Kartografie, Geoökologie, Biogeographie, Umweltphysik, Umweltchemie, Meereskunde, Ökologie, Bodenkunde, Humanmedizin, Humanbiologie, Humangenetik, Neurobiologie, Lebensmittelchemie, Archäologie, Verhaltensbiologie, Physiologie, Genetik, Morphologie, Paläontologie, Zoologie, Botanik, Mykologie, Virologie, Bakteriologie, Bioinformatik, Mikrobiologie, Zellbiologie, Biochemie, Organische Chemie, Biophysik, Molekularbiologie, Supramolekulare Chemie, Physikalische Chemie, Molekularphysik, Anorganische Chemie, Elektrodynamik, Physik der Kondensierten Materie, Chemoinformatik, Quantenchemie, Thermodynamik, Quantenphysik, Radiochemie, Kernphysik, Hochenergiephysik, Teilchenphysik

Mathematische Modellierung mittels Differentialgleichungen. Insbesondere in Fachrichtungen der Physik oder in Fachrichtungen, welche der Physik nahestehen und physikalische Grundprinzipien benützen, finden mathematische Modelle mittels gewöhnlicher und partieller Differentialgleichungen Anwendung. Als eine kleine Auswahl seien folgende Beispiele erwähnt:

- Newton'sche Bewegungsgleichungen (Modelle der Klassischen Mechanik)
- Master-Gleichungen, Kontinuitätsgleichungen (Modelle der Reaktionskinetik)
- Diffusions-Advektions-Reaktions-Gleichungen (Modelle für Strömungsprozesse, Modelle für Musterbildungsprozesse, Modelle der Meteorologie)
- Schrödinger-Gleichungen (Modelle der Quantenphysik)

Weitere Beispiele aus dem Bereich der Biowissenschaften, der Medizinischen Wissenschaften, der Sportwissenschaften, der Finanzwissenschaften sowie der Logistik sind:

- Populationsdynamik, Ausbreitung von Krankheiten (Lotka–Volterra-Modelle)
- Blutkreislauf des Menschen, Entwicklung von Diagnose- und Therapieverfahren (Herzinfarkt, Schlaganfall, Ultraschalluntersuchungen)
- Belastung des menschlichen Körpers bei der Ausübung von Sport, Optimierung von Bewegungen (Wintersport)
- Aktienmodelle
- Sichere Beförderung einer hohen Anzahl von Personen, Verkehrsplanung

Kapitel 2

Newton'sche Bewegungsgleichungen (Ballwurf)

Inhalt. Zur Illustration der grundlegenden Konzepte

- dimensionslose Formulierung mit geeigneten Skalierungen,
- Sensitivitätsanalyse und
- Modellreduktion

wird ein einfaches mathematisches Modell für den Wurf eines Balles behandelt. Entsprechend den Prinzipien der Klassischen Mechanik wird der Wurf eines Balles als spezielles Zweikörperproblem (Ball, Erde) modelliert; zulässige Reduktionen des auf den Newton'schen Bewegungsgleichungen basierenden Modelles führen schließlich auf eine lineare gewöhnliche Differentialgleichung zweiter Ordnung mit bekannter Lösung.

Modell für Ballwurf.

- (i) *Vorbemerkung.* Für zwei Körper der Massen m_1, m_2 [kg] mit zugehörigen Koordinaten $q_1, q_2 \in \mathbb{R}^3$ [m] ist die auf den ersten Körper wirkende Gravitationskraft durch

$$F_G = - \frac{G m_1 m_2}{\|q_1 - q_2\|^3} (q_1 - q_2) \quad [\text{N} = \text{kg m s}^{-2}]$$

gegeben, wobei $G = 6.67384 \cdot 10^{-11}$ [m³ kg⁻¹ s⁻²] die Gravitationskonstante bezeichnet.

- (ii) *Newton'sche Bewegungsgleichungen.* Zur wesentlichen Vereinfachung der Modellierung eines Ballwurfes wird die idealisierte Situation eines punktförmigen Körpers der Masse m [kg] angenommen; die Funktion

$$q: [0, T] \longrightarrow \mathbb{R}^3: t [\text{s}] \longmapsto q(t) = \begin{pmatrix} x(t) \\ y(t) \\ z(t) \end{pmatrix} [\text{m}]$$

gibt die Koordinaten des Balles in Abhängigkeit von der Zeit an.¹ Mittels Newton'scher Bewegungsgleichungen unter Einbeziehung der Gravitationskraft

$$\text{Masse} \times \text{Beschleunigung} = \text{Gravitationskraft} \quad [\text{N} = \text{kg m s}^{-2}]$$

und bei Vorgabe von Anfangsbedingungen, dem Abwurfsort $q_0 \in \mathbb{R}^3$ [m] und der Anfangsgeschwindigkeit $v_0 \in \mathbb{R}^3$ [m s⁻¹], ergibt sich folgendes Anfangswertproblem

$$\begin{cases} q''(t) = -\frac{GM}{\|q(t) - Q\|^3} (q(t) - Q), & t \in (0, T), \\ q(0) = q_0, & q'(0) = v_0, \end{cases}$$

wobei $M = 5.9736 \cdot 10^{24}$ [kg] die Masse der Erde und $Q \in \mathbb{R}^3$ [m] die fix gewählten Koordinaten des Erdmittelpunktes bezeichnen; die Masse des Balles hat auf die Differentialgleichung keinen Einfluß. Gesucht ist die Bahn des Balles vom Zeitpunkt des Abwurfes bis zum Wiedererreichen der Anfangshöhe

$$(t, q(t)) \text{ für } t \in [0, T_2] \text{ mit } T_2 > 0 \text{ so bestimmt, daß } z(T_2) = z(0) = z_0;$$

im Speziellen sollen die maximale Wurfhöhe $z(T_1)$, bestimmt durch die Bedingung $z'(T_1) = 0$, sowie die Wurfweite berechnet werden, d.h. die gesuchten Größen sind

$$z(T_1) \text{ mit } T_1 > 0 \text{ so bestimmt, daß } z'(T_1) = 0, \\ \|q(T_2) - q_0\|.$$

- (iii) *Einflußgrößen.* In der vorliegenden Situation ist es naheliegend, den Abwurfsort des Balles und dessen Anfangsgeschwindigkeit als Eingabegrößen zu wählen; obwohl die Masse des Balles keinen Einfluß auf die Differentialgleichung und somit auf die Bahn des Balles hat, kann man sie als zusätzliche Eingabegröße betrachten, da sie sich auf den anfänglichen Impuls auswirkt und folglich auf die für den Abwurf des Balles aufzubringende kinetische Energie² und die entsprechende Kraft. Die gesuchten Ausgabegrößen sind die Bahn des Balles vom Zeitpunktes des Abwurfes bis zum Aufprall; insbesondere möchte man die maximale Wurfhöhe und die Wurfweite bestimmen, als weitere Informationen werden auch die entsprechenden Zeitpunkte angegeben. Physikalische Parameter, die in der Differentialgleichung auftreten und sich somit auf deren Lösung auswirken, sind die Masse der Erde, die Koordinaten des Erdmittelpunktes und die Gravitationskonstante; sinnvollerweise setzt man den Abwurfsort des Balles mit dem Erdmittelpunkt und

¹Die Ballhöhe werde durch die z -Koordinate beschrieben. Eine geeignete Wahl des Koordinatensystemes wird unten angegeben, vgl. Abschnitt zur Vereinfachung (ii).

²Impuls (Masse \times Geschwindigkeit) $p = mv$. Kinetische Energie $E_{\text{kin}} = \frac{1}{2m} p^2$.

dem Erdradius in Beziehung. Insgesamt ergibt sich die Zuordnung $y = \mathcal{M}(x(p), p)$ mit

$$x(p) = \begin{pmatrix} \text{Masse des Balles } m \text{ [kg]} \\ \text{Abwurfsort } q_0 \text{ [m]} \\ \text{Anfangsgeschwindigkeit } v_0 \text{ [m s}^{-1}] \end{pmatrix},$$

$$p = \begin{pmatrix} \text{Masse der Erde } M \text{ [kg]} \\ \text{Koordinaten des Erdmittelpunktes } Q \text{ [m]} \\ \text{Erdradius } R \text{ [m]} \\ \text{Gravitationskonstante } G \text{ [m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^{-2}] \end{pmatrix},$$

$$y = \begin{pmatrix} \text{Bahn des Balles } (t, q(t)) \text{ [(s, m)] für } t \in [0, T_2] \\ \text{Zeitpunkt der maximalen Wurfhöhe und maximale Höhe } (T_1, z(T_1)) \text{ [(s, m)]} \\ \text{Zeitpunkt des Aufpralles und Wurfweite } (T_2, \|q(T_2) - q_0\|) \text{ [(s, m)]} \end{pmatrix}.$$

Dimensionslose Formulierung und Vereinfachung.

- (i) *Dimensionslose Formulierung.* Die Einführung von Größen $\lambda \in \mathbb{R}_{>0}^3$ [m] sowie $\tau > 0$ [s] und der Ansatz

$$q_{\text{neu}} : [0, \frac{T}{\tau}] \longrightarrow \mathbb{R}^3 : t_{\text{neu}} \longmapsto q_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) = q_{\text{neu}}\left(\frac{t}{\tau}\right) = \Lambda^{-1} q(t) = \begin{pmatrix} \frac{x(t)}{\lambda_1} \\ \frac{y(t)}{\lambda_2} \\ \frac{z(t)}{\lambda_3} \end{pmatrix},$$

wobei $\Lambda = \text{diag}(\lambda)$, führt auf eine von den physikalischen Einheiten unabhängige Formulierung. Mittels Kettenregel folgt nämlich (wegen $t_{\text{neu}} = \frac{t}{\tau}$ bzw. $t = \tau t_{\text{neu}}$ und $q_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) = \Lambda^{-1} q(t)$ bzw. $q(t) = \Lambda q_{\text{neu}}(t_{\text{neu}})$, Bezeichnungen $q'_{\text{neu}} = \frac{dq_{\text{neu}}}{dt_{\text{neu}}}$ und $q' = \frac{dq}{dt}$)

$$\begin{aligned} q'_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) &= \tau \Lambda^{-1} q'(t), \\ q''_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) &= \tau^2 \Lambda^{-1} q''(t) \\ &= - \frac{\tau^2 G M}{\|q(t) - Q\|^3} \Lambda^{-1} (q(t) - Q) \\ &= - \frac{\tau^2 G M}{\|\Lambda (q_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) - \Lambda^{-1} Q)\|^3} (q_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) - \Lambda^{-1} Q), \end{aligned}$$

was die folgende dimensionslose Formulierung des ursprünglichen Modelles ergibt

$$\begin{cases} q''_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) = - \frac{\tau^2 G M}{\|\Lambda (q_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) - \Lambda^{-1} Q)\|^3} (q_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) - \Lambda^{-1} Q), & t_{\text{neu}} \in (0, \frac{T}{\tau}), \\ q_{\text{neu}}(0) = \Lambda^{-1} q_0, & q'_{\text{neu}}(0) = \tau \Lambda^{-1} v_0. \end{cases}$$

- (ii) *Vereinfachte Formulierung.* Eine ohne Einschränkung der Allgemeinheit gültige vereinfachte Formulierung des Anfangswertproblems erhält man, wenn man

$$Q = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -R \end{pmatrix} [\text{m}]$$

als Koordinaten des Erdmittelpunktes mit Erdradius $R = 6371 \cdot 10^3$ [m] und als Anfangsbedingungen

$$q_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ z_0 \end{pmatrix} [\text{m}], \quad v_0 = \begin{pmatrix} v_{0x} \\ 0 \\ v_{0z} \end{pmatrix} [\text{m s}^{-1}],$$

wählt.³ Außerdem ist es zweckmäßig, die Erdbeschleunigung $g = \frac{GM}{R^2} \approx 9.8219$ [m s⁻²] einzuführen. Wegen

$$q_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) - \Lambda^{-1} Q = \begin{pmatrix} x_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) \\ y_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) \\ z_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) + \frac{R}{\lambda_3} \end{pmatrix},$$

$$\Lambda (q_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) - \Lambda^{-1} Q) = \begin{pmatrix} \lambda_1 x_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) \\ \lambda_2 y_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) \\ \lambda_3 (z_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) + \frac{R}{\lambda_3}) \end{pmatrix},$$

$$\|\Lambda (q_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) - \Lambda^{-1} Q)\|^2 = \lambda_3^2 \left(\left(\frac{\lambda_1}{\lambda_3} x_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) \right)^2 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_3} y_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) \right)^2 + \left(z_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) + \frac{R}{\lambda_3} \right)^2 \right),$$

ergibt sich das Anfangswertproblem

$$\left\{ \begin{array}{l} \begin{pmatrix} x''_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) \\ y''_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) \\ z''_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) \end{pmatrix} = -\frac{\tau^2 g R^2}{\lambda_3^3} \left(\left(\frac{\lambda_1}{\lambda_3} x_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) \right)^2 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_3} y_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) \right)^2 + \left(z_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) + \frac{R}{\lambda_3} \right)^2 \right)^{-\frac{3}{2}} \\ \quad \times \begin{pmatrix} x_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) \\ y_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) \\ z_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) + \frac{R}{\lambda_3} \end{pmatrix}, \quad t_{\text{neu}} \in \left(0, \frac{T}{\tau} \right), \\ \begin{pmatrix} x_{\text{neu}}(0) \\ y_{\text{neu}}(0) \\ z_{\text{neu}}(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{z_0}{\lambda_3} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} x'_{\text{neu}}(0) \\ y'_{\text{neu}}(0) \\ z'_{\text{neu}}(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\tau v_{0x}}{\lambda_1} \\ 0 \\ \frac{\tau v_{0z}}{\lambda_3} \end{pmatrix}. \end{array} \right.$$

³Zusätzliche Überlegungen, welche die Erhaltung des Drehimpulses

$$L = q \times p = q \times m q'$$

bei Zentralkräften verwenden, zeigen, daß die Bahn des Balles in diesem Fall in der (x, z) -Ebene verläuft, siehe Bemerkung.

Zur numerischen Lösung dieses Anfangswertproblems für ein System gekoppelter nichtlinearer gewöhnlicher Differentialgleichungen zweiter Ordnung können beispielsweise explizite Runge–Kutta Verfahren verwendet werden.

Modellreduktionen.

- (i) *Erste Modellreduktion.* Eine erste Reduktion des mathematischen Modelles basiert auf den für einen Ballwurf sinnvollen Annahmen $R \gg x(t), y(t)$, genauer, auf den folgenden Näherungen

$$\begin{aligned} \frac{\tau^2 g R^2}{\lambda_3^3} \left(\left(\frac{\lambda_1}{\lambda_3} x_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) \right)^2 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_3} y_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) \right)^2 + \left(z_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) + \frac{R}{\lambda_3} \right)^2 \right)^{-\frac{3}{2}} x_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) &\ll 1, \\ \frac{\tau^2 g R^2}{\lambda_3^3} \left(\left(\frac{\lambda_1}{\lambda_3} x_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) \right)^2 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_3} y_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) \right)^2 + \left(z_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) + \frac{R}{\lambda_3} \right)^2 \right)^{-\frac{3}{2}} y_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) &\ll 1, \\ \left(\left(\frac{\lambda_1}{\lambda_3} x_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) \right)^2 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_3} y_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) \right)^2 + \left(z_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) + \frac{R}{\lambda_3} \right)^2 \right)^{-\frac{3}{2}} &\approx \left(z_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) + \frac{R}{\lambda_3} \right)^{-3}, \end{aligned}$$

was auf das wesentlich vereinfachte Modell

$$\left\{ \begin{array}{l} \begin{array}{l} x''_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) \\ y''_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) \\ z''_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) \end{array} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\frac{\tau^2 g R^2}{\lambda_3^3} \left(z_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) + \frac{R}{\lambda_3} \right)^{-2} \end{pmatrix}, \quad t_{\text{neu}} \in \left(0, \frac{T}{\tau} \right), \\ \begin{array}{l} x_{\text{neu}}(0) \\ y_{\text{neu}}(0) \\ z_{\text{neu}}(0) \end{array} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{z_0}{\lambda_3} \end{pmatrix}, \quad \begin{array}{l} x'_{\text{neu}}(0) \\ y'_{\text{neu}}(0) \\ z'_{\text{neu}}(0) \end{array} = \begin{pmatrix} \frac{\tau v_{0x}}{\lambda_1} \\ 0 \\ \frac{\tau v_{0z}}{\lambda_3} \end{pmatrix}, \end{array} \right.$$

mit entkoppelten Differentialgleichungen führt. Die ersten beiden Koordinaten können direkt bestimmt werden (aus dem Ansatz $f(t_{\text{neu}}) = f(0) + f'(0) t_{\text{neu}}$ folgt $f'(t_{\text{neu}}) = f'(0)$ und weiters $f''(t_{\text{neu}}) = 0$)

$$x_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) = \frac{\tau v_{0x}}{\lambda_1} t_{\text{neu}}, \quad y_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) = 0, \quad t_{\text{neu}} \in \left[0, \frac{T}{\tau} \right].$$

Für das reduzierte Modell ist somit ein Anfangswertproblem für eine nichtlineare gewöhnliche Differentialgleichung zweiter Ordnung (näherungsweise) zu lösen

$$\left\{ \begin{array}{l} z''_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) = -\frac{\tau^2 g R^2}{\lambda_3^3} \left(z_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) + \frac{R}{\lambda_3} \right)^{-2}, \quad t_{\text{neu}} \in \left(0, \frac{T}{\tau} \right), \\ z_{\text{neu}}(0) = \frac{z_0}{\lambda_3}, \quad z'_{\text{neu}}(0) = \frac{\tau v_{0z}}{\lambda_3}. \end{array} \right.$$

- (ii) *Zweite Modellreduktion.* Unter der zusätzlichen Annahme $R \gg z(t)$, genauer, der folgenden Näherung

$$\frac{\tau^2 g R^2}{\lambda_3^3} \left(z_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) + \frac{R}{\lambda_3} \right)^{-2} \approx \frac{\tau^2 g}{\lambda_3^3},$$

ergibt sich eine weitere wesentliche Vereinfachung des Modelles. Man erhält ein Anfangswertproblem für eine lineare gewöhnliche Differentialgleichung zweiter Ordnung

$$\begin{cases} z''_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) = -\frac{\tau^2 g}{\lambda_3}, & t_{\text{neu}} \in (0, \frac{T}{\tau}), \\ z_{\text{neu}}(0) = \frac{z_0}{\lambda_3}, & z'_{\text{neu}}(0) = \frac{\tau v_{0z}}{\lambda_3}, \end{cases}$$

mit bekannter Lösung (aus dem Ansatz $f(t_{\text{neu}}) = f(0) + f'(0) t_{\text{neu}} + \frac{1}{2} f''(0) t_{\text{neu}}^2$ folgt $f'(t_{\text{neu}}) = f'(0) + f''(0) t_{\text{neu}}$ und weiters $f''(t_{\text{neu}}) = f''(0)$)

$$z_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) = \frac{z_0}{\lambda_3} + \frac{\tau v_{0z}}{\lambda_3} t_{\text{neu}} - \frac{\tau^2 g}{2\lambda_3} t_{\text{neu}}^2, \quad t_{\text{neu}} \in [0, \frac{T}{\tau}].$$

Die Koordinaten des Balles sind somit durch

$$q_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) = \begin{pmatrix} \frac{\tau v_{0x}}{\lambda_1} t_{\text{neu}} \\ 0 \\ \frac{z_0}{\lambda_3} + \frac{\tau v_{0z}}{\lambda_3} t_{\text{neu}} - \frac{\tau^2 g}{2\lambda_3} t_{\text{neu}}^2 \end{pmatrix}, \quad t_{\text{neu}} \in [0, \frac{T}{\tau}],$$

gegeben. Für den Zeitpunkt des Aufpralles, bestimmt durch die Forderung

$$z_{\text{neu}}(T_2) = z_{\text{neu}}(0) = \frac{z_0}{\lambda_3} \iff \frac{\tau}{\lambda_3} T_2 (v_{0z} - \frac{\tau g}{2} T_2) = 0,$$

wobei $T_2 > 0$ gelte, ergibt sich

$$T_2 = \frac{2 v_{0z}}{\tau g} : \quad q_{\text{neu}}(T_2) = \begin{pmatrix} \frac{2 v_{0x} v_{0z}}{\lambda_1 g} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

und aus Symmetriegründen folgt für den Zeitpunkt maximaler Wurfhöhe die Relation

$$T_1 = \frac{1}{2} T_2 = \frac{v_{0z}}{\tau g} : \quad z'_{\text{neu}}(T_1) = 0, \quad q_{\text{neu}}(T_1) = \begin{pmatrix} \frac{v_{0x} v_{0z}}{\lambda_1 g} \\ 0 \\ \frac{z_0}{\lambda_3} + \frac{v_{0z}^2}{2\lambda_3 g} \end{pmatrix}.$$

Sensitivitätsanalyse.

(i) *Vereinfachtes lineares Modell.* Für das vereinfachte lineare Modell mit bekannter Lösung

$$q_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) = \begin{pmatrix} \frac{\tau v_{0x}}{\lambda_1} t_{\text{neu}} \\ 0 \\ \frac{z_0}{\lambda_3} + \frac{\tau v_{0z}}{\lambda_3} t_{\text{neu}} - \frac{\tau^2 g}{2\lambda_3} t_{\text{neu}}^2 \end{pmatrix}, \quad t_{\text{neu}} \in [0, \frac{T}{\tau}],$$

ist sofort ersichtlich, wie sich Änderungen der Anfangshöhe und der Anfangsgeschwindigkeit auf das Ergebnis auswirken; die Berechnung der partiellen Ableitungen

$$\partial_{z_0} q_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{\lambda_3} \end{pmatrix}, \quad \partial_{v_{0x}} q_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) = \begin{pmatrix} \frac{\tau}{\lambda_1} t_{\text{neu}} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \partial_{v_{0z}} q_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{\tau}{\lambda_3} t_{\text{neu}} \end{pmatrix},$$

bestätigt etwa, daß die horizontale Komponente der Anfangsgeschwindigkeit nur die Wurfweite und die vertikale Komponente nur die Wurfhöhe beeinflusst.

(ii) *Vereinfachtes nichtlineares Modell.* Für das vereinfachte nichtlineare Modell

$$\begin{cases} x_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) = \frac{\tau v_{0x}}{\lambda_1} t_{\text{neu}}, & y_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) = 0, & t_{\text{neu}} \in [0, \frac{T}{\tau}], \\ z''_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) = -\frac{\tau^2 g R^2}{\lambda_3^3} (z_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) + \frac{R}{\lambda_3})^{-2}, & & t_{\text{neu}} \in (0, \frac{T}{\tau}), \\ z_{\text{neu}}(0) = \frac{z_0}{\lambda_3}, & z'_{\text{neu}}(0) = \frac{\tau v_{0z}}{\lambda_3}, & \end{cases}$$

ist es bereits deutlich aufwendiger, beispielsweise die Sensitivität bezüglich der vertikalen Komponente v_{0z} zu untersuchen. Differentiation der Differentialgleichung und der Anfangsbedingungen bzgl. v_{0z} führt auf ein Anfangswertproblem für $Z = \partial_{v_{0z}} z_{\text{neu}}$

$$\begin{cases} Z''(t_{\text{neu}}) = \frac{2\tau^2 g R^2}{\lambda_3^3} (z_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) + \frac{R}{\lambda_3})^{-3} Z(t_{\text{neu}}), & t_{\text{neu}} \in (0, \frac{T}{\tau}), \\ Z(0) = 0, & Z'(0) = \frac{\tau}{\lambda_3}. \end{cases}$$

Falls man quantitative Aussagen beispielsweise zur Abhängigkeit von $\partial_{v_{0z}} z_{\text{neu}}$ bzgl. v_{0z} treffen möchte, ist es notwendig, die Variationsgleichung (näherungsweise) zu lösen. Ist man nur am qualitativen Verhalten der Lösung interessiert, reicht es aus, die (formale) Lösungsdarstellung

$$Z(t_{\text{neu}}) = \Omega_1(t_{\text{neu}}) Z(0) + \Omega_2(t_{\text{neu}}) Z'(0), \quad t_{\text{neu}} \in [0, \frac{T}{\tau}],$$

zu verwenden; insbesondere folgt daraus

$$\partial_{v_{0z}} z_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) \neq 0.$$

Geeignete Skalierungen (Lineares Modell). Aus den Forderungen, daß zu den Zeitpunkten maximaler Wurfhöhe bzw. maximaler Wurfweite näherungsweise

$$T_1 = \frac{v_{0z}}{\tau g} \approx \frac{1}{2}, \quad T_2 = 2 T_1 \approx 1, \quad z_{\text{neu}}(T_1) = \frac{z_0}{\lambda_3} + \frac{v_{0z}^2}{2\lambda_3 g} \approx 1, \quad x_{\text{neu}}(T_2) = \frac{2 v_{0x} v_{0z}}{\lambda_1 g} \approx 1,$$

gelte, ergeben sich folgende Skalierungen in Abhängigkeit von der vorgegebenen Anfangshöhe und der Anfangsgeschwindigkeit

$$\tau \approx \frac{2 v_{0z}}{g}, \quad \lambda_1 \approx \frac{2 v_{0x} v_{0z}}{g} = \tau v_{0x}, \quad \lambda_3 \approx z_0 + \frac{v_{0z}^2}{2g} = z_0 + \frac{\tau v_{0z}}{4}.$$

Bezüglich dieser Wahl der Skalierungen ist für das lineare Modell die Wurfbahn des Balles durch die einfache Darstellung

$$\tau = \frac{2 v_{0z}}{g}, \quad \lambda_1 = \tau v_{0x}, \quad \lambda_3 = z_0 + \frac{\tau v_{0z}}{4} :$$

$$q_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) = \begin{pmatrix} t_{\text{neu}} \\ 0 \\ \frac{4}{4z_0 + \tau v_{0z}} \left(z_0 + \tau v_{0z} t_{\text{neu}} (1 - t_{\text{neu}}) \right) \end{pmatrix}, \quad t_{\text{neu}} \in [0, \frac{T}{\tau}],$$

mit $T_1 = \frac{1}{2}$ sowie $T_2 = 1$ gegeben; da die Bahn des Balles durch die zwei Größen $z_0, \tau v_{0z}$ bestimmt ist, bezeichnet man diese auch als effektive Parameter. Im Spezialfall $z_0 = 0$ folgt insbesondere

$$z_0 = 0, \quad \tau = \frac{2v_{0z}}{g}, \quad \lambda_1 = \tau v_{0x}, \quad \lambda_3 = \frac{\tau v_{0z}}{4} :$$

$$q_{\text{neu}}(t_{\text{neu}}) = \begin{pmatrix} t_{\text{neu}} \\ 0 \\ 4 t_{\text{neu}}(1 - t_{\text{neu}}) \end{pmatrix}, \quad t_{\text{neu}} \in \left[0, \frac{T}{\tau}\right].$$

Bemerkungen.

- (i) *Mehrkörperproblem.* Das Zweikörperproblem wird durch die Newton'schen Bewegungsgleichungen

$$m_1 q_1''(t) = - \frac{G m_1 m_2}{\|q_1(t) - q_2(t)\|^3} (q_1(t) - q_2(t)),$$

$$m_2 q_2''(t) = - \frac{G m_1 m_2}{\|q_1(t) - q_2(t)\|^3} (q_2(t) - q_1(t)),$$

beschrieben. Bei Einführung der Koordinaten des Schwerpunktes $c q_S = m_1 q_1 + m_2 q_2$ (die Größe c habe die Einheit $[kg]$) sowie der Relativkoordinaten $q = q_1 - q_2$ ergeben sich die Differentialgleichungen

$$q_S''(t) = 0, \quad q''(t) = - \frac{G(m_1 + m_2)}{\|q(t)\|^3} q(t).$$

Analoge Aussagen gelten für das Mehrkörperproblem (Sonnensystem).

- (ii) *Drehimpulserhaltung bei Zentralkräften.* Falls die Bewegung eines punktförmigen Körpers mit Koordinaten $z : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^3$ durch eine Differentialgleichung der Form

$$z''(t) = f(\|z(t)\|_{\mathbb{R}^3}) z(t)$$

beschrieben wird, ist der Drehimpuls eine Erhaltungsgröße, d.h. es gilt

$$z(t) \times z'(t) = \tilde{L}(t) = \tilde{L}(0) = z(0) \times z'(0).$$

Mittels Differentiation folgt nämlich (Einsetzen der Differentialgleichung, Verwendung von $w \times w = 0$ für $w \in \mathbb{R}^3$)

$$\tilde{L}'(t) = z'(t) \times z'(t) + z(t) \times z''(t) = z'(t) \times z'(t) + f(\|z(t)\|_{\mathbb{R}^3}) (z(t) \times z(t)) = 0.$$

Da weiters (wegen $z(t) \times z'(t) \perp z(t), z'(t)$)

$$(z(t) | z(0) \times z'(0))_{\mathbb{R}^3} = (z(t) | \tilde{L}(0))_{\mathbb{R}^3} = (z(t) | \tilde{L}(t))_{\mathbb{R}^3} = (z(t) | z(t) \times z'(t))_{\mathbb{R}^3} = 0,$$

zeigt dies, daß die Bahn des Körpers in der durch die Anfangbedingungen $z(0), z'(0)$ bzw. den entsprechenden Normalvektor $z(0) \times z'(0)$ definierten Ebene verläuft.

Ergänzungen (Hamilton-Systeme)

Als Illustrationen für Modelle der klassischen Mechanik, welche auf Hamilton-Systeme führen, werden das mathematische Pendel sowie der harmonische Oszillator ergänzt. Diese einfachen Modelle dienen außerdem als Motivation für Schwingungsgleichungen und Wellengleichungen.

Mathematisches Pendel, Harmonischer Oszillator

Mathematisches Pendel.

- (i) *Situation.* Als idealisiertes Modell eines schwingenden Pendels wird ein punktförmiger Körper der Masse m , welcher an einer masselosen Pendelschnur der Länge ℓ fixiert ist, betrachtet. Es wird angenommen, daß die Pendelbewegung durch die Einwirkung der Gravitationskraft bestimmt ist und der Einfluß von anderen Kräften wie etwa Reibungskräften vernachlässigt werden kann.
- (ii) *Problemstellung.* Gesucht sind die Koordinaten des Pendels in Abhängigkeit von der Zeit. Aufgrund der Drehimpulserhaltung bei Zentralkräften findet die Pendelbewegung in einer Ebene statt; bei geeigneter Wahl des Koordinatensystemes ergibt sich somit eine Reduktion auf zwei Komponenten

$$q : [0, \infty) \longrightarrow \mathbb{R}^2 : t \longmapsto q(t) = \begin{pmatrix} x(t) \\ z(t) \end{pmatrix}.$$

Da die Pendelbewegung auf einer Kreisbahn verläuft, erhält man, wenn der Mittelpunkt des Kreises gleich dem Ursprung des Koordinatensystemes gewählt wird, die Nebenbedingung

$$\|q(t)\| = \ell, \quad t \in [0, \infty).$$

- (iii) *Newton'sche Bewegungsgleichungen.* Bei der naheliegenden Wahl kartesischer Koordinaten und mittels der zulässigen linearen Approximation an die Gravitationskraft⁴ lauten die Newton'schen Bewegungsgleichungen (Masse des Pendels hat keinen Einfluß auf die Differentialgleichung)

Masse \times Beschleunigung = Gravitationskraft,

$$m \begin{pmatrix} x''(t) \\ z''(t) \end{pmatrix} = m q''(t) = F_G = \begin{pmatrix} 0 \\ -mg \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} x''(t) \\ z''(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -g \end{pmatrix}.$$

⁴Vgl. reduziertes Modell für Ballwurf.

- (iv) *Polarkoordinaten.* Die vorgegebene Nebenbedingung legt die Einführung von Polarkoordinaten mit zeitabhängiger Funktion $\varphi : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ nahe

$$\begin{aligned} q(t) &= \begin{pmatrix} x(t) \\ z(t) \end{pmatrix} = \ell \begin{pmatrix} \cos(\varphi(t)) \\ \sin(\varphi(t)) \end{pmatrix}, \\ q'(t) &= \begin{pmatrix} x'(t) \\ z'(t) \end{pmatrix} = \ell \varphi'(t) \begin{pmatrix} -\sin(\varphi(t)) \\ \cos(\varphi(t)) \end{pmatrix}, \\ q''(t) &= \begin{pmatrix} x''(t) \\ z''(t) \end{pmatrix} = \ell \varphi''(t) \begin{pmatrix} -\sin(\varphi(t)) \\ \cos(\varphi(t)) \end{pmatrix} - \ell (\varphi'(t))^2 \begin{pmatrix} \cos(\varphi(t)) \\ \sin(\varphi(t)) \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

- (v) *Pendelgleichung.* In Polarkoordinaten lauten die Newton'schen Bewegungsgleichungen unter der zusätzlichen Nebenbedingung

$$\ell \varphi''(t) \begin{pmatrix} -\sin(\varphi(t)) \\ \cos(\varphi(t)) \end{pmatrix} - \ell (\varphi'(t))^2 \begin{pmatrix} \cos(\varphi(t)) \\ \sin(\varphi(t)) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x''(t) \\ z''(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -g \end{pmatrix}.$$

Aus der ersten Komponente folgt die Bedingung (sofern $\cos(\varphi(t)) \neq 0$)

$$\begin{aligned} -\ell \sin(\varphi(t)) \varphi''(t) - \ell \cos(\varphi(t)) (\varphi'(t))^2 &= x''(t) = 0, \\ (\varphi'(t))^2 &= -\tan(\varphi(t)) \varphi''(t); \end{aligned}$$

Einsetzen in zweite Komponente führt auf (wegen $\sin^2 + \cos^2 = 1$)

$$\begin{aligned} \ell \cos(\varphi(t)) \varphi''(t) - \ell \sin(\varphi(t)) (\varphi'(t))^2 &= z''(t) = -g, \\ \ell \varphi''(t) \left(\cos^2(\varphi(t)) + \sin^2(\varphi(t)) \right) &= -g \cos(\varphi(t)), \\ \varphi''(t) &= -\frac{g}{\ell} \cos(\varphi(t)). \end{aligned}$$

- (vi) *Alternative Herleitung (Drehimpuls).* Eine alternative Herleitung der Pendelgleichung nützt die kompakte Schreibweise

$$\begin{aligned} e &= \begin{pmatrix} \cos \varphi \\ \sin \varphi \end{pmatrix}, \quad e_{\perp} = \begin{pmatrix} -\sin \varphi \\ \cos \varphi \end{pmatrix} \perp e, \\ q &= \ell e, \quad q_{\perp} = \ell e_{\perp}, \quad q' = \varphi' q_{\perp}, \quad q'' = \varphi'' q_{\perp} - (\varphi')^2 q, \end{aligned}$$

und die Betrachtung der Ableitung des Drehimpulses $L = q \times (m q')$ bzw. von $\tilde{L} = q \times q'$ (wegen $q' \times q' = 0$)

$$\frac{d}{dt} (q \times q') = q \times q''.$$

Einsetzen der obigen Relation für q'' sowie der Bewegungsgleichung (mit Standardbasisvektor e_2 , Masse hat keinen Einfluß)

$$q'' = -g e_2$$

führt auf (wegen $e \times e = 0$, $e \times e_{\perp} = \det(e, e') = 1$, $e \times e_2 = \cos \varphi$)

$$\begin{aligned} \varphi'' q \times q_{\perp} - (\varphi')^2 q \times q &= q \times q'' = -g q \times e_2, \\ \varphi'' &= -\frac{g}{\ell} \cos \varphi. \end{aligned}$$

- (vii) *Mathematisches Pendel.* Die übliche Formulierung der mathematischen Pendelgleichung für die Auslenkung aus der Ruhelage erhält man nun mittels der Transformation $\psi = \pi/2 + \varphi$ und mit der Bezeichnung $\omega^2 = \frac{g}{\ell} > 0$ (Betrachtung des einschließenden Winkels mit negativer z -Achse, insbesondere gilt $\psi = 0$ für $\varphi = -\frac{\pi}{2}$ und $\varphi = 0$ für $\psi = \frac{\pi}{2}$, Additionstheorem $\cos \varphi = \cos(\psi - \pi/2) = \sin \psi$)

$$\psi''(t) = -\omega^2 \sin(\psi(t)), \quad t \in [0, \infty).$$

- (viii) *Equilibrium und Linearisierung.* Für die mathematische Pendelgleichung ist der Ursprung $\psi = 0$ wegen

$$f(\psi) = -\omega^2 \sin(\psi), \quad f(0) = 0, \quad f'(\psi) = -\omega^2 \cos(\psi), \quad f'(0) = -\omega^2 < 0,$$

ein stabiles Equilibrium. Mittels $f(\psi) = f(0) + f'(0)\psi + r$ ergibt sich die Darstellung

$$\begin{aligned} \psi''(t) &= -\omega^2 \sin(\psi(t)) = -\omega^2 \psi(t) + r(t), \\ r(t) &= \omega^2 (\psi(t) - \sin(\psi(t))) = \mathcal{O}((\psi(t))^3). \end{aligned}$$

Harmonischer Oszillator.

- (i) *Harmonischer Oszillator.* Im Fall kleiner Auslenkungen ist die Vernachlässigung des nichtlinearen Resttermes in der mathematischen Pendelgleichung zulässig. Dies führt auf den harmonischen Oszillator

$$\psi''(t) = -\omega^2 \psi(t), \quad t \in [0, \infty),$$

mit bekannter Lösung bei Vorgabe der Anfangsauslenkung und Anfangsgeschwindigkeit (wegen $\psi(t) = C_1 \sin(\omega t) + C_2 \cos(\omega t)$ und $\psi'(t) = -C_1 \omega \sin(\omega t) + C_2 \omega \cos(\omega t)$)

$$\psi(t) = \psi(0) \cos(\omega t) + \frac{1}{\omega} \psi'(0) \sin(\omega t), \quad t \in [0, \infty).$$

- (ii) *Lösungsdarstellung.* Diese Lösungsdarstellung erhält man auch durch Transformation auf ein Differentialgleichungssystem erster Ordnung

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \Psi'_1(t) \\ \Psi'_2(t) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \Psi_2(t) \\ -\omega^2 \Psi_1(t) \end{pmatrix}, \quad t \in [0, \infty), \\ \Psi'(t) &= A \Psi(t), \quad A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\omega^2 & 0 \end{pmatrix}, \quad t \in [0, \infty), \end{aligned}$$

und der Darstellung der exakten Lösung mittels Matrix-Exponentialfunktion

$$\Psi(t) = e^{tA} \Psi(0), \quad t \in [0, \infty).$$

Mittels der leicht zu bestimmenden Eigenwertzerlegung (Eigenwerte $\pm i\omega$)

$$A = V\Lambda V^{-1}, \quad \Lambda = \begin{pmatrix} i\omega & 0 \\ 0 & -i\omega \end{pmatrix}, \quad V = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ i\omega & -i\omega \end{pmatrix}, \quad V^{-1} = \frac{1}{2i\omega} \begin{pmatrix} i\omega & 1 \\ i\omega & -1 \end{pmatrix},$$

folgt die angegebene Relation mittels Eulerscher Formel

$$\Psi(t) = V e^{t\Lambda} V^{-1} \Psi(0) = \begin{pmatrix} \cos(\omega t) & \frac{1}{\omega} \sin(\omega t) \\ -\omega \sin(\omega t) & \cos(\omega t) \end{pmatrix} \Psi(0), \quad t \in [0, \infty).$$

- (iii) *Grundlegende Eigenschaften.* Aus der Lösungsdarstellung mittels Sinus- und Cosinus-Funktion ist offensichtlich, daß alle Lösungen des harmonischen Oszillators periodisch mit Periode $T = \frac{2\pi}{\omega}$ sind.⁵

Hamilton-Systeme.

- (i) *Allgemeine Form.* Die allgemeine Form eines Hamilton-Systems mit zugehöriger Hamilton-Funktion $H: \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ lautet

$$\begin{cases} q'(t) = \partial_p H(p(t), q(t)), \\ p'(t) = -\partial_q H(p(t), q(t)), \end{cases} \quad t \in (0, T).$$

Differentiation und Einsetzen der Differentialgleichung (mit $\partial_p = \partial_1, \partial_q = \partial_2$)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} H(p(t), q(t)) &= \partial_p H(p(t), q(t)) p'(t) + \partial_q H(p(t), q(t)) q'(t) \\ &= -\partial_p H(p(t), q(t)) \partial_q H(p(t), q(t)) + \partial_q H(p(t), q(t)) \partial_p H(p(t), q(t)) \\ &= 0 \end{aligned}$$

zeigt, daß folgende Größe erhalten bleibt

$$H(p(t), q(t)) = H(p(0), q(0)), \quad t \in [0, T].$$

- (ii) *Pendelgleichung als Hamilton-System.* Die mathematische Pendelgleichung ist ein einfaches Beispiel eines Hamilton-Systems mit zugehöriger Hamilton-Funktion (mit $q = \psi$ sowie $p = \psi'$)

$$H(p, q) = \frac{1}{2} p^2 + \omega^2 (1 - \cos q), \quad \partial_p H(p, q) = p, \quad \partial_q H(p, q) = \omega^2 \sin q.$$

Eine Umformulierung der mathematischen Pendelgleichung als ein Differentialgleichungssystem erster Ordnung führt nämlich auf die folgenden Bedingungen (naheliegender Zusammenhang mit kinetischer Energie $E_{\text{kin}} = \frac{1}{2} p^2$ und potentieller Energie $E_{\text{pot}} = c - \omega^2 \cos q$)

$$\begin{aligned} \partial_p H(p, q) &= p, & \partial_q H(p, q) &= \omega^2 \sin q, \\ H(p, q) &= \frac{1}{2} p^2 + C(q), & H(p, q) &= -\omega^2 \cos q + C(p), \\ H(p, q) &= \frac{1}{2} p^2 - \omega^2 \cos q + C. \end{aligned}$$

⁵Vgl. auch Phasendiagramme für das Mathematische Pendel und den Harmonischen Oszillator.

Die zusätzliche Integrationskonstante ist so gewählt, daß für die Ruhelage $q = \psi = 0$ der Minimalwert $E_{\text{pot}} = c - \omega^2 = 0$ erreicht wird; für $q = \psi = \pi$ ergibt sich dann der Maximalwert $E_{\text{pot}} = c + \omega^2 = 2\omega^2$.⁶

- (iii) *Harmonischer Oszillator.* Der Harmonische Oszillator entspricht der Hamilton-Funktion (zulässige Approximation $1 - \cos q \approx \frac{1}{2} q^2$ für kleine Auslenkungen)

$$H(p, q) = \frac{1}{2} (p^2 + \omega^2 q^2).$$

⁶In einem Phasendiagramm entspricht die Kurve $(q(t), p(t))$ einer durch den Anfangswert $H(p(0), q(0))$ bestimmten Niveaulinie von H .

Kapitel 3

Master- und Kontinuitätsgleichungen (Chemische Reaktionen)

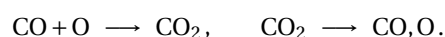
Inhalt. Als weitere Illustration wird die Modellierung elementarer chemischer Reaktionen behandelt. Um ein numerisch realisierbares mathematisches Modell zu entwickeln, sind verschiedene Reduktionsschritte notwendig:

- Stochastischer Prozeß
- Differenzgleichung
- Master-Gleichung
- Kontinuitätsgleichung
- System gewöhnlicher Differentialgleichungen

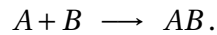
Die Modellierung der chemischen Reaktionen als stochastischer Prozeß führt unter vereinfachenden Zusatzannahmen auf eine Differenzgleichung. Durch einen Grenzübergang bezüglich des Zeitinkrementes erhält man eine Master-Gleichung; ein weiterer Grenzübergang bezüglich der Anzahl der Moleküle führt auf eine partielle Differentialgleichung in Form einer Kontinuitätsgleichung. Zur Analyse des Langzeitverhaltens ist es zweckmäßig, eine Reduktion auf ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen vorzunehmen.

Chemische Reaktionen. Für zwei verschiedene Arten von Molekülen (bzw. Atomen) sowie deren Verbindung werden die folgenden chemischen Reaktionen¹ betrachtet:

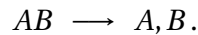
¹Diese chemischen Reaktionen treten beispielsweise bei Verbindungen von Kohlenstoff- und Sauerstoffatomen auf



- *Verbindung.* Ein Molekül vom Typ A und ein Molekül vom Typ B verbinden sich zu einem Molekül vom Typ AB



- *Zerfall.* Ein Molekül vom Typ AB zerfällt in ein Molekül vom Typ A und ein Molekül vom Typ B



Mathematische Modellierung.

- (i) *Ziel.* Unter der Annahme, daß die Anfangsverteilung der Moleküle, d.h. die Anzahl der Moleküle vom Typ A , B und AB zur Zeit $t = 0$, näherungsweise bekannt ist, möchte man ein mathematisches Modell entwickeln, welches den zeitlichen Verlauf der Verteilung auf Moleküle vom Typ A , B und AB und damit die stattfindenden Reaktionen wiedergibt. Meist interessiert man sich zudem für die Frage, ob asymptotisch, d.h. für $t \rightarrow \infty$, ein stationärer Zustand eintritt.
- (ii) *Realisierbarkeit.* Da im Rahmen der chemischen Reaktionskinetik Prozesse mit einer großen Anzahl an Molekülen

$$N \gg 1$$

untersucht werden, würde die mathematische Modellierung der Trajektorie jedes einzelnen Moleküls entsprechend der klassischen Mechanik oder der Quantenmechanik zu einem Modell führen, dessen numerische Berechnung ein Ding der Unmöglichkeit wäre.

- (iii) *Stochastisches Modell.* Als Ausgangspunkt wählt man deshalb anstelle eines deterministischen Modelles ein stochastisches Modell, das auf einer Beschreibung der Reaktionen als stochastischer Prozeß basiert; Verteilungen zu Zeitpunkten $t \in [0, \infty)$ werden dabei als zufällige Ereignisse interpretiert. Unter zusätzlichen Annahmen wie jener der Markov-Eigenschaft und durch Einschränkung des betrachteten Zeitintervalles $[t, t + \tau]$ kann man die Anzahl der möglichen chemischen Reaktionen stark reduzieren und erhält eine vergleichsweise einfache Differenzgleichung, welche Wahrscheinlichkeiten zu den aufeinanderfolgenden Zeitpunkten t und $t + \tau$ in Beziehung setzt; als Parameter treten dabei die Raten für die Verbindung oder den Zerfall von Molekülen auf. Bei geeigneter Skalierung erhält man durch den Grenzübergang

$$\tau \rightarrow 0$$

eine Master-Gleichung; der Grenzübergang

$$\delta = \frac{1}{N} \rightarrow 0$$

führt schließlich auf eine partielle Differentialgleichung in Form einer Kontinuitätsgleichung. Um das asymptotische Verhalten zu untersuchen, wird eine weitere Reduktion auf ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen, welches die zeitliche Entwicklung von Erwartungswerten modelliert, vorgenommen.

Modellierung als stochastischer Prozeß.

- (i) *Poisson-Prozeß und Markov-Eigenschaft.* Das betrachtete mathematisches Modell für chemische Reaktionen basiert auf einem Zugang mittels Poisson-Prozessen. Insbesondere nützt man deren Markov-Eigenschaft, d.h. man setzt voraus, daß die Verteilung zum Zeitpunkt $t + \tau$ nur von der Verteilung zum Zeitpunkt t und den im Zeitintervall $(t, t + \tau]$ stattfindenden chemischen Reaktionen abhängt. Einflüsse von Ereignissen zu früheren Zeitpunkten $[0, t)$ werden somit als vernachlässigbar angesehen. Außerdem wird angenommen, daß das Zeitinkrement $\tau > 0$ hinreichend klein gewählt ist, sodaß der Einfluß von Beiträgen höherer Ordnung vernachlässigt werden kann, weil etwa $C\tau^2 \ll \tau$.
- (ii) *Verbindungs- und Zerfallsrate.* Da man von einem Poisson-Prozeß ausgeht, ist die Wahrscheinlichkeit, daß sich ein Molekül vom Typ A und ein Molekül vom Typ B in einem Zeitintervall $(t, t + \tau]$ verbinden, durch

$$\text{Verbindung: } r_+ \tau + \mathcal{O}(\tau^2)$$

gegeben, wobei $r_+ > 0$ die Reaktionsrate bezeichnet; entsprechend ist die Wahrscheinlichkeit, daß ein Molekül vom Typ AB in ein Molekül vom Typ A und ein Molekül vom Typ B zerfällt, gleich (wobei $r_- > 0$)

$$\text{Zerfall: } r_- \tau + \mathcal{O}(\tau^2).$$

- (iii) *Verteilungen und zugehörige Wahrscheinlichkeiten.* Für das Ereignis, daß zu einem Zeitpunkt $t \in [0, \infty)$ genau $j(t)$ Moleküle vom Typ A , $k(t)$ Moleküle vom Typ B und $\ell(t)$ Moleküle vom Typ AB vorhanden sind

$$Z(t) = (j(t), k(t), \ell(t))$$

bezeichnet

$$p\left(\frac{j(t)}{N}, \frac{k(t)}{N}, \frac{\ell(t)}{N}, t\right) = P\left(Z(t) = (j(t), k(t), \ell(t))\right)$$

die zugehörige Wahrscheinlichkeit; in Hinblick auf die Herleitung der Kontinuitätsgleichung wird die Anzahl relativ zur anfänglichen Gesamtzahl der gebundenen bzw. nicht gebundenen Moleküle vom Typ A oder B

$$N = N_A + N_B = j(0) + k(0) + 2\ell(0)$$

angegeben.

- (iv) *Anfangsverteilung und Erhaltungsgrößen.* Im folgenden wird angenommen, daß die anfängliche Anzahl der Moleküle vom Typ A , B und AB

$$Z(0) = (j(0), k(0), \ell(0))$$

näherungsweise bekannt ist bzw. dieses Ereignis mit hoher Wahrscheinlichkeit eintritt. Zu beachten ist, daß die Gesamtzahl der Moleküle keine Erhaltungsgröße ist

$$j(t) + k(t) + \ell(t) \underset{\text{i.A.}}{\neq} j(0) + k(0) + \ell(0), \quad t \in [0, \infty),$$

jedoch die Anzahl der gebundenen oder nicht gebundenen Moleküle vom Typ A bzw. B erhalten bleibt

$$j(t) + \ell(t) = N_A = j(0) + \ell(0), \quad k(t) + \ell(t) = N_B = k(0) + \ell(0), \quad t \in [0, \infty);$$

folglich berechnet sich $\ell(t)$ aus

$$\ell(t) = \frac{1}{2} (N - j(t) - k(t)), \quad t \in [0, \infty).$$

Differenzgleichung. Um für ein zu einem gewissen Zeitpunkt $t \in (0, \infty)$ eintretendes Ereignis $Z(t)$ bzw. die zugehörige Wahrscheinlichkeit $p(\cdot, \cdot, t)$ eine Relation in Abhängigkeit vom Anfangszustand anzugeben, müßte man sämtliche im Zeitintervall $[0, t]$ stattfindenden chemischen Reaktionen bestimmen, was nicht realisierbar ist; deshalb versucht man stattdessen, Ereignisse zu aufeinanderfolgenden Zeitpunkten t und $t + \tau$ in Relation zu setzen. Wesentlich ist dabei, daß aufgrund der angenommenen Markov-Eigenschaft das betrachtete Zeitintervall $[t, t + \tau]$ so klein gewählt werden kann, daß maximal eine einzige chemische Reaktion (Verbindung, Zerfall) eintritt; somit gibt es nur die folgenden Möglichkeiten, welche auf das Ereignis $Z(t + \tau) = (J, K, L)$ führen:

$$\text{Verbindung } A + B \rightarrow AB: \quad Z(t) = (J + 1, K + 1, L - 1) \rightarrow Z(t + \tau) = (J, K, L),$$

$$\text{Zerfall } AB \rightarrow A, B: \quad Z(t) = (J - 1, K - 1, L + 1) \rightarrow Z(t + \tau) = (J, K, L),$$

$$\text{Keine Reaktion:} \quad Z(t) = (J, K, L) \rightarrow Z(t + \tau) = (J, K, L).$$

Diese enorme Einschränkung der stattfindenden chemischen Reaktionen erlaubt die Bestimmung der zugehörigen Wahrscheinlichkeiten durch Abzählen der Möglichkeiten:

- Sind zum Zeitpunkt t genau $J + 1$ Moleküle vom Typ A und $K + 1$ Moleküle vom Typ B vorhanden, gibt es $(J + 1)(K + 1)$ Möglichkeiten, ein Molekül vom Typ A mit einem Molekül vom Typ B zu verbinden

$$\text{Verbindung } A + B \rightarrow AB: \quad Z(t) = (J + 1, K + 1, L - 1) \rightarrow Z(t + \tau) = (J, K, L).$$

Für die zugehörige Wahrscheinlichkeit erhält man

$$P(Z(t) = (J + 1, K + 1, L - 1) \rightarrow Z(t + \tau) = (J, K, L)) = (J + 1)(K + 1) r_+ \tau + \mathcal{O}(\tau^2).$$

- Sind zum Zeitpunkt t genau $L + 1$ Moleküle vom Typ AB vorhanden, gibt es $L + 1$ Möglichkeiten für den Zerfall eines einzigen Moleküls von Typ AB

$$\text{Zerfall } AB \rightarrow A, B: \quad Z(t) = (J - 1, K - 1, L + 1) \rightarrow Z(t + \tau) = (J, K, L).$$

Für die zugehörige Wahrscheinlichkeit ergibt sich

$$P(Z(t) = (J - 1, K - 1, L + 1) \rightarrow Z(t + \tau) = (J, K, L)) = (L + 1) r_- \tau + \mathcal{O}(\tau^2).$$

- Die Wahrscheinlichkeit, daß keine Reaktion

$$\text{Keine Reaktion: } Z(t) = (J, K, L) \longrightarrow Z(t + \tau) = (J, K, L)$$

stattfindet, ist durch (Wahrscheinlichkeit für eine Verbindung ist $JK r_+ \tau$, Wahrscheinlichkeit für einen Zerfall ist $L r_- \tau$, Gegenwahrscheinlichkeit dazu)

$$P(Z(t) = (J, K, L) \rightarrow Z(t + \tau) = (J, K, L)) = 1 - JK r_+ \tau - L r_- \tau + \mathcal{O}(\tau^2)$$

gegeben.

Insgesamt führt dies auf folgenden Zusammenhang

$$\begin{aligned} p\left(\frac{J}{N}, \frac{K}{N}, \frac{L}{N}, t + \tau\right) &= (J + 1)(K + 1) r_+ \tau p\left(\frac{J+1}{N}, \frac{K+1}{N}, \frac{L-1}{N}, t\right) \\ &+ (L + 1) r_- \tau p\left(\frac{J-1}{N}, \frac{K-1}{N}, \frac{L+1}{N}, t\right) \\ &+ (1 - (JK r_+ + L r_-) \tau) p\left(\frac{J}{N}, \frac{K}{N}, \frac{L}{N}, t\right) + \mathcal{O}(\tau^2); \end{aligned}$$

für den Differenzenquotienten bezüglich des Zeitinkrementes erhält man somit die Relation

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau} \left(p\left(\frac{J}{N}, \frac{K}{N}, \frac{L}{N}, t + \tau\right) - p\left(\frac{J}{N}, \frac{K}{N}, \frac{L}{N}, t\right) \right) &= (J + 1)(K + 1) r_+ p\left(\frac{J+1}{N}, \frac{K+1}{N}, \frac{L-1}{N}, t\right) \\ &+ (L + 1) r_- p\left(\frac{J-1}{N}, \frac{K-1}{N}, \frac{L+1}{N}, t\right) \\ &- (JK r_+ + L r_-) p\left(\frac{J}{N}, \frac{K}{N}, \frac{L}{N}, t\right) + \mathcal{O}(\tau^2). \end{aligned}$$

Master-Gleichung und Kontinuitätsgleichung. Unter geeigneten Voraussetzungen ergibt sich aus der angegebenen Differenzengleichung durch den Grenzübergang $\tau \rightarrow 0$ eine Master-Gleichung und daraus durch den Grenzübergang $N \rightarrow \infty$ eine Kontinuitätsgleichung. Im Folgenden bezeichne (wobei $N_A + N_B = N$)

$$\Omega_N = \left\{ \left(\frac{J}{N}, \frac{K}{N}, \frac{L}{N} \right) : (J, K, L) \in \{0, \dots, N\}^3, J + L = N_A, K + L = N_B, L = \frac{1}{2}(N - J - K) \right\} \subset [0, 1]^3$$

den zulässigen Bereich; dem Grenzfall $N \rightarrow \infty$ entspreche die Menge (wobei $\frac{N_A}{N} \rightarrow c_A$ sowie $\frac{N_B}{N} \rightarrow c_B$ und folglich $c_A + c_B = 1$)

$$\Omega = \left\{ (x, y, z) \in (0, 1)^3 : x + z = c_A, y + z = c_B, z = \frac{1}{2}(1 - x - y) \right\} \subset [0, 1]^3.$$

- (i) *Master-Gleichung.* Der Grenzübergang $\tau \rightarrow 0$ erlaubt die Vernachlässigung Terme höherer Ordnung bezüglich τ und führt auf eine Master-Gleichung für $U : \Omega_N \times [0, \infty) \rightarrow [0, 1]$

$$\begin{aligned} \tau \rightarrow 0: \quad \partial_t U\left(\frac{J}{N}, \frac{K}{N}, \frac{L}{N}, t\right) &= (J + 1)(K + 1) r_+ U\left(\frac{J+1}{N}, \frac{K+1}{N}, \frac{L-1}{N}, t\right) \\ &+ (L + 1) r_- U\left(\frac{J-1}{N}, \frac{K-1}{N}, \frac{L+1}{N}, t\right) \\ &- (JK r_+ + L r_-) U\left(\frac{J}{N}, \frac{K}{N}, \frac{L}{N}, t\right). \end{aligned}$$

(ii) *Kontinuitätsgleichung.* Mit den suggestiven Bezeichnungen²

$$\delta = \frac{1}{N}, \quad (x, y, z) = \left(\frac{J}{N}, \frac{K}{N}, \frac{L}{N}\right), \quad \rho_+ = \frac{r_+}{\delta}, \quad \rho_- = r_-,$$

wobei $(x, y, z) \in \Omega_N$ die relative Anzahl der Moleküle angibt, schreibt sich die Master-Gleichung folgendermaßen

$$\begin{aligned} \partial_t U(x, y, z, t) &= \frac{r_+}{\delta^2} (x + \delta) (y + \delta) U(x + \delta, y + \delta, z - \delta, t) \\ &\quad + \frac{r_-}{\delta} (z + \delta) U(x - \delta, y - \delta, z + \delta, t) \\ &\quad - \left(\frac{r_+}{\delta^2} x y + \frac{r_-}{\delta} z\right) U(x, y, z, t) \\ &= \frac{\rho_+}{\delta} (x + \delta) (y + \delta) U(x + \delta, y + \delta, z - \delta, t) \\ &\quad + \frac{\rho_-}{\delta} (z + \delta) U(x - \delta, y - \delta, z + \delta, t) \\ &\quad - \left(\frac{\rho_+}{\delta} x y + \frac{\rho_-}{\delta} z\right) U(x, y, z, t) \\ &= \rho_+ \frac{1}{\delta} \left((x + \delta) (y + \delta) U(x + \delta, y + \delta, z - \delta, t) - x y U(x, y, z, t) \right) \\ &\quad + \rho_- \frac{1}{\delta} \left((z + \delta) U(x - \delta, y - \delta, z + \delta, t) - z U(x, y, z, t) \right). \end{aligned}$$

In Situationen, wo diese speziellen Skalierungen sinnvoll sind, ergibt sich mittels Taylorreihenentwicklungen bezüglich $0 < \delta = \frac{1}{N} \ll 1$, etwa (mit Bezeichnung $\partial_x = \partial_1$ etc.)

$$\begin{aligned} f(\delta) &= f(0) + \delta f'(0) + \mathcal{O}(\delta^2), \quad \frac{1}{\delta} (f(\delta) - f(0)) = f'(0) + \mathcal{O}(\delta), \\ f(\delta) &= (x + \delta) (y + \delta) U(x + \delta, y + \delta, z - \delta, t), \quad f(0) = x y U(x, y, z, t), \\ f'(0) &= \partial_x (x y U(x, y, z, t)) + \partial_y (x y U(x, y, z, t)) - \partial_z (x y U(x, y, z, t)), \end{aligned}$$

und dem Grenzübergang $N \rightarrow \infty$ bzw. $\delta \rightarrow 0$ folgende partielle Differentialgleichung für die Wahrscheinlichkeitsdichte $u: \bar{\Omega} \times [0, \infty) \rightarrow [0, 1]$

$$\begin{aligned} \partial_t u(x, y, z, t) &= \rho_+ \left(\partial_x (x y u(x, y, z, t)) + \partial_y (x y u(x, y, z, t)) - \partial_z (x y u(x, y, z, t)) \right) \\ &\quad + \rho_- \left(-\partial_x (z u(x, y, z, t)) - \partial_y (z u(x, y, z, t)) + \partial_z (z u(x, y, z, t)) \right) \\ &= \operatorname{div} \begin{pmatrix} (\rho_+ x y - \rho_- z) u(x, y, z, t) \\ (\rho_+ x y - \rho_- z) u(x, y, z, t) \\ -(\rho_+ x y - \rho_- z) u(x, y, z, t) \end{pmatrix}; \end{aligned}$$

in kompakter Schreibweise wird die Form einer Kontinuitätsgleichung³ deutlich

$$\partial_t u(x, y, z, t) = \operatorname{div}(u(x, y, z, t) q(x, y, z)), \quad (x, y, z, t) \in \Omega \times (0, \infty),$$

$$q: \bar{\Omega} \longrightarrow \mathbb{R}^3: (x, y, z) \longmapsto q(x, y, z) = (\rho_+ x y - \rho_- z) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

²Vorsicht! Diese Bezeichnungen werden ebenfalls für die entsprechenden Grenzwerte für $N \rightarrow \infty$ bzw. $\delta \rightarrow 0$ verwendet.

³Eine partielle Differentialgleichung der Form

$$\partial_t u(x, t) = \operatorname{div}(J(x, t)),$$

wobei u die einer Erhaltungsgröße entsprechende Dichtefunktion ist, bezeichnet man als Kontinuitätsgleichung; in der betrachteten Situation ist die Stromdichte durch $J = uq$ gegeben.

Multiplikation der partiellen Differentialgleichung mit einer Testfunktion und Integration bezüglich $(x, t) \in \Omega \times (0, \infty)$ führt auf eine Integralgleichung und die Definition einer Lösung im abgeschwächten Sinn.

System gewöhnlicher Differentialgleichungen. In Hinblick auf die Analyse des Langzeitverhaltens ist hilfreich, von der Wahrscheinlichkeitsdichte $u : \bar{\Omega} \times [0, \infty) \rightarrow [0, 1]$ auf die zugehörigen Erwartungswerte $y : [0, \infty) \rightarrow [0, 1]^3$ überzugehen; unter der Zusatzannahme, daß die Lösung der Kontinuitätsgleichung homogene Dirichlet-Randbedingungen erfüllt und die Zufallsvariablen unkorreliert sind, führt dies auf ein nichtlineares Differentialgleichungssystem.

- (i) *System gewöhnlicher Differentialgleichungen.* Für die folgenden Approximationen an die Erwartungswerte

$$\begin{aligned} y_1(t) &= \int_{\Omega} x u(x, y, z, t) \, d(x, y, z), & y_1(t) &= E\left(\frac{j(t)}{N}\right) + \mathcal{O}(\delta^2), \\ y_2(t) &= \int_{\Omega} y u(x, y, z, t) \, d(x, y, z), & y_2(t) &= E\left(\frac{k(t)}{N}\right) + \mathcal{O}(\delta^2), \\ y_3(t) &= \int_{\Omega} z u(x, y, z, t) \, d(x, y, z), & y_3(t) &= E\left(\frac{\ell(t)}{N}\right) + \mathcal{O}(\delta^2), \end{aligned}$$

erhält man mittels der Kontinuitätsgleichung mit homogenen Dirichlet-Randbedingungen und unter der zusätzlichen Annahme

$$\int_{\Omega} x y u(x, y, z, t) \, d(x, y, z) = y_1(t) y_2(t)$$

ein System nichtlinearer gewöhnlicher Differentialgleichungen

$$\begin{pmatrix} y_1'(t) \\ y_2'(t) \\ y_3'(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\varrho_+ y_1(t) y_2(t) + \varrho_- y_3(t) \\ -\varrho_+ y_1(t) y_2(t) + \varrho_- y_3(t) \\ \varrho_+ y_1(t) y_2(t) - \varrho_- y_3(t) \end{pmatrix}, \quad t \in [0, \infty).$$

- (ii) *Begründung.* Differentiation und Anwendung der Kontinuitätsgleichung führt auf (mit Bezeichnung $q = (q_x, q_y, q_z)^T$)

$$\begin{aligned} y_1'(t) &= \int_{\Omega} x \partial_t u(x, y, z, t) \, d(x, y, z) \\ &= \int_{\Omega} x \operatorname{div}(u(x, y, z, t) q(x, y, z)) \, d(x, y, z) \\ &= \int_{\Omega} x \partial_x (u(x, y, z, t) q_x(x, y, z)) \, d(x, y, z) \\ &\quad + \int_{\Omega} \partial_y (x u(x, y, z, t) q_y(x, y, z)) \, d(x, y, z) \\ &\quad + \int_{\Omega} \partial_z (x u(x, y, z, t) q_z(x, y, z)) \, d(x, y, z). \end{aligned}$$

Aufgrund der geforderten homogenen Dirichlet-Randbedingungen gilt

$$\begin{aligned}\int_{\Omega} \partial_y(x u(x, y, z, t) q_y(x, y, z)) \, d(x, y, z) &= 0, \\ \int_{\Omega} \partial_z(x u(x, y, z, t) q_z(x, y, z)) \, d(x, y, z) &= 0;\end{aligned}$$

partielle Integration und Einsetzen der Randbedingungen sowie der Zusatzannahme ergibt die Differentialgleichung

$$\begin{aligned}y_1'(t) &= \int_{\Omega} x \partial_x(u(x, y, z, t) q_x(x, y, z)) \, d(x, y, z) \\ &= - \int_{\Omega} u(x, y, z, t) q_x(x, y, z) \, d(x, y, z) \\ &= - \int_{\Omega} (\varrho_+ x y - \varrho_- z) u(x, y, z, t) \, d(x, y, z) \\ &= - \varrho_+ \int_{\Omega} x y u(x, y, z, t) \, d(x, y, z) + \varrho_- \int_{\Omega} z u(x, y, z, t) \, d(x, y, z) \\ &= - \varrho_+ y_1(t) y_2(t) + \varrho_- y_3(t).\end{aligned}$$

Aus Symmetriegründen folgt die Relation

$$y_2'(t) = - \varrho_+ y_1(t) y_2(t) + \varrho_- y_3(t).$$

Analoge Überlegungen führen auf die Differentialgleichung

$$\begin{aligned}y_3'(t) &= \int_{\Omega} z \partial_t u(x, y, z, t) \, d(x, y, z) \\ &= \int_{\Omega} z \operatorname{div}(u(x, y, z, t) q(x, y, z)) \, d(x, y, z) \\ &= \int_{\Omega} \partial_x(z u(x, y, z, t) q_x(x, y, z)) \, d(x, y, z) \\ &\quad + \int_{\Omega} \partial_y(z u(x, y, z, t) q_y(x, y, z)) \, d(x, y, z) \\ &\quad + \int_{\Omega} z \partial_z(u(x, y, z, t) q_z(x, y, z)) \, d(x, y, z) \\ &= - \int_{\Omega} u(x, y, z, t) q_z(x, y, z) \, d(x, y, z) \\ &= \int_{\Omega} (\varrho_+ x y - \varrho_- z) u(x, y, z, t) \, d(x, y, z) \\ &= \varrho_+ y_1(t) y_2(t) - \varrho_- y_3(t).\end{aligned}$$

(iii) *Abschlußrelation.* Relationen, die zusätzlich benötigt werden, um aus einer Kontinuitätsgleichung ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen herzuleiten, werden als

Abschlußrelationen bezeichnet. Für den Spezialfall einer im Punkt $y(t)$ konzentrierten Dirac'schen Delta-Distribution⁴ erhält man

$$u(\cdot, t) = \delta_{y(t)} : \int_{\Omega} x y u(x, y, z, t) \, d(x, y, z) = y_1(t) y_2(t);$$

die oben angegebene Zusatzannahme wird also durch den deterministischen Grenzfall motiviert.

Ergänzungen (Langzeitverhalten)

Equilibrium und asymptotisches Verhalten. Insbesondere im Zusammenhang mit gewöhnlichen Differentialgleichungen sind im folgenden angegebene Überlegungen zur Untersuchung des Langzeitverhaltens nützlich.

- (i) *Anfangswertproblem.* Das betrachtete Anfangswertproblem für $y : [0, \infty) \rightarrow [0, 1]^3$ ist von der Form

$$\begin{cases} y'(t) = F(y(t)), & t \in (0, \infty), \\ y(0) \text{ gegeben;} \end{cases}$$

die definierende Funktion $F : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ und die zugehörige Jacobi-Matrix sind durch

$$F(z) = \begin{pmatrix} -\varrho_+ z_1 z_2 + \varrho_- z_3 \\ -\varrho_+ z_1 z_2 + \varrho_- z_3 \\ \varrho_+ z_1 z_2 - \varrho_- z_3 \end{pmatrix}, \quad F'(z) = \begin{pmatrix} -\varrho_+ z_2 & -\varrho_+ z_1 & \varrho_- \\ -\varrho_+ z_2 & -\varrho_+ z_1 & \varrho_- \\ \varrho_+ z_2 & \varrho_+ z_1 & -\varrho_- \end{pmatrix},$$

gegeben. Aufgrund der Beschränktheit des Wertebereiches $[0, 1]^3$ ist die definierende Funktion global Lipschitz-stetig und somit die Existenz und Eindeutigkeit einer globalen Lösung gesichert.

- (ii) *Equilibrium.* Ein Equilibrium⁵ des Differentialgleichungssystems ist durch die Bedingung

$$F(y^*) = 0, \quad y_1^* y_2^* = \frac{\varrho_-}{\varrho_+} y_3^*,$$

⁴Die im Punkt $x_0 \in \mathbb{R}$ konzentrierte Dirac'sche Delta-Distribution $\delta_{x_0} : \mathcal{C}(\mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{R}$ ist durch die Relation

$$\delta_{x_0}(f) = f(x_0)$$

definiert; häufig wird auch die folgende suggestive Schreibweise verwendet

$$\delta_{x_0}(f) = \int_{\mathbb{R}} f(x) \delta_{x_0}(x) \, dx = f(x_0).$$

⁵Eine zeitunabhängige Lösung $y^* : [0, \infty) \rightarrow [0, 1]^3$ des betrachteten Systems gewöhnlicher Differentialgleichungen bezeichnet man als stationäre Lösung oder Equilibrium; wie üblich wird die konstante Funktion mit dem Funktionswert $y^* \in [0, 1]^3$ identifiziert.

charakterisiert. In Hinblick auf die Erhaltungsgrößen

$$j(t) + \ell(t) = N_A = j(0) + \ell(0), \quad k(t) + \ell(t) = N_B = k(0) + \ell(0), \quad t \in [0, \infty),$$

fordert man außerdem, daß zusätzlich die folgenden Relationen gelten (Vorgabe eines Anfangswertes $y(0)$ bzw. der Größen $n_A = y_1(0) + y_3(0)$ und $n_B = y_2(0) + y_3(0)$)

$$y_1^* + y_3^* = n_A, \quad y_2^* + y_3^* = n_B.$$

Ein Equilibrium des Differentialgleichungssystems ist somit durch die Bedingungen

$$y_1^* y_2^* = \frac{\rho_-}{\rho_+} y_3^*, \quad y_1^* + y_3^* = n_A, \quad y_2^* + y_3^* = n_B,$$

bestimmt. Umformen führt auf eine quadratische Gleichung für die erste Komponente

$$\begin{aligned} y_3^* &= n_A - y_1^* = n_B - y_2^*, & y_1^* y_2^* &= \frac{\rho_-}{\rho_+} y_3^*, \\ y_2^* &= y_1^* + n_B - n_A, & y_3^* &= n_A - y_1^*, \\ y_1^* (y_1^* + n_B - n_A) &= y_1^* y_2^* = \frac{\rho_-}{\rho_+} y_3^* = \frac{\rho_-}{\rho_+} (n_A - y_1^*), \\ (y_1^*)^2 + \left(\frac{\rho_-}{\rho_+} + n_B - n_A\right) y_1^* - \frac{\rho_-}{\rho_+} n_A &= 0, & y_2^* &= y_1^* + n_B - n_A, & y_3^* &= n_A - y_1^*; \end{aligned}$$

da die negative Lösung ausgeschlossen werden kann, ist das Equilibrium durch die vorgegebenen Raten (ρ_+, ρ_-) und Teilchenzahlen (n_A, n_B) eindeutig bestimmt

$$\begin{aligned} y_1^* &= -\frac{1}{2} \left(\frac{\rho_-}{\rho_+} + n_B - n_A\right) + \sqrt{\frac{1}{4} \left(\frac{\rho_-}{\rho_+} + n_B - n_A\right)^2 + \frac{\rho_-}{\rho_+} n_A}, \\ y_2^* &= y_1^* + n_B - n_A, & y_3^* &= n_A - y_1^*. \end{aligned}$$

- (iii) *Diagonalisierung der Jacobi-Matrix.* Die spezielle Struktur der Jacobi-Matrix (Auswertung im Equilibrium, folglich $a, b, c > 0$)

$$F'(y^*) = A = \begin{pmatrix} -a & -b & c \\ -a & -b & c \\ a & b & -c \end{pmatrix}$$

ermöglicht eine händische Berechnung der Eigenwerte und zugehöriger Eigenvektoren

$$\begin{aligned} \mu &= a + b + c, & \lambda_1 &= -\mu < 0, & v_1 &= \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \\ \lambda_2 = 0 = \lambda_3, & & v_2 &= \begin{pmatrix} b \\ -a \\ 0 \end{pmatrix}, & v_3 &= \begin{pmatrix} c \\ 0 \\ a \end{pmatrix}; \end{aligned}$$

dies zeigt, daß die Jacobi-Matrix diagonalisierbar ist und einen negativen Eigenwert sowie den doppelten Eigenwert Null besitzt

$$A = V \begin{pmatrix} -\mu & & \\ & 0 & \\ & & 0 \end{pmatrix} V^{-1}.$$

In Hinblick auf die Analyse des Langzeitverhaltens ist die Berechnung der Matrix-Exponentialfunktion wesentlich

$$e^{tA} = V \begin{pmatrix} e^{-\mu t} & & \\ & 1 & \\ & & 1 \end{pmatrix} V^{-1};$$

in der betrachteten Situation folgt daraus insbesondere, daß Anteile in Richtung des Eigenvektors zum negativen Eigenwert exponentiell abklingen.

- (iv) *Prinzip der linearisierten Stabilität.* Das Prinzip der linearisierten Stabilität besagt, daß das nichtlineare Differentialgleichungssystem

$$y'(t) = F(y(t))$$

und dessen Linearisierung bezüglich des Equilibrium (Equilibrium erfüllt $F(y^*) = 0$, mittels Taylorreihenentwicklung folgt $F(y) = F(y) - F(y^*) \approx F'(y^*)(y - y^*)$, setze $z = y - y^*$)

$$z'(t) = F'(y^*) z(t)$$

dasselbe asymptotische Verhalten haben; besitzen beispielsweise alle Eigenwerte der Jacobi-Matrix negative Realteile, so ist das Equilibrium asymptotisch stabil. In der vorliegenden Situation ist dieses Prinzip jedoch *nicht* direkt anwendbar; stattdessen greift man auf Überlegungen zurück, welche schließlich die Bestimmung der analytischen Lösung des nichtlinearen Differentialgleichungssystems ermöglichen.

- (v) *Bestimmung der Lösung und exponentielles Abfallverhalten.* Zulässige Lösungswerte und insbesondere das Equilibrium erfüllen die Bedingungen

$$\begin{aligned} y_1(t) &= n_A - y_3(t), & y_1^* &= n_A - y_3^*, \\ y_2(t) &= n_B - y_3(t), & y_2^* &= n_B - y_3^*; \end{aligned}$$

die Differenz $z(t) = y(t) - y^*$ ist somit ein skalares Vielfaches des zum negativen Eigenwert $\lambda_1 = -\mu < 0$ gehörigen Eigenvektors v_1

$$\begin{aligned} z(t) &= -z_3(t) v_1, \\ z_1(t) &= y_1(t) - y_1^* = y_3^* - y_3(t) = -z_3(t), \\ z_2(t) &= y_2(t) - y_2^* = y_3^* - y_3(t) = -z_3(t), \\ z_3(t) &= y_3(t) - y_3^*. \end{aligned}$$

Dies zeigt das exponentielle Abfallverhalten von Lösungen des linearisierten Differentialgleichungssystems für $t \in [0, \infty)$

$$z(t) = e^{tA} z(0) = -z_3(0) e^{tA} v_1 = -z_3(0) e^{-\mu t} v_1, \quad z(0) = y(0) - y^*.$$

Um das asymptotische Verhalten des nichtlinearen System zu charakterisieren, nützt man die folgenden Überlegungen, welche auf eine skalare Differentialgleichung für die dritte Komponente der Lösung führen (verwende spezielle Form von F und Identität $F(y^*) = 0$)

$$\begin{aligned} z'(t) &= (y - y^*)'(t) = F(y(t)) - F(y^*) = \left(-\varrho_+ (y_1(t) y_2(t) - y_1^* y_2^*) + \varrho_- (y_3(t) - y_3^*) \right) v_1, \\ z'(t) &= \left(-\varrho_+ ((y_1(t) - y_1^*) (y_2(t) - y_2^* + y_2^*) + y_1^* (y_2(t) - y_2^*)) + \varrho_- (y_3(t) - y_3^*) \right) v_1, \\ z_3'(t) &= \varrho_+ (z_3(t))^2 - (\varrho_- + \varrho_+ (y_1^* + y_2^*)) z_3(t); \end{aligned}$$

mittels Separation der Variablen kann deren analytische Lösung bestimmt werden

$$\begin{aligned} z_3'(t) &= C_1 (z_3(t))^2 - C_2 z_3(t), \quad C_1 = \varrho_+ > 0, \quad C_2 = \varrho_- + \varrho_+ (y_1^* + y_2^*) > 0, \\ \frac{C_2}{\zeta (C_1 \zeta - C_2)} &= \frac{1}{\zeta - \frac{C_2}{C_1}} - \frac{1}{\zeta}, \end{aligned}$$

$$\int \left(\frac{1}{\zeta - \frac{C_2}{C_1}} - \frac{1}{\zeta} \right) d\zeta = \ln \left(\zeta - \frac{C_2}{C_1} \right) - \ln \zeta = \ln \frac{\zeta - \frac{C_2}{C_1}}{\zeta},$$

$$\frac{1}{C_2} \ln \frac{z_3(t) - \frac{C_2}{C_1}}{z_3(t)} = t + C, \quad \frac{z_3(t) - \frac{C_2}{C_1}}{z_3(t)} = C e^{C_2 t}, \quad (1 - C e^{C_2 t}) z_3(t) = \frac{C_2}{C_1},$$

$$t = 0: \quad C = 1 - \frac{C_2}{C_1 z_3(0)},$$

$$z_3(t) = \left(\frac{C_1}{C_2} + \left(\frac{1}{z_3(0)} - \frac{C_1}{C_2} \right) e^{C_2 t} \right)^{-1}.$$

Somit ist die analytische Lösung des nichtlinearen Differentialgleichungssystems bekannt

$$y(t) = y^* - \left(\frac{C_1}{C_2} + \left(\frac{1}{z_3(0)} - \frac{C_1}{C_2} \right) e^{C_2 t} \right)^{-1} v_1,$$

$$v_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad C_1 = \varrho_+ > 0, \quad C_2 = \varrho_- + \varrho_+ (y_1^* + y_2^*) > 0;$$

dies zeigt insbesondere das exponentielle Abfallverhalten der Lösung gegen das Equilibrium.⁶

⁶Numerische Verifikation, vgl. Proseminar.

Teil II

Grundlegendes zu partiellen Differentialgleichungen

Kapitel 1

Klassifizierung und Lösungsbegriffe

Partielle Differentialgleichungen. Eine Gleichung bzw. allgemeiner ein System von Gleichungen für eine unbekannte Funktion in mehreren Variablen und gewisse partielle Ableitungen bezeichnet man als eine partielle Differentialgleichung bzw. ein System partieller Differentialgleichungen.

Klassifizierung. Aufgrund der großen Vielfalt von partiellen Differentialgleichungen ist es nicht möglich und sinnvoll, allgemeingültige Aussagen zu treffen. In Hinblick auf die betrachteten Anwendungen und numerische Lösungsverfahren ist es im Allgemeinen zweckmäßig, zwischen dem zeitunabhängigen und dem zeitabhängigen Fall zu unterscheiden. Wegen des unterschiedlichen Schwierigkeitsgrades bei der Analyse unterscheidet man meist auch zwischen einzelnen Gleichungen und Systemen sowie dem linearen, semilinearen, quasilinearen und voll nichtlinearen Fall.

Zeitabhängige partielle Differentialgleichungen. Im Folgenden werden vorwiegend zeitabhängige nichtlineare partielle Differentialgleichungen für reellwertige Funktionen

$$u : \overline{\Omega} \times [0, T] \subset \mathbb{R}^d \times \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R} : (x, t) \longmapsto u(x, t)$$

betrachtet, wobei $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ das räumliche Gebiet angibt; da für nichtlineare Probleme im Allgemeinen nur die lokale Existenz einer Lösung gesichert ist und in Hinblick auf numerische Berechnungen, werden beschränkte zeitliche Bereiche $[0, T]$ betrachtet.

Meist sind neben einer partiellen Differentialgleichung zusätzlich räumliche Randbedingungen und zeitliche Anfangsbedingungen vorgegeben, was auf ein Anfangsrandwertproblem für eine partielle Differentialgleichung führt

$$\left\{ \begin{array}{l} F(\partial_t^j u(x, t), \dots, \partial_t u(x, t), \partial_x^k u(x, t), \dots, \partial_x u(x, t), u(x, t), x, t) = 0, \quad (x, t) \in \Omega \times (0, T), \\ R_1(\partial_x^{k-1} u(x, t), \dots, \partial_x u(x, t), u(x, t), x, t) = 0, \quad (x, t) \in \partial\Omega \times [0, T], \\ R_2(\partial_t^{j-1} u(x, t), \dots, \partial_t u(x, t), u(x, t), x) = 0, \quad (x, t) \in \overline{\Omega} \times \{0\}; \end{array} \right.$$

für die partiellen Ableitungen der Ordnung $\ell \in \mathbb{N}$ wird hier die Kurzschreibweise ∂_x^ℓ verwendet, d.h. ∂_x^ℓ umfaßt sämtliche Kombinationen $\partial_{x_1}^{\ell_1}, \dots, \partial_{x_d}^{\ell_d}$ mit $\ell_1 + \dots + \ell_d = \ell$.

Ein Anfangsrandwertproblem für eine partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung bezüglich des Ortes und erster Ordnung bezüglich der Zeit ist typischerweise von der Form ($j = 1$ und $k = 2$)

$$\begin{cases} F(\partial_t u(x, t), \partial_{xx} u(x, t), \partial_x u(x, t), u(x, t), x, t) = 0, & (x, t) \in \Omega \times (0, T), \\ R_1(\partial_x u(x, t), u(x, t), x, t) = 0, & (x, t) \in \partial\Omega \times [0, T], \\ u(x, 0) = u_0(x), & x \in \bar{\Omega}, \end{cases}$$

und für eine partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung bezüglich des Ortes und der Zeit erhält man typischerweise ein Anfangsrandwertproblem der Form ($j = 2 = k$)

$$\begin{cases} F(\partial_{tt} u(x, t), \partial_t u(x, t), \partial_{xx} u(x, t), \partial_x u(x, t), u(x, t), x, t) = 0, & (x, t) \in \Omega \times (0, T), \\ R_1(\partial_x u(x, t), u(x, t), x, t) = 0, & (x, t) \in \partial\Omega \times [0, T], \\ u(x, 0) = u_0(x), \quad \partial_t|_{t=0} u(x, t) = v_0(x), & x \in \bar{\Omega}. \end{cases}$$

Bemerkungen.

- (i) In Hinblick auf eine theoretische Analyse von Anfangsrandwertproblemen sind gewisse grundlegende Voraussetzungen an den betrachteten räumlichen Bereich¹ sinnvoll.
- (ii) Für eine klassische Lösung einer partiellen Differentialgleichung wird gefordert, daß die partielle Differentialgleichung im strengen Sinn erfüllt ist, d.h. es wird vorausgesetzt, daß

¹Es sei $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ ein Gebiet, d.h. eine nichtleere, offene und zusammenhängende Teilmenge des euklidischen Raumes. Für ein beschränktes Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ bildet der Abschluß $\bar{\Omega} = \Omega \cup \partial\Omega$ eine kompakte Menge; in diesem Fall wird zusätzlich angenommen, daß der Rand $\partial\Omega$ glatt ist oder das Gebiet Ω als kartesisches Produkt von offenen Intervallen gegeben ist.

Laut Definition besitzt eine kompakte Menge $\bar{\Omega} \subset \mathbb{R}^d$ einen glatten Rand, wenn für jeden Randpunkt $x_0 \in \partial\Omega$ folgende Bedingungen erfüllt sind:

- (i) Es existiert eine auf einer offenen Umgebung U von x_0 definierte Funktion $r : U \rightarrow \mathbb{R}$, die stetig differenzierbar ist.
- (ii) Es gilt $\bar{\Omega} \cap U = \{x \in U : r(x) \leq 0\}$ und insbesondere $\partial\Omega \cap U = \{x \in U : r(x) = 0\}$.
- (iii) Für alle $x \in U$ gilt $r'(x) \neq 0$.

Im Fall der abgeschlossenen Kugel $B_\rho(\mu) = \{x \in \mathbb{R}^d : \|x - \mu\| \leq \rho\} \subset \mathbb{R}^d$ mit Mittelpunkt $\mu \in \mathbb{R}^d$ und Radius $\rho > 0$ erfüllt die durch

$$r : U = \mathbb{R}^d \setminus \{\mu\} \longrightarrow \mathbb{R} : x \longmapsto \|x - \mu\|^2 - \rho^2 = \sum_{j=1}^d (x_j - \mu_j)^2 - \rho^2$$

definierte Funktion die geforderten Eigenschaften: Für ein beliebiges Element des Randes bildet der Definitionsbereich U eine offene Umgebung. Für jedes Element $x \in \bar{B}_\rho(\mu) \cap U = B_\rho(\mu) \setminus \{\mu\}$ gilt $\|x - \mu\| \leq \rho$ und folglich $r(x) \leq 0$; in jedem Randpunkt $x \in \partial B_\rho(\mu)$ ist $\|x - \mu\| = \rho$ und somit $r(x) = 0$. Die Funktion r ist stetig differenzierbar mit Ableitung $r'(x) = 2(x - \mu)^T$ und insbesondere gilt $r'(x) \neq 0$ für $x \in U = \mathbb{R}^d \setminus \{\mu\}$.

die Lösung auf den betrachteten räumlichen und zeitlichen Bereichen hinreichend oft stetig differenzierbar ist; in Hinblick auf relevante Anwendungen ist eine Abschwächung dieses Lösungsbegriffes notwendig.

- (iii) Funktionswerte partieller Ableitungen, welche bei Anfangs- und Randbedingungen auftreten, sind meist als einseitige Grenzwerte zu verstehen. Die bei den Anfangs- und Randbedingungen angegebenen Bereiche beinhalten möglicherweise zusätzliche Kompatibilitätsforderungen, welche nicht erfüllbar sind, und deshalb geeignet angepaßt oder abgeschwächt werden müssen.

Abschwächung des Lösungsbegriffes. Eine Funktion, die eine partielle Differentialgleichung und die vorgegebenen Rand- und Anfangsbedingungen im strengen Sinn erfüllt, bezeichnet man als klassische Lösung des Anfangsrandwertproblem; um die Existenz- und Eindeutigkeit einer solchen Lösung sicherstellen zu können, ist es erforderlich, daß die Daten des Problems gewisse Differenzierbarkeits- und Kompatibilitätsbedingungen erfüllen. In Hinblick auf realistische Anwendungen sind diese Bedingungen jedoch oft nicht erfüllt und das Konzept der klassischen Lösung damit zu einschränkend; so können beispielsweise mathematische Modelle für das Entstehen und die Ausbreitung von Stoßwellen oder die Auswirkungen zufälliger Störungen nicht behandelt werden. Deshalb ist es wünschenswert, den Lösungsbegriff zu erweitern und von partiellen Differentialgleichungen auf Formulierungen, die unter geringeren Regularitätsvoraussetzungen an Lösungen wohldefiniert sind, überzugehen; beispielsweise analysiert man zugehörige Integralgleichungen, führt zusätzliche regularisierende Differentialoperatoren ein oder betrachtet partielle Differentialgleichungen mit regularisierten Daten. Ein Vorteil solcher abgeschwächter Lösungsbegriffe² liegt auch darin, daß kompakte mathematische Formulierungen mittels partiellen Differentialgleichungen beibehalten werden können. Ziel der theoretischen Untersuchungen ist es dann, die Wohldefiniertheit des Anfangsrandwertproblem, d.h. die Existenz und Eindeutigkeit einer Lösung und deren stetige Abhängigkeit von den Daten des Problem, in einem abgeschwächten Sinn zu zeigen.

²Zu gebräuchlichen Lösungsbegriffen zählen neben dem Begriff der klassischen Lösung die folgenden:

- Milde Lösung (Übergang auf die mittels der linearen Variation-der-Konstanten Formel erhaltene Integraldarstellung)
- Schwache Lösung (Übergang auf die getestete Differentialgleichung: Multiplikation der partiellen Differentialgleichung mit einer regulären Funktion, welche kompakten Träger besitzt, und partielle Integration bezüglich einiger oder aller Variablen)
- Starke Lösung (Existenz der auftretenden Ableitungen im schwachen Sinn)
- Integrallösung (Üblicherweise im Zusammenhang mit nichtlinearen Erhaltungsgleichungen: Übergang auf die bezüglich der Raum- und Zeitvariablen getestete Differentialgleichung, Lösung in $L^\infty(\Omega \times (0, T))$)
- Entropielösung, Viskositätslösung, etc.

Lösbarkeit von partiellen Differentialgleichungen. Da nur in einfachen Spezialfällen explizite Darstellungen von Lösungen (im abgeschwächten Sinn) bekannt sind, müssen im Normalfall numerische Verfahren zur näherungsweise Lösung von Anfangsrandwertproblemen eingesetzt werden. Um die numerischen Simulationen zu rechtfertigen und die Ergebnisse korrekt zu interpretieren, werden Resultate zur Existenz, Eindeutigkeit und Regularität der Lösung (im abgeschwächten Sinn) eines Anfangsrandwertproblems und bei Langzeitintegrationen zudem Aussagen zum qualitativen Lösungsverhalten als wesentliche theoretische Grundlage benötigt.

Kapitel 2

Relevante partielle Differentialgleichungen

Relevante partielle Differentialgleichungen. Als Illustrationen werden einige, in Hinblick auf Anwendungen relevante partielle Differentialgleichungen angegeben. Zur Vereinfachung werden spezielle Normierungen angenommen und zum besseren Verständnis zusätzlich jene Formulierungen, welche dem klassischen Lösungsbegriff für den Spezialfall von zwei Raumdimensionen entsprechen, ergänzt.

(i) *Advektionsgleichungen, Kontinuitätsgleichungen*

Es sei $u : \Omega \times (0, T) \subset \mathbb{R}^d \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$.

Die homogene lineare Advektionsgleichung mit konstanten Koeffizienten hat die Form

$$\begin{aligned}\partial_t u &= \operatorname{div}(c u), \\ \partial_t u(x, y, t) &= c_x \partial_x u(x, y, t) + c_y \partial_y u(x, y, t),\end{aligned}$$

wobei $c \in \mathbb{R}^d$.

Für den allgemeineren Fall $c : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ ergibt sich eine partielle Differentialgleichung in Form einer Kontinuitätsgleichung

$$\begin{aligned}\partial_t u &= \operatorname{div}(c u), \\ \partial_t u(x, y, t) &= \partial_x(c_x(x, y) u(x, y, t)) + \partial_y(c_y(x, y) u(x, y, t)).\end{aligned}$$

(ii) *Erhaltungsgleichungen, Burgers-Gleichung*

Es sei $u : \Omega \times (0, T) \subset \mathbb{R}^d \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$.

Eine nichtlineare Erhaltungsgleichung hat die Form

$$\begin{aligned}\partial_t u &= \operatorname{div}(f(u)), \\ \partial_t u(x, y, t) &= f'(u(x, y, t)) (\partial_x u(x, y, t) + \partial_y u(x, y, t)),\end{aligned}$$

wobei $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$.

Speziell für $f(v) = \frac{1}{2} v^2$ und somit $f'(v) = v$ ergibt sich die Burgers-Gleichung (mit $d = 1$)

$$\partial_t u(x, t) = u(x, t) \partial_x u(x, t);$$

die Hinzunahme eines zusätzlichen glättenden Termes führt auf die viskose Burgers-Gleichung (mit $\varepsilon > 0$)

$$\partial_t u(x, t) = \varepsilon \partial_{xx} u(x, t) + u(x, t) \partial_x u(x, t).$$

(iii) *Diffusionsgleichungen*

Es sei $u : \Omega \times (0, T) \subset \mathbb{R}^d \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$.

Die homogene lineare Diffusionsgleichung ist durch

$$\begin{aligned} \partial_t u &= \Delta u, \\ \partial_t u(x, y, t) &= \partial_{xx} u(x, y, t) + \partial_{yy} u(x, y, t), \end{aligned}$$

gegeben.

Bei Hinzunahme einer Funktion $f : \Omega \times (0, T) \subset \mathbb{R}^d \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ erhält man eine inhomogene lineare Diffusionsgleichung

$$\begin{aligned} \partial_t u &= \Delta u + f, \\ \partial_t u(x, y, t) &= \partial_{xx} u(x, y, t) + \partial_{yy} u(x, y, t) + f(x, y, t). \end{aligned}$$

(iv) *Laplace- und Poisson-Gleichungen*

Es sei $u : \Omega \subset \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$.

Im Fall einer inhomogenen linearen Diffusionsgleichung mit zeitunabhängiger Inhomogenität $f : \Omega \subset \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ führt die Bestimmung stationärer Lösungen auf eine Poisson-Gleichung

$$\begin{aligned} -\Delta u &= f, \\ -(\partial_{xx} u(x, y) + \partial_{yy} u(x, y)) &= f(x, y). \end{aligned}$$

Der Spezialfall $f = 0$ entspricht der Bestimmung stationärer Lösungen der homogenen linearen Diffusionsgleichung und führt auf die Laplace-Gleichung

$$\begin{aligned} \Delta u &= 0, \\ \partial_{xx} u(x, y) + \partial_{yy} u(x, y) &= 0. \end{aligned}$$

(v) *Nichtlineare Laplace-Gleichung, Gleichung poröser Medien*

Es sei $u : \Omega \times (0, T) \subset \mathbb{R}^d \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$.

Eine nichtlineare Diffusionsgleichung ergibt sich bei Betrachtung des nichtlinearen Laplace-Operators mit Exponent $p \in (1, 2) \cup (2, \infty)$ (mit euklidischer Norm $\|\cdot\|_{\mathbb{R}^d}$)

$$\begin{aligned}\partial_t u &= \operatorname{div}(\|\nabla u\|_{\mathbb{R}^d}^{p-2} \nabla u), \\ \|\nabla u(x, y, t)\|_{\mathbb{R}^2}^2 &= (\partial_x u(x, y, t))^2 + (\partial_y u(x, y, t))^2, \\ \partial_t u(x, y, t) &= \partial_x \left(\|\nabla u(x, y, t)\|_{\mathbb{R}^2}^{p-2} \partial_x u(x, y, t) \right) + \partial_y \left(\|\nabla u(x, y, t)\|_{\mathbb{R}^2}^{p-2} \partial_y u(x, y, t) \right).\end{aligned}$$

Zur Modellierung von Diffusionsprozessen in porösen Medien betrachtet man die folgende nichtlineare Diffusionsgleichung mit Exponent $p \in (1, \infty)$

$$\begin{aligned}\partial_t u &= \Delta(u^p), \\ \partial_t u(x, y, t) &= \partial_{xx}(u(x, y, t))^p + \partial_{yy}(u(x, y, t))^p.\end{aligned}$$

(vi) *Diffusions-Reaktions-Gleichungen, Fisher-KPP- und Allen-Cahn-Gleichung, Blow-up-Gleichungen*

Es sei $u : \Omega \times (0, T) \subset \mathbb{R}^d \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$.

Eine lineare Diffusionsgleichung mit zusätzlichem nichtlinearem Reaktionsterm hat beispielsweise die Form

$$\begin{aligned}\partial_t u &= \Delta u + f(u), \\ \partial_t u(x, y, t) &= \partial_{xx} u(x, y, t) + \partial_{yy} u(x, y, t) + f(u(x, y, t)),\end{aligned}$$

wobei $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$.

Bekannte Beispiele für Diffusions-Reaktions-Gleichungen sind die Fisher-KPP-Gleichung¹ mit Nichtlinearität $f(v) = v - v^2 = v(1 - v)$

$$\begin{aligned}\partial_t u &= \Delta u + u - u^2, \\ \partial_t u(x, y, t) &= \partial_{xx} u(x, y, t) + \partial_{yy} u(x, y, t) + u(x, y, t) - (u(x, y, t))^2,\end{aligned}$$

sowie die Allen-Cahn-Gleichung²

$$\begin{aligned}\partial_t u &= \Delta u + u - u^3, \\ \partial_t u(x, y, t) &= \partial_{xx} u(x, y, t) + \partial_{yy} u(x, y, t) + u(x, y, t) - (u(x, y, t))^3,\end{aligned}$$

welche sich für $f(v) = v - v^3 = v(1 - v)(1 + v)$ ergibt.

Die Wahl $f(v) = v^p$ oder $f(v) = e^v$ führt auf Gleichungen, welche Singularitäten entwickeln.

¹Die Fisher-KPP-Gleichung ist nach Fisher, Kolmogorov, Petrovsky und Piscounov benannt.

²Die Allen-Cahn-Gleichung ist auch als Chafee-Infante-Gleichung oder als bistabile Gleichung bekannt.

(vii) *Freie Schrödinger-Gleichung, Nichtlineare Schrödinger-Gleichungen, Systeme gekoppelter Gross–Pitaevskii-Gleichungen*

Es sei $u : \Omega \times (0, T) \subset \mathbb{R}^d \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$.

Die freie Schrödingergleichung ist durch

$$\begin{aligned} i \partial_t u &= -\Delta u, \\ i \partial_t u(x, y, t) &= -(\partial_{xx} u(x, y, t) + \partial_{yy} u(x, y, t)), \end{aligned}$$

gegeben.

Die Hinzunahme einer Nichtlinearität der speziellen Form

$$f(|u|^2)u$$

mit $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ führt beispielsweise für $f(v) = v$ auf die kubische Schrödingergleichung

$$\begin{aligned} i \partial_t u &= -\Delta u + |u|^2 u, \\ i \partial_t u(x, y, t) &= -(\partial_{xx} u(x, y, t) + \partial_{yy} u(x, y, t)) + |u(x, y, t)|^2 u(x, y, t). \end{aligned}$$

Wesentlich sind auch spezielle Skalierungen (mit $0 < \varepsilon \ll 1$)

$$\begin{aligned} i \partial_t u &= -\frac{1}{\varepsilon} \Delta u + |u|^2 u, \\ i \partial_t u &= -\Delta u + \frac{1}{\varepsilon} |u|^2 u. \end{aligned}$$

Die Gross–Pitaevskii-Gleichung mit harmonischem Potential $V : \Omega \subset \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ hat die Form (mit $d \in \{1, 2, 3\}$)

$$\begin{aligned} i \partial_t u &= -\Delta u + Vu + |u|^2 u, \\ i \partial_t u(x, y, t) &= -(\partial_{xx} u(x, y, t) + \partial_{yy} u(x, y, t)) + V(x, y) u(x, y, t) + |u(x, y, t)|^2 u(x, y, t); \end{aligned}$$

Systeme gekoppelter Gross–Pitaevskii-Gleichungen treten bei der Modellierung von Bose–Einstein-Kondensaten auf.

(viii) *Elektronische Schrödinger-Gleichungen, MCTDHF-Gleichungen*

Spezielle Ansätze ermöglichen die Reduktion von hochdimensionalen linearen Schrödinger-Gleichungen wie der elektronischen Schrödinger-Gleichung mit Coulomb-Potential (paarweise Interaktion) für $u : \Omega \times (0, T) \subset \mathbb{R}^{3d} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$

$$\begin{aligned} i \partial_t u &= -\Delta u + Vu, \\ V(x) &= \sum_{1 \leq j < k \leq d} \frac{1}{\|x_j - x_k\|_{\mathbb{R}^3}}, \quad x = (x_1, \dots, x_d) \in \mathbb{R}^{3d}, \end{aligned}$$

auf Systeme nichtlinearer Schrödinger-Gleichungen in drei Raumdimensionen, die MCTDHF³-Gleichungen.

³MCTDHF steht für *multi-configuration time-dependent Hartee-Fock*

(ix) *Lineare Wellengleichungen und Helmholtz-Gleichungen*

Die homogene lineare Wellengleichung für $u : \Omega \times (0, T) \subset \mathbb{R}^d \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ ist durch

$$\begin{aligned}\partial_{tt}u &= \Delta u, \\ \partial_{tt}u(x, y, t) &= \partial_{xx}u(x, y, t) + \partial_{yy}u(x, y, t),\end{aligned}$$

gegeben.

Die Helmholtz-Gleichung (Eigenwertgleichung) für $u : \Omega \subset \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ mit $c \in \mathbb{R}$

$$\begin{aligned}(\Delta + c^2)u &= 0, \\ \partial_{xx}u(x, y) + \partial_{yy}u(x, y) + c^2u(x, y) &= 0,\end{aligned}$$

ergibt sich als spezielle stationäre Lösung der homogenen linearen Wellengleichung aus dem Ansatz

$$\begin{aligned}u(x, t) &= e^{ict}v(x), \\ 0 &= \partial_{tt}u(x, t) - \Delta u(x, t) = -e^{ict}\left(c^2v(x) + \Delta v(x)\right).\end{aligned}$$

(x) *Klein–Gordon-Gleichung, Sine–Gordon-Gleichung, Westervelt-Gleichung*

Es sei $u : \Omega \times (0, T) \subset \mathbb{R}^d \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$.

Die Klein–Gordon-Gleichung ist durch

$$\begin{aligned}\partial_{tt}u &= \Delta u - u, \\ \partial_{tt}u(x, y, t) &= \partial_{xx}u(x, y, t) + \partial_{yy}u(x, y, t) - u(x, y, t),\end{aligned}$$

gegeben.

Ein bekanntes Beispiel für eine nichtlineare Wellengleichung ist die Sine–Gordon-Gleichung

$$\begin{aligned}\partial_{tt}u &= \Delta u + \sin(u), \\ \partial_{tt}u(x, y, t) &= \partial_{xx}u(x, y, t) + \partial_{yy}u(x, y, t) + \sin(u(x, y, t)).\end{aligned}$$

Ein Beispiel einer gedämpften nichtlinearen Wellengleichung ist die Westervelt-Gleichung (Angabe für $d = 1$)

$$\begin{aligned}\partial_{tt}u &= \alpha \Delta \partial_t u + \beta \Delta u + \gamma \partial_t (\partial_t u)^2, \\ \partial_{tt}u(x, t) &= \alpha \partial_{xxt}u(x, t) + \beta \partial_{xx}u(x, y, t) + \gamma \partial_t (\partial_t u(x, t))^2,\end{aligned}$$

welche im Rahmen der nichtlinearen Akustik bei der Modellierung von Schallwellen hoher Intensität auftritt.

Ergänzungen. Als weitere Beispiele relevanter zeitabhängiger partieller Differentialgleichungen seien die folgenden erwähnt:

- Balkengleichung
Biharmonische Gleichung
- Boussinesq-Gleichung
- Cahn–Hilliard-Gleichung
Gray–Scott-Gleichungen
Komplexe Ginzburg–Landau-Gleichung
- Korteweg-de-Vries-Gleichung
- Gleichung mittlerer Krümmung (mean curvature equation)
Gleichung minimaler Oberfläche (minimal surface equation)
- Perona–Malik-Gleichung
- Euler-Gleichungen
Navier–Stokes-Gleichungen
- Maxwell-Gleichungen
- Gleichungen der Elastizitätstheorie
- Liouville-Gleichung
Von-Neumann-Gleichung
- Hamilton–Jacobi-Gleichungen

Kapitel 3

Allgemeine Lösungsdarstellungen

Lösungsdarstellungen. In diesem Abschnitt wird an grundlegende Konzepte, welche bei der Behandlung von zeitabhängigen Differentialgleichungen und insbesondere zur Darstellung von Lösungen von Nutzen sind, erinnert. Zur Vereinfachung der Herleitungen wird zunächst stillschweigend angenommen, daß die betrachteten Funktionen auf geeignet gewählten Definitionsbereichen hinreichend oft differenzierbar sind und damit sämtliche Relationen wohldefiniert sind. Die erhaltenen Lösungsdarstellungen können dann unter abgeschwächten Voraussetzungen angewendet werden.

Lineare Variation-der-Konstanten Formel (Gewöhnliche Differentialgleichungen). Die lineare Variation-der-Konstanten Formel bzw. das Duhamelsche Prinzip ist ein wichtiges Hilfsmittel zur Darstellung der Lösung einer inhomogenen linearen gewöhnlichen Differentialgleichung; sie wird auch bei der Herleitung von Existenzresultaten für nichtlineare Probleme (vgl. Picard–Lindelöf Iteration) und bei Untersuchungen zum Langzeitverhalten (vgl. Prinzip der linearisierten Stabilität) genützt. Die Konstruktion einfacher exponentieller Zeitintegrationsverfahren beruht ebenfalls auf der Lösungsdarstellung mittels der linearen Variation-der-Konstanten Formel.

- (i) *Homogene lineare Differentialgleichungen.* Die Lösung des folgenden Anfangswertproblems für ein System linearer gewöhnlicher Differentialgleichungen (wobei $A \in \mathbb{K}^{d \times d}$ mit $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ oder $\mathbb{K} = \mathbb{C}$ und $y : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{K}^d$)

$$\begin{cases} y'(t) = A y(t), & t \in (0, \infty), \\ y(0) = y_0, \end{cases}$$

ist durch die Matrix-Exponentialfunktion gegeben

$$y(t) = e^{tA} y_0 = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} t^j A^j y_0, \quad t \in [0, \infty).$$

- (ii) *Inhomogene lineare Differentialgleichungen.* Im Fall einer linearen Differentialgleichung mit zusätzlicher Inhomogenität $b: [0, \infty) \rightarrow \mathbb{K}^d$

$$\begin{cases} y'(t) = Ay(t) + b(t), & t \in (0, \infty), \\ y(0) = y_0, \end{cases}$$

erhält man mittels der linearen Variation-der-Konstanten Formel die Lösungsdarstellung

$$y(t) = e^{tA} y_0 + \int_0^t e^{(t-\tau)A} b(\tau) d\tau, \quad t \in [0, \infty),$$

oder allgemeiner

$$y(t) = e^{(t-s)A} y(s) + \int_s^t e^{(t-\tau)A} b(\tau) d\tau, \quad s, t \in [0, \infty),$$

wie man aus den folgenden Überlegungen sieht (Ansatz, Differentiation und Einsetzen der Differentialgleichung, Integration)

$$\begin{aligned} y(t) &= e^{(t-s)A} C(t), & y(s) &= C(s), \\ y'(t) &= Ae^{(t-s)A} C(t) + e^{(t-s)A} C'(t) = Ay(t) + e^{(t-s)A} C'(t), \\ Ay(t) + e^{(t-s)A} C'(t) &= y'(t) = Ay(t) + b(t), \\ C'(t) &= e^{(s-t)A} b(t), \\ C(t) &= C(s) + \int_s^t e^{(s-\tau)A} b(\tau) d\tau = y(s) + \int_s^t e^{(s-\tau)A} b(\tau) d\tau, \\ y(t) &= e^{(t-s)A} C(t) = e^{(t-s)A} y(s) + \int_s^t e^{(t-\tau)A} b(\tau) d\tau. \end{aligned}$$

- (iii) *Nichtlineare Differentialgleichungen.* Mittels Linearisierung lässt sich die Lösungsdarstellung für eine lineare Differentialgleichung auf den allgemeinen nichtlinearen Fall erweitern (mit definierender Funktion $F: [0, T] \times \mathbb{K}^d \rightarrow \mathbb{K}^d$ und zugehöriger Jacobi-Matrix $A = F'(y^*) \in \mathbb{K}^{d \times d}$ für ein $y^* \in \mathbb{K}^d$)

$$\begin{cases} y'(t) = F(t, y(t)) = Ay(t) + R(t, y(t)), & t \in (0, T), \\ y(0) = y_0, \end{cases}$$

und man erhält

$$y(t) = e^{tA} y_0 + \int_0^t e^{(t-\tau)A} R(\tau, y(\tau)) d\tau, \quad t \in [0, T].$$

Prinzip der linearisierten Stabilität (Gewöhnliche Differentialgleichungen). Unter der Annahme, daß eine globale Lösung $y : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{K}^d$ existiert, wird ein Anfangswertproblem für eine autonome Differentialgleichung (mit Nichtlinearität $F : \mathbb{K}^d \rightarrow \mathbb{K}^d$)

$$\begin{cases} y'(t) = F(y(t)), & t \in (0, \infty), \\ y(0) = y_0, \end{cases}$$

betrachtet. Um das asymptotische Verhalten in einer Umgebung eines Equilibrium¹ $y^* \in \mathbb{K}^d$

$$F(y^*) = 0$$

zu untersuchen, betrachtet man das zugehörige lineare System

$$z'(t) = Az(t), \quad t \in (0, \infty), \quad A = F'(y^*),$$

dessen Lösung durch

$$z(t) = e^{tA} z(0), \quad t \in [0, \infty),$$

gegeben ist. Das asymptotische Verhalten von Lösungen der linearen Differentialgleichung ist durch die Eigenwerte von A bestimmt. Besitzen beispielsweise alle Eigenwerte negativen Realteil, so gilt

$$\lim_{t \rightarrow \infty} e^{tA} = 0$$

und folglich ist $z^* = 0$ ein asymptotisch stabiles Equilibrium

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|z(t)\|_{\mathbb{C}^d} = 0.$$

Unter gewissen Voraussetzungen ist das Prinzip der linearisierten Stabilität, welches besagt, daß das ursprüngliche Problem und dessen Linearisierung dasselbe Stabilitätsverhalten haben, anwendbar; der Beweis dieses Resultates nützt die Linearisierung (mit $\tilde{y} = y - y^*$ und $r = F(y) - A\tilde{y}$)

$$\begin{cases} \tilde{y}'(t) = A\tilde{y}(t) + r(t), & t \in [0, \infty), \\ \tilde{y}(0) = y_0 - y^*, \end{cases}$$

und die Lösungsdarstellung mittels der linearen Variation-der-Konstanten Formel

$$\tilde{y}(t) = e^{tA} (y_0 - y^*) + \int_0^t e^{(t-\tau)A} r(\tau) d\tau, \quad t \in [0, \infty).$$

Ist $z^* = 0$ beispielsweise ein asymptotisch stabiles Equilibrium des linearisierten Problemes, so folgt, daß y^* ein asymptotisch stabiles Equilibrium des nichtlinearen Problemes ist (Aussage ist für Anfangswerte y_0 in einer Umgebung von y^* gültig)

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|y(t) - y^*\|_{\mathbb{C}^d} = 0.$$

¹Wie üblich wird ein Equilibrium, d.h. eine stationäre Lösung $y^* : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{K}^d$, mit dem entsprechenden Funktionswert $y^* \in \mathbb{K}^d$ identifiziert.

Formulierungen als Evolutionsgleichungen. In vielen Fällen ist es hilfreich, eine zeitabhängige partielle Differentialgleichung als Evolutionsgleichung zu formulieren, da dann Zusammenhänge mit dem wesentlich einfacheren Fall einer gewöhnlichen Differentialgleichung leichter zu erkennen sind. Eine solche Formulierung ist auch bei der Konstruktion und Analyse von Zeitintegrationsverfahren von Nutzen.

Als einfache Illustration wird die eindimensionale Diffusionsgleichung mit homogenen Dirichlet-Randbedingungen auf einem Intervall $[a, b] \subset \mathbb{R}$ und vorgegebener Anfangsbedingung $U_0 : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ betrachtet; gegeben ist also das folgende Anfangsrandwertproblem für $U : [a, b] \times [0, T] \subset \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} : (x, t) \mapsto U(x, t)$

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t U(x, t) = \partial_{xx} U(x, t), \quad (x, t) \in (a, b) \times (0, T), \\ U(a, t) = 0 = U(b, t), \quad t \in [0, T], \\ U(x, 0) = U_0(x), \quad x \in [a, b]. \end{array} \right.$$

Bei einer Formulierung als Evolutionsgleichung ersetzt man dieses Anfangsrandwertproblem durch ein Anfangswertproblem für eine Funktion $u : [0, T] \rightarrow X : t \mapsto u(t)$

$$\left\{ \begin{array}{l} u'(t) = A u(t), \quad t \in (0, T), \\ u(0) = U_0; \end{array} \right.$$

der Wert $u(t) \in X$ entspricht dabei der Funktion $U(\cdot, t) : [a, b] \rightarrow \mathbb{R} : x \mapsto U(x, t)$. Wesentlich ist die Wahl des zugrundeliegenden Funktionenraumes X und insbesondere die Definition des linearen Operators $A : D(A) \subset X \rightarrow X$, welcher dem Differentialoperator ∂_{xx} entspricht und dessen Definitionsbereich die Regularitätsanforderungen an die Lösung sowie die vorgegebenen Randbedingungen wiedergibt. Betrachtet man beispielsweise den Banachraum $\mathcal{C}([a, b])$ als zugrundeliegenden Funktionenraum, führt dies auf

$$A : D(A) = \{v \in \mathcal{C}^2((a, b)) \cap \mathcal{C}([a, b]) : v(a) = 0 = v(b)\} \longrightarrow X = \mathcal{C}([a, b]) : v \longmapsto v'',$$

was dem Begriff der klassischen Lösung entspricht; wählt man stattdessen den Hilbertraum $L^2(a, b)$ als zugrundeliegenden Funktionenraum, ergibt sich

$$A : D(A) = H^2(a, b) \cap H_0^1(a, b) \longrightarrow X = L^2(a, b) : v \longmapsto v'',$$

und damit eine Lösung in einem abgeschwächten Sinn. Diese Überlegungen lassen sich direkt auf beliebige Raumdimensionen übertragen.

Lineare Variation-der-Konstanten Formel (Evolutionsgleichungen). Die folgenden formalen Überlegungen für Evolutionsgleichungen werden beispielsweise im Rahmen der Theorie sektorieller Operatoren und analytischer Semigruppen gerechtfertigt und zur Analyse von parabolischen Differentialgleichungen angewendet, vgl. LUNARDI.

- (i) *Evolutionoperator.* Für eine durch einen linearen Operator $A : D(A) \subset X \rightarrow X$ definierte Evolutionsgleichung (mit $u : [0, T] \rightarrow X$)

$$\begin{cases} u'(t) = A u(t), & t \in (0, T), \\ u(0) = u_0, \end{cases}$$

bezeichnet $(\mathcal{E}_A(t))_{t \in [0, T]}$ den zugehörigen Evolutionoperator bzw. Lösungsoperator, welcher durch die Relation

$$u(t) = \mathcal{E}_A(t) u_0, \quad t \in [0, T],$$

gegeben ist. Da die Evolutionsgleichung linear ist, ist der Operator $\mathcal{E}_A(t) : X \rightarrow X$ für alle $t \in [0, T]$ linear; insbesondere gilt $\mathcal{E}_A(0) v = v$ für $v \in X$.

- (ii) *Lineare Variation-der-Konstanten Formel.* Für eine nichtlineare Evolutionsgleichung der Form (definiert durch $F : D(F) \subset [0, T] \times X \rightarrow X$)

$$\begin{cases} u'(t) = F(t, u(t)) = A u(t) + f(t, u(t)), & t \in (0, T), \\ u(0) = u_0, \end{cases}$$

ergibt sich die folgende formale Lösungsdarstellung mittels der linearen Variation-der-Konstanten Formel

$$u(t) = \mathcal{E}_A(t) u_0 + \int_0^t \mathcal{E}_A(t - \tau) f(\tau, u(\tau)) \, d\tau, \quad t \in [0, T].$$

Im Rahmen der Theorie sektorieller Operatoren und analytischer Semigruppen wird diese Darstellung zur Analyse semilinearer parabolischer Evolutionsgleichungen genutzt; mittels des Banach'schen Fixpunktsatzes werden Existenzresultate in Interpolationsräumen $D(A) \subset V \subset X$ hergeleitet, wobei der betrachtete Lösungsraum $u(t) \in V$ durch die Semilinearität $f : [0, T] \times V \rightarrow X$ bestimmt ist.

- (iii) *Modifikation der linearen Variation-der-Konstanten Formel.* Die Erweiterung der Analyse auf voll nichtlineare Evolutionsgleichungen erfordert die Betrachtung einer modifizierten linearen Variation-der-Konstanten Formel

$$\begin{aligned} u(t) &= \mathcal{E}_A(t) u_0 + \int_0^t \mathcal{E}_A(t - \tau) \, d\tau \, f(t, u(t)) \\ &\quad + \int_0^t \mathcal{E}_A(t - \tau) \left(f(\tau, u(\tau)) - f(t, u(t)) \right) \, d\tau, \quad t \in [0, T], \end{aligned}$$

welche dann auf eine geeignete Lösungsdarstellung führt

$$\begin{aligned} A u(t) &= \mathcal{E}_A(t) A u_0 + (\mathcal{E}_A(t) - I) f(t, u(t)) \\ &\quad + \int_0^t A \mathcal{E}_A(t - \tau) \left(f(\tau, u(\tau)) - f(t, u(t)) \right) \, d\tau, \quad t \in [0, T]. \end{aligned}$$

Nichtlineare Variation-der-Konstanten Formel (Evolutionsgleichungen). Die nichtlineare Variation-der-Konstanten Formel bzw. Gröbner–Aleksseev Formel ermöglicht es, die Lösungen von zwei nichtlinearen Differentialgleichungen mit Hilfe einer Integralrelation zu verknüpfen. Verwendet man zudem die formale Schreibweise mittels Lie-Kalkül werden die Analogien zwischen dem linearen und dem nichtlinearen Fall deutlich. Die Einführung des Evolutionsoperators ist insbesondere in Situationen, wo die Abhängigkeit der Lösung bezüglich des Anfangswertes untersucht werden soll, hilfreich und üblich. Damit man die folgenden formalen Überlegungen im Zusammenhang mit zeitabhängigen partiellen Differentialgleichungen für konkrete Anwendungen nützen kann, ist es wesentlich, die Definitionsbereiche der auftretenden nichtlinearen Operatoren geeignet zu wählen und sicherzustellen, daß die angegebenen Lösungsdarstellungen wohldefiniert sind.

(i) *Evolutionsoperator.* Für die nichtlineare autonome Differentialgleichung

$$\begin{cases} u'(t) = F(u(t)), & t \in (0, T), \\ u(0) = u_0, \end{cases}$$

ist der zugehörige Evolutionsoperator durch

$$u(t) = \mathcal{E}_F(t, u_0), \quad t \in [0, T],$$

definiert. Damit lassen sich die Differentialgleichung und die Anfangsbedingung folgendermaßen angeben (mit Schreibweise $\frac{d}{dt} \mathcal{E}_F(t, u_0) = \partial_1 \mathcal{E}_F(t, u_0)$)

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \mathcal{E}_F(t, u_0) = F(\mathcal{E}_F(t, u_0)), & t \in (0, T), \\ \mathcal{E}_F(0, u_0) = u_0. \end{cases}$$

In Situationen, wo der Anfangswert variiert wird, bezeichnet

$$\partial_2 \mathcal{E}_F(t, u_0)$$

die Ableitung der Lösung bezüglich des Anfangswertes.

(ii) *Lie-Kalkül.* Der Evolutionsoperator und die zugehörige Lie-Ableitung sind durch die zwei fundamentalen Relationen

$$e^{tD_F} G u_0 = G(\mathcal{E}_F(t, u_0)), \quad D_F G u_0 = G'(u_0) F(u_0),$$

gegeben. Als natürliche Erweiterung der entsprechenden Relation für lineare Operatoren (im einfachsten Fall $A \in \mathbb{K}^{d \times d}$)

$$\left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} e^{tA} = A$$

ergibt sich die Definition der Lie-Ableitung mittels Kettenregel und Einsetzen der Differentialgleichung sowie der Anfangsbedingung

$$\left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} e^{tD_F} G u_0 = \left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} G(\mathcal{E}_F(t, u_0)) = G'(\mathcal{E}_F(t, u_0)) F(\mathcal{E}_F(t, u_0)) \Big|_{t=0} = G'(u_0) F(u_0).$$

(iii) *Nichtlineare Variation-der-Konstanten Formel.* Die Lösungen der Anfangswertprobleme

$$\begin{cases} u'(t) = F(u(t)), & t \in (0, T), \\ u(0) = u_0, \\ v'(t) = F(u(t)) + R(u(t)), & t \in (0, T), \\ v(0) = u_0, \end{cases}$$

sind durch die nichtlineare Variation-der-Konstanten Formel verknüpft

$$\mathcal{E}_{F+R}(t, u_0) = \mathcal{E}_F(t, u_0) + \int_0^t \partial_2 \mathcal{E}_F(t - \tau, \mathcal{E}_{F+R}(\tau, u_0)) R(\mathcal{E}_{F+R}(\tau, u_0)) d\tau, \quad t \in [0, T];$$

in Analogie zur linearen Variation-der-Konstanten Formel ergibt sich mittels Lie-Kalkül die kompakte Formulierung

$$e^{tD_{F+R}} u_0 = e^{tD_F} u_0 + \int_0^t e^{\tau D_{F+R}} D_R e^{(t-\tau)D_F} u_0 d\tau, \quad t \in [0, T].$$

Der Beweis der nichtlinearen Variation-der-Konstanten Formel beruht auf der Identität

$$\partial_2 \mathcal{E}_G(t, v) G(v) = G(\mathcal{E}_G(t, v)),$$

welche man mit Hilfe der Kettenregel und den grundlegenden Eigenschaften des Evolutionsoperators zeigt

$$\begin{aligned} \partial_2 \mathcal{E}_G(t, v) G(v) &= \partial_2 \mathcal{E}_G(t, \mathcal{E}_G(s, v)) G(\mathcal{E}_G(s, v)) \Big|_{s=0} \\ &= \frac{d}{ds} \Big|_{s=0} \mathcal{E}_G(t, \mathcal{E}_G(s, v)) \\ &= \frac{d}{ds} \Big|_{s=0} \mathcal{E}_G(t + s, v) \\ &= G(\mathcal{E}_G(t + s, v)) \Big|_{s=0} \\ &= G(\mathcal{E}_G(t, v)); \end{aligned}$$

in kompakter Notation ergibt sich die Identität

$$D_G e^{tD_G} v = e^{tD_G} D_G v.$$

Die gesuchte Integrationsrelation folgt damit aus

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{F+R}(t, u_0) - \mathcal{E}_F(t, u_0) &= \mathcal{E}_F(t - \tau, \mathcal{E}_{F+R}(\tau, u_0)) \Big|_{\tau=0}^t \\ &= \int_0^t \frac{d}{d\tau} \mathcal{E}_F(t - \tau, \mathcal{E}_{F+R}(\tau, u_0)) d\tau \\ &= \int_0^t \left(\partial_2 \mathcal{E}_F(t - \tau, \mathcal{E}_{F+R}(\tau, u_0)) \left(F(\mathcal{E}_{F+R}(\tau, u_0)) + R(\mathcal{E}_{F+R}(\tau, u_0)) \right) \right. \\ &\quad \left. - F(\mathcal{E}_F(t - \tau, \mathcal{E}_{F+R}(\tau, u_0))) \right) d\tau \\ &= \int_0^t \partial_2 \mathcal{E}_F(t - \tau, \mathcal{E}_{F+R}(\tau, u_0)) R(\mathcal{E}_{F+R}(\tau, u_0)) d\tau. \end{aligned}$$

Ergänzungen (Lösungsoperator)

Matrix-Exponentialfunktion. Im Fall einer Matrix A moderater Dimension kann man die Eigenwertzerlegung der Matrix bzw. allgemeiner die Kenntnis der Jordan'schen Normalform² zur Berechnung der Exponentialfunktion

$$e^{tA} = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} t^j A^j, \quad t \in \mathbb{R},$$

nützen.

(i) Ist eine Matrix $A \in \mathbb{K}^{d \times d}$ diagonalisierbar, d.h. gilt die Relation

$$A = V \Lambda V^{-1}, \quad \Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_d),$$

mit Diagonalmatrix Λ und Transformationsmatrix V , so ist die Identität

$$A^k = V \Lambda^k V^{-1}, \quad k \in \mathbb{N},$$

offensichtlich und folglich die Matrix-Exponentialfunktion durch

$$e^{tA} = V e^{t\Lambda} V^{-1}, \quad e^{t\Lambda} = \text{diag}(e^{t\lambda_1}, \dots, e^{t\lambda_d}), \quad t \in \mathbb{R},$$

gegeben.

(ii) Im allgemeinen Fall nützt man die Relation

$$A = W J W^{-1}$$

²*Berechnung der Jordan'schen Normalform.* Ist $\lambda \in \mathbb{K}$ ein Eigenwert einer Matrix, beispielsweise der algebraischen Vielfachheit 2 und der geometrischen Vielfachheit 1, so heißt ein Element $v \neq 0$ mit $(A - \lambda I)v = 0$ ein Hauptvektor erster Stufe, was einem Eigenwert entspricht; bei Multiplikation dieser Relation mit $A - \lambda I$ folgt insbesondere $(A - \lambda I)^2 v = 0$. Als Hauptvektor zweiter Stufe bezeichnet man eine Lösung $w \neq 0$ des linearen Gleichungssystems $(A - \lambda I)w = v$; bei Multiplikation mit $A - \lambda I$ folgt $(A - \lambda I)^2 w = (A - \lambda I)v = 0$. In der betrachteten Situation bilden die Hauptvektoren v, w eine Basis des Hauptraumes $\{z : (A - \lambda I)^2 z = 0\}$, welcher eine Verallgemeinerung des Eigenraumes $\{z : (A - \lambda I)z = 0\}$ darstellt. Aus den angegebenen Relationen für Hauptvektoren ergibt sich die Transformation auf Jordan'sche Normalform

$$A = W J W^{-1},$$

$$W = (v|w): \quad AW = (Av|Aw) = (\lambda v|\lambda w + v) = W \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix} + W \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = W(D + N) = WJ.$$

Im Spezialfall eines Jordanblockes

$$J = \begin{pmatrix} \lambda & 1 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix}, \quad J = D + N, \quad D = \text{diag}(\lambda, \lambda), \quad N = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

bildet der erste Standardbasisvektor einen Hauptvektor erster Stufe und der zweite Standardbasisvektor einen Hauptvektor zweiter Stufe.

mit Matrix J in Jordan-Blockform und Transformationsmatrix V . Wesentlich ist dabei die Zerlegung der Jordan-Matrix J in eine Diagonalmatrix (bzw. diagonalisierbare Matrix) sowie eine nilpotente Matrix und die Kommutativität dieser Matrizen³

$$J = D + N, \quad DN = ND.$$

Beispielsweise für den Spezialfall $N^2 = 0$ ergibt sich wegen

$$\begin{aligned} N^2 = 0: \quad J^2 &= (D + N)^2 = (D + N)(D + N) = D^2 + ND + DN + N^2 = D^2 + 2DN, \\ J^3 &= (D + N)^3 = (D + N)^2(D + N) = D^3 + 3D^2N, \\ J^j &= D^j + jD^{j-1}N, \quad j \in \mathbb{N}, \end{aligned}$$

damit die folgende Relation für die Matrix-Exponentialfunktion (wegen Kommutativität gilt insbesondere $e^{tD}e^{tN} = e^{tN}e^{tD}$)

$$\begin{aligned} e^{tA} &= We^{tJ}W^{-1}, \\ N^2 = 0: \quad e^{tJ} &= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} t^j D^j + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{(j-1)!} t^{j-1} D^{j-1} tN = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} t^j D^j (I + tN) = e^{tD} e^{tN}. \end{aligned}$$

Einführung des Lösungsoperators und geeignete Darstellungen.

- (i) Im Zusammenhang mit einem unbeschränkten linearen Operator $A : D(A) \subset X \rightarrow X$ wie beispielsweise dem Laplace-Operator oder allgemeiner einem sektoriellen Operator wird der Lösungsoperator $(e^{tA})_{t \in [0, \infty)}$ mittels Cauchy'scher Integralformel definiert.
- (ii) Im Spezialfall eines selbstadjungierten Differentialoperators nützt ein alternativer und meist einfacherer Zugang die Kenntnis eines vollständigen orthonormalen Systems von Eigenfunktionen, vgl. Fourier-Spektralverfahren.
- (iii) Im nichtlinearen Fall basiert die Angabe des formalen Lösungsoperators $(e^{tD_F})_{t \in [0, T]}$ auf (lokalen) Existenz- und Eindeutigkeitsresultaten für Anfangswertprobleme.
- (iv) Man beachte, daß die Darstellung mittels Potenzreihe

$$e^{tA} = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} t^j A^j$$

für einen unbeschränkten linearen Operator $A : D(A) \subset X \rightarrow X$ nicht zweckmäßig ist, weil sie eine unnatürliche Einschränkung des Definitionsbereiches des Lösungsoperators $(e^{tA})_{t \in [0, \infty)}$ zur Folge hätte.

³Die Kommutativität folgt im Wesentlichen aus der für spezielle Diagonalmatrizen offensichtlichen Identität

$$D = \lambda I: \quad \lambda N = DN = ND = \lambda N.$$

- (v) Entsprechend ist die im Zusammenhang mit nichtlinearen Problemen teilweise verwendete Darstellung

$$e^{tD_F} = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} t^j D_F^j$$

als rein formale Notation zu verstehen und besser zu vermeiden. Allgemein verschleiert die formale Schreibweise mittels Lie-Kalkül, daß im Gegensatz zum linearen Fall beispielsweise die Identität

$$D_F e^{tD_F} = e^{tD_F} D_F$$

auf nichttrivialen Überlegungen beruht.

Kapitel 4

Spezielle Lösungsdarstellungen

Inhalt. Im Folgenden werden explizite Lösungsdarstellungen für grundlegende partielle Differentialgleichungen wie

- lineare Advektionsgleichungen ($\Omega = \mathbb{R}^d$)
- lineare Diffusionsgleichungen ($\Omega = (a_1, b_1) \times \cdots \times (a_d, b_d) \subset \mathbb{R}^d$ bzw. $\Omega = \mathbb{R}^d$)
- lineare Schrödinger-Gleichungen ($\Omega = (a_1, b_1) \times \cdots \times (a_d, b_d) \subset \mathbb{R}^d$ bzw. $\Omega = \mathbb{R}^d$)
- lineare Wellengleichungen ($\Omega = \mathbb{R}$)

hergeleitet; da zusätzliche Inhomogenitäten mittels der linearen Variation-der-Konstanten Formel eingebunden werden können, wird in erster Linie der homogene Fall behandelt. Zur Illustration der Methode der Charakteristiken für nichtlineare Erhaltungsgleichungen wird außerdem eine implizite Lösungsdarstellung für die

- Burgers-Gleichung ($\Omega = \mathbb{R}$)

angegeben. Zur Vereinfachung der Überlegungen wird zunächst angenommen, daß die Problemdata gewisse Regularitätsvoraussetzungen erfüllen und Lösungen im klassischen Sinn existieren.

4.1 Lineare Advektionsgleichungen

Eindimensionale Advektionsgleichung. Die Lösung $u : \mathbb{R} \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R} : (x, t) \mapsto u(x, t)$ der homogenen linearen Advektionsgleichung in einer Raumdimension (mit $0 \neq c \in \mathbb{R}$ und regulärer Anfangsbedingung $u_0 \in \mathcal{C}^1(\mathbb{R})$)

$$\begin{cases} \partial_t u(x, t) = c \partial_x u(x, t), & (x, t) \in \mathbb{R} \times (0, \infty), \\ u(x, 0) = u_0(x), & x \in \mathbb{R}, \end{cases}$$

ist durch die folgende Relation gegeben

$$u(x, t) = u_0(x + ct), \quad (x, t) \in \mathbb{R} \times [0, \infty).$$

Das vorgegebene Anfangsprofil wird somit mit konstanter Geschwindigkeit nach links, falls $c > 0$, oder rechts, falls $c < 0$, verschoben.

- (i) *Direktes Nachprüfen.* Differentiation der angegebenen Lösung zeigt die Gültigkeit der Lösungsdarstellung

$$\partial_x u(x, t) = u_0'(x + ct), \quad \partial_t u(x, t) = c u_0'(x + ct), \quad (x, t) \in \mathbb{R} \times (0, \infty).$$

- (ii) Für die folgenden Überlegungen ist es zweckmäßig, den zeitlichen Bereich $[0, \infty)$ auf \mathbb{R} zu erweitern und die Funktion $u : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ zu betrachten.

Lineare Transformation. Wählt man den Ansatz

$$u(x, t) = v(x + ct, x - ct), \quad (x, t) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R},$$

so folgt insbesondere die Relation

$$u_0(x) = u(x, 0) = v(x, x), \quad x \in \mathbb{R}.$$

Partielle Differentiation und Einsetzen der Advektionsgleichung

$$\begin{aligned} \partial_x u(x, t) &= \partial_1 v(x + ct, x - ct) + \partial_2 v(x + ct, x - ct), \\ \partial_t u(x, t) &= c(\partial_1 v(x + ct, x - ct) - \partial_2 v(x + ct, x - ct)), \\ 0 &= c \partial_x u(x, t) - \partial_t u(x, t) = 2c \partial_2 v(x + ct, x - ct), \end{aligned}$$

zeigen, daß die transformierte Funktion bezüglich des zweiten Argumentes konstant ist

$$\partial_2 v(x + ct, x - ct) = 0, \quad (x, t) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R},$$

und folglich die angegebene Lösungsdarstellung gilt

$$u(x, t) = v(x + ct, x - ct) = v(x + ct, x + ct) = u_0(x + ct), \quad (x, t) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}.$$

Erklärungen (Zusammenfassung). Die folgenden Überlegungen dienen dazu, den gewählten Ansatz zu erklären. Die grundlegende Idee ist es, eine lineare Transformation der Koordinaten

$$\begin{cases} x = \alpha \xi + \beta \eta, \\ t = \gamma \xi + \delta \eta, \end{cases}$$

so zu bestimmen, daß für die durch

$$v: \mathbb{R} \times \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}: (\xi, \eta) \longmapsto v(\xi, \eta) = u(\alpha \xi + \beta \eta, \gamma \xi + \delta \eta)$$

definierte Funktion eine der partiellen Ableitungen verschwindet. Die ursprüngliche partielle Differentialgleichung wird also beispielsweise durch die partielle Differentialgleichung $\partial_\eta v = 0$, deren Lösung bekannt ist (mit $\eta_0 \in \mathbb{R}$ beliebig)

$$\partial_\eta v(\xi, \eta) = 0, \quad v(\xi, \eta) = v(\xi, \eta_0), \quad (\xi, \eta) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R},$$

ersetzt. Da die zugehörige inverse Transformation durch

$$\begin{cases} \xi = \frac{1}{\alpha\delta - \beta\gamma} (\delta x - \beta t), \\ \eta = \frac{1}{\alpha\delta - \beta\gamma} (-\gamma x + \alpha t), \end{cases}$$

$$u(x, t) = v\left(\frac{1}{\alpha\delta - \beta\gamma} (\delta x - \beta t), \frac{1}{\alpha\delta - \beta\gamma} (-\gamma x + \alpha t)\right), \quad (x, t) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R},$$

gegeben ist, führt die Anfangsbedingungen auf

$$u_0(x) = u(x, 0) = v\left(\frac{\delta}{\alpha\delta - \beta\gamma} x, \frac{\gamma}{\beta\gamma - \alpha\delta} x\right), \quad x \in \mathbb{R},$$

Bei geeigneter Wahl von η_0 ergibt sich ein Zusammenhang mit der vorgegebenen Anfangsbedingung und in Folge die gesuchte Lösungsdarstellung.

Erklärungen. In kompakter Notation ist die transformierte Funktion durch

$$v = u \circ \varphi: \mathbb{R} \times \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}: (\xi, \eta) \longmapsto u(\varphi(\xi, \eta)),$$

$$\varphi: \mathbb{R} \times \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R} \times \mathbb{R}: (\xi, \eta)^T \longmapsto A(\xi, \eta)^T, \quad A = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix},$$

definiert; umgekehrt gilt

$$u = v \circ \varphi^{-1}: \mathbb{R} \times \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}: (x, t) \longmapsto v(\varphi^{-1}(x, t)),$$

$$\varphi^{-1}: \mathbb{R} \times \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R} \times \mathbb{R}: (x, t)^T \longmapsto A^{-1}(x, t)^T, \quad A^{-1} = \frac{1}{\alpha\delta - \beta\gamma} \begin{pmatrix} \delta & -\beta \\ -\gamma & \alpha \end{pmatrix}.$$

Differentiation und Einsetzen der Advektionsgleichung $\partial_t u = c \partial_x u$ führt auf (Schreibweise für partielle Ableitung bezüglich des ersten bzw. zweiten Argumentes $\partial_x u = \partial_1 u$ bzw. $\partial_t u = \partial_2 u$)

$$v(\xi, \eta) = u(\alpha \xi + \beta \eta, \gamma \xi + \delta \eta),$$

$$v'(\xi, \eta) = u'(\varphi(\xi, \eta)) \varphi'(\xi, \eta),$$

$$(\partial_\xi v(\xi, \eta), \partial_\eta v(\xi, \eta)) = \left(\alpha \partial_x u(\varphi(\xi, \eta)) + \gamma \partial_t u(\varphi(\xi, \eta)), \beta \partial_x u(\varphi(\xi, \eta)) + \delta \partial_t u(\varphi(\xi, \eta)) \right),$$

$$(\partial_\xi v(\xi, \eta), \partial_\eta v(\xi, \eta)) = \partial_x u(\varphi(\xi, \eta)) (\alpha + c\gamma, \beta + c\delta).$$

Wählt man beispielsweise $\beta = \frac{1}{2}$ und $\delta = -\frac{1}{2c}$, so folgt $\beta + c\delta = 0$ und weiters

$$\partial_\eta v(\xi, \eta) = 0, \quad v(\xi, \eta) = v(\xi, \eta_0), \quad (\xi, \eta) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R},$$

d.h. die transformierte Funktion v ist bezüglich des zweiten Argumentes konstant. Die naheliegenden Wahl $\alpha = \beta$ und $\gamma = -\delta$ stellt sicher, daß A invertierbar ist

$$A = \frac{1}{2c} \begin{pmatrix} c & c \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad A^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & c \\ 1 & -c \end{pmatrix};$$

die Matrix A ist hier so gewählt, daß ihre Inverse eine einfache Struktur hat. Somit ergeben sich die Relationen

$$\begin{aligned} v(\xi, \eta) &= u\left(\frac{1}{2}(\xi + \eta), \frac{1}{2c}(\xi - \eta)\right), & v(\xi, \eta) &= v(\xi, \eta_0), & (\xi, \eta) &\in \mathbb{R} \times \mathbb{R}, \\ u(x, t) &= v(x + ct, x - ct), & u_0(x) &= u(x, 0) = v(x, x), & (x, t) &\in \mathbb{R} \times \mathbb{R}, \end{aligned}$$

die schließlich auf die Lösungsdarstellung führen (das zweite Argument von v ist frei wählbar und wird so bestimmt, daß sich ein Zusammenhang mit dem Anfangswert ergibt)

$$u(x, t) = v(x + ct, x - ct) = v(x + ct, x + ct) = u(x + ct, 0) = u_0(x + ct), \quad (x, t) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}.$$

- (iii) *Methode der Charakteristiken.* Die Methode der Charakteristiken beruht auf der Idee, jene Punkte $(x, t) \in \mathbb{R} \times (0, \infty)$, welche auf dieselben Funktionswerte der Lösung führen, zu verknüpfen; diese Vorgehensweise wird insbesondere durch die bekannte Lösungsdarstellung für die homogene lineare Advektionsgleichung motiviert.

Bei der Methode der Charakteristiken ersetzt man die Ortsvariable durch eine zeitabhängige skalare Funktion mit Startpunkt $x_0 \in \mathbb{R}$

$$\xi : [0, \infty) \longrightarrow \mathbb{R} : t \longmapsto \xi(t), \quad \xi(0) = x_0,$$

und fordert, daß die durch die Lösungswerte definierte Funktion

$$v : [0, \infty) \times \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R} : t \longmapsto v(t) = u(\xi(t), t)$$

konstant ist, d.h. es gelte

$$v'(t) = 0, \quad v(t) = v(0), \quad t \in \mathbb{R};$$

Im Spezialfall der Advektionsgleichung führt Differentiation und Einsetzen der partiellen Differentialgleichung auf die Bedingung (wie zuvor bezeichnen $\partial_x u = \partial_1 u$ und $\partial_t u = \partial_2 u$ die partiellen Ableitungen bezüglich des ersten und zweiten Argumentes)

$$\begin{aligned} 0 = v'(t) &= \xi'(t) \partial_x u(\xi(t), t) + \partial_t u(\xi(t), t) = (\xi'(t) + c) \partial_x u(\xi(t), t), \\ &\xi'(t) = -c. \end{aligned}$$

Insgesamt erhält man das Anfangswertproblem

$$\begin{cases} \xi'(t) = -c, & t \in (0, \infty), \\ \xi(0) = x_0, \end{cases}$$

mit bekannter Lösung

$$\xi(t) = x_0 - c t, \quad t \in [0, \infty).$$

Daraus ergibt sich die Lösungsdarstellung (setze $x = x_0 - c t$ bzw. $x_0 = x + c t$)

$$\begin{aligned} u(x_0 - c t, t) &= u(\xi(t), t) = v(t) = v(0) = u(x_0, 0) = u_0(x_0), \\ u(x, t) &= u_0(x + c t), \quad (x, t) \in \mathbb{R} \times [0, \infty). \end{aligned}$$

(iv) *Bemerkung.* Die obigen Überlegungen führen auf den Ansatz (mit $x = x_0 - c t$)

$$w(s) = v(t + s) = u(x - c s, t + s),$$

vgl. EVANS mit $b = -c$, und mittels Einsetzen der Advektionsgleichung auf die gesuchte Lösungsdarstellung

$$\begin{aligned} w'(s) &= \partial_t u(x - c s, t + s) - c \partial_x u(x - c s, t + s) = 0, \\ u(x - c s, t + s) &= w(s) = \text{const} = w(-t) = u(x + c t, 0) = u_0(x + c t), \\ s = 0: \quad u(x, t) &= u_0(x + c t). \end{aligned}$$

Abgeschwächter Lösungsbegriff. In Hinblick auf relevante Anwendungen wie die Ausbreitung von Stoßwellen ist es wünschenswert, die Funktion

$$u(x, t) = u_0(x + c t), \quad (x, t) \in \mathbb{R} \times [0, \infty),$$

auch für Anfangsbedingungen mit geringeren Regularitätseigenschaften als Lösung der Advektionsgleichung

$$\begin{cases} \partial_t u(x, t) = c \partial_x u(x, t), & (x, t) \in \mathbb{R} \times (0, \infty), \\ u(x, 0) = u_0(x), & x \in \mathbb{R}, \end{cases}$$

in einem abgeschwächten Sinn zu verstehen.

(i) *Integrallösung.* Betrachtet man anstelle der Advektionsgleichung die zugehörige Integralgleichung, so führt dies auf (Multiplikation mit einer Testfunktion, d.h. mit einer regulären Funktion $\nu : \mathbb{R} \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ mit kompaktem Träger, insbesondere für $x \rightarrow \pm\infty$)

bzw. $t \rightarrow \infty$ gelte $v(x, t) \rightarrow 0$, Integration bezüglich der Ortsvariable $x \in \mathbb{R}$ und der Zeitvariable $t \in [0, \infty)$, partielle Integration, Einsetzen der Anfangsbedingung)

$$\begin{aligned} \partial_t u(x, t) - c \partial_x u(x, t) &= 0, \\ \int_0^\infty \int_{\mathbb{R}} (\partial_t u(x, t) - c \partial_x u(x, t)) v(x, t) dx dt &= 0, \\ - \int_0^\infty \int_{\mathbb{R}} u(x, t) (\partial_t v(x, t) - c \partial_x v(x, t)) dx dt \\ &+ \int_{\mathbb{R}} (u(x, t) v(x, t)) \Big|_{t=0}^\infty dx - \int_0^\infty (c u(x, t) v(x, t)) \Big|_{x=-\infty}^\infty dt = 0, \\ - \int_0^\infty \int_{\mathbb{R}} u(x, t) (\partial_t v(x, t) - c \partial_x v(x, t)) dx dt - \int_{\mathbb{R}} u_0(x) v(x, 0) dx &= 0. \end{aligned}$$

Eine Lösung $u \in L^\infty(\mathbb{R} \times (0, \infty))$, welche diese Integralgleichung

$$\int_0^\infty \int_{\mathbb{R}} u(x, t) (\partial_t v(x, t) - c \partial_x v(x, t)) dx dt + \int_{\mathbb{R}} u_0(x) v(x, 0) dx = 0$$

für alle Testfunktionen $v : \mathbb{R} \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ erfüllt, heißt eine Integrallösung der Advektionsgleichung.

(ii) *Heaviside-Funktion.* Wählt man als Anfangsbedingung die Heaviside-Funktion

$$H : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R} : x \longmapsto H(x) = \begin{cases} 1, & x \geq 0, \\ 0, & x < 0, \end{cases}$$

so ist leicht zu zeigen, daß die Funktion

$$u(x, t) = u_0(x + ct) = H(x + ct) = \begin{cases} 1, & x + ct \geq 0, \\ 0, & x + ct < 0, \end{cases} \quad (x, t) \in \mathbb{R} \times [0, \infty),$$

eine Integrallösung der Advektionsgleichung ist. Beispielsweise für $c > 0$ erhält man (wegen $x + ct \geq 0$ bzw. $t \geq -\frac{x}{c}$ bzw. $x \geq -ct$)

$$\begin{aligned} &\int_0^\infty \int_{\mathbb{R}} u(x, t) (\partial_t v(x, t) - c \partial_x v(x, t)) dx dt + \int_{\mathbb{R}} u_0(x) v(x, 0) dx \\ &= \int_{\mathbb{R}} \int_0^\infty H(x + ct) \partial_t v(x, t) dt dx - c \int_0^\infty \int_{\mathbb{R}} H(x + ct) \partial_x v(x, t) dx dt \\ &\quad + \int_{\mathbb{R}} H(x) v(x, 0) dx \\ &= \int_{\mathbb{R}} \int_{\min\{0, -\frac{x}{c}\}}^\infty \partial_t v(x, t) dt dx - c \int_0^\infty \int_{-ct}^\infty \partial_x v(x, t) dx dt + \int_0^\infty v(x, 0) dx \\ &= \int_{\mathbb{R}} v(x, t) \Big|_{t=\min\{0, -\frac{x}{c}\}}^\infty dx - c \int_0^\infty v(x, t) \Big|_{x=-ct}^\infty dt + \int_0^\infty v(x, 0) dx \\ &= - \int_{\mathbb{R}} v\left(x, \min\left\{0, -\frac{x}{c}\right\}\right) dx + c \int_0^\infty v(-ct, t) dt + \int_0^\infty v(x, 0) dx \\ &= - \int_{-\infty}^0 v\left(x, -\frac{x}{c}\right) dx - \int_0^\infty v(x, 0) dx + c \int_0^\infty v(-ct, t) dt + \int_0^\infty v(x, 0) dx, \end{aligned}$$

und mittels der Substitution $\xi = -\frac{x}{c}$ bzw. $x = -c\xi$ folgt

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty \int_{\mathbb{R}} u(x, t) (\partial_t v(x, t) - c \partial_x v(x, t)) dx dt + \int_{\mathbb{R}} u_0(x) v(x, 0) dx \\ &= -c \int_0^\infty \int_{\mathbb{R}} v(-c\xi, \xi) d\xi - \int_0^\infty \int_{\mathbb{R}} v(x, 0) dx + c \int_0^\infty \int_{\mathbb{R}} v(-ct, t) dt + \int_0^\infty \int_{\mathbb{R}} v(x, 0) dx \\ &= 0. \end{aligned}$$

Mehrdimensionale Advektionsgleichung. Die Überlegungen für den eindimensionalen Fall lassen sich direkt auf beliebige Raumdimensionen erweitern und führen auf das folgende Resultat. Die Lösung $u: \mathbb{R}^d \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}: (x, t) \mapsto u(x, t)$ der homogenen linearen Advektionsgleichung mit konstanten Koeffizienten $0 \neq c \in \mathbb{R}^d$

$$\begin{cases} \partial_t u(x, t) = \operatorname{div}(c u(x, t)), & (x, t) \in \mathbb{R}^d \times (0, \infty), \\ u(x, 0) = u_0(x), & x \in \mathbb{R}^d, \end{cases}$$

ist durch die folgende Relation gegeben

$$u(x, t) = u_0(x + ct), \quad (x, t) \in \mathbb{R}^d \times [0, \infty).$$

Für spätere Überlegungen ist es zweckmäßig, die homogene lineare Advektionsgleichung als Evolutionsgleichung zu formulieren und den zugehörigen linearen Evolutionsoperator, welcher für Funktionen $v: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ definiert ist, einzuführen

$$A = \operatorname{div}(c \cdot), \quad (\mathcal{E}_A(t)v)(x) = v(x + ct), \quad (x, t) \in \mathbb{R}^d \times [0, \infty).$$

Inhomogene Advektionsgleichung. Für eine lineare Advektionsgleichung (mit Inhomogenität $r: \mathbb{R}^d \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$)

$$\begin{cases} \partial_t u(x, t) = \operatorname{div}(c u(x, t)) + r(x, t), & (x, t) \in \mathbb{R}^d \times (0, \infty), \\ u(x, 0) = u_0(x), & x \in \mathbb{R}^d, \end{cases}$$

erhält man mit Hilfe der linearen Variation-der-Konstanten Formel die Lösungsdarstellung

$$\begin{aligned} u(\cdot, t) &= \mathcal{E}_A(t)u_0 + \int_0^t \mathcal{E}_A(t-\tau) r(\cdot, \tau) d\tau, \quad t \in [0, \infty), \\ u(x, t) &= u_0(x + ct) + \int_0^t r(x + c(t-\tau), \tau) d\tau, \quad (x, t) \in \mathbb{R}^d \times [0, \infty). \end{aligned}$$

Dies wird auch nochmals durch Differentiation bestätigt (mit $u'_0 = (\partial_{x_1} u_0, \dots, \partial_{x_d} u_0)^T$ und $\partial_x r = (\partial_{x_1} r, \dots, \partial_{x_d} r)^T$)

$$\begin{aligned} \partial_t u(x, t) &= c \cdot u'_0(x + ct) + \int_0^t c \cdot \partial_x r(x + c(t-\tau), \tau) d\tau + r(x, t), \\ \operatorname{div}(c u(x, t)) &= c \cdot u'_0(x + ct) + \int_0^t c \cdot \partial_x r(x + c(t-\tau), \tau) d\tau. \end{aligned}$$

4.2 Lineare Diffusionsgleichungen

Diffusionsgleichung. In gewissen Situationen ist es möglich, eine Lösungsdarstellung für die homogene lineare Diffusionsgleichung

$$\begin{cases} \partial_t u(x, t) = \Delta u(x, t), & (x, t) \in \Omega \times (0, \infty), \\ u(x, 0) = u_0(x), & x \in \overline{\Omega}, \end{cases}$$

anzugeben.

- *Spektralverfahren.* Falls das betrachtete Gebiet die spezielle Form

$$\Omega = (a_1, b_1) \times \cdots \times (a_d, b_d) \subset \mathbb{R}^d$$

hat und periodische Randbedingungen vorgegeben sind, kann man mittels des Fourier-Spektralverfahrens eine explizite Darstellung der Lösung bestimmen; durch ungerade bzw. gerade Fortsetzung lassen sich die Überlegungen auch auf den Fall homogener Dirichlet- oder Neumann-Randbedingungen übertragen. Diese Lösungsdarstellungen werden insbesondere zur numerischen Approximation genützt, vgl. auch Implementierung von Spektralverfahren.

- *Fundamentallösung.* Zur Berechnung der Fundamentallösung auf $\Omega = \mathbb{R}^d$ verwendet man die Fourier-Transformation.

In den angegebenen Spezialfällen nützt man die Kenntnis von Eigenfunktionen des Laplace-Operators (Eigenfunktion $\mathcal{B}_m : \Omega \subseteq \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C}$ und zugehöriger Eigenwert $\lambda_m \in \mathbb{R}$)

$$\Delta \mathcal{B}_m = \lambda_m \mathcal{B}_m, \quad m \in \mathcal{M}.$$

Da die Elemente von $(\mathcal{B}_m)_{m \in \mathcal{M}}$ durch Tensorprodukte gegeben sind (Produkt von Exponentialfunktionen)

$$\mathcal{B}_m(x) = \mathcal{B}_{(m_1, \dots, m_d)}(x_1, \dots, x_d) = \mathcal{B}_{m_1}(x_1) \cdots \mathcal{B}_{m_d}(x_d), \quad x \in \Omega \subseteq \mathbb{R}^d,$$

und die folgende Relation gilt (wegen $\Delta = \partial_{x_1}^2 + \cdots + \partial_{x_d}^2$ und Eigenrelation $\partial_{x_j}^2 \mathcal{B}_{\mu_j} = \lambda_{\mu_j} \mathcal{B}_{\mu_j}$)

$$\lambda_m = \lambda_{m_1} + \cdots + \lambda_{m_d}, \quad m \in \mathcal{M},$$

reicht es aus, den eindimensionalen Fall genauer zu behandeln.

Lösungsdarstellung mittels Fourier-Spektralverfahren. Es bezeichne $\Omega = (a_1, a_2) \subset \mathbb{R}$ ein offenes beschränktes Intervall (d.h. $a_1, a_2 \in \mathbb{R}$ mit $a_1 < a_2$) und $\mathcal{M} = \mathbb{Z}$ die Indexmenge.

(i) *Fourier-Basisfunktionen.* Betrachtet man den eindimensionalen Laplace-Operator

$$A = \partial_{xx}$$

und setzt zusätzlich periodische Randbedingungen voraus (komplexwertige Funktionen $f : \overline{\Omega} \rightarrow \mathbb{C}$ zugelassen)

$$D(A) = \left\{ v \in \mathcal{C}^2(\Omega) \cap \mathcal{C}(\overline{\Omega}) : v(a_2) = v(a_1) \right\},$$

so ist offensichtlich, daß die Fourier-Basisfunktionen $(\mathcal{B}_m)_{m \in \mathcal{M}}$ (Bedingung $\mathcal{B}_m \in D(A)$ erfüllt, zusätzliche Normierung $\|\mathcal{B}_m\|_{L^2} = 1$)

$$\mathcal{B}_m : \overline{\Omega} \rightarrow \mathbb{C} : x \mapsto \frac{1}{\sqrt{a_2 - a_1}} e^{\frac{2\pi i m}{a_2 - a_1}(x - a_1)}, \quad m \in \mathcal{M},$$

Eigenfunktionen bilden; die zugehörigen Eigenwerte sind durch (beachte $\lambda_m \in \mathbb{R}$ und zudem $\lambda_m \leq 0$)

$$A\mathcal{B}_m = \lambda_m \mathcal{B}_m, \quad \lambda_m = -\frac{4\pi^2 m^2}{(a_2 - a_1)^2}, \quad m \in \mathcal{M},$$

gegeben.

(ii) *Fourier-Spektraldarstellung.* Da die Fourier-Basisfunktionen ein vollständiges Orthonormalsystem im Hilbertraum $(L^2(\Omega), (\cdot|\cdot)_{L^2})$ bilden, ist für jede Funktion $v \in L^2(\Omega)$ die Darstellung (Fourier-Spektralkoeffizienten $v_m \in \mathbb{C}$, Konvergenz der Reihe in $L^2(\Omega)$, Fourier-Reihendarstellung)

$$v = \sum_{m \in \mathcal{M}} v_m \mathcal{B}_m, \quad v_m = (v|\mathcal{B}_m)_{L^2} = \int_{\Omega} v(x) \overline{\mathcal{B}_m(x)} dx, \quad m \in \mathcal{M},$$

gültig; insbesondere erhält man mittels Parseval'scher Identität die Relation

$$\|v\|_{L^2}^2 = \sum_{m \in \mathcal{M}} |v_m|^2.$$

(iii) *Lösungsdarstellung.* Für die homogene lineare Diffusionsgleichung

$$\begin{cases} \partial_t u(x, t) = \partial_{xx} u(x, t), & (x, t) \in \Omega \times (0, \infty), \\ u(x, 0) = u_0(x), & x \in \overline{\Omega}, \end{cases}$$

mit zusätzlichen periodischen Randbedingungen¹

$$u(a_1, t) = u(a_2, t), \quad t \in [0, \infty),$$

¹Man beachte, daß im Zusammenhang mit dem klassischen Lösungsbegriff die vorausgesetzten periodischen Randbedingungen eingehen; man benötigt in diesem Fall sogar Differenzierbarkeit der periodisch fortgesetzten Funktion. Hinsichtlich Konvergenz im L^2 -Sinn ist es jedoch nicht notwendig, Periodizität des Anfangswertes und der Lösung zu fordern.

erhält man mittels der Fourier-Spektraldarstellung der vorgegebenen Anfangsbedingung die Lösungsdarstellung

$$u_0 = \sum_{m \in \mathcal{M}} (u_0|_{\mathcal{B}_m})_{L^2} \mathcal{B}_m,$$

$$u(\cdot, t) = \sum_{m \in \mathcal{M}} (u_0|_{\mathcal{B}_m})_{L^2} e^{\lambda_m t} \mathcal{B}_m, \quad t \in [0, \infty).$$

- (iv) *Klassischer Lösungsbegriff.* Das Dirichlet-Kriterium² besagt, daß die Fourier-Reihe einer periodischen und differenzierbaren Funktion punktweise gegen die Funktion konvergiert. Unter diesen Voraussetzungen an die Anfangsbedingung ist somit die Schreibweise

$$u_0(x) = \sum_{m \in \mathcal{M}} (u_0|_{\mathcal{B}_m})_{L^2} \mathcal{B}_m(x), \quad x \in \bar{\Omega},$$

gerechtfertigt; mittels der angegebenen Lösungsdarstellung überträgt sich die Regularität der Anfangsbedingung auf die Lösung der Diffusionsgleichung.³ Insgesamt führt dies somit auf eine Lösung des Anfangswertproblems für die Diffusionsgleichung im klassischen Sinn

$$u(x, t) = \sum_{m \in \mathcal{M}} (u_0|_{\mathcal{B}_m})_{L^2} e^{\lambda_m t} \mathcal{B}_m(x), \quad (x, t) \in \bar{\Omega} \times [0, \infty).$$

- (v) *Abschwächung des Lösungsbegriffes.* Im Zusammenhang mit Fourierreihen ist naheliegender, Wohldefiniertheit in $L^2(\Omega)$ zu untersuchen. Für Anfangsbedingungen $u_0 \in L^2(\Omega)$ ist die angegebene Lösungsdarstellung im Sinne des $L^2(\Omega)$ definiert und es gilt

$$u_0 \in L^2(\Omega) \implies u(\cdot, t) \in L^2(\Omega), \quad t \in [0, \infty).$$

²Dirichlet-Kriterium (Punktweise Konvergenz der Fourier-Reihe).

- (i) Es bezeichne $\Omega = (a_1, a_2) \subset \mathbb{R}$ ein beschränktes Intervall. Falls für eine Funktion $f \in L^1(\Omega)$ die einseitigen Grenzwerte und Ableitungen in einem Punkt $x \in \Omega$ existieren

$$f(x_-) = \lim_{\xi \nearrow x} f(\xi), \quad f(x_+) = \lim_{\xi \searrow x} f(\xi), \quad f'(x_-) = \lim_{\xi \nearrow x} \frac{f(\xi) - f(x_-)}{\xi - x}, \quad f'(x_+) = \lim_{\xi \searrow x} \frac{f(\xi) - f(x_+)}{\xi - x},$$

so konvergiert die zugehörige Fourier-Reihe in x gegen den Mittelwert der einseitigen Grenzwerte

$$\sum_{m \in \mathcal{M}} (f|_{\mathcal{B}_m})_{L^2} \mathcal{B}_m(x) = \frac{1}{2} (f(x_-) + f(x_+)).$$

Wenn die periodisch fortgesetzte Funktion $\tilde{f}: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ diese Regularitätsvoraussetzungen erfüllt, gilt die Aussage auch in den Randpunkten $x = a_1$ bzw. $x = a_2$.

- (ii) In Situationen, wo die periodische Fortsetzung einer Funktion $f \in L^1(\Omega)$ differenzierbar ist, gilt somit

$$f(x) = \sum_{m \in \mathcal{M}} (f|_{\mathcal{B}_m})_{L^2} \mathcal{B}_m(x), \quad x \in \bar{\Omega}.$$

³Wegen $u(\cdot, t) \in \mathcal{C}^\infty(\Omega)$ für $u_0 \in L^2(\Omega)$ gilt insbesondere $u(\cdot, t) \in \mathcal{C}^\infty(\Omega)$ für $u_0 \in \mathcal{C}^1(\Omega)$, vgl. später.

Insbesondere folgt mittels Parseval'scher Identität die Abschätzung

$$\|u(\cdot, t)\|_{L^2} \leq \|u_0\|_{L^2}, \quad t \in [0, \infty),$$

denn (wegen $\lambda_m = -\frac{4\pi^2 m^2}{(a_2 - a_1)^2} \leq 0$ und somit $e^{\lambda_m t} \leq 1$ für $t \in [0, \infty)$ und $m \in \mathcal{M}$)

$$\|u(\cdot, t)\|_{L^2}^2 = \sum_{m \in \mathcal{M}} |(u_0|_{\mathcal{B}_m})_{L^2}|^2 e^{2\lambda_m t} \leq \sum_{m \in \mathcal{M}} |(u_0|_{\mathcal{B}_m})_{L^2}|^2 = \|u_0\|_{L^2}^2, \quad t \in [0, \infty);$$

man beachte, daß negative Werte $t < 0$ jedoch im Allgemeinen nicht zulässig sind, weil in diesem Fall $e^{\lambda_m t} \rightarrow \infty$ für $m \rightarrow \pm\infty$. Außerdem gilt für (beliebig kleine) positive Zeiten die Implikation

$$u_0 \in L^2(\Omega) \implies \partial_x^k u(\cdot, t) \in L^2(\Omega), \quad t \in (0, \infty), \quad k \in \mathbb{N},$$

und damit aufgrund des Sobolev'schen Einbettungssatzes $H^1(\Omega) \hookrightarrow \mathcal{C}(\bar{\Omega})$ sogar

$$u_0 \in L^2(\Omega) \implies u(\cdot, t) \in \mathcal{C}^\infty(\Omega), \quad t \in (0, \infty),$$

was den starken Regularisierungseffekt der Diffusionsgleichung zeigt; aus der Lösungsdarstellung folgt nämlich (Eigenrelation $\partial_x \mathcal{B}_m = \mu_m \mathcal{B}_m$ mit $\mu_m = i \frac{2\pi m}{a_2 - a_1} \in i\mathbb{R}$, insbesondere gilt $\lambda_m = \mu_m^2$, Beschränktheit der Funktion $f_k : (0, \infty) \rightarrow \mathbb{R} : z \mapsto e^{-z^2} z^k$ für Exponenten $k \in \mathbb{N}$)

$$\begin{aligned} \partial_x^k u(\cdot, t) &= \sum_{m \in \mathcal{M}} (u_0|_{\mathcal{B}_m})_{L^2} e^{\lambda_m t} \partial_x^k \mathcal{B}_m = \sum_{m \in \mathcal{M}} (u_0|_{\mathcal{B}_m})_{L^2} e^{\lambda_m t} \mu_m^k \mathcal{B}_m, \\ e^{\lambda_m t} |\mu_m|^k &\leq C_k, \quad t \in (0, \infty), \quad m \in \mathcal{M}, \quad k \in \mathbb{N}, \\ \|\partial_x^k u(\cdot, t)\|_{L^2} &\leq C_k \|u_0\|_{L^2}, \quad t \in (0, \infty), \quad k \in \mathbb{N}. \end{aligned}$$

(vi) *Spezialfall.* Wählt man speziell $a_1 = 0$ sowie $a_2 = 2\pi$ vereinfachen sich die angegebenen Relationen

$$\mathcal{B}_m(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{imx}, \quad \lambda_m = -m^2, \quad x \in [0, 2\pi], \quad m \in \mathbb{Z};$$

unter geeigneten Regularitätsvoraussetzungen erhält man somit die Identität

$$u(x, t) = \frac{1}{2\pi} \sum_{m \in \mathbb{Z}} \int_0^{2\pi} u_0(\xi) e^{im(x-\xi) - m^2 t} d\xi, \quad (x, t) \in [0, 2\pi] \times [0, \infty).$$

Bemerkung. In der betrachteten Situation ergibt sich als Friedrich'sche Erweiterung des Laplace-Operators der selbstadjungierte Operator (A dicht definiert und symmetrisch, weil $(Av|w)_{L^2} = (v|Aw)_{L^2}$ für $v, w \in D(A)$)

$$A : D(A) \subset X \longrightarrow X : v \longmapsto \Delta v, \quad X = L^2(\Omega), \quad D(A) = H^2(\Omega).$$

Das Fourier-Spektralverfahren kann in diesem Fall verwendet werden, um den zugehörigen Evolutionsoperator $\mathcal{E}_A(t) : X \rightarrow X$ einzuführen; aus den obigen Überlegungen folgen insbesondere die Relationen

$$\begin{aligned}\|\mathcal{E}_A(t) u_0\|_X &\leq C \|u_0\|_X, \quad t \in [0, \infty), \\ \|A_\alpha \mathcal{E}_A(t) u_0\|_X &\leq C_\alpha \|u_0\|_X, \quad t \in (0, \infty), \quad \alpha \in (0, \infty),\end{aligned}$$

wobei gebrochene Potenzen $A_\alpha = (-A)^\alpha : D(A_\alpha) \subset X \rightarrow X$ mittels der Spektralzerlegung definiert sind. Im Rahmen der Theorie selbstadjungierter Operatoren auf Hilberträumen oder sektorieller Operatoren auf Banachräumen werden Erweiterungen dieses Zuganges untersucht.

Lösungsdarstellung mittels Fourier-Transformation.

- (i) *Fourier-Transformation.*⁴ Für jede Funktion $f \in L^1(\mathbb{R})$ ist die kontinuierliche Fourier-Transformation, gegeben durch

$$(\mathcal{F}(f))(\mu) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} f(\xi) e^{-i\mu\xi} d\xi, \quad \mu \in \mathbb{R},$$

wohldefiniert; falls auch $\mathcal{F}(f) \in L^1(\mathbb{R})$, so gilt außerdem

$$f(x) = \left(\mathcal{F}^{-1}(\mathcal{F}(f))\right)(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} (\mathcal{F}(f))(\mu) e^{i\mu x} d\mu, \quad x \in \mathbb{R}.$$

Insgesamt führt dies auf die Identität

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} f(\xi) e^{i\mu(x-\xi)} d\xi d\mu, \quad x \in \mathbb{R}.$$

- (ii) *Lösungsdarstellung.* In Analogie zum Fall eines beschränkten Gebietes (Angabe für den Spezialfall $\Omega = (0, 2\pi) \subset \mathbb{R}$)

$$u(x, t) = \frac{1}{2\pi} \sum_{m \in \mathbb{Z}} \int_0^{2\pi} u_0(\xi) e^{im(x-\xi) - m^2 t} d\xi, \quad (x, t) \in [0, 2\pi] \times [0, \infty),$$

ergibt sich für die lineare Diffusionsgleichung auf dem gesamten Raum

$$\begin{cases} \partial_t u(x, t) = \partial_{xx} u(x, t), & (x, t) \in \mathbb{R} \times (0, \infty), \\ u(x, 0) = u_0(x), & x \in \mathbb{R}, \end{cases}$$

die Lösungsdarstellung

$$u(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} u_0(\xi) e^{i\mu(x-\xi) - \mu^2 t} d\xi d\mu, \quad (x, t) \in \mathbb{R} \times [0, \infty).$$

⁴Detaillierte Informationen sind in den Unterlagen zur Fourier-Analyse angegeben.

- (iii) *Vorüberlegungen.* Die Exponentialfunktion $\exp : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C} : z \mapsto e^z$ ist für jedes Element $z \in \mathbb{C}$ komplex differenzierbar, d.h. eine ganze Funktion. Der Cauchy'sche Integralsatz besagt insbesondere, daß für jede ganze Funktion $f : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ das Integral über eine geschlossene (stückweise reguläre) Kurve $\gamma : [0, 1] \rightarrow \mathbb{C}$ verschwindet

$$\int_{\gamma} f(z) dz = \int_0^1 f(\gamma(t)) \gamma'(t) dt = 0.$$

Mit Hilfe dieses Resultates folgert man, daß der Wert des folgenden Integrals nicht von $c \in \mathbb{R}$ abhängt und erhält somit

$$\int_{\mathbb{R}+ic} e^{-z^2} dz = \int_{\mathbb{R}} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}.$$

- (iv) *Vereinfachte Darstellung und Fundamentallösung.* Die angegebene Lösungsdarstellung kann noch weiter vereinfacht werden (Vertauschen der Integrationsreihenfolge)

$$\begin{aligned} u(x, t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} u_0(\xi) e^{i\mu(x-\xi) - \mu^2 t} d\xi d\mu \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} u_0(\xi) \int_{\mathbb{R}} e^{i\mu(x-\xi) - \mu^2 t} d\mu d\xi, \quad (x, t) \in \mathbb{R} \times [0, \infty). \end{aligned}$$

Quadratisches Ergänzen

$$i\mu(x-\xi) - \mu^2 t = -t \left(\mu^2 - 2 \frac{i(x-\xi)}{2t} \mu \pm \frac{i^2(x-\xi)^2}{4t^2} \right) = -t \left(\mu - \frac{i(x-\xi)}{2t} \right)^2 - \frac{(x-\xi)^2}{4t}$$

und die Integraltransformation

$$\tilde{\mu} = \sqrt{t} \left(\mu - \frac{i(x-\xi)}{2t} \right), \quad \mu = \frac{1}{\sqrt{t}} \tilde{\mu} + \frac{i(x-\xi)}{2t},$$

führen auf (Anwendung des Cauchy'schen Integralsatzes, siehe oben)

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} e^{i\mu(x-\xi) - \mu^2 t} d\mu &= \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{(x-\xi)^2}{4t}} \int_{\mathbb{R}} e^{-t \left(\mu - \frac{i(x-\xi)}{2t} \right)^2} d\mu \\ &= \frac{1}{2\pi\sqrt{t}} e^{-\frac{(x-\xi)^2}{4t}} \int_{\mathbb{R} - \frac{i(x-\xi)}{2\sqrt{t}}} e^{-\tilde{\mu}^2} d\tilde{\mu} \\ &= \frac{1}{2\pi\sqrt{t}} e^{-\frac{(x-\xi)^2}{4t}} \int_{\mathbb{R}} e^{-\tilde{\mu}^2} d\tilde{\mu} \\ &= \frac{1}{2\sqrt{\pi t}} e^{-\frac{(x-\xi)^2}{4t}}. \end{aligned}$$

Insgesamt führt dies auf die bekannte Darstellung

$$\begin{aligned} u(x, t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} u_0(\xi) e^{i\mu(x-\xi) - \mu^2 t} d\xi d\mu \\ &= \int_{\mathbb{R}} u_0(\xi) \frac{1}{2\sqrt{\pi t}} e^{-\frac{(x-\xi)^2}{4t}} d\xi, \quad (x, t) \in \mathbb{R} \times [0, \infty). \end{aligned}$$

Für theoretische Überlegungen ist es manchmal zweckmäßig, nur den Beitrag

$$F(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi t}} e^{-\frac{x^2}{4t}}, \quad (x, t) \in \mathbb{R} \times [0, \infty),$$

welcher dem Ansatz $u_0 = \delta_0$ ⁵ entspricht, zu betrachten; man bezeichnet F als Fundamentallösung der Diffusionsgleichung. Die Lösung der Diffusionsgleichung ergibt sich dann als Faltung der Fundamentallösung und der Anfangsbedingung

$$\begin{aligned} u(\cdot, t) &= F(\cdot, t) * u_0, & t \in [0, \infty), \\ u(x, t) &= \int_{\mathbb{R}} F(x - \xi, t) u_0(\xi) \, d\xi, & (x, t) \in \mathbb{R} \times [0, \infty). \end{aligned}$$

In Analogie zur Fourier-Spektralzerlegung führt man den zugehörigen Evolutionsoperators mittels der Fundamentallösung ein (wobei $A = \partial_{xx}$)

$$u(\cdot, t) = \mathcal{E}_A(t) u_0 = F(\cdot, t) * u_0, \quad t \in [0, \infty).$$

⁵Definition der Dirac'schen Delta-Distribution und gebräuchliche Schreibweise

$$\delta_0(f) = \int_{\mathbb{R}} f(\xi) \delta_0(\xi) \, d\xi = f(0).$$

4.3 Lineare Schrödinger-Gleichungen

Freie Schrödinger-Gleichung. Die für die homogene lineare Diffusionsgleichung angegebenen Lösungsdarstellungen lassen sich direkt auf die freie Schrödinger-Gleichung

$$i \partial_t u(x, t) = \Delta u(x, t), \quad (x, t) \in \Omega \times (0, \infty),$$

übertragen. Verwendet man beispielsweise die Fourier-Spektraldarstellung der vorgegebenen Anfangsbedingung, so erhält man

$$\begin{aligned} u_0 &= \sum_{m \in \mathcal{M}} (u_0 | \mathcal{B}_m)_{L^2} \mathcal{B}_m, \\ u(\cdot, t) &= \sum_{m \in \mathcal{M}} (u_0 | \mathcal{B}_m)_{L^2} e^{-i\lambda_m t} \mathcal{B}_m, \quad t \in [0, \infty); \end{aligned}$$

im Gegensatz zur Diffusionsgleichung ist diese Darstellung auch für negative Zeiten wohldefiniert (Semi-Gruppe versus Gruppe). Ähnliche Überlegungen wie zuvor zeigen die Erhaltung der L^2 -Norm (wegen $|e^{-i\lambda_m t}| = 1$ für $t \in \mathbb{R}$)

$$\|u(\cdot, t)\|_{L^2}^2 = \sum_{m \in \mathcal{M}} |(u_0 | \mathcal{B}_m)_{L^2}|^2 = \|u_0\|_{L^2}^2, \quad t \in [0, \infty),$$

und allgemeiner der Sobolev-Halbnormen für $k \in \mathbb{N}$

$$\|\partial_x^k u(\cdot, t)\|_{L^2}^2 = \sum_{m \in \mathcal{M}} |(u_0 | \mathcal{B}_m)_{L^2}|^2 |\mu_m|^k = \|\partial_x^k u_0\|_{L^2}^2, \quad t \in [0, \infty).$$

Bemerkung. Auf ähnlichen Überlegungen basieren Lösungsdarstellungen für lineare Schrödinger-Gleichungen mit zusätzlichem Potentialterm:

- Harmonisches Potential, vgl. Hermite-Spektralverfahren.
- Symmetrisches harmonisches Potential plus Rotationsterm, vgl. Laguerre-Fourier-Hermite-Spektralverfahren.

4.4 Lineare Wellengleichungen

Wellengleichung. Mittels der bekannten Lösungsdarstellung für die lineare Advektionsgleichung ist es möglich, eine Darstellung der Lösung $u : \mathbb{R} \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R} : (x, t) \mapsto u(x, t)$ der linearen Wellengleichung in einer Raumdimension (mit $0 \neq c \in \mathbb{R}$)

$$\begin{cases} \partial_{tt} u(x, t) = c^2 \partial_{xx} u(x, t), & (x, t) \in \mathbb{R} \times (0, \infty), \\ u(x, 0) = u_0(x), \quad \partial_t \Big|_{t=0} u(x, t) = v_0(x), & x \in \mathbb{R}, \end{cases}$$

anzugeben.

Lösungsdarstellung.

(i) *Erinnerung.* Die Lösung einer inhomogenen linearen Advektionsgleichung

$$\begin{cases} \partial_t u(x, t) = c \partial_x u(x, t) + r(x, t), & (x, t) \in \mathbb{R} \times (0, \infty), \\ u(x, 0) = u_0(x), & x \in \mathbb{R}, \end{cases}$$

ist durch die Darstellung mittels linearer Variation-der-Konstanten Formel

$$u(x, t) = u_0(x + ct) + \int_0^t r(x + c(t - \tau), \tau) d\tau, \quad (x, t) \in \mathbb{R} \times [0, \infty),$$

gegeben.

(ii) *Vorüberlegung.* Unter geeigneten Regularitätsvoraussetzungen an $v : \mathbb{R} \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ zeigt direktes Nachprüfen

$$\begin{aligned} (\partial_t - c \partial_x)(\partial_t + c \partial_x)v(x, t) &= \partial_t(\partial_t v(x, t) + c \partial_x v(x, t)) - c \partial_x(\partial_t v(x, t) + \partial_x v(x, t)) \\ &= \partial_{tt} v(x, t) + c \partial_{tx} v(x, t) - c \partial_{xt} v(x, t) - c^2 \partial_{xx} v(x, t) \\ &= \partial_{tt} v(x, t) - c^2 \partial_{xx} v(x, t) \end{aligned}$$

die Gültigkeit der Zerlegung

$$\partial_{tt} - c^2 \partial_{xx} = (\partial_t - c \partial_x)(\partial_t + c \partial_x).$$

(iii) *Erster Integrationsschritt.* Mittels der angegebenen Zerlegung des Differentialoperators $\partial_{tt} - c^2 \partial_{xx}$ und der Hilfsbezeichnung

$$U(x, t) = \partial_t u(x, t) + c \partial_x u(x, t), \quad (x, t) \in \mathbb{R} \times [0, \infty),$$

schreibt sich die Wellengleichung als homogene lineare Advektionsgleichung

$$\begin{aligned} 0 = \partial_{tt} u(x, t) - c^2 \partial_{xx} u(x, t) &= (\partial_t - c \partial_x)(\partial_t u(x, t) + c \partial_x u(x, t)) = \partial_t U(x, t) - c \partial_x U(x, t), \\ \partial_t U(x, t) &= c \partial_x U(x, t), \end{aligned}$$

deren Lösung durch

$$U(x, t) = U(x + ct, 0), \quad (x, t) \in \mathbb{R} \times [0, \infty),$$

gegeben ist; Einsetzen der Anfangsbedingungen ergibt

$$U(x, 0) = \partial_t \Big|_{t=0} u(x, t) + c \partial_x u(x, 0) = v_0(x) + c u'_0(x), \quad x \in \mathbb{R},$$

und folglich erhält man die Darstellung

$$U(x, t) = U(x + ct, 0) = v_0(x + ct) + c u'_0(x + ct), \quad (x, t) \in \mathbb{R} \times [0, \infty).$$

- (iv) *Zweiter Integrationsschritt.* Einsetzen dieser Lösungsdarstellung in die definierende Relation führt auf eine inhomogene lineare Advektionsgleichung

$$\begin{aligned} \partial_t u(x, t) + c \partial_x u(x, t) &= U(x, t) = v_0(x + ct) + c u'_0(x + ct), \\ \partial_t u(x, t) &= -c \partial_x u(x, t) + c u'_0(x + ct) + v_0(x + ct), \end{aligned}$$

mit bekannter Lösungsdarstellung

$$\begin{aligned} u(x, t) &= u_0(x - ct) + \int_0^t r(x - c(t - \tau), \tau) \, d\tau \\ &= u_0(x - ct) + \int_0^t \left(c u'_0(x - c(t - \tau) + c\tau) + v_0(x - c(t - \tau) + c\tau) \right) \, d\tau \\ &= u_0(x - ct) + c \int_0^t u'_0(x - ct + 2c\tau) \, d\tau + \int_0^t v_0(x - ct + 2c\tau) \, d\tau; \end{aligned}$$

direkte Integration und die Substitution $\xi = x - ct + 2c\tau$ bzw. $\tau = \frac{1}{2c}(\xi - x + ct)$ ergeben schließlich

$$\begin{aligned} u(x, t) &= u_0(x - ct) + \frac{1}{2} u_0(x - ct + 2ct) \Big|_{\tau=0}^t + \frac{1}{2c} \int_{x-ct}^{x+ct} v_0(\xi) \, d\xi \\ &= \frac{1}{2} (u_0(x + ct) + u_0(x - ct)) + \frac{1}{2c} \int_{x-ct}^{x+ct} v_0(\xi) \, d\xi. \end{aligned}$$

- (v) *Lösungsdarstellung.* Insgesamt zeigt dies die bekannte Lösungsdarstellung für die eindimensionale Wellengleichung (Nachprüfen durch Differentiation)

$$u(x, t) = \frac{1}{2} (u_0(x + ct) + u_0(x - ct)) + \frac{1}{2c} \int_{x-ct}^{x+ct} v_0(\xi) \, d\xi, \quad (x, t) \in \mathbb{R} \times [0, \infty).$$

4.5 Burgers-Gleichung

Methode der Charakteristiken. In speziellen Situationen ermöglicht die Methode der Charakteristiken es, eine Darstellung der Lösung $u : \mathbb{R}^d \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$ einer nichtlinearen Erhaltungsgleichung

$$\begin{cases} \partial_t u(x, t) = \partial_x f(u(x, t)) = f'(u(x, t)) \partial_x u(x, t), & (x, t) \in \mathbb{R}^d \times (0, T), \\ u(x, 0) = u_0(x), \end{cases}$$

zu bestimmen. Man ersetzt dazu die Ortsvariable durch eine zeitabhängige Funktion (Bildbereich von ξ ergibt Kurve im räumlichen Bereich, mit $x_0 \in \mathbb{R}$)

$$\xi : [0, T] \longrightarrow \mathbb{R}^d : t \longmapsto \xi(t), \quad \xi(0) = x_0,$$

und fordert, daß die durch die Lösungswerte definierte Funktion

$$v : [0, T] \longrightarrow \mathbb{R}^d : t \longmapsto v(t) = u(\xi(t), t)$$

konstant ist, d.h. es gelte (Kurve verbindet idente Funktionswerte der Lösung)

$$v'(t) = 0, \quad u(\xi(t), t) = v(t) = v(0) = u(x_0, 0) = u_0(x_0), \quad t \in [0, T].$$

Mittels Differentiation und Einsetzen der partiellen Differentialgleichung ergibt sich die Bedingung (wiederum $\partial_x = \partial_1$ etc.)

$$\begin{aligned} 0 = v'(t) &= \xi'(t) \partial_x u(\xi(t), t) + \partial_t u(\xi(t), t) = \left(\xi'(t) + f'(u(\xi(t), t)) \right) \partial_x u(\xi(t), t), \\ \xi'(t) &= -f'(u(\xi(t), t)) = -f'(u_0(x_0)). \end{aligned}$$

Insgesamt erhält man also folgendes Anfangswertproblem für ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen

$$\begin{cases} \xi'(t) = -f'(u_0(x_0)), & t \in (0, T), \\ \xi(0) = x_0, \end{cases}$$

mit bekannter Lösung

$$\xi(t) = x_0 - f'(u_0(x_0)) t, \quad t \in [0, T],$$

und damit die Lösungsdarstellung

$$u(x_0 - f'(u_0(x_0)) t, t) = u(\xi(t), t) = v(t) = v(0) = u(x_0, 0) = u_0(x_0), \quad t \in [0, T].$$

Advektionsgleichung. Im Fall der linearen Advektionsgleichung ist $f(v) = cv$ bzw. $f'(v) = c$ mit $c \in \mathbb{R}^d$; somit ergibt sich die zuvor angegebene Lösungsdarstellung sofort aus ($x = x_0 - ct$ bzw. $x_0 = x - ct$)

$$f'(v) = c: \quad u(x_0 - ct, t) = u_0(x_0), \quad u(x, t) = u_0(x + ct), \quad t \in [0, \infty).$$

Burgers-Gleichung. Setzt man speziell $f(v) = \frac{1}{2} v^2$ bzw. $f'(v) = v$ ergibt sich die Burgers-Gleichung für $u : \mathbb{R} \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R} : (x, t) \mapsto u(x, t)$

$$\begin{cases} \partial_t u(x, t) = u(x, t) \partial_x u(x, t), & (x, t) \in \mathbb{R} \times (0, T), \\ u(x, 0) = u_0(x), \end{cases}$$

mit der typischen Ausbildung von Stoßwellen (*shock*), auch für reguläre Anfangswerte. Die Methode der Charakteristiken führt in diesem Fall auf die Relation

$$f'(v) = v : \quad u(x_0 - u_0(x_0) t, t) = u_0(x_0), \quad t \in [0, T];$$

geeignetes Umformen ergibt die implizite Lösungsdarstellung (ersetze $x = x_0 - u_0(x_0) t$ bzw. $x_0 = x + u_0(x_0) t$, aus $u(x, t) = u_0(x_0)$ folgt $u(x, t) = u_0(x_0) = u_0(x + u_0(x_0) t) = u_0(x + u(x, t) t)$)

$$f'(v) = v : \quad u(x, t) = u_0(x + u(x, t) t), \quad t \in [0, T].$$

Bemerkung. Die für die homogene lineare Diffusionsgleichung und die freie Schrödinger-Gleichung angegebenen Lösungsdarstellungen lassen sich direkt auf die Wellengleichung in mehreren Raumdimensionen

$$\partial_{tt} u(x, t) = \Delta u(x, t), \quad (x, t) \in \Omega \times (0, \infty) \subset \mathbb{R}^d \times \mathbb{R},$$

übertragen.

Teil III

Parabolische Probleme und Schrödinger-Gleichungen

Kapitel 1

Parabolische Gleichungen (Diffusionsprozesse)

Inhalt. Mathematische Modelle zur Beschreibung von Diffusionsprozessen und Brown'schen Bewegungen¹ haben vielfältige Anwendungen. Diffusions-Advektions-Reaktions-Gleichungen² treten beispielsweise bei der Modellierung von

- Wärmeleitungsprozessen,
- Populationen,
- Musterbildungsprozessen und
- Finanzmärkten³

¹Die Bewegung von Teilchen (wie etwa Pollen) in Flüssigkeiten oder Gasen mit einer von der Temperatur abhängigen Intensität wird als Brown'sche Molekularbewegung bezeichnet; sie wurde vom Botaniker Robert Brown beobachtet.

²In vielen Fällen modelliert eine Diffusions-Advektions-Reaktions-Gleichung die Konzentration von Teilchen in einem umgebenden Fluid (Gas oder Flüssigkeit); die Teilchen diffundieren und werden durch die Bewegung des Fluids transportiert, zusätzlich treten chemische Reaktionen auf. Im Folgenden wird nicht näher zwischen den Begriffen Drift, Advektion und Transport unterschieden. Die Bezeichnung Diffusions-Advektions-Reaktions-Gleichungen ist insbesondere im Zusammenhang mit parabolischen Differentialgleichungen, deren Hauptteil durch einen elliptischen Differentialoperator zweiter Ordnung definiert ist, üblich; typischerweise umfaßt die Differentialgleichung einen linearen Diffusions- und Advektionsterm sowie einen zusätzlichen nichtlinearen Reaktionsterm

$$\partial_t u(x, t) = \nabla \cdot (D(x) \nabla u(x, t)) + \nabla \cdot (c(x) u(x, t)) + f(u(x, t));$$

allgemeiner können die auftretenden Koeffizienten auch von der Lösung abhängen.

³Bei geeigneter Transformation hat das Black-Scholes-Modell zur Beschreibung von Optionspreisen

$$\partial_t u(x, t) + c_1 x \partial_x u(x, t) + c_2 x^2 \partial_{xx} u(x, t) = c u(x, t)$$

die Form einer linearen Diffusionsgleichung.

auf. Zunächst werden diskrete zufällige Sprungprozesse (Random Walks) zur Herleitung von Diffusions-Advektions-Gleichungen und allgemeiner Fokker-Planck-Gleichungen betrachtet. Ein alternativer Zugang basiert auf kontinuierlichen Modellen, welche aus dem Prinzip der Energieerhaltung (erster Hauptsatz der Thermodynamik) und zusätzlichen Materialgesetzen folgen. Abschließend werden grundlegende Eigenschaften von Diffusions-Advektions-Reaktions-Gleichungen angegeben und insbesondere deren asymptotisches Verhalten untersucht.

Notationen. Im Folgenden wird $d\sigma$ als Symbol für Oberflächenintegrale verwendet, wobei ν die zugehörige äußere Einheitsnormale bezeichnet.

1.1 Zufällige Sprungprozesse (Random Walks)

Sprungprozesse und zugehörige Diffusions-Advektions-Gleichungen. Als erstes werden zufällige Sprungprozesse, welche auf lineare Diffusions-Advektions-Gleichungen mit konstanten Koeffizienten führen, untersucht.

- (i) *Random walks.* Im Folgenden wird ein spezieller zufälliger Sprungprozess in der Ebene als diskreter stochastischer Prozess modelliert. Dazu wird ein Gitter der Form

$$G = (\xi\mathbb{Z}) \times (\eta\mathbb{Z}) \subset \mathbb{R} \times \mathbb{R}$$

betrachtet; die Wahl der positiven reellen Zahlen $\xi, \eta \in \mathbb{R}_{>0}$ bestimmt die Gitterweite. Weiters wird vorausgesetzt, daß das Zeitinkrement $\tau > 0$ so klein gewählt ist, daß in jedem Zeitintervall $[t, t + \tau]$ mit $t \in [0, \infty)$ nur die umgebenden Gitterpunkte in Richtung der Koordinatenachsen erreicht werden können; genauer, es wird angenommen, daß sich, ausgehend von einem Gitterpunkt $(x, y) \in G$, die Wahrscheinlichkeiten für die Ereignisse *Sprung nach rechts*, *Sprung nach links*, *Sprung nach oben*, *Sprung nach unten*, *kein Sprung* zu Eins summieren. Aus der grundlegenden Annahme, daß der Sprungprozeß die Markov-Eigenschaft hat, folgt, daß Zustände im Zeitraum $[0, t)$ keinen Einfluß auf den Zustand zum Zeitpunkt $t + \tau$ haben. Eine wesentliche Vereinfachung des Modells ergibt sich aus der zusätzlichen Annahme, daß die Wahrscheinlichkeiten für Sprünge nicht von aktuellen Zuständen im Zeitintervall $[t, t + \tau)$ abhängen; zunächst wird außerdem der Einfluß des aktuellen Gitterpunktes außer Acht gelassen.

- (ii) *Grundlegende Relation für diskrete Wahrscheinlichkeiten.* Die obigen Annahmen führen auf folgende Wahrscheinlichkeiten für Sprünge, wobei

$$\alpha, \beta, \gamma, \delta \in [0, 1], \quad \alpha + \beta + \gamma + \delta \leq 1,$$

gelte.

- (i) Wahrscheinlichkeit des Ereignisses *Sprung nach rechts*

$$\text{Sprung von } (x, y) \text{ nach } (x + \xi, y) : \quad P((x, y, t) \rightarrow (x + \xi, y, t + \tau)) = \alpha.$$

- (ii) Wahrscheinlichkeit des Ereignisses *Sprung nach links*

$$\text{Sprung von } (x, y) \text{ nach } (x - \xi, y) : \quad P((x, y, t) \rightarrow (x - \xi, y, t + \tau)) = \beta.$$

- (iii) Wahrscheinlichkeit des Ereignisses *Sprung nach oben*

$$\text{Sprung von } (x, y) \text{ nach } (x, y + \eta) : \quad P((x, y, t) \rightarrow (x, y + \eta, t + \tau)) = \gamma.$$

- (iv) Wahrscheinlichkeit des Ereignisses *Sprung nach unten*

$$\text{Sprung von } (x, y) \text{ nach } (x, y - \eta) : \quad P((x, y, t) \rightarrow (x, y - \eta, t + \tau)) = \delta.$$

(v) Wahrscheinlichkeit des Ereignisses *Kein Sprung*

$$\text{Verbleiben in } (x, y): \quad P((x, y, t) \rightarrow (x, y, t + \tau)) = 1 - \alpha - \beta - \gamma - \delta.$$

Für die Wahrscheinlichkeit des Ereignisses *Aufenthalt im Gitterpunkt* $(x, y) \in G$ zum Zeitpunkt $t + \tau$, welche mit

$$p(x, y, t + \tau) = P(\text{Aufenthalt in } (x, y) \in G \text{ zum Zeitpunkt } t + \tau)$$

bezeichnet wird, erhält man somit die folgende Relation⁴

$$p(x, y, t + \tau) = \alpha p(x - \xi, y, t) + \beta p(x + \xi, y, t) + \gamma p(x, y - \eta, t) + \delta p(x, y + \eta, t) \\ + (1 - \alpha - \beta - \gamma - \delta) p(x, y, t).$$

(iii) *Vorüberlegungen.* Der Grenzübergang $(\xi, \eta, \tau) \rightarrow (0, 0, 0)$, entspricht dem Übergang von einem ebenen Gitter und diskreten Zeitpunkten auf die kontinuierlichen Bereiche

$$G \rightsquigarrow \mathbb{R}^2, \quad (n\tau)_{n=0}^{\infty} \rightsquigarrow [0, \infty),$$

sowie dem Übergang von einer Relation für die diskrete Wahrscheinlichkeit p auf eine Relation für die entsprechende Wahrscheinlichkeitsdichte. Taylorreihenentwicklungen zweiter Ordnung (wiederum mit Bezeichnungen $\partial_x = \partial_1$ etc.)

$$p(x + \xi, y, t) = p(x, y, t) + \xi \partial_x p(x, y, t) + \frac{1}{2} \xi^2 \partial_{xx} p(x, y, t) + \mathcal{O}(\xi^3), \\ p(x - \xi, y, t) = p(x, y, t) - \xi \partial_x p(x, y, t) + \frac{1}{2} \xi^2 \partial_{xx} p(x, y, t) + \mathcal{O}(\xi^3), \\ p(x, y + \eta, t) = p(x, y, t) + \eta \partial_y p(x, y, t) + \frac{1}{2} \eta^2 \partial_{yy} p(x, y, t) + \mathcal{O}(\eta^3), \\ p(x, y - \eta, t) = p(x, y, t) - \eta \partial_y p(x, y, t) + \frac{1}{2} \eta^2 \partial_{yy} p(x, y, t) + \mathcal{O}(\eta^3),$$

und die Linearisierung

$$p(x, y, t + \tau) = p(x, y, t) + \tau \partial_t p(x, y, t) + \mathcal{O}(\tau^2)$$

führen auf die Relationen

$$p(x, y, t + \tau) = \alpha p(x - \xi, y, t) + \beta p(x + \xi, y, t) + \gamma p(x, y - \eta, t) + \delta p(x, y + \eta, t) \\ + (1 - \alpha - \beta - \gamma - \delta) p(x, y, t),$$

$$p(x, y, t) + \tau \partial_t p(x, y, t) = \alpha p(x, y, t) - \alpha \xi \partial_x p(x, y, t) + \frac{1}{2} \alpha \xi^2 \partial_{xx} p(x, y, t) \\ + \beta p(x, y, t) + \beta \xi \partial_x p(x, y, t) + \frac{1}{2} \beta \xi^2 \partial_{xx} p(x, y, t) \\ + \gamma p(x, y, t) - \gamma \eta \partial_y p(x, y, t) + \frac{1}{2} \gamma \eta^2 \partial_{yy} p(x, y, t) \\ + \delta p(x, y, t) + \delta \eta \partial_y p(x, y, t) + \frac{1}{2} \delta \eta^2 \partial_{yy} p(x, y, t) \\ + (1 - \alpha - \beta - \gamma - \delta) p(x, y, t) + \mathcal{O}(\xi^3) + \mathcal{O}(\eta^3) + \mathcal{O}(\tau^2),$$

$$\partial_t p(x, y, t) = \frac{(\alpha + \beta) \xi^2}{2\tau} \partial_{xx} p(x, y, t) + \frac{(\gamma + \delta) \eta^2}{2\tau} \partial_{yy} p(x, y, t) \\ + \frac{(\beta - \alpha) \xi}{\tau} \partial_x p(x, y, t) + \frac{(\delta - \gamma) \eta}{\tau} \partial_y p(x, y, t) \\ + \mathcal{O}\left(\frac{\xi^3}{\tau}\right) + \mathcal{O}\left(\frac{\eta^3}{\tau}\right) + \mathcal{O}(\tau).$$

⁴Vorsicht! Fehler im Skriptum

- (iv) *Grenzübergang.* Wesentlich für einen wohldefinierten Grenzübergang ist, daß die folgenden Grenzwerte für $(\xi, \eta, \tau) \rightarrow (0, 0, 0)$ existieren

$$\frac{(\alpha+\beta)\xi^2}{2\tau} \rightarrow d_x \in \mathbb{R}_{\geq 0}, \quad \frac{(\gamma+\delta)\eta^2}{2\tau} \rightarrow d_y \in \mathbb{R}_{\geq 0}, \quad \frac{(\beta-\alpha)\xi}{\tau} \rightarrow c_x \in \mathbb{R}, \quad \frac{(\delta-\gamma)\eta}{\tau} \rightarrow c_y \in \mathbb{R},$$

und insbesondere die Restterme vernachlässigt werden können

$$\frac{\xi^3}{\tau} \rightarrow 0, \quad \frac{\eta^3}{\tau} \rightarrow 0.$$

Unter diesen Annahmen erhält man eine lineare Diffusions-Advektions-Gleichung mit konstanten Koeffizienten für eine Funktion $u : \mathbb{R}^2 \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ (Diffusionsterm mit $d_x, d_y \geq 0$, Driftterm mit $c_x, c_y \in \mathbb{R}$)

$$\partial_t u(x, y, t) = d_x \partial_{xx} u(x, y, t) + d_y \partial_{yy} u(x, y, t) + c_x \partial_x u(x, y, t) + c_y \partial_y u(x, y, t).$$

- (v) *Erweiterung auf beliebige Raumdimensionen.* Die bisherigen Überlegungen lassen sich direkt auf beliebige Raumdimensionen erweitern; die Einführung des Vektors $c \in \mathbb{R}^d$ und der Diagonalmatrix (Diffusionstensor)

$$D = \begin{pmatrix} D_{11} & & \\ & \ddots & \\ & & D_{dd} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{d \times d}$$

ermöglicht eine kompakte Formulierung einer linearen Diffusions-Advektions-Gleichung mit konstanten Koeffizienten für $u : \mathbb{R}^d \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R} : (x, t) \mapsto u(x, t)$

$$\begin{aligned} \partial_t u(x, t) &= \nabla \cdot (D \nabla u(x, t) + c u(x, t)), \\ \partial_t u(x, t) &= \begin{pmatrix} \partial_{x_1} \\ \vdots \\ \partial_{x_d} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} D_{11} \partial_{x_1} u(x, t) \\ \vdots \\ D_{dd} \partial_{x_d} u(x, t) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \partial_{x_1} \\ \vdots \\ \partial_{x_d} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_1 u(x, t) \\ \vdots \\ c_d u(x, t) \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

- (vi) *Homogene lineare Diffusionsgleichungen.* Falls Sprünge nach recht und links bzw. oben und unten gleich wahrscheinlich sind

$$\alpha = \beta, \quad \gamma = \delta,$$

fallen die Beiträge erster Ordnung weg ($c_x = 0 = c_y$), und die partielle Differentialgleichung vereinfacht sich zu

$$\partial_t u(x, y, t) = d_x \partial_{xx} u(x, y, t) + d_y \partial_{yy} u(x, y, t).$$

Im Fall beliebiger Raumdimensionen führt dies bei geeigneter Skalierung auf die homogene lineare Diffusionsgleichung (Wärmeleitungsgleichung) für $u : \mathbb{R}^d \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$

$$\partial_t u(x, t) = \Delta u(x, t).$$

- (vii) *Homogene lineare Advektionsgleichungen (Transportgleichungen).* In Situationen, wo der Diffusionsterm in Relation zum Driftterm vernachlässigt werden kann, vereinfacht sich die partielle Differentialgleichung zu einer homogenen linearen Advektionsgleichung (Transportgleichung) für $u : \mathbb{R}^d \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$

$$\partial_t u(x, t) = c \cdot \nabla u(x, t).$$

Eine alternative Herleitung der Transportgleichung mittels eines kontinuierlichen Modells ist unten angegeben.

Lineare Diffusions-Advektions- und Fokker-Planck-Gleichungen. Im allgemeineren Fall, wo die Sprungwahrscheinlichkeiten von den Gitterpunkten abhängen, und somit die entsprechenden Grenzwerte ortsabhängig sind, führen die obigen Überlegungen auf eine lineare partielle Differentialgleichung mit ortsabhängigen Koeffizienten. In Hinblick auf eine kompakte Angabe von linearen Diffusions-Advektions-Gleichungen ist es zweckmäßig, in Analogie zu vorhin, die folgende Formulierung mit Diffusionstensor $D : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^{d \times d}$ und $c : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ zu betrachten⁵

$$\partial_t u(x, t) = \nabla \cdot (D(x) \nabla u(x, t) + c(x) u(x, t)),$$

wobei $u : \mathbb{R}^d \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$; neben einem Diffusions- und Driftterm tritt zusätzlich der Beitrag $b u$ mit $b = \nabla \cdot c$ auf. Im Zusammenhang mit der Evolution einer Wahrscheinlichkeitsdichte bezeichnet man eine lineare partielle Differentialgleichung dieser Form, definiert durch einen elliptischen Differentialoperator zweiter Ordnung, als Fokker-Planck-Gleichung.

Diffusionstensor. Um die allgemeine Form einer Diffusions-Advektions-Gleichung, insbesondere das Auftreten gemischter Ableitungen beim führenden Term

$$\nabla \cdot (D(x) \nabla u(x, t))$$

zu illustrieren, wird eine naheliegende Verallgemeinerung des zufälligen Sprungprozesses in der Ebene betrachtet.

- (i) *Vorüberlegung.* Im Spezialfall von zwei Raumdimensionen führt die rechte Seite der partiellen Differentialgleichung

$$\partial_t u(x, t) = \nabla \cdot (D(x) \nabla u(x, t) + c(x) u(x, t))$$

⁵Die Wahl $D = 0$ schließt den Spezialfall einer Transportgleichung ein, im Gegensatz zu der im Skriptum gewählten Formulierung

$$\partial_t u(x, t) = \nabla \cdot (D(x) \nabla u(x, t) + D(x) c(x) u(x, t)),$$

wobei zusätzlich die Existenz einer Potentialfunktion $V : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ mit $c = \nabla V$ verwendet wird.

auf einen Differentialoperator zweiter Ordnung (zur Vereinfachung werden die Argumente nicht angegeben)

$$\begin{aligned}
& \begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \end{pmatrix} \cdot \left(\begin{pmatrix} D_{11} & D_{12} \\ D_{21} & D_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial_x u \\ \partial_y u \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} c_x u \\ c_y u \end{pmatrix} \right) \\
&= \begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \end{pmatrix} \cdot \left(D_{11} \partial_x u + D_{12} \partial_y u \right) + \begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_x u \\ c_y u \end{pmatrix} \\
&= \partial_x (D_{11} \partial_x u + D_{12} \partial_y u) + \partial_y (D_{21} \partial_x u + D_{22} \partial_y u) + \partial_x (c_x u) + \partial_y (c_y u) \\
&= D_{11} \partial_{xx} u + (D_{12} + D_{21}) \partial_{xy} u + D_{22} \partial_{yy} u \\
&\quad + (\partial_x D_{11} + \partial_y D_{21} + c_x) \partial_x u + (\partial_x D_{12} + \partial_y D_{22} + c_y) \partial_y u \\
&\quad + (\partial_x c_x + \partial_y c_y) u.
\end{aligned}$$

(ii) *Sprungprozesse und zugehörige Diffusions-Advektions-Gleichungen.* Im Folgenden wird ein zufälliger Sprungprozeß in der Ebene betrachtet, bei welchem Sprünge in alle Himmelsrichtungen als Ereignisse zugelassen sind. Mit den entsprechenden Wahrscheinlichkeiten

$$\alpha_{\text{Ost}}, \alpha_{\text{West}}, \alpha_{\text{Nord}}, \alpha_{\text{Süd}}, \alpha_{\text{Nord-Ost}}, \alpha_{\text{Süd-Ost}}, \alpha_{\text{Nord-West}}, \alpha_{\text{Süd-West}} \in [0, 1],$$

$$\alpha = \alpha_{\text{Ost}} + \alpha_{\text{West}} + \alpha_{\text{Nord}} + \alpha_{\text{Süd}} + \alpha_{\text{Nord-Ost}} + \alpha_{\text{Süd-Ost}} + \alpha_{\text{Nord-West}} + \alpha_{\text{Süd-West}} \leq 1,$$

ergibt sich die folgende Relation

$$\begin{aligned}
p(x, y, t + \tau) &= \alpha_{\text{Ost}} p(x - \xi, y, t) + \alpha_{\text{West}} p(x + \xi, y, t) \\
&\quad + \alpha_{\text{Nord}} p(x, y - \xi, t) + \alpha_{\text{Süd}} p(x, y + \xi, t) \\
&\quad + \alpha_{\text{Nord-Ost}} p(x - \xi, y - \xi, t) + \alpha_{\text{Süd-Ost}} p(x - \xi, y + \xi, t) \\
&\quad + \alpha_{\text{Nord-West}} p(x + \xi, y - \xi, t) + \alpha_{\text{Süd-West}} p(x + \xi, y + \xi, t) \\
&\quad + (1 - \alpha) p(x, y, t);
\end{aligned}$$

zur Vereinfachung wird (ohne wesentliche Einschränkung) $\eta = \xi$ gesetzt. Taylorreihenentwicklungen wie

$$\begin{aligned}
p(x, y, t + \tau) &= p(x, y, t) + \tau \partial_t p(x, y, t) + \mathcal{O}(\tau^2) \\
p(x \pm \xi, y, t) &= p(x, y, t) \pm \xi \partial_x p(x, y, t) + \frac{1}{2} \xi^2 \partial_{xx} p(x, y, t) + \mathcal{O}(\xi^3), \\
p(x, y \pm \xi, t) &= p(x, y, t) \pm \xi \partial_y p(x, y, t) + \frac{1}{2} \xi^2 \partial_{yy} p(x, y, t) + \mathcal{O}(\xi^3), \\
p(x \pm \xi, y \pm \xi, t) &= p(x, y, t) \pm \xi \partial_x p(x, y, t) \pm \xi \partial_y p(x, y, t) \\
&\quad + \frac{1}{2} \xi^2 \partial_{xx} p(x, y, t) + \xi^2 \partial_{xy} p(x, y, t) + \frac{1}{2} \xi^2 \partial_{yy} p(x, y, t) + \mathcal{O}(\xi^3),
\end{aligned}$$

führen somit auf

$$\begin{aligned}
\partial_t p(x, y, t) = & \frac{(\alpha_{\text{Ost}} + \alpha_{\text{West}} + \alpha_{\text{Nord-Ost}} + \alpha_{\text{Süd-Ost}} + \alpha_{\text{Nord-West}} + \alpha_{\text{Süd-West}})\xi^2}{2\tau} \partial_{xx} p(x, y, t) \\
& + \frac{(\alpha_{\text{Nord-Ost}} + \alpha_{\text{Süd-West}} - \alpha_{\text{Süd-Ost}} - \alpha_{\text{Nord-West}})\xi^2}{\tau} \partial_{xy} p(x, y, t) \\
& + \frac{(\alpha_{\text{Nord}} + \alpha_{\text{Süd}} + \alpha_{\text{Nord-Ost}} + \alpha_{\text{Süd-Ost}} + \alpha_{\text{Nord-West}} + \alpha_{\text{Süd-West}})\xi^2}{2\tau} \partial_{yy} p(x, y, t) \\
& + \frac{(\alpha_{\text{West}} + \alpha_{\text{Nord-West}} + \alpha_{\text{Süd-West}} - \alpha_{\text{Ost}} - \alpha_{\text{Nord-Ost}} - \alpha_{\text{Süd-Ost}})\xi}{\tau} \partial_x p(x, y, t) \\
& + \frac{(\alpha_{\text{Süd}} + \alpha_{\text{Süd-Ost}} + \alpha_{\text{Süd-West}} - \alpha_{\text{Nord}} - \alpha_{\text{Nord-Ost}} - \alpha_{\text{Nord-West}})\xi}{\tau} \partial_y p(x, y, t) \\
& + \mathcal{O}(\tau) + \mathcal{O}\left(\frac{\xi^3}{\tau}\right).
\end{aligned}$$

Unter der Annahme, daß für $(\tau, \xi) \rightarrow (0, 0)$ insbesondere die Grenzwerte

$$\begin{aligned}
\frac{(\alpha_{\text{Ost}} + \alpha_{\text{West}} + \alpha_{\text{Nord-Ost}} + \alpha_{\text{Süd-Ost}} + \alpha_{\text{Nord-West}} + \alpha_{\text{Süd-West}})\xi^2}{2\tau} & \rightarrow D_{11}, \\
\frac{(\alpha_{\text{Nord-Ost}} + \alpha_{\text{Süd-West}} - \alpha_{\text{Süd-Ost}} - \alpha_{\text{Nord-West}})\xi^2}{\tau} & \rightarrow D_{12} + D_{21}, \\
\frac{(\alpha_{\text{Nord}} + \alpha_{\text{Süd}} + \alpha_{\text{Nord-Ost}} + \alpha_{\text{Süd-Ost}} + \alpha_{\text{Nord-West}} + \alpha_{\text{Süd-West}})\xi^2}{2\tau} & \rightarrow D_{22},
\end{aligned}$$

existieren, erhält man somit die folgenden Beiträge

$$D_{11} \partial_{xx} u + (D_{12} + D_{21}) \partial_{xy} u + D_{22} \partial_{yy} u;$$

dies zeigt, daß beim Miteinbeziehen von zufälligen Sprüngen in Diagonalrichtung zusätzlich gemischte Ableitungen zweiter Ordnung auftreten. Für eine kompakte Angabe des Diffusionsterms ist deshalb die Einführung des Diffusionstensors zweckmäßig

$$\nabla \cdot (D \nabla u) = D_{11} \partial_{xx} u + (D_{12} + D_{21}) \partial_{xy} u + D_{22} \partial_{yy} u.$$

- (iii) *Diffusionstensor und Diagonalisierung.* Interessiert man sich speziell für das Lösungsverhalten einer Diffusionsgleichung der Form

$$\partial_t u(x, t) = \nabla \cdot (D \nabla u(x, t)),$$

ist die Bestimmung der Eigenwerte des Diffusionstensors und zugehöriger Eigenvektoren hilfreich; mittels einer geeigneten Transformation der Raumvariablen kann man die partielle Differentialgleichung dann in der einfacheren Form

$$\partial_t v(\xi, t) = \Delta v(\xi, t)$$

darstellen.

- (iv) *Erweiterung auf variable Koeffizienten.* Falls die Wahrscheinlichkeiten von den Gitterpunkten abhängen, gelten ähnliche Überlegungen.⁶

⁶Detaillierte Rechnungen werden im Rahmen des Proseminars durchgeführt.

Herleitung der homogenen linearen Transportgleichung. Im Folgenden wird die Transportgleichung aus dem Prinzip der Erhaltung der Masse hergeleitet. Beschreibt die Funktion $u : \mathbb{R}^d \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ die Konzentration von Teilchen (beispielsweise Pollen) in einem umgebenden Fluid (beispielsweise Luft), dessen Bewegung (beispielsweise aufgrund des Windes) durch $c \in \mathbb{R}^d$ gegeben ist, so gilt die Relation (gesamte in einem Gebiet $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ befindliche Stoffmenge bleibt für alle Zeiten erhalten, Integraltransformation $\xi = x - c\tau$ bzw. $x = \xi + c\tau$)

$$\int_{\Omega} u(x, t) \, dx = \int_{\{x+c\tau: x \in \Omega\}} u(x, t + \tau) \, dx = \int_{\Omega} u(x + c\tau, t + \tau) \, dx.$$

Unter geeigneten Regularitätsannahmen führt Differentiation bezüglich des Zeitinkrementes $\tau > 0$ auf (mit Bezeichnungen $\partial_x = \nabla = \partial_1$ und $\partial_t = \partial_2$)

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{d}{d\tau} \int_{\Omega} u(x + c\tau, t + \tau) \, dx \\ &= \int_{\Omega} \partial_{\tau} u(x + c\tau, t + \tau) \, dx \\ &= \int_{\Omega} c \cdot \nabla u(x + c\tau, t + \tau) + \partial_t u(x + c\tau, t + \tau) \, dx; \end{aligned}$$

da das Gebiet $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ beliebig gewählt werden kann, folgt daraus die homogene lineare Transportgleichung mit konstanten Koeffizienten für $u : \mathbb{R}^d \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ (ersetze $x + c\tau \leftrightarrow x$ und $t + \tau \leftrightarrow t$)

$$\partial_t u(x, t) = -c \cdot \nabla u(x, t).$$

Läßt man allgemeiner eine orts- und zeitabhängige Funktion $c : \mathbb{R}^d \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}^d$ zu, erhält man eine Transportgleichung der Form

$$\partial_t u(x, t) = -c(x, t) \cdot \nabla u(x, t).$$

1.2 Grundprinzipien der Thermodynamik

Thermodynamik und Kinetische Theorie. Historisch wurde die empirische Theorie der Thermodynamik (Wärmelehre) durch die Kinetische Theorie der Wärme, welche thermodynamische Phänomene durch wenige Grundannahmen erklärt, abgelöst. Im Speziellen werden im Rahmen der Kinetischen Gastheorie die beobachteten makroskopischen Eigenschaften eines Gases durch mikroskopische Bewegungen der Gasteilchen (Moleküle bzw. Atome) und deren Wechselwirkungen begründet.

Wärme, Kinetische Energie, Temperatur. Unter Wärme versteht man eine ungeordnete Bewegung von Teilchen; die damit verbundene Bewegungsenergie (kinetische Energie) bezeichnet man als thermische Energie oder Wärmeenergie. Die Temperatur gibt an, in welcher Richtung Wärmeenergie fließt. Zwei Systeme unterschiedlicher Temperaturen gleichen die Temperaturdifferenz durch Wärmeaustausch aus bis sich beide Systeme in einem thermischen Gleichgewicht befinden; dabei wird thermische Energie vom System höherer Temperatur an das System geringerer Temperatur abgegeben.

Ideale Gase. Das idealisierte Modell eines Gases basiert auf der Annahme, daß ein Gas aus einer großen Anzahl von identischen Teilchen, welche als Massenpunkte angesehen werden können, besteht und die Newton'schen Bewegungsgleichungen gültig sind; wesentliche Größen bei der Beschreibung eines einzelnen Teilchens sind somit Masse, Position, Impuls und Energie. Außerdem geht man davon aus, daß Gravitationseffekte vernachlässigt werden können, und aufgrund der Impulserhaltung, Stöße der Gasteilchen untereinander nicht miteinbezogen werden müssen.

Temperatur eines idealen Gases. Betrachtet wird ein ideales Gas in einem Behälter mit Volumen V [m³]; über elastische Stöße der Gasteilchen wird ein Druck⁷ p [kg m⁻¹ s⁻²] auf die Wand des Behälters ausgeübt. Besitzen die Gasteilchen die Masse m [kg] und die (gemittelte) Geschwindigkeit v [m s⁻¹], so ist die (gemittelte) kinetische Energie E [J = kg m² s⁻²] durch

$$E = \frac{1}{2} m v^2$$

gegeben; andererseits gilt bei drei Freiheitsgraden⁸ der Bewegung die folgende Relation für die Temperatur T [K]

$$E = \frac{3}{2} k T,$$

wobei $k = 1.38 \cdot 10^{-23}$ [J K⁻¹] die Boltzmann-Konstante bezeichnet. Die Zustandsgleichung eines idealen Gases stellt einen Zusammenhang zwischen dem Gasdruck p , dem Volumen V , der Anzahl N der Gasteilchen, und der Temperatur T her

$$p V = k N T;$$

⁷Druck (Kraft pro Fläche) $p = \frac{F}{A}$ [P = N m⁻²], [N = kg m s⁻²].

⁸Translation, Rotation, Schwingung

dies führt auf folgende Relation für die Temperatur eines idealen Gases (wegen $\frac{pV}{N} = kT = \frac{2}{3}E$ mit $E = \frac{1}{2}mv^2$)

$$kT = \frac{1}{3}mv^2.$$

Innere Energie und Enthalpie. Die in einem physikalischen System enthaltene Energie bezeichnet man als thermodynamische Energie (innere Energie); man zählt dazu die Bewegungsenergie der Teilchen des betrachteten Systems, die Energie der chemischen Bindungen der Teilchen und ähnliche Effekte. Die Enthalpie H setzt sich aus der thermischen Energie U und der Volumenarbeit (auch Volumenänderungsarbeit, d.h. jene Arbeit die zu leisten ist, um ein Volumen zu erreichen) W zusammen

$$H = U + W, \quad W = pV.$$

Erster Hauptsatz der Thermodynamik. Der erste Hauptsatz der Thermodynamik zum Grundprinzip der Energieerhaltung besagt, daß sich die thermische Energie U eines Systems nur durch den Transport von Energie in Form von Wärme Q über die Grenzen des Systems oder Arbeit W ändert

$$\Delta U = \Delta Q + \Delta W.$$

Entropie und zweiter Hauptsatz der Thermodynamik. Die Entropie S als Maß für Unordnung ist durch den Quotienten von übertragener Wärme und Temperatur definiert. Der zweite Hauptsatz der Thermodynamik besagt, daß bei einem reversiblen Prozess $\Delta S = 0$ und bei einem irreversiblen Prozess $\Delta S > 0$ gilt.

1.3 Kontinuierliche Modelle (Thermodynamik)

Energieerhaltung. Der erste Schritt bei der Herleitung von Diffusions-Advektions-Reaktions-Gleichungen ist es, eine partielle Differentialgleichung anzugeben, die den Energietransport in einem Gas beschreibt. Dazu wird, wie immer unter geeigneten Regularitätsvoraussetzungen, ein beschränktes Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ und eine der Energie entsprechende Funktion (Dichtefunktion) $\rho : \Omega \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}_{\geq 0}$ betrachtet

$$\int_{\Omega_0} \rho(x, t) \, dx, \quad \Omega_0 \subseteq \Omega, \quad t \in [0, \infty).$$

Mittels des ersten Hauptsatzes der Thermodynamik zum Grundprinzip der Energieerhaltung folgert man, daß die zeitliche Änderung der Energie gleich der zugeführten Wärmemenge durch den Wärmefluß über den Rand des betrachteten Teilbereiches Ω_0 , gegeben durch eine Funktion $q : \Omega \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}^3$, und zusätzliche Wärmequellen, gegeben durch eine Funktion $f : \Omega \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$, ist

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega_0} \rho(x, t) \, dx = \int_{\partial\Omega_0} q(x, t) \cdot \nu(x) \, d\sigma + \int_{\Omega_0} f(x, t) \, dx.$$

Die Anwendung des Satzes von Gauß⁹ ergibt die Identität

$$\int_{\Omega_0} \partial_t \rho(x, t) \, dx = \int_{\Omega_0} \operatorname{div} q(x, t) \, dx + \int_{\Omega_0} f(x, t) \, dx;$$

da das Teilgebiet Ω_0 beliebig gewählt werden kann, folgt daraus die folgende Relation für die unbekanntenen Funktionen $\rho : \Omega \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ und $q : \Omega \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}^3$ in Abhängigkeit von der vorgegebenen Funktion $f : \Omega \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$

$$\partial_t \rho(x, t) = \operatorname{div} q(x, t) + f(x, t).$$

⁹Unter geeigneten Voraussetzungen an den betrachteten Integrationsbereich $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ und den Integranden $F : \Omega \subset \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ gibt der Satz von Gauß (auch Satz von Gauß–Green, vgl. Satz von Stokes) einen Zusammenhang zwischen dem Volums- und Oberflächen-Integral an

$$\int_{\Omega} \operatorname{div} F(x) \, dx = \int_{\partial\Omega} F(x) \cdot \nu(x) \, d\sigma;$$

dabei bezeichnet $\nu : \partial\Omega \rightarrow \mathbb{R}^d$ die äußere Einheitsnormale. Im Spezialfall eines quaderförmigen Gebietes entspricht der Satz von Gauß dem Hauptsatz der Differential- und Integralrechnung; beispielsweise erhält man im zweidimensionalen Fall die Relation

$$\begin{aligned} \int_{a_x}^{b_x} \int_{a_y}^{b_y} (\partial_x F(x, y) + \partial_y F(x, y)) \, dy \, dx &= \int_{a_y}^{b_y} \left(\int_{a_x}^{b_x} \partial_x F(x, y) \, dx \right) dy + \int_{a_x}^{b_x} \left(\int_{a_y}^{b_y} \partial_y F(x, y) \, dy \right) dx \\ &= \int_{a_y}^{b_y} (F(b_x, y) - F(a_x, y)) \, dy + \int_{a_x}^{b_x} (F(x, b_y) - F(x, a_y)) \, dx \\ &= \int_{\partial\Omega} F(x, y) \cdot \nu(x, y) \, d\sigma. \end{aligned}$$

Materialgesetze. Um die gesuchten Funktionen $\rho : \Omega \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ und $q : \Omega \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}^3$ in Abhängigkeit von der vorgegebenen Funktion $f : \Omega \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ zu bestimmen, sind zusätzliche Materialgesetze (constitutive laws) erforderlich.

- In vielen Fällen ist es sinnvoll, eine Relation der Form

$$\rho(x, t) = c(x, u(x, t)) u(x, t)$$

anzunehmen, die einen Zusammenhang mit einer der Temperatur entsprechenden Funktion $u : \Omega \times [0, \infty) \subset \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ herstellt; die Funktion $c : \Omega \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ spiegelt dabei insbesondere die spezifische Wärmekapazität und die Dichte des Gases (bzw. Materials) wieder. Bei der Modellierung von Mischungen mehrerer Materialien mit unterschiedlichen Wärmekapazitäten und Dichten ist c ortsabhängig; bei Materialien, deren Wärmekapazitäten und Dichten von der Temperatur wesentlich beeinflusst sind, ist auch die Temperaturabhängigkeit zu beachten.

- Entsprechend dem Fouriersches Gesetz der Wärmeleitung¹⁰ gilt die Relation

$$q(x, t) = d(x, u(x, t), \nabla u(x, t)) \nabla u(x, t)$$

mit einer Funktion $d : \Omega \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$, welche insbesondere den Wärmeleitungskoeffizienten wiedergibt; dieser Zusammenhang zwischen Wärmefluß und Temperatur besagt, daß Wärme zum Ausgleich von Temperaturdifferenzen in Richtung des stärksten Temperaturgefälles, d.h. des Gradienten der Temperatur, fließt. Werden anisotrope Materialien modelliert, deren Eigenschaften richtungsabhängig sind, läßt man zudem eine Matrixwertige Funktion $D : \Omega \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^{3 \times 3}$ zu

$$q(x, t) = D(x, u(x, t), \nabla u(x, t)) \nabla u(x, t).$$

Wärmeleitungsgleichung. Insgesamt führen die obigen Überlegungen auf eine nichtlineare partielle Differentialgleichung für $u : \Omega \times [0, \infty) \subset \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ mit gegebener Inhomogenität $f : \Omega \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$

$$\partial_t \left(c(x, u(x, t)) u(x, t) \right) = \operatorname{div} \left(D(x, u(x, t), \nabla u(x, t)) \nabla u(x, t) \right) + f(x, t).$$

Im Spezialfall $c, D \in \mathbb{R}$ und bei geeigneter Skalierung vereinfacht sich die partielle Differentialgleichung zu einer inhomogenen linearen Diffusionsgleichung der Form

$$\partial_t u(x, t) = \Delta u(x, t) + f(x, t).$$

¹⁰Vgl. auch Fick'sches Gesetz und Ohm'sches Gesetz.

Randbedingungen. Für eine partielle Differentialgleichung ist die Vorgabe von gewissen Randbedingungen und einer Anfangsbedingung wesentlich. Im Zusammenhang mit Wärmeleitungsprozessen wird oft angenommen, daß Wärmefluß über den Rand des betrachteten Gebietes $\partial\Omega$ stattfindet und außerhalb eine gewisse Umgebungstemperatur u_* vorliegt. Man geht dabei von der Vorstellung aus, daß Wärmeübertragung mit der Umgebung durch Strömung stattfindet, d.h. Wärme wird durch Überströmen der Oberfläche $\partial\Omega$ und den dann erfolgenden Temperatúrausgleich übertragen

$$q(x, t) \cdot \nu(x) = -\tilde{c}(x, u(x, t)) (u(x, t) - u_*(x, t)), \quad (x, t) \in \partial\Omega \times [0, T].$$

der auftretende Wärmeübergangskoeffizient ist im allgemeinen Fall eine orts- und temperaturabhängige Funktion. Einsetzen einer Relation der Form $q = d \nabla u$ führt auf Robin'sche Randbedingungen (wegen $\partial_\nu u = \nabla u \cdot \nu$ und mit $c = d^{-1} \tilde{c}$)

$$\partial_\nu u(x, t) = -c(x, u(x, t), \nabla u(x, t)) (u(x, t) - u_*(x, t)), \quad (x, t) \in \partial\Omega \times [0, T].$$

Im Spezialfall, wo kein Austausch von Wärme mit der Umgebung stattfindet, ergeben sich homogene Neumann Randbedingungen ($c \approx 0$)

$$\partial_\nu u(x, t) = 0, \quad (x, t) \in \partial\Omega \times [0, T];$$

falls der Wärmeaustausch so stark ist, daß die Temperatur am Rand des Gebietes gleich der Umgebungstemperatur ist, verwendet man inhomogene Dirichlet Randbedingungen ($c \gg 1$)

$$u(x, t) = u_*(x, t), \quad (x, t) \in \partial\Omega \times [0, T].$$

1.4 Diffusions-Advektions-Reaktions-Gleichungen

Nichtlineare Diffusions-Advektions-Reaktions-Gleichungen. Nichtlineare Diffusions-Advektions-Reaktions-Gleichungen treten auch häufig bei der mathematischen Modellierung der Konzentration von Teilchen, welche in einem umgebenden Fluid transportiert werden und damit (chemisch) reagieren, auf; zusätzlich führt ein Diffusionsprozess zu einem Ausgleich der Konzentration. Dies schließt auch mathematische Modelle für Musterbildungsprozesse und die Entwicklung von Populationen oder die Ausbreitung von Krankheiten ein. Bekannte Beispiele sind:

- *Kolmogorov–Petrovsky–Piscounov-Gleichung (KPP-Gleichung) bzw. Fisher-Gleichung* für $u : \Omega \times (0, T) \subset \mathbb{R}^d \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ (wobei $d, r > 0$, meist $d = 1 = r$)

$$\partial_t u(x, t) = d \Delta u(x, t) + (r - u(x, t)) u(x, t).$$

- *Lotka–Volterra-Gleichungen (Räuber-Beute Modell)* für $(u, v) : \Omega \times (0, T) \subset \mathbb{R}^d \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^2$ (wobei $d_u, d_v, r_u, r_v > 0$)

$$\begin{cases} \partial_t u(x, t) = d_u \Delta u(x, t) + (v(x, t) - r_u) u(x, t), \\ \partial_t v(x, t) = d_v \Delta v(x, t) + (r_v - u(x, t)) v(x, t). \end{cases}$$

Vgl. Kompendium zu Numerische Verfahren für Differentialgleichungen.

- *Allen–Cahn-Gleichung bzw. Chafee–Infante-Gleichung bzw. bistabile Gleichung* für $u : \Omega \times (0, T) \subset \mathbb{R}^d \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ (wobei $d, r > 0$, meist $d = 1 = r$)

$$\partial_t u(x, t) = d \Delta u(x, t) + (r - u(x, t)) (r + u(x, t)) u(x, t).$$

- *Gray–Scott-Gleichungen* für $(u, v) : \Omega \times (0, T) \subset \mathbb{R}^d \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^2$ (wobei $d_u, d_v, c_u, c_v > 0$)

$$\begin{cases} \partial_t u(x, t) = d_u \Delta u(x, t) - u(x, t) (v(x, t))^2 + c_u (1 - u(x, t)), \\ \partial_t v(x, t) = d_v \Delta v(x, t) + u(x, t) (v(x, t))^2 - (c_u + c_v) v(x, t). \end{cases}$$

- *Kuramoto–Sivashinsky-Gleichung (1D)* für $v : \Omega \times (0, T) \subset \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$

$$\partial_t v(x, t) = -\partial_{xxxx} v(x, t) - \partial_{xx} v(x, t) - \frac{1}{2} (\partial_x v(x, t))^2.$$

Angabe der partiellen Differentialgleichung meist für $u = \partial_x v$

$$\partial_t u(x, t) = -\partial_{xxxx} u(x, t) - \partial_{xx} u(x, t) - u(x, t) \partial_x u(x, t).$$

- *Cahn–Hilliard-Gleichung* für $u : \Omega \times (0, T) \subset \mathbb{R}^d \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ (wobei $c, d > 0$)

$$\partial_t u(x, t) = -c \Delta^2 u(x, t) + d \Delta \left((u(x, t))^3 - u(x, t) \right).$$

Zusätzliche Angabe der partiellen Differentialgleichung für den eindimensionalen Fall

$$\partial_t u(x, t) = -c \partial_{xxxx} u(x, t) + d \left(3 (u(x, t))^2 - 1 \right) \partial_{xx} u(x, t) + 6 d u(x, t) (\partial_x u(x, t))^2.$$

1.5 Charakteristisches Lösungsverhalten

Lineare Diffusionsgleichung. Zur wesentlichen Vereinfachung der Überlegungen wird die homogene lineare Diffusionsgleichung mit spezieller Normierung und inhomogenen Dirichlet- bzw. Neumann-Randbedingungen auf einem beschränkten Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ betrachtet

$$\begin{cases} \partial_t u(x, t) = \Delta u(x, t), & (x, t) \in \Omega \times (0, T), \\ u(x, t) = g(x, t) \quad \text{bzw.} \quad \partial_\nu u(x, t) = -\frac{c}{2}(u(x, t) - g(x, t)), & (x, t) \in \partial\Omega \times (0, T), \\ u(x, 0) = u_0(x) \quad \text{gegeben;} \end{cases}$$

zunächst wird die Existenz einer klassischen Lösung $u : \bar{\Omega} \times [0, T] \subset \mathbb{R}^d \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ und somit insbesondere die Vorgabe einer regulären Anfangsbedingung angenommen.

Vorüberlegungen. Testen der Diffusionsgleichung mit der Lösung, d.h. Multiplikation der partiellen Differentialgleichung mit dem Lösungswert $u(x, t)$ und Integration bezüglich der Ortsvariablen $x \in \Omega$, führt auf die Identität

$$\int_{\Omega} u(x, t) \partial_t u(x, t) \, dx = \int_{\Omega} u(x, t) \Delta u(x, t) \, dx.$$

Unter geeigneten Regularitätsvoraussetzungen gilt einerseits

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} (u(x, t))^2 \, dx = \int_{\Omega} u(x, t) \partial_t u(x, t) \, dx.$$

Differentiation und Anwendung des Satzes von Gauß¹¹ führt andererseits auf (zur Vereinfachung der Notation werden die Argumente weggelassen, mit $F = u \nabla u$ und wegen $\partial_\nu u = \nabla u \cdot \nu$)

$$\begin{aligned} u \nabla u &= (u \partial_{x_1} u, \dots, u \partial_{x_d} u)^T, \\ \operatorname{div}(u \nabla u) &= \partial_{x_1} (u \partial_{x_1} u) + \dots + \partial_{x_d} (u \partial_{x_d} u) = (\partial_{x_1} u)^2 + \dots + (\partial_{x_d} u)^2 + u (\partial_{x_1 x_1} u + \dots + \partial_{x_d x_d} u), \\ \operatorname{div}(u \nabla u) &= \|\nabla u(x, t)\|_{\mathbb{R}^d}^2 + u \Delta u, \\ \int_{\Omega} (\|\nabla u\|_{\mathbb{R}^d}^2 + u \Delta u) \, dx &= \int_{\Omega} \operatorname{div}(u \nabla u) \, dx = \int_{\partial\Omega} u \nabla u \cdot \nu(x) \, d\sigma = \int_{\partial\Omega} u \partial_\nu u \, d\sigma, \\ \int_{\Omega} u \Delta u \, dx &= - \int_{\Omega} \|\nabla u\|_{\mathbb{R}^d}^2 \, dx + \int_{\partial\Omega} u \partial_\nu u \, d\sigma. \end{aligned}$$

Mit der Bezeichnung (wobei $V(t) \geq 0$)

$$V(t) = \|u(\cdot, t)\|_{L^2}^2 = \int_{\Omega} (u(x, t))^2 \, dx$$

¹¹Der Satz von Gauß lautet

$$\int_{\Omega} \operatorname{div} F(x) \, dx = \int_{\partial\Omega} F(x) \cdot \nu(x) \, d\sigma,$$

vgl. oben.

erhält man damit die Relation

$$\begin{aligned} V'(t) &= \frac{d}{dt} \int_{\Omega} (u(x, t))^2 dx = 2 \int_{\Omega} u(x, t) \partial_t u(x, t) dx = 2 \int_{\Omega} u(x, t) \Delta u(x, t) dx \\ &= -2 \int_{\Omega} \|\nabla u(x, t)\|_{\mathbb{R}^d}^2 dx + 2 \int_{\partial\Omega} u(x, t) \partial_\nu u(x, t) d\sigma. \end{aligned}$$

Insbesondere im Fall von homogenen Dirichlet-Randbedingungen kann man diese Relation weiter vereinfachen; ähnliche Überlegungen gelten für homogene Neumann-Randbedingungen.

Monotonieverhalten (Homogene Dirichlet-Randbedingungen). Bei Einsetzen der Dirichlet-Randbedingungen $u(x, t) = g(x, t)$ für $(x, t) \in \partial\Omega \times (0, T)$ erhält man

$$V'(t) = -2 \int_{\Omega} \|\nabla u(x, t)\|_{\mathbb{R}^d}^2 dx + 2 \int_{\partial\Omega} g(x, t) \partial_\nu u(x, t) d\sigma.$$

Sind insbesondere homogene Dirichlet-Randbedingungen $g = 0$ vorgegeben, vereinfacht sich diese Relation zu

$$V'(t) = -2 \int_{\Omega} \|\nabla u(x, t)\|_{\mathbb{R}^d}^2 dx.$$

Integration bezüglich der Zeitvariable für $0 \leq s < t \leq T$ führt somit auf

$$V(t) + 2 \int_{\Omega \times [s, t]} \|\nabla u(x, \tau)\|_{\mathbb{R}^d}^2 d(x, \tau) = V(s), \quad 0 \leq s < t \leq T,$$

was die Monotonie der Funktion V zeigt, im Fall einer bezüglich der Ortsvariablen nichtkonstanten Lösung mit $\nabla u \neq 0$ sogar deren strenge Monotonie

$$V(t) < V(s) = V(t) + 2 \int_{\Omega \times [t_0, T]} \|\nabla u(x, t)\|_{\mathbb{R}^d}^2 d(x, t), \quad 0 \leq s < t \leq T.$$

Exponentielles Abfallverhalten (Homogene Dirichlet-Randbedingungen). Betrachtet man nochmals den Spezialfall der Diffusionsgleichung mit homogenen Dirichlet-Randbedingungen, so ergibt sich mittels der Ungleichung von Poincaré–Friedrichs¹² zudem die Abschätzung (mit $C > 0$)

$$V'(t) = -2 \int_{\Omega} \|\nabla u(x, t)\|_{\mathbb{R}^d}^2 dx \leq -C V(t), \quad t \in [0, \infty).$$

¹²Resultat. Die Ungleichung von Poincaré–Friedrichs

$$\|v\|_{L^2(\Omega)} \leq C \|v\|_{H_0^1(\Omega)}, \quad v \in H_0^1(\Omega),$$

gilt für jedes reguläre und beschränkte Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^d$. Die Konstante $C > 0$ hängt vom betrachteten Gebiet ab und kann insbesondere durch die Seitenlänge eines Würfels, welcher das betrachtete Gebiet umfaßt, abgeschätzt werden.

Beweis. Da der Raum der beliebig oft stetig differenzierbaren Funktionen, welche nur auf einer kompakten Teilmenge von Ω von Null verschiedene Werte annehmen, im Sobolevraum dicht ist

$$\mathcal{C}_0^\infty(\Omega) \stackrel{d}{\subset} H_0^1(\Omega),$$

Dies zeigt das exponentielle Abfallverhalten der L^2 -Norm der Lösung gegen Null

$$\begin{aligned} V(t) &\leq e^{-Ct} V(0), \quad t \in [0, \infty), \\ \|u(\cdot, t)\|_{L^2} &\leq e^{-Ct} \|u_0\|_{L^2}, \quad t \in [0, \infty). \end{aligned}$$

Bemerkung. Auf dem Fourier-Spektralverfahren basierende Überlegungen zu linearen Diffusionsgleichungen zeigten (für $\Omega = (a, b) \subset \mathbb{R}$ folgt $\lambda_m = -\frac{4\pi^2 m^2}{(b-a)^2} \leq 0$ und somit $e^{\lambda_m t} \leq 1$ für $m \in \mathbb{Z}$ und $t \in [0, \infty)$)

$$\|u(\cdot, t)\|_{L^2}^2 = \sum_{m \in \mathbb{Z}} |(u_0 | \mathcal{B}_m)_{L^2}|^2 e^{2\lambda_m t} \leq \sum_{m \in \mathbb{Z}} |(u_0 | \mathcal{B}_m)_{L^2}|^2 = \|u_0\|_{L^2}^2, \quad t \in [0, \infty).$$

Sind homogene Dirichlet-Randbedingungen vorausgesetzt, tritt die Fourier-Basisfunktion zum Eigenwert λ_0 nicht auf; in Übereinstimmung mit den obigen Überlegungen folgt in diesem Fall die Abschätzung (wobei $\lambda_m \leq \lambda_1 = -\frac{4\pi^2}{(b-a)^2}$)

$$\|u(\cdot, t)\|_{L^2} \leq e^{\lambda_1 t} \|u_0\|_{L^2}, \quad t \in [0, \infty).$$

reicht es aus, eine reguläre Funktion $v \in \mathcal{C}_0^\infty(\Omega)$ zu betrachten. Zur Vereinfachung wird nur der eindimensionale Fall $\Omega = (a, b) \subset \mathbb{R}$ bewiesen. Da insbesondere $v(a) = 0$ gilt, folgt mittels der Ungleichung von Cauchy die Behauptung aus folgenden Überlegungen für $x \in [a, b]$

$$\begin{aligned} v(x) &= v(a) + \int_a^x v'(\xi) \, d\xi = \int_a^x v'(\xi) \, d\xi, \\ \int_a^x v'(\xi) \, d\xi &= \int_a^x 1 \cdot v'(\xi) \, d\xi \leq \sqrt{\int_a^x 1^2 \, d\xi} \sqrt{\int_a^x (v'(\xi))^2 \, d\xi} \leq \sqrt{b-a} \sqrt{\int_a^b (v'(\xi))^2 \, d\xi}, \\ (v(x))^2 &= \left(\int_a^x v'(\xi) \, d\xi \right)^2 \leq (b-a) \int_a^b (v'(\xi))^2 \, d\xi, \\ \int_a^b (v(x))^2 \, dx &\leq (b-a)^2 \int_a^b (v'(\xi))^2 \, d\xi. \end{aligned}$$

Vgl. auch [HTTP://WWW.IANS.UNI-STUTT.GART.DE/SIMTECH/HARBRECHT/TEACHING/NPDE2/SKRIPT.PDF](http://www.ians.uni-stuttgart.de/SIMTECH/HARBRECHT/TEACHING/NPDE2/SKRIPT.PDF) sowie [HTTP://WWW.MATH.UNI-HAMBURG.DE/HOME/LAUTERBACH/SCRIPTS/PDE1213/CH2.PDF](http://www.math.uni-hamburg.de/home/lauterbach/scripts/pde1213/ch2.pdf).

Kapitel 2

Schrödinger-Gleichungen (Quantenphysikalische Phänomene)

Inhalt. Zusätzliche Informationen zu den Themen

- Systeme gekoppelter Gross-Pitaevskii-Gleichungen (Bose-Einstein Kondensation)
- Multi-configuration-Hartree-Fock-Gleichungen (Elektronenstruktur von Molekülen)

sind im Skriptum *Time-Splitting Spectral Methods for Nonlinear Schrödinger Equations* und Vorträgen, verfügbar unter <http://techmath.uibk.ac.at/mecht/>, angegeben.

Literatur

WOLFGANG ARENDT, KARSTEN URBAN

Partielle Differenzialgleichungen – Eine Einführung in analytische und numerische Methoden
Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg, 2010

MARTIN BURGER

Mathematische Modellierung (Skriptum, Wintersemester 2006/2007 bzw. 2012/2013)

http://wwwmath.uni-muenster.de/num/Vorlesungen/Modellierung_06/skript.pdf

http://wwwmath.uni-muenster.de/num/Vorlesungen/Modellierung_WS12/skript.pdf

LAWRENCE EVANS

Partial Differential Equations

Graduate Studies in Mathematics, Volume 19, Second edition, American Mathematical Society, 2010

ERNST HAIRER, CHRISTIAN LUBICH, GERHARD WANNER

Geometric Numerical Integration – Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations

Springer Series in Computational Mathematics, Volume 31, 2006

CHRISTIAN LUBICH

From Quantum to Classical Molecular Dynamics: Reduced Models and Numerical Analysis

Zurich Lectures in Advanced Mathematics, European Mathematical Society, 2008

ALESSANDRA LUNARDI

Analytic Semigroups and Optimal Regularity in Parabolic Problems

Birkhäuser, Basel, 1995

GERALD TESCHL

Ordinary Differential Equations and Dynamical Systems

Graduate Studies in Mathematics, Volume 140, American Mathematical Society, 2012

http://www4.ncsu.edu/~schecter/ma_732_sp13/teschl_ode.pdf

NICK TREFETHEN, KRISTINE EMBREE

The (Unfinished) PDE Coffee Table Book

<http://people.maths.ox.ac.uk/trefethen/pdectb.html>

Weitere Quellen.

Wikipedia

<https://www.wikipedia.org>, <http://de.wikipedia.org>

Skriptum *Time-Splitting Spectral Methods for Nonlinear Schrödinger Equations* (Sommersemester 2011)

Kompendium *Numerische Verfahren für Differentialgleichungen I: Strukturerhaltende Algorithmen für gewöhnliche Differentialgleichungen* (Wintersemester 2012/13)