



Seminar „Mathematische Modelle in den Natur- und Ingenieurwissenschaften“

Prof. Dr. Willy Dörfler
JProf. Dr. Tobias Jahnke

Institut für Angewandte und Numerische Mathematik

14. Februar 2008



Formales

- ▶ Ort und Zeit: Dienstags um 14:00 Uhr, S11
- ▶ Zielgruppe:
 - ▶ Studierende im Hauptstudium
 - ▶ Studierende des Lehramts
- ▶ Einzelarbeit



Das sollen Sie lernen

- ▶ Einige mathematische Modelle
- ▶ Umgang mit wissenschaftlichen Texten
- ▶ Halten eines (wissenschaftlichen) Vortrags
- ▶ Mathematik erklären



Das sollten Sie mitbringen

- ▶ Interesse an mathematischer Modellierung
- ▶ Kenntnisse aus Analysis III
- ▶ Interesse an Physik oder Chemie
- ▶ Kein Angst vor komplizierten Formeln



Was wir von Ihnen erwarten

- ▶ Einarbeitung (min 4 Wochen)
- ▶ Vortrag (60 Minuten)
 - ▶ Tafel
 - ▶ Beamer
- ▶ Diskussion der Vorträge
- ▶ Ausarbeitung (5 Seiten)



Das können Sie mitnehmen

- ▶ Vortragserfahrung
- ▶ Information über aktuelle Forschungsgebiete
- ▶ Kontakt zu Mitarbeitern unseres Instituts
(Examensarbeit, Diplomarbeit)
- ▶ Seminarschein



Themengebiet 1: Optische Eigenschaften photonischer Kristalle

Betreuer:
Markus Richter

Die Maxwell-Gleichungen

Und Gott sprach...

$$\nabla \times H = \frac{\partial D}{\partial t} + J,$$

$$\nabla \times E = -\frac{\partial B}{\partial t},$$

$$\nabla \cdot B = 0,$$

$$\nabla \cdot D = \rho$$

... und es wurde Licht.

Vortrag 1.1

Die Maxwell-Gleichungen

- ▶ Wie interpretiert man die einzelnen Größen?
- ▶ Was beschreiben die einzelnen Gleichungen?
- ▶ Was sind die zugrunde liegenden physikalischen Phänomene?
- ▶ Was sind die zugrunde liegenden mathematischen Sätze?
- ▶ Welche Wechselwirkungen bestehen zwischen Licht und Materie?



Vortrag 1.2

Weiterer Vortrag über die Maxwell-Gleichungen

- ▶ Inhalte werden noch bekannt gegeben...



Vortrag 1.3

Vereinfachungen und Anwendungen

- ▶ Was sind zeitharmonische Wellen?
- ▶ Wie gelangt man zu Eigenwertproblemen?
- ▶ Was sind Moden?
- ▶ Kann Licht durch eine Rohrleitung „fließen“?

Vortrag 1.4

Die schwache Formulierung

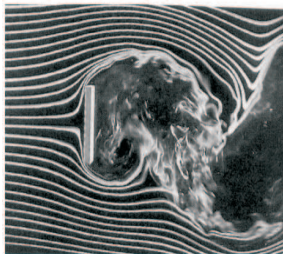
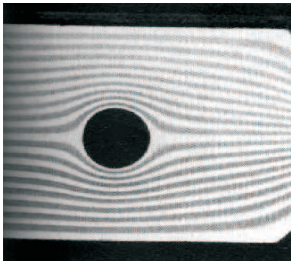
- ▶ Was sind schwache Formulierungen?
- ▶ Warum benötigt man eine schwache Formulierung bei photonischen Kristallen?
- ▶ Was ist der Raum $H(\text{curl})$?
- ▶ Welches Eigenwertproblem beschreibt einen photonischen Kristall?



Themengebiet 2: Faser- und Partikelsedimentation

Betreuer:

Markus Feist
Florian Keller



Navier–Stokes Gleichungen

Newton'sches und inkompressibles Fluid:

$$\begin{aligned}\rho_f \left(\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) + u(x, t) \cdot \nabla u(x, t) \right) \\ = -\nabla p(x) + \mu_f \Delta u(x, t) + \rho_f g \\ \nabla \cdot u(x, t) = 0\end{aligned}$$

für alle $(x, t) \in \mathbb{R}^3 \setminus B(t) \times \mathbb{R}^+$

$g = (g_{x_1}, g_{x_2}, g_{x_3})^T$ Erdbeschleunigung

$x = (x_1, x_2, x_3)$ Ortsvektor

t Zeitvariable



Vortrag 2.1

Herleitung der Navier–Stokes Gleichungen

- ▶ Welche Vereinfachungen werden gemacht?
- ▶ Welche Auswirkungen haben diese Vereinfachungen?
- ▶ Beispiele Erklärungen?
- ▶ Koordinatentransformation mit den Navier-Stokes Gleichungen?



Vortrag 2.2

Weiterer Vortrag über die Navier–Stokes Gleichungen

- ▶ Inhalte werden noch bekannt gegeben...

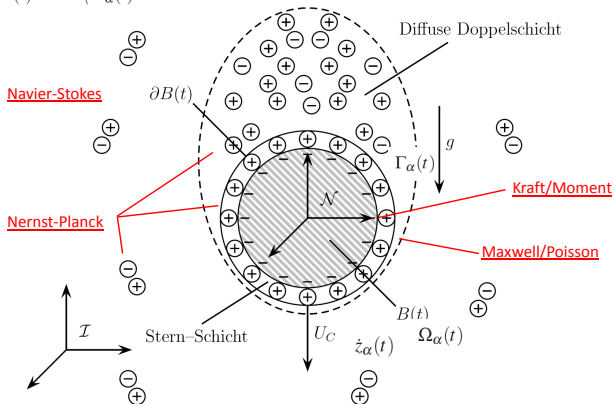
Vortrag 2.3

Weitere Strömungsformen

- ▶ Entdimensionierung der Navier–Stokes Gleichungen?
- ▶ Langsame Umströmung einer Kugel?
- ▶ Umströmung eines schlanken Körpers?
- ▶ Turbulente Strömungen?

Sedimentation eines geladenen Partikels in einem Elektrolyt

$$\Omega^F(t) := \mathbb{R}^3 \setminus \Omega_\alpha(t)$$



Sedimentation eines geladenen Partikels in einem Elektrolyt

Gesamtmodell

Gesuchte Groessen: v^F , p^F , v_i , n_i , ψ , \dot{z}_α .

$$\rho^F \frac{\partial v^F}{\partial t} + v^F \cdot \nabla v^F + \nabla p^F - \mu^F \Delta v^F - \rho^F g - \rho_e \nabla \psi = 0,$$

$$\nabla \cdot v^F = 0;$$

$$-\Delta \psi - \frac{\rho_e}{\epsilon_0 \epsilon_r} = 0,$$

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + D_i \Delta n_i + v^F \cdot \nabla n_i - D_i \frac{e}{k_B T} \nabla \cdot (z_i n_i \nabla \psi) = 0,$$

$$v_i - v^F + \frac{z_i e}{\lambda_i} \nabla \psi + \frac{k_B T}{\lambda_i} \nabla \ln(n_i) = 0.$$

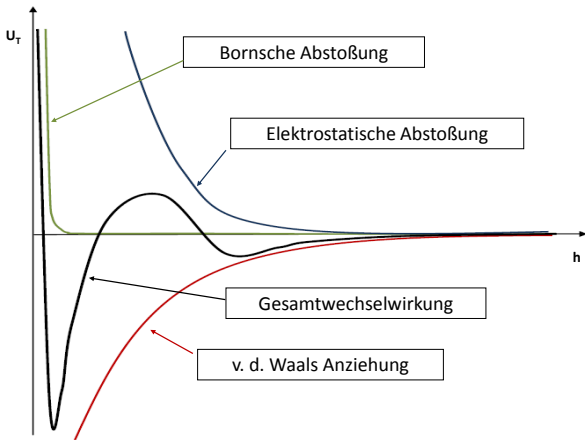
Vortrag 2.4

Sedimentation eines geladenen Partikels in einem Elektrolyt

- ▶ Herleitung der Poissongleichung und der Nernst-Planck-Gleichung
- ▶ Sternschicht-Theorie
- ▶ Randbedingungen
- ▶ Entdimensionierung des Gesamtsystems
- ▶ Vereinfachung der Gleichungen
- ▶ Existenz und Eindeutigkeit der Lösung
- ▶ Analytische Lösungen für Spezialfälle
- ▶ Lösung von Oshima

DLVO-Theorie

Untersuchung der Stabilität von Suspensionen



Vortrag 2.5

DLVO-Theorie

- ▶ Druck zwischen zwei Flächen in einem Elektrolyt
- ▶ van der Waals-Kräfte
- ▶ Bornsche Abstoßung
- ▶ Hamaker-Theorie
- ▶ Abhängigkeit der Stabilität von der Ionenkonzentration
- ▶ Erweiterung der DLVO-Theorie
- ▶ Stabilisierung von Suspensionen



Themengebiet 3: Nonlinear Dispersive Waves in the Nonlinear Schroedinger Approximation

Betreuer:
Tomas Dohnal

Nonlinear Schroedinger Equation

$$iu_t + \Delta u + \gamma|u|^2u = 0, \quad u = u(x, t) \in \mathbb{C}, x \in \mathbb{R}^d, t \geq 0$$

Applications:

- ▶ optical pulses (e.g. from a laser) in cubically nonlinear media (e.g. silica)
 - ▶ photonic fibers (\Rightarrow 1D NLS)
 - ▶ slab waveguides (\Rightarrow 2D NLS)
 - ▶ bulk media (\Rightarrow 3D NLS)
- ▶ wavepackets of surface waves on deep water (1D or 2D NLS)
- ▶ plasma waves
- ▶ in general: wavepackets in weakly nonlinear, dispersive and conservative systems

Nonlinear Schrodinger Equation

Derivation for pulses in optical fibers with a cubic nonlinearity:

Maxwell's equations reduce to

$$\Delta \vec{E} - \frac{n_0^2}{c^2} \partial_t^2 \vec{E} - \frac{1}{c^2} \partial_t^2 \left(\chi^{(3)} |\vec{E}|^2 \vec{E} \right) = 0, \quad n_0 = n_0(x^2 + y^2)$$

Assuming a slowly varying envelope ansatz

$$\vec{E} = (U(x, y, \omega_0), 0, 0)^T A(Z, T_1, T_2) e^{i(k_0 z - \omega_0 t)} +$$

c.c.,

$$Z = \varepsilon z, T_1 = \varepsilon t, T_2 = \varepsilon^2 t$$

Using multiple scales expansion obtain the 1D NLS

$$i \partial_{T_2} A + \alpha \partial_{\xi}^2 A + \beta |A|^2 A = 0.$$

Nonlinear Schrodinger Equation

Derivation for pulses in optical fibers with a cubic nonlinearity:

Maxwell's equations reduce to

$$\Delta \vec{E} - \frac{n_0^2}{c^2} \partial_t^2 \vec{E} - \frac{1}{c^2} \partial_t^2 \left(\chi^{(3)} |\vec{E}|^2 \vec{E} \right) = 0, \quad n_0 = n_0(x^2 + y^2)$$

Assuming a slowly varying envelope ansatz

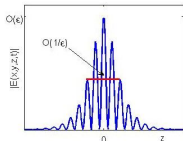
$$\vec{E} = (U(x, y, \omega_0), 0, 0)^T A(Z, T_1, T_2) e^{i(k_0 z - \omega_0 t)}$$

c.c.,

$$Z = \varepsilon z, T_1 = \varepsilon t, T_2 = \varepsilon^2 t$$

Using multiple scales expansion obtain the 1D NLS

$$i \partial_{T_2} A + \alpha \partial_{\xi}^2 A + \beta |A|^2 A = 0.$$





Nonlinear Schroedinger Equation

Properties of the NLS:

- ▶ dispersive
- ▶ Hamiltonian (infinite dimensional)
- ▶ completely integrable via the inverse scattering transform
- ▶ explicit pulse-like solutions known in 1D: solitons

Vortrag 3.1

Nonlinear Schroedinger Equation

Project Tasks:

- ▶ overview of the applications of NLS
- ▶ derivation of the NLS for pulses in optical fibers with instantaneous cubic nonlinearity from the nonlin. Maxwell equation under the divergence free condition $\nabla \cdot \vec{E} = 0$
- ▶ abstract derivation for envelopes of wavepackets in weakly nonlinear dispersive systems
- ▶ soliton solutions

Gross-Pitaevsky Equation/Periodic NLS

$$iu_t + u_x x - V(x)u + \gamma |u|^2 u = 0, \quad V(x+d) = V(x), \quad t \geq 0, \quad x \in \mathbb{R}, \quad \gamma$$

Applications:

- ▶ Gross-Pitaevsky: density distribution of an elongated Bose-Einstein Condensate (supercooled Rb, He, ...) loaded on an optical lattice
- ▶ Periodic NLS: optical beam in a periodic slab waveguide

Derivation in the optics setting:

- cubically nonlinear dielectric medium
- refractive index $n_0 = n_0(y)V(x)$, $V(x+d) = V(x)$
- slowly modulated beam in the z -direction

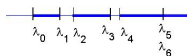
$$\vec{E} = \begin{pmatrix} U(y, \omega_0) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} A(Z, x) e^{i(k_0 z - \omega_0 t)} + c.c., \quad Z = \varepsilon z$$

→ obtain the asymptotic model

Gross-Pitaevsky Equation/Periodic NLS

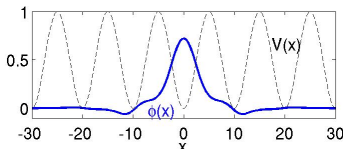
Properties of the periodic NLS:

- ▶ dispersive
- ▶ Hamiltonian (infinite dimensional)
- ▶ NOT completely integrable via the inverse scattering transform
- ▶ spectrum of the linear operator $\partial_{xx} - k^2 - V(x)$ is



continuous with gaps

- ▶ in the spectral gaps exist stationary solitary waves: Gap



Solitons

Vortrag 3.2

Gross-Pitaevsky Equation/Periodic NLS

Project Tasks:

- ▶ detailed derivation of the periodic NLS either for optics or BECs and a brief derivation for the other case
- ▶ computation of $\sigma(\partial_{xx} - k^2 - V(x))$ using Floquet theory
- ▶ overview of known results on existence and linear stability fo gap solitons

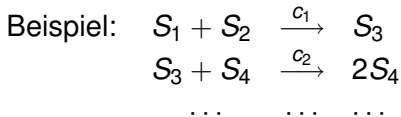


Themengebiet 4: Stochastische Reaktionskinetik

Betreuer:
Tobias Jahnke

Traditionelle Reaktionskinetik

Reaktionen zwischen verschiedenen Stoffen S_1, S_2, \dots

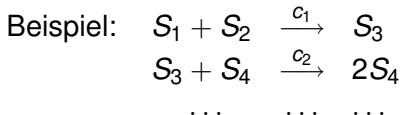


Annahmen: konstante Temperatur
konstantes Volumen
homogene Verteilung im Raum

Traditionelle Beschreibung:
System von ODEs (\longrightarrow Konzentrationen)

Traditionelle Reaktionskinetik

Reaktionen zwischen verschiedenen Stoffen S_1, S_2, \dots



Annahmen: konstante Temperatur
konstantes Volumen
homogene Verteilung im Raum

Traditionelle Beschreibung:

System von ODEs (\longrightarrow Konzentrationen)

Schlechtes Modell für Reaktionen in Zellen!
Kleine Teilchenzahlen, kritische Fluktuationen

Vortrag 4.1

Der stochastische Simulationsalgorithmus

Betrachte diskrete Teilchenzahlen statt Konzentrationen

Zufallsvariable $X(t) = \begin{pmatrix} X_1(t) \\ \vdots \\ X_d(t) \end{pmatrix} \in \mathbb{N}^d$

Markov-Sprungprozess im Zustandsraum \mathbb{N}^d .

Vortrag 4.1

Der stochastische Simulationsalgorithmus

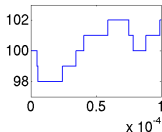
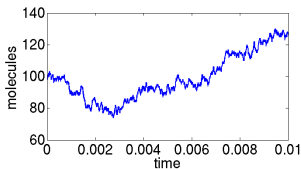
Betrachte diskrete Teilchenzahlen statt Konzentrationen

Zufallsvariable $X(t) = \begin{pmatrix} X_1(t) \\ \vdots \\ X_d(t) \end{pmatrix} \in \mathbb{N}^d$

Markov-Sprungprozess im Zustandsraum \mathbb{N}^d .

Stochastic simulation algorithm (Gillespie 1976):

Erzeuge Realisierungen von $X(t)$.



Vortrag 4.2: Die chemische Mastergleichung

Wahrscheinlichkeitsverteilung der Teilchenzahlen

$$p(t, x) = \mathbb{P}\left(x_k \text{ Exemplare von } S_k \text{ zur Zeit } t\right), \quad x = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_d \end{pmatrix} \in \mathbb{N}^d$$

Chemische Mastergleichung (CME)

$$\frac{\partial}{\partial t} p(t, x) = \sum_{j=1}^m \left(\alpha_j(x - \nu_j) p(t, x - \nu_j) - \alpha_j(x) p(t, x) \right)$$

Propensity functions $\alpha_j(x)$

Stoichiometrischer Vektor $\nu_j \in \mathbb{Z}^d$

Vortrag 4.2: Die chemische Mastergleichung

Wahrscheinlichkeitsverteilung der Teilchenzahlen

$$p(t, x) = \mathbb{P}\left(x_k \text{ Exemplare von } S_k \text{ zur Zeit } t\right), \quad x = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_d \end{pmatrix} \in \mathbb{N}^d$$

Chemische Mastergleichung (CME)

$$\frac{\partial}{\partial t} p(t, x) = \sum_{j=1}^m \left(\alpha_j(x - \nu_j) p(t, x - \nu_j) - \alpha_j(x) p(t, x) \right)$$

Propensity functions $\alpha_j(x)$

Stoichiometrischer Vektor $\nu_j \in \mathbb{Z}^d$

Chemische Mastergleichung = System von ODEs

Vortrag 4.2: Die chemische Mastergleichung

Wahrscheinlichkeitsverteilung der Teilchenzahlen

$$p(t, x) = \mathbb{P}\left(x_k \text{ Exemplare von } S_k \text{ zur Zeit } t\right), \quad x = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_d \end{pmatrix} \in \mathbb{N}^d$$

Chemische Mastergleichung (CME)

$$\frac{\partial}{\partial t} p(t, x) = \sum_{j=1}^m \left(\alpha_j(x - \nu_j) p(t, x - \nu_j) - \alpha_j(x) p(t, x) \right)$$

Propensity functions $\alpha_j(x)$

Stoichiometrischer Vektor $\nu_j \in \mathbb{Z}^d$

Chemische Mastergleichung = System von ODEs

Problem: Eine ODE pro Zustand!

Zu viele ODEs für traditionelle Verfahren!

Vortrag 4.2: Die chemische Mastergleichung

Wahrscheinlichkeitsverteilung der Teilchenzahlen

$$p(t, x) = \mathbb{P}\left(x_k \text{ Exemplare von } S_k \text{ zur Zeit } t\right), \quad x = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_d \end{pmatrix} \in \mathbb{N}^d$$

Chemische Mastergleichung (CME)

$$\frac{\partial}{\partial t} p(t, x) = \sum_{j=1}^m \left(\alpha_j(x - \nu_j) p(t, x - \nu_j) - \alpha_j(x) p(t, x) \right)$$

Propensity functions $\alpha_j(x)$

Stoichiometrischer Vektor $\nu_j \in \mathbb{Z}^d$

Chemische Mastergleichung = System von ODEs

Beispiel: Drei Stoffe mit je bis zu 100 Kopien

→ CME = **100³ ODEs !**

Vortrag 4.2: Die chemische Mastergleichung

Wahrscheinlichkeitsverteilung der Teilchenzahlen

$$p(t, x) = \mathbb{P}\left(x_k \text{ Exemplare von } S_k \text{ zur Zeit } t\right), \quad x = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_d \end{pmatrix} \in \mathbb{N}^d$$

Chemische Mastergleichung (CME)

$$\frac{\partial}{\partial t} p(t, x) = \sum_{j=1}^m \left(\alpha_j(x - \nu_j) p(t, x - \nu_j) - \alpha_j(x) p(t, x) \right)$$

Propensity functions $\alpha_j(x)$

Stoichiometrischer Vektor $\nu_j \in \mathbb{Z}^d$

Chemische Mastergleichung = “diskrete PDE”

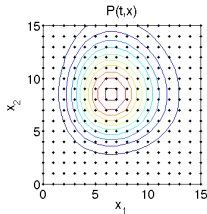
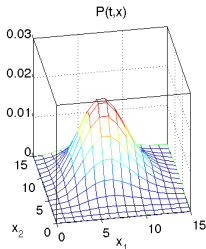
Vortrag 4.2: Die chemische Mastergleichung

Wahrscheinlichkeitsverteilung der Teilchenzahlen

$$p(t, x) = \mathbb{P}\left(x_k \text{ Exemplare von } S_k \text{ zur Zeit } t\right), \quad x = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_d \end{pmatrix} \in \mathbb{N}^d$$

Chemische Mastergleichung (CME)

$$\frac{\partial}{\partial t} p(t, x) = \sum_{i=1}^m \left(\alpha_j(x - \nu_j) p(t, x - \nu_j) - \alpha_j(x) p(t, x) \right)$$





Vortrag 4.3

Weiterer Vortrag über die chemische Mastergleichung

- ▶ Inhalte werden noch bekannt gegeben...



Das wars...