G-CSC Goethe-Center for Scientific Computing der Universität Frankfurt

1. Übung zur Vorlesung
Modellierung und Simulation 3
(WS 2013/14)
Prof. Dr. G. Queisser
Markus Breit, Martin Stepniewski

Abgabe: Dienstag, 29.10.2013, 10:00 Uhr

Mathematische Grundlagen

Definition 1. *Mit*

$$f,\, g\colon \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$$

$$\boldsymbol{F},\, \boldsymbol{G}\colon \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}^3$$

seien jeweils zwei differenzierbare ***Skalarfelder*** *bzw.* ***Vektorfelder*** *gegeben. Wir bezeichnen die Menge der Skalarfelder mit $\mathcal{S}$ und die Menge der Vektorfelder mit $\mathcal{V}$. Dann gelten für die Differentialoperatoren* ***Gradient****,* ***Divergenz*** *und* ***Rotation*** *(exakte Definitionsbereiche sträflich vernachlässigend) die folgenden Definitionen:*

$$\nabla\colon \mathcal{S} \to \mathcal{V}, \qquad \nabla f := \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} f = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x} \\ \frac{\partial f}{\partial y} \\ \frac{\partial f}{\partial z} \end{pmatrix} \in \mathcal{V} \tag{1}$$

$$\begin{aligned} \operatorname{div}\colon \mathcal{V} \to \mathcal{S}, \qquad \operatorname{div} \boldsymbol{F} &:= \langle \nabla, \boldsymbol{F} \rangle = \langle \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \boldsymbol{F}_x \\ \boldsymbol{F}_y \\ \boldsymbol{F}_z \end{pmatrix} \rangle \\ &= (\frac{\partial}{\partial x}\boldsymbol{F}_x + \frac{\partial}{\partial y}\boldsymbol{F}_y + \frac{\partial}{\partial z}\boldsymbol{F}_z) \in \mathcal{S} \end{aligned} \tag{2}$$

$$\operatorname{rot}\colon \mathcal{V} \to \mathcal{V}, \qquad \operatorname{rot} \boldsymbol{F} := \nabla \times \boldsymbol{F} = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \boldsymbol{F}_x \\ \boldsymbol{F}_y \\ \boldsymbol{F}_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \boldsymbol{F}_z}{\partial y} - \frac{\partial \boldsymbol{F}_y}{\partial z} \\ \frac{\partial \boldsymbol{F}_x}{\partial z} - \frac{\partial \boldsymbol{F}_z}{\partial x} \\ \frac{\partial \boldsymbol{F}_y}{\partial x} - \frac{\partial \boldsymbol{F}_x}{\partial y} \end{pmatrix} \in \mathcal{V} \tag{3}$$

Aufgrund der Konventionen in den Lehrbüchern wird im Folgenden statt $\langle \nabla, \boldsymbol{F} \rangle$ die Schreibweise $\nabla \cdot \boldsymbol{F}$ für das Skalarprodukt verwendet. Demnach gilt:

$$\vec{x} \cdot \vec{y} := \langle \vec{x}, \vec{y} \rangle = x_1 y_1 + x_2 y_2 + x_3 y_3, \ \textit{für } \vec{x},\, \vec{y} \in \mathbb{R}^3$$

Definition 2. *Ein Vektorfeld $\boldsymbol{F} := \nabla f$, welches als Gradient eines zweimal stetig differenzierbaren Skalarfeldes f ausgedrückt werden kann, wird als* ***Gradientenfeld*** *oder* ***Potentialfeld*** *bezeichnet. Ein Vektorfeld $\boldsymbol{F} := \operatorname{rot} \boldsymbol{G}$, welches als Rotation eines zweimal stetig differenzierbaren Vektorfeldes $\boldsymbol{G}$ ausgedrückt werden kann, heißt auch* ***Wirbelfeld****.*

Satz 1. ***(Gaußscher Integralsatz)***
Unter geeigneten Voraussetzungen gilt für ein stetig differenzierbares Vektorfeld $\boldsymbol{F}$*, ein Volumen* $V \subset \mathbb{R}^3$ *und dessen umschließenden Rand* S*:*

$$\int_V \mathrm{div}\,\boldsymbol{F}\; dV = \int_S F \cdot \vec{n}\; dS$$

Dabei bezeichnet $\vec{n}$ *den Normalenvektor, der senkrecht auf dem Rand steht und nach außen zeigt.*

Genauere Voraussetzungen:
Sei $V \in \mathbb{R}^3$ *eine beschränkte und offene Menge mit stückweise glattem Rand* $S = \partial V$ *(d.h.* S *setze sich aus endlich vielen glatten Flächenstücken zusammen). Der Rand sei orientiert durch ein äußeres Normaleneinheitsfeld* $\vec{n}$*, d.h. auf allen Flächenstücken existiert ein senkrecht stehender Normalenvektor* $\vec{n}$*, der nach außen weg vom umschlossenen Bereich zeigt. Ferner sei das Vektorfeld* $\boldsymbol{F}$ *stetig auf dem Abschluss* $\overline{V}$ *und stetig differenzierbar auf* V*.*

Satz 2. ***(Hauptsatz der Differential- und Integralrechnung)***
Sei $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ *eine auf dem Intervall* $[a, b]$ *integrierbare und in allen Punkten* $c \in (a, b)$ *stetige Funktion. Dann ist die Funktion*

$$F(x) := \int_a^x f(t)dt$$

in allen Punkten $c \in (a, b)$ *differenzierbar und es gilt:*

$$F'(c) = f(c)$$

Ferner gilt die ***Newton-Leibniz-Formel:***

$$\int_a^b f(t)dt = F(b) - F(a)$$

Definition 3. ***(Lineare Abbildung)***
Eine Abbildung $f\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ $(n, m \in \mathbb{N})$ *heißt* ***linear****, wenn für alle Konstanten* $c \in \mathbb{R}$ *und alle Vektoren* $x, y \in \mathbb{R}^n$ *gilt:*

- f *ist* ***homogen****, d.h.* $f(cx) = cf(x)$
- f *ist* ***additiv****, d.h.* $f(x + y) = f(x) + f(y)$

Aufgaben

Aufgabe 1.1 (2+2 Punkte)
(i) Zeigen Sie: Die beiden Differentialoperatoren ∇ und div sind *linear*, d.h. für alle Konstanten $c \in \mathbb{R}$, Skalarfelder $f, g \in \mathcal{S}$ und Vektorfelder $F, G \in \mathcal{V}$ gilt:

1. *Homogenität*:
   (A.1) $\nabla(cf) = c\,\nabla f$ (B.1) $\mathrm{div}(c\,\mathbf{F}) = c\ \mathrm{div}\,\mathbf{F}$

2. *Additivität*
   (A.2) $\nabla(f+g) = \nabla f + \nabla g$ (B.2) $\mathrm{div}(\mathbf{F}+\mathbf{G}) = \mathrm{div}\,\mathbf{F} + \mathrm{div}\,\mathbf{G}$

(ii) Weisen Sie jeweils für ∇ und div die *Produktregel* nach:

$$\nabla(f \cdot g) = f\nabla g + g\nabla f \tag{A.3}$$

$$\mathrm{div}(f \cdot \mathbf{F}) = \langle \nabla f, \mathbf{F} \rangle + f\,(\mathrm{div}\,\mathbf{F}) \tag{B.3}$$

(für alle diferenzierbaren Skalarfelder $f, g \in \mathcal{S}$ und Vektorfelder $F \in \mathcal{V}$)

Hinweis: Achten Sie dabei auf die strikte Anwendung der Rechenregeln für Vektoren und die obigen Definitionen für die Operatoren.

Aufgabe 1.2 (1+1 Punkte)
Beweisen Sie (für jeweils ausreichend reguläre f und $\mathbf{G}$):

1. Potentialfelder sind *rotationsfrei*, d.h.
   $\mathsf{rot}\,(\nabla f) = 0$

2. Wirbelfelder sind *divergenzfrei*, d.h.
   $\mathsf{div}\,(\mathsf{rot}\,\mathbf{G}) = 0$

Aufgabe 1.3 (1+2 Punkte) (*Der Gaußsche Integralsatz*)
(i) Zeigen Sie: Die Anwendung des Gaußschen Integralsatzes auf die Ableitung einer reellen Funktion $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ auf dem Intervall $[a, b]$ führt auf die *Newton-Leibniz-Formel* zur Berechnung von bestimmten Integralen aus dem *Hauptsatz der Differential- und Integralrechnung.* (An dieser Stelle erkennt man, dass im Mehrdimensionalen das Vektorfeld $\mathbf{F}$ als Stammfunktion von $\mathrm{div}\,\mathbf{F}$ fungiert.)

(ii) Weisen Sie nach, dass sich mit Hilfe des Gaußschen Integralsatzes eine Formel zur *Partiellen Integration* im Mehrdimensionalen ableiten lässt, d.h. es gilt:

$$\int_\Omega f\ div\ \mathbf{G}\ dV = \int_{\partial\Omega} f(\mathbf{G} \cdot \vec{n})\ dS\ -\ \int_\Omega (\mathbf{G} \cdot \nabla f)\ dV$$

Tipp: Benutzen Sie hierfür die Produktregel aus Aufgabe 1.1.

Aufgabe 1.4 (1+2 Punkte) (*Physikalische Interpretation des Differentialoperators* div)
Die Divergenz div wird auch als *Quellen- bzw. Senkenstärke* bezeichnet. Je nach Wert der Divergenz eines differenzierbaren Vektorfeldes $\mathbf{F}$ in einem Punkt $\vec{x}$ handelt es sich bei $\vec{x}$ um eine *Senke* ($\mathsf{div}\ \mathbf{F}(\vec{x}) < 0$) oder eine *Quelle* ($\mathsf{div}\ \mathbf{F}(\vec{x}) > 0$). Falls $\mathsf{div}\ \mathbf{F}(\vec{x}) = 0$, so ist $\mathbf{F}$ in $\vec{x}$ *quellenfrei.*

(i) Erläutern Sie vor diesem Hintergrund, wie der **Zusammenhang zwischen Volumen und Oberflächen-Integral**, der durch den *Gaußschen Integralsatz* beschrieben wird, physikalisch zu deuten ist.

(ii) Gegeben sei das zweidimensionale Vektorfeld

$$\mathbf{F}(x, y) := \begin{pmatrix} \cos x \\ \cos y \end{pmatrix}$$

Bestimmen Sie mit Hilfe der Divergenz von $\mathbf{F}$ jeweils eine Quelle, Senke und quellenfreie Stelle von $\mathbf{F}$. Zeigen Sie ferner exemplarisch, dass die Divergenz von $\mathbf{F}$ den *Gaußschen Integralsatz* auf der Quadratfläche $[-\pi, \pi] \times [-\pi, \pi]$ erfüllt.

Aufgabe 1.5 (2+2 Punkte) (*Die Diffusionsgleichung*)
Betrachten Sie die orts- und zeitabhängige Konzentration $c(x, y, z, t)$ eines beliebigen Stoffes in einem beschränkten und abgeschlossenen Volumen $V \subset \mathbb{R}^3$. Nehmen Sie an, dass es in V keine zusätzlichen Quellen und Senken dieses Stoffes gibt.

Aus der *Massenerhaltung* folgt, dass die zeitliche Änderung der Konzentration c nur von der Flussdichte $\vec{j}(x, y, z, t)$ am Rand abhängt, genauer gilt:

$$\int_V \frac{\partial c}{\partial t} dV = -\int_{\partial V} \vec{j} \cdot \vec{n}\ dS$$

Das *1. Ficksche Gesetz* stellt nun folgende Beziehung zwischen Konzentration c und Flussdichte $\vec{j}$ her: Die Flussdichte $\vec{j}$ hängt proportional vom Konzentrationsgradienten $\nabla c(x, y, z, t)$ ab, d.h. es gilt:

$$\vec{j}(x, y, z, t) = -D\nabla c(x, y, z, t)$$

mit einer Proportionalitätskonstanten $D \in \mathbb{R}^{3\times 3}$.

(i) Nehmen Sie nun an, dass $D \in \mathbb{R}$. Leiten Sie mit diesen Informationen die Ihnen aus der Vorlesung bekannte *Diffusionsgleichung* (auch *Wärmeleitungsgleichung* genannt) her, die den Zusammenhang zwischen zeitlicher und örtlicher Entwicklung der Konzentration $c(\vec{x}, t)$ beschreibt:

$$\frac{\partial}{\partial t} c(\vec{x}, t) = D \, \Delta c(\vec{x}, t)$$

mit dem *Laplace-Operator* $\Delta := \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$.

(ii) Gegeben sei die Anfangskonzentration eines Stoffes zum Zeitpunkt $t_0 = 0$:

$$c(x, t_0 = 0) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}x^2}$$

Geben Sie zunächst exemplarisch jeweils einen Punkt an, in dem die Konzentration im weiteren Verlauf der Zeit ansteigen bzw. abnehmen wird. Bestimmen Sie sodann das gesamte Ortsintervall, in dem die Konzentration im weiteren Verlauf der Zeit abnehmen wird.

Hinweis:
Bitte bearbeiten Sie die Aufgaben schriftlich und begründen Sie immer verständlich und genau unter Zuhilfenahme Ihnen bekannter Regeln und Definitionen Ihre Ausführungen. Die Abgabe für dieses Übungsblatt ist am Dienstag, 29. Okt. 2013, vor Beginn der Übung um 10.00 Uhr. In der Übung werden die Lösungen zu den Aufgaben besprochen. Es können also direkt Fragen dazu gestellt werden.