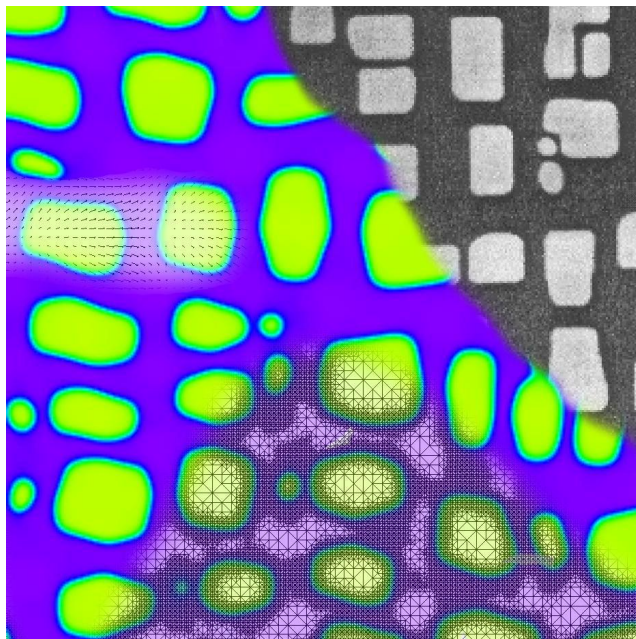


RHEINISCHE FRIEDRICH-WILHELMS-UNIVERSITÄT BONN
INSTITUT FÜR ANGEWANDTE MATHEMATIK

**Numerische Lösungen
der Cahn-Hilliard-Gleichung
und
der Cahn-Larché-Gleichung**



Ulrich Weikard

Bonn, Oktober 2002

RHEINISCHE FRIEDRICH-WILHELMS-UNIVERSITÄT BONN
INSTITUT FÜR ANGEWANDTE MATHEMATIK

**Numerische Lösungen
der Cahn-Hilliard-Gleichung
und
der Cahn-Larché-Gleichung**

Dissertation

zur Erlangung des Doktorgrades (Dr. rer. nat.)

der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät

der Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn

vorgelegt von

Ulrich Weikard

aus Leverkusen

Bonn, Oktober 2002

Angefertigt mit Genehmigung der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät der Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn

1. Referent: Prof. M. Rumpf
2. Referent: Prof. F. Otto
Tag der Promotion:

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	6
2	Mathematische Modellierung	11
2.1	Das Cahn-Hilliard Modell	11
2.2	Die Linearisierung der Cahn-Hilliard Gleichung	17
2.3	Das Cahn-Larché Modell – Einbeziehung von Elastizität	18
3	Die Diskretisierung der Modelle	25
3.1	Gitterkonstruktion und Finite-Element Räume	26
3.2	Das implizite Euler-Verfahren	30
3.3	Das entkoppelte Euler-Verfahren	34
3.4	Das θ -Zwischenschritt-Verfahren	35
3.5	Adaptive Steuerung der Gitterfeinheit	37
4	Konvergenz der diskreten Modelle	39
4.1	A priori-Abschätzungen	40
4.2	Das Kompaktheitsargument	42
4.3	Lösungseigenschaft der Grenzwerte	44
4.4	Der Beweis für das entkoppelte Verfahren	44
5	A Posteriori Fehlerabschätzung	47
5.1	Das duale Problem	48
5.2	Fehlerdarstellung	50
5.3	Das parabolische Residuum	51
5.4	Abhängigkeit der Konstanten von den Daten	63
5.5	Implementation	64
	Anhang: Beweis der Stabilitätsabschätzungen	69

6	Numerische Ergebnisse	79
6.1	Ergebnisverifikation	79
6.2	Vergleich Cahn-Hilliard und Mullins-Sekerka Modell	83
6.3	Verhalten der Fehlerschätzer	84
6.4	Vergrößerungsraten und Geschwindigkeit der Evolution	90
6.5	Effekte der Elastizität	95

Kapitel 1

Einleitung

Thema dieser Arbeit sind Modelle, die Phasentrennung und die sich daran anschließende Entwicklung der entstehenden Mikrostruktur in Metallegierungen beschreiben. Insbesondere betrachten wir das Cahn-Hilliard-Modell und dessen Erweiterung durch Einbeziehung elastischer Materialeigenschaften.

Experimenteller Hintergrund

Die Herstellung und das Verhalten von Metallegierungen sind von großer technologischer Bedeutung. Eine wichtige Frage ist, welche Alterungsprozesse in verwendeten Materialien auftreten, wie – insbesondere wie schnell – diese Prozesse ablaufen und welche Auswirkungen dies auf die Eigenschaften des Materials hat. Ein solcher Alterungsprozeß, der bei Metallegierungen auftreten kann, ist die Entmischung. Systeme, bei denen dieser Vorgang relevant wird, sind zum Beispiel Nickel-Aluminium-Legierungen, die zur Beschichtung von Turbinen eingesetzt werden oder Blei-Zinn-Mischungen, aus denen die Lötstellen bestehen, mit denen Mikrochips auf Platinen gelötet werden [32, 53, 19, 20].

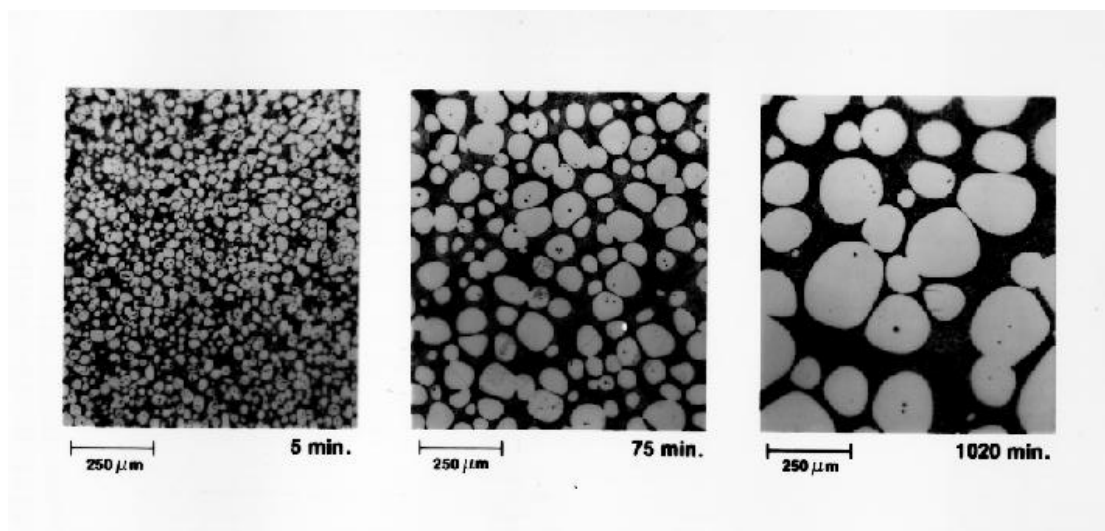


Abbildung 1.1: Entmischung und Evolution der entstehenden Mikrostruktur

Es soll folgender Vorgang modelliert und verstanden werden: Die Legierung befindet sich

zunächst bei hoher Temperatur im Zustand homogener Durchmischung. Wird nun das System abgekühlt, so beobachtet man das Auftreten verschiedener Phasen. Es bilden sich also räumlich getrennte Gebiete, die sich hinsichtlich des Mischungsverhältnisses und damit auch hinsichtlich anderer physikalischer Eigenschaften voneinander unterscheiden. Den Übergang von der Mischphase zum Zustand mit getrennten Phasen bezeichnet man als Phasentrennung.

Nach der eigentlichen Entmischung beobachtet man, daß die entstehende Mikrostruktur im Laufe der Zeit immer größer wird. Große Partikel wachsen auf Kosten kleinerer, welche schließlich verschwinden (siehe Abbildung (1.1)). Dieser Vorgang, der auch als Ostwald-Reifung bezeichnet wird, kann als Minimierung der Ausdehnung der Phasengrenzen beschrieben werden. Nimmt man eine solche Tendenz zur Minimierung der Phasengrenzen an, so sollten sich annähernd kugelförmige Partikel ergeben. Dies ist bei einigen, jedoch nicht bei allen, Systemen der Fall. Ein Gegenbeispiel zeigt Abbildung (1.2). Hier verlaufen Phasengrenzen tendenziell stärker entlang bestimmter Richtungen, die durch das zugrunde liegende Metallgitter bestimmt sind.

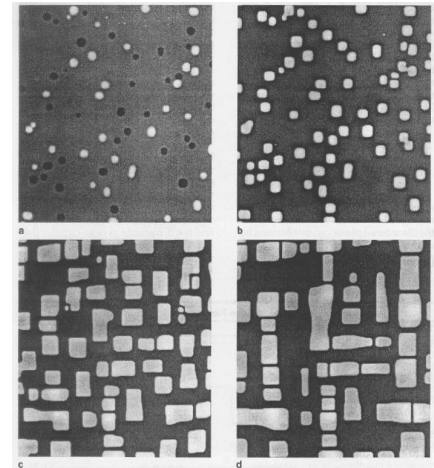


Abbildung 1.2: Anisotrope Partikelformen in einer Nickel-Aluminium Legierung

Eine Möglichkeit, die beobachteten Anisotropien zu erklären, ist die Einbeziehung von elastischen Einflüssen. Da ein Metallgitter auf elastische Verzerrungen je nach Richtung unterschiedlich reagiert, ist hier eine mögliche Quelle der Anisotropie. Elastische Verzerrungen können zum Beispiel daraus resultieren, daß die beiden Phasen unterschiedliche Volumina einnehmen möchten, was der Fall ist, wenn der Gitterabstand der Atome in beiden Phasen unterschiedlich ist. Darüber hinaus ist es möglich, daß die eine Phase elastisch härter ist als die andere und somit auf Verzerrungen anders reagiert.

In den Modellen zur Beschreibung dieser Phänomene wird angenommen, daß der die Entmischung bewirkende Prozeß ein Diffusionsprozeß ist. Die Vorstellung ist, daß benachbarte Atome ihre Plätze im Gitter tauschen. Die Gitterstruktur des Metalls soll dabei unverändert bleiben. Es ist zu betonen, daß sich die geschilderten Prozesse im festen Zustand abspielen. Dementsprechend sind die Diffusionsgeschwindigkeiten langsam und somit die Zeitskala der Entmischung recht lang: typischerweise in der Größenordnung von Tagen oder Wochen.

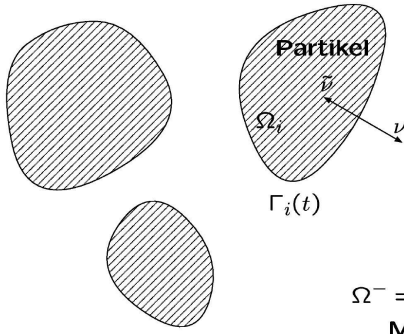
Modellierung

Zur Simulation dieser Phänomene sind drei unterschiedliche Arten von Modellen vorgeschlagen worden (siehe [32] für einen detaillierteren Überblick).

- Atomistische Modelle
- Konzentrations-Modelle mit scharfen Phasengrenzen
- Konzentrations-Modelle mit glatten Phasengrenzen

Auf der feinsten Ebene kann man das Verhalten der Atome im Metallgitter direkt simulieren. Es werden Annahmen über die Wahrscheinlichkeiten für den Platztausch von je zwei Atomen gemacht und damit die Bewegungen einer möglichst großen Anzahl von Atomen

simuliert (Kawasaki-Dynamik). Problematisch dabei ist, daß die für eine realistische Simulation benötigte Anzahl von Atomen numerisch schwer zu handhaben ist. Deswegen geht man dazu über, nicht einzelne Atome sondern die Konzentration der Atomsorten zu betrachten. Modelle dieser Art unterscheiden sich hauptsächlich darin, ob sie scharfe Phasengrenzen betrachten, über die hinweg die Konzentration einen Sprung macht oder aber Zonen mit steilen Gradienten aber dennoch stetigem Übergang zwischen den Phasen.



Vertreter der ersten Art von Modellen ist das von Mullins und Sekerka. Dabei nimmt man jeweils einen festen Wert für die Konzentration in der Matrix- und der Partikelphase an und modelliert die Bewegung der Phasengrenzen. Diese Bewegung wird durch ein Potential w festgelegt. Bezeichnet man die Phasengrenzen mit Γ , so ist w als Lösung der partiellen Differentialgleichung

$$\begin{aligned} \Delta w &= 0 && \text{innerhalb der Phasen} \\ w &= \kappa && \text{auf den Phasengrenzen } \Gamma \end{aligned}$$

Abbildung 1.3: Skizze zum Mullins-Sekerka Modell

gegeben. Dabei bezeichnet κ die Krümmung der Phasengrenze. Die Entwicklung von Γ ist dann durch die Normalengeschwindigkeit

keit V bestimmt, die durch

$$V = [\nabla w]_{-}^{+} \cdot \nu$$

gegeben ist, wobei ν der Normalenvektor an Γ und $[\nabla w]_{-}^{+}$ der Sprung des Gradienten von w sein soll. Die Schwierigkeit bei diesem Modell liegt in der Behandlung der Fälle, in denen sich die Topologie der Phasengrenzen ändert. Numerisch wurde das um elastische Effekte erweiterte Modell beispielsweise in [47, 46, 2, 1] behandelt.

Für den Grenzfall, daß der Massenanteil der Partikelphase verschwindet, haben Lifshitz, Slyozov [48] und Wagner [66] selbstähnliches Wachstumsverhalten gezeigt, das durch eine Längenskala $R(t)$ charakterisiert ist, die wie $t^{\frac{1}{3}}$ wächst.

In dieser Arbeit konzentrieren wir uns hingegen auf Modelle mit stetigen Übergängen zwischen den Phasen. In Kapitel 2 werden das Cahn-Hilliard Modell sowie dessen Erweiterung durch Einbeziehung von Elastizität ausführlich hergeleitet und dargestellt.

Kernstück des Modells ist eine nichtlineare, parabolische partielle Differentialgleichung, die die Entwicklung der Konzentration ρ beschreibt.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla \left(M \nabla (\psi'(\rho) - \gamma \Delta \rho) \right), \quad x \in \Omega, t > 0.$$

Hierbei ist M die Mobilität und ψ eine nichtlineare Funktion von ρ . Setzt man die Mobilität konstant identisch Eins, so vereinfacht sich die Cahn-Hilliard-Gleichung zu

$$(1.1) \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} = \Delta (\psi'(\rho) - \gamma \Delta \rho), \quad x \in \Omega, t > 0.$$

Auch der Fall einer konzentrationsabhängigen Mobilität ist von Interesse (vgl.[24]) und kann mit prinzipiell ähnlichen Methoden angegangen werden. In dieser Arbeit beschränken wir uns allerdings auf den Fall konstanter Mobilität.

In diese Modellgleichung gehen die elastischen Materialeigenschaften noch nicht ein. Die Elastizität kann mittels eines Terms, der auf Khachatryan zurückgeht [44], berücksichtigt

werden. Die so erweiterte Cahn-Hilliard-Gleichung mit konstanter Mobilität, die auch Cahn-Larché Gleichung genannt wird, lautet dann¹:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \Delta \left(\psi'(\rho) - \gamma \Delta \rho - e \operatorname{Spur}(\mathcal{S}) + (\mathcal{E}(\mathbf{u}) - \bar{\mathcal{E}}(\rho)) : \mathcal{C}'(\rho) (\mathcal{E}(\mathbf{u}) - \bar{\mathcal{E}}(\rho)) \right)$$

Für $\gamma = 0$ wurde diese Gleichung zuerst von Cahn und Larché in [45] aufgestellt, für $\gamma > 0$ von Onuki [59].

Zusammenfassung der verwendeten Methoden und erzielten Ergebnisse

Ziel der vorliegenden Arbeit ist die Implementierung und Analyse eines effizienten numerischen Verfahrens zur Lösung der Cahn-Hilliard- und der Cahn-Larché-Gleichung. In Kapitel 2 wird das mathematische Modell detailliert beschrieben, und die Gleichungen werden hergeleitet.

Zur Diskretisierung der Gleichungen des Modells bezüglich des Ortes haben wir einen Finite-Element-Ansatz gewählt. Ausführliche Darstellungen dieser Technik finden sich beispielsweise in [7, 13, 63]. Bei der Zeitdiskretisierung lag der Schwerpunkt der Implementierung auf dem θ -Zwischenschritt-Verfahren [8, 54]. Daneben betrachten wir auch das implizite Euler- und das Crank-Nicholson-Verfahren zur Auflösung der Zeitableitung. Diese beiden Verfahren sowie der theoretische Hintergrund dazu werden zum Beispiel in [5, 67, 35] ausführlich analysiert. Dort werden allerdings nur der Fall ohne beziehungsweise der mit homogener Elastizität betrachtet. Der Darstellung der Diskretisierung der Gleichungen mittels der genannten Verfahren ist das dritte Kapitel gewidmet.

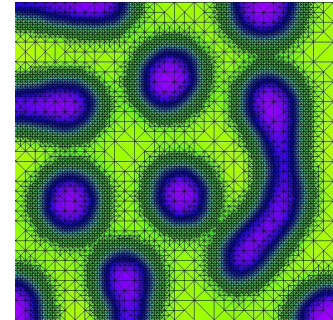


Abbildung 1.4: Numerisches Beispiel mit adaptivem Gitter

Im vierten Kapitel diskutieren wir einige Eigenschaften der diskretisierten Gleichungen. Das Hauptergebnis ist der Beweis der Konvergenz der diskreten Lösungen der Cahn-Larché-Gleichung gegen Lösungen der Differentialgleichung. Während wir dies für den Fall homogener Elastizität schon in [35] gezeigt haben, ist der Fall inhomogener Elastizität deutlich schwieriger und nur mit anderen Mitteln zu fassen. Hier ist es auch nicht möglich, a priori-Abschätzungen mit Fehlerordnungen zu zeigen. Da Eindeutigkeit der kontinuierlichen Lösung auch nicht gezeigt werden kann, ist ein solches Resultat auch nicht zu erwarten. Der Beweis der Konvergenz der numerischen Lösungen lehnt sich an den Existenzbeweis von H. Garcke [33] an.

In Kapitel 5 werden wir a posteriori-Fehlerschätzer für die Cahn-Hilliard- und die Cahn-Larché-Gleichung mit homogener Elastizität herleiten. Diese lokalen Fehlerschätzer werden zur Adaption der Gitter, auf denen wir rechnen, verwendet. Die mit den beschriebenen Algorithmen erzeugten numerischen Ergebnisse sind in Kapitel 6 zusammengefasst. Dabei interessieren uns hauptsächlich

- die Verifikation der Algorithmen insbesondere das richtige Skalierungsverhalten,
- die Konvergenz von Lösungen der Cahn-Hilliard-Gleichung gegen Lösungen des Mullins-Sekerka-Modells,
- das Verhalten der Fehlerschätzer,
- die Auswirkungen der Elastizität auf Phasengrenzen und Partikelgestalt,

¹Für die Definition der zusätzlichen Größen e , \mathcal{S} , $\mathcal{E}(\mathbf{u})$, $\bar{\mathcal{E}}(\rho)$ und $\mathcal{C}(\rho)$ siehe Kapitel 2, Abschnitt 3

- die Vergrößerungsraten und Geschwindigkeit der Evolution mit und ohne Elastizität.

Abbildung (1.4) zeigt ein numerisches Beispiel für eine Entwicklung ohne Elastizität und das zugrundeliegende adaptive Gitter. Ein weiteres Beispiel diesmal mit inhomogener, anisotroper Elastizität ist in Abbildung (1.5) wiedergegeben.

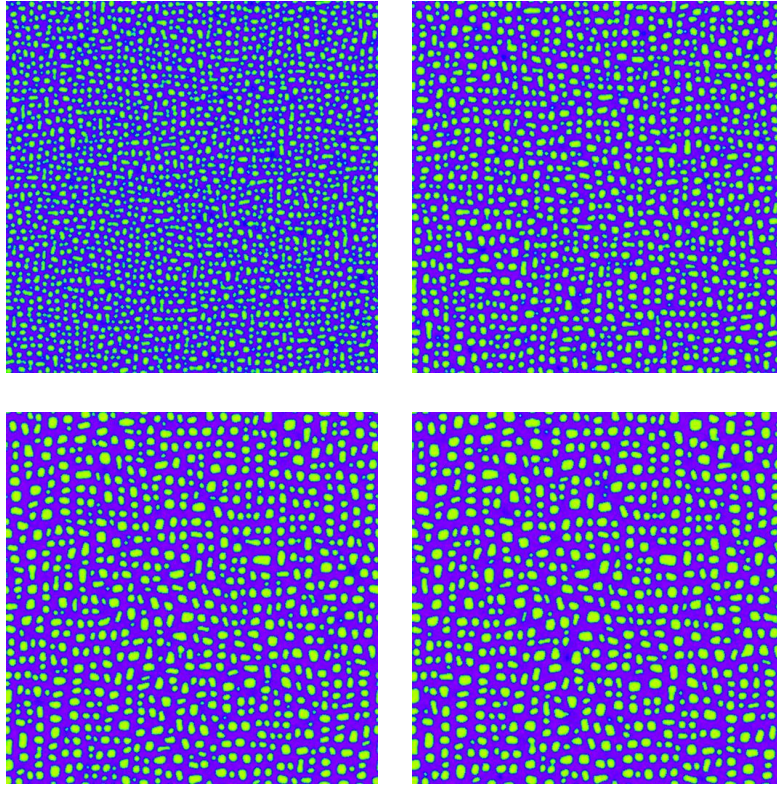


Abbildung 1.5: Numerisches Beispiel mit inhomogener, anisotroper Elastizität

Kapitel 2

Mathematische Modellierung

Der Zweck dieses Kapitels ist die Darstellung der Modellierung von Phasentrennungsprozessen in zweikomponentigen Legierungen durch Konzentrationsmodelle mit stetigen Phasenübergängen. Neben der ursprünglichen Arbeit von Cahn und Hilliard [9] finden sich Überblicke über die Modellierung und deren Herleitung in [21, 58, 32]. Eine alternativer Modellierungsansatz, der zu denselben Gleichungen führt, findet sich bei Gurtin [38].

2.1 Das Cahn-Hilliard Modell

Die Modellierung der Entmischung und der Evolution der entstehenden Mikrostruktur nach Cahn und Hilliard geht im wesentlichen in zwei Schritten vor. Im einfachsten Fall wird ein System aus zwei Komponenten, wie zum Beispiel Nickel und Aluminium, betrachtet. Modelliert wird die Differenz der Konzentrationen, die wir mit ρ bezeichnen. Da sich beide Konzentrationen zu 1 addieren ist durch ρ der Zustand des Systems eindeutig festgelegt.

Der erste Schritt der Modellierung ist die Konstruktion eines Energiefunktionals $E(\rho) = \int_{\Omega} e(\rho) dx$ mit einem beschränkten, konvexen Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, $1 \leq d \leq 3$ und einer Energiedichte $e(\rho, \nabla \rho)$. Im zweiten Schritt wird angenommen, daß die Dynamik des Systems – mittels Diffusion – durch Minimierung des Energiefunktionals bestimmt ist. Die folgenden Abschnitte konkretisieren dieses Vorgehen.

Das Energiefunktional

In dem Modell von Cahn und Hilliard hat das Energiefunktional $E(\rho)$ zwei verschiedene Anteile. Der eine kommt von der Mischungsenthalpie der beiden Komponenten, der andere von der Oberflächenenergie der Phasengrenzen.

Die freie Enthalpie

Ein physikalischer Vorgang wie die Entmischung von Legierungen unterliegt den Gesetzen der Thermodynamik. Insbesondere sind thermodynamische Systeme bestrebt, die freie Enthalpie zu minimieren. Dementsprechend sind nur die Zustände minimaler freier Enthalpie stabile Zustände des Systems. Alle anderen Zustände sind instabil. Damit eine Phasentrennung eintreten kann, muß also der Zustand homogener Durchmischung eine höhere freie Enthalpie haben als der Zustand mit koexistierenden Phasen.

Aus dem oben Gesagten folgt, daß die freie Enthalpie ψ von der Konzentration ρ abhängt. Wie in der Einleitung geschildert verhält sich das System im Experiment bei verschiedenen

Wegen der Erhaltung der Masse der beiden Komponenten des Systems gilt:

$$\rho_{\text{misch}} = \mu \cdot \rho_1 + (1 - \mu) \cdot \rho_2$$

und demnach muß auch $\rho_1 \leq \rho_{\text{misch}} \leq \rho_2$ (bzw. $\rho_2 \leq \rho_{\text{misch}} \leq \rho_1$) gelten. Dann folgt mit der strikten Konvexität von ψ :

$$\psi(\rho_{\text{misch}}) = \psi(\mu \cdot \rho_1 + (1 - \mu) \cdot \rho_2) < \mu \cdot \psi(\rho_1) + (1 - \mu) \cdot \psi(\rho_2) = \tilde{\psi}.$$

Also ist die Mischphase von der Enthalpie her günstiger als der entmischte Zustand. Damit tritt in diesem Fall im Gleichgewicht keine Phasentrennung auf.

Wenden wir uns nun dem Fall $T < T_{\text{krit}}$ zu. In Abbildung 2.1(b) haben die lokalen Minima von ψ die gleichen Werte. Dies stellt keine Einschränkung dar, denn aufgrund der W-Form von ψ gibt es genau zwei Werte ρ_- und ρ_+ , die der folgenden Bedingung genügen:

$$\psi'(\rho_-) = \frac{\psi(\rho_+) - \psi(\rho_-)}{\rho_+ - \rho_-} = \psi'(\rho_+)$$

Gilt $\rho_{\text{misch}} \in [\rho_-, \rho_+]$, so wählt man $\lambda := \frac{\psi(\rho_+) - \psi(\rho_-)}{\rho_+ - \rho_-}$, und $F(\rho) := \psi(\rho) - \lambda(\rho - \rho_{\text{misch}})$. F hat dann offenbar zwei absolute Minima nämlich bei ρ_- und ρ_+ mit $F(\rho_-) = F(\rho_+)$. Das Minimierungsproblem 2.1 ist aber äquivalent zu

$$(2.2) \quad \text{Minimiere } \int_{\Omega} F(\rho(x)) dx \text{ unter der Nebenbedingung } \int_{\Omega} \rho(x) dx = \rho_{\text{misch}} |\Omega|.$$

Absolute Minima ergeben sich für Zerlegungen des Gebietes $\Omega = \Omega_- \dot{\cup} \Omega_+$ und

$$(2.3) \quad \rho(x) = \begin{cases} \rho_-, & \text{für } x \in \Omega_- \\ \rho_+, & \text{für } x \in \Omega_+. \end{cases}$$

Dabei müssen wegen der Massenerhaltung Ω_- und Ω_+ so gewählt werden, daß gilt:

$$(2.4) \quad \rho_- |\Omega_-| + \rho_+ |\Omega_+| = \rho_{\text{misch}} |\Omega|.$$

Diese Konfiguration hat eine geringere freie Enthalpie als die Mischphase. Es gibt also Gleichgewichtskonfigurationen mit getrennten Phasen. Ist ρ_{misch} außerhalb von $[\rho_-, \rho_+]$, so läßt sich 2.4 für Konfigurationen mit getrennten Phasen nicht mehr erfüllen.

Unterhalb der kritischen Temperatur ist die Mischphase also für bestimmte Mischungsverhältnisse allenfalls metastabil und globale Minima sind durch Zustände mit getrennten Phasen gekennzeichnet. Unsere Modellannahmen führen zu dem Phasendiagramm, das in Abbildung 2.2 dargestellt ist. Dabei ist die Spinodale die Menge aller Punkte, für die $\psi''(\rho, T) = 0$ gilt oder anders ausgedrückt die Kurve der Wendepunkte von ψ . Die Konodale trennt Bereiche, in denen die Mischphase stabil beziehungsweise metastabil ist.

Im folgenden interessieren wir uns ausschließlich für den Fall $T < T_{\text{krit}}$. Cahn und Hilliard haben in [9] für $\psi : [-1, 1] \mapsto \mathbb{R}$ den Ausdruck

$$(2.5) \quad \psi(\rho) = \frac{\theta}{2} [(\rho + 1) \ln(\rho + 1) + (\rho - 1) \ln(\rho - 1)] - \frac{\theta_{\text{krit}}}{2} \rho^2$$

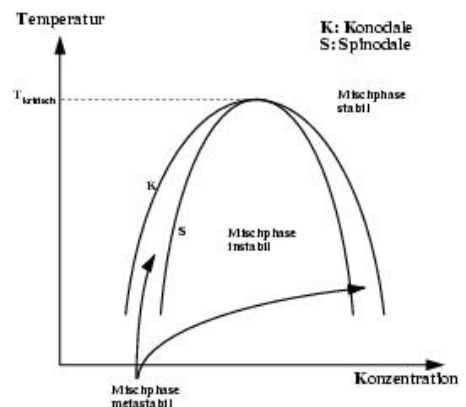


Abbildung 2.2: Phasendiagramm

vorgeschlagen. Dabei sind $\theta = k_B T$ und $\theta_{krit} = k_B T_{krit}$ mit der Boltzmannkonstante k_B . Diese Form der freien Enthalpie ist zum Beispiel von De Fontaine [17, 18], Hoyt [40, 42, 41] sowie Elliot und Luckhaus [25] untersucht worden. Ist T nahe der kritischen Temperatur und ρ nahe Null, so kann $\frac{1}{1-\rho^2}$ durch $1+\rho^2$ angenähert werden. Dies führt auf eine Approximation durch ein Polynom vierten Grades:

$$(2.6) \quad \psi(\rho) = \frac{1}{4}(\rho^2 - 1)^2$$

Wählt man (2.5) als freie Enthalpie, so werden Ableitungen von ψ in den Punkten -1 und 1 unbeschränkt. Um die damit verbundenen Probleme zu umgehen, nutzen wir, wie allgemein in der Literatur üblich, die polynomiale Variante (2.6).

Oberfläche der Phasengrenzen

Würde man nur die Mischungsenthalpie betrachten, so wären Konfigurationen mit beliebig ausgedehnten Phasengrenzen ebenfalls Minima des Energiefunktionals. Da solche Beobachtungen im Experiment nicht auftreten sondern im Gegenteil die Evolution der Mikrostruktur durch Abnahme der Ausdehnung der Phasengrenzen gekennzeichnet ist, fügen Cahn und Hilliard der Energiedichte den Term $\frac{\gamma}{2}|\nabla\rho|^2$ hinzu. Dieser soll die Oberflächenenergie der Phasen beschreiben. Dabei ist γ eine positive, reelle Konstante. Im Ergebnis bestimmt γ , wie steil die Übergänge zwischen zwei benachbarten Phasen sind und wie schnell die Ausdehnung der Phasengrenzen abnimmt.

Das Energiefunktional E ist damit:

$$(2.7) \quad E(\rho) := \int_{\Omega} \left(\psi(\rho) + \frac{\gamma}{2} |\nabla\rho|^2 \right) dx.$$

Die Diffusionsgleichung

Ausgangspunkt für die Herleitung der Diffusionsgleichung ist die Kontinuitätsgleichung, die sich aus Annahme der Massenerhaltung ergibt:

$$\partial_t \rho = -\operatorname{div} \mathbf{J}$$

mit dem Massenfluß \mathbf{J} . Dieser sei gegeben durch

$$\mathbf{J} = -M \nabla w$$

wobei M die Mobilität und w die Differenz der chemischen Potentiale der beiden Phasen bezeichnet. Diese wiederum ergibt sich als die erste Variation des Energiefunktionals E nach der Konzentrationsdifferenz ρ .

$$\frac{\delta E}{\delta \rho}(\varphi) = \int_{\Omega} (\psi'(\rho) - \gamma \Delta \rho) \varphi dx$$

führt zu

$$w = \psi'(\rho) - \gamma \Delta \rho.$$

Zusammen ergibt das

$$\partial_t \rho = \operatorname{div}(M \nabla w) = \operatorname{div} \left(M \nabla (\psi'(\rho) - \gamma \Delta \rho) \right).$$

Setzt man die Mobilität konstant identisch Eins, wie wir das für den Rest dieser Arbeit tun wollen, so erhält man:

$$(2.8) \quad \partial_t \rho = \Delta w$$

$$(2.9) \quad w = (\psi'(\rho) - \gamma \Delta \rho).$$

Diese Gleichung soll auf $[0, T] \times \Omega$ gelöst werden, wobei wir zusätzlich Anfangsdaten ρ_0 vorschreiben.

Randbedingungen

Das betrachtete System soll abgeschlossen sein. Es findet also kein Massenfluß über den Rand von Ω statt. Bezeichnet ν den äußeren Normalenvektor an den Rand von Ω , so läßt sich diese Bedingung folgendermaßen ausdrücken:

$$\mathbf{J} \cdot \nu = -M \nabla w \cdot \nu = -\partial_\nu w = 0, \quad \text{auf } \partial\Omega.$$

Des weiteren nehmen wir als Randbedingung $\partial_\nu \rho = 0$ auf $\partial\Omega$ an. Diese ergibt sich natürlicherweise bei der Berechnung der ersten Variation des Energiefunktional. Die Bedingung entspricht einem Kräftegleichgewicht für Oberflächenkräfte. Alternativ betrachten wir auch periodische Randbedingungen für ρ und w .

Schwache Formulierung

Testen der Cahn-Hilliard Gleichungen (2.8) und (2.9) mit Funktionen aus $H^{1,2}(\Omega)$ ergibt die schwache Formulierung:

(P_{C.-H.}): *Gesucht sind*

$$\rho \in L^2(0, T; H^{1,2}(\Omega)) \cap H^{1,2}(0, T; (H^{1,2}(\Omega))^*),$$

$$w \in L^2(0, T; H^{1,2}(\Omega)),$$

so daß für fast jedes $t \in (0, T)$ und für jedes $\zeta \in H^{1,2}(\Omega)$ gilt:

$$(2.10) \quad \langle \partial_t \rho, \zeta \rangle = -(\nabla w, \nabla \zeta)$$

$$(2.11) \quad (w, \zeta) = (\psi'(\rho), \zeta) + \gamma(\nabla \rho, \nabla \zeta)$$

$$(2.12) \quad \rho(\cdot, 0) = \rho_0 \text{ fast überall in } \Omega,$$

wobei (\cdot, \cdot) das L^2 -Skalarprodukt und $\langle \cdot, \cdot \rangle$ die Dualitätspaarung zwischen dem Sobolevraum $H^{1,2}(\Omega)$ und dem entsprechenden Dualraum $H^{1,2}(\Omega)^*$ ist. Vom Startwert $\rho_0 \in H^{1,2}(\Omega)$ setzen wir voraus, daß $\int_\Omega \psi(\rho_0) dx < \infty$ ist.

Eigenschaften des Modells

Von der Herleitung des Modells ist klar, daß die Masse erhalten bleibt:

$$\frac{d}{dt} \int_\Omega \rho(x, t) dx = 0$$

Zwar gilt für die Cahn-Hilliard Gleichung kein Maximumprinzip, jedoch hat man stattdessen die Ljapunov-Eigenschaft des Energiefunktional:

$$\frac{d}{dt} E(\rho(t)) \leq 0.$$

Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen

Für die ursprüngliche Form der Nichtlinearität (2.5) haben Elliot und Luckhaus in [25] globale Existenz von Lösungen gezeigt. Es gilt

2.1 Satz. *Sei $\rho_0 \in H^{1,2}(\Omega)$, $\|\rho_0\|_{L^\infty(\Omega)} \leq 1$ und $|\int_\Omega \rho_0 dx| \leq (1-\delta)|\Omega|$ für ein $\delta > 0$. Dann gibt es eine eindeutige Lösung ρ mit zugehörigem w , so daß*

$$\begin{aligned} \rho &\in L^\infty(0, T; H^{1,2}(\Omega)) \cap L^2(0, T; H^{1,2}(\Omega)) \cap C(0, T; L^2(\Omega)), \\ \partial_t \rho &\in L^2(0, T; (H^{1,2}(\Omega))^*), \\ \sqrt{t} \partial_t \rho &\in L^2(0, T; H^{1,2}(\Omega)), \\ \sqrt{t} w &\in L^\infty(0, T; H^{1,2}(\Omega)), \\ \sqrt{t} \psi'(\rho) &\in L^\infty(0, T; L^2(\Omega)) \end{aligned}$$

gilt. Dabei erfüllen ρ und w die Gleichung in folgendem Sinne:

$$\begin{aligned} \int_0^T \varphi(t) \left(\partial_t(\rho, \zeta) + (\nabla w, \nabla \zeta) \right) dt &= 0 \\ \int_0^T \varphi(t) \left((w - \psi'(\rho), \zeta) - \gamma(\nabla \rho, \nabla \zeta) \right) dt &= 0 \end{aligned}$$

für alle $\varphi \in C[0, T]$ und alle $\zeta \in H^{1,2}(\Omega)$. Außerdem gelten fast überall $\rho(0, \cdot) = \rho_0$ und $|\rho| \leq 1$.

Für polynomiale Nichtlinearitäten wie in (2.6) haben Elliott und Zheng in [26] und [21] folgende Existenzaussagen bewiesen.

2.2 Satz. *Es sei $H_E^{2,2}(\Omega) := \left\{ v \in H^{2,2}(\Omega) \mid \frac{\partial v}{\partial \nu} = 0 \text{ auf } \partial\Omega \right\}$. Ist $\rho_0 \in H_E^{2,2}(\Omega)$, so existiert eine eindeutige Lösung ρ mit*

$$\begin{aligned} \rho &\in L^2(0, T; H^{4,2}(\Omega)) \\ \partial_t \rho &\in L^2(0, T; L^2(\Omega)). \end{aligned}$$

Ist darüber hinaus $\Delta \rho_0 \in H^{1,2}(\Omega)$, so gilt

$$\begin{aligned} \rho &\in L^\infty(0, T; H^{3,2}(\Omega)) \cap C^0(0, T; H_E^{2,2}(\Omega)), \\ \partial_t \rho &\in L^2(0, T; H^{1,2}(\Omega)), \\ w &\in L^2(0, T; H^{3,2}(\Omega)) \end{aligned}$$

und für alle $t \in [0, T]$ die Abschätzung

$$\|\rho(t, \cdot)\|_{H^{3,2}(\Omega)} + \|w(t, \cdot)\|_{H^{1,2}(\Omega)} \leq C$$

Gradientenflußstruktur

Die Dynamik des Systems läßt sich als $H^{1,2}(\Omega)^*$ -Gradientenfluß bezüglich eines bestimmten Skalarproduktes auffassen. Um dies zu sehen, erklären wir zunächst den Operator $\Delta^{-1} : H^{1,2}(\Omega)^* \rightarrow H^{1,2}(\Omega)$ folgendermaßen: Zu gegebenem $f \in H^{1,2}(\Omega)^*$ sei $v = \Delta^{-1} f$ die Lösung von

$$(2.13) \quad \langle f, \varphi \rangle = -(\nabla v, \nabla \varphi) \quad \forall \varphi \in H^{1,2}(\Omega),$$

die $\int_{\Omega} v \, dx = 0$ erfüllt. Die Lösbarkeit von 2.13 folgt aus dem Satz von Lax-Milgram, wobei die Koerzivität der Bilinearform durch die Poincaré-Ungleichung mit Mittelwert Null garantiert wird. Darüber hinaus sei auf $H^{1,2}(\Omega)^*$ ein Skalarprodukt $(\cdot, \cdot)_{\Delta^{-1}}$ durch

$$(2.14) \quad (f, g)_{\Delta^{-1}} := (\nabla \Delta^{-1} f, \nabla \Delta^{-1} g)$$

definiert.

Dann gilt für jedes $\varphi \in H^{1,2}(\Omega)$

$$\frac{\delta E}{\delta \rho}(\varphi) = (w, \varphi) \stackrel{2.10}{=} -(\Delta^{-1} \partial_t \rho, \varphi) \stackrel{2.13}{=} -(\nabla \Delta^{-1} \partial_t \rho, \nabla \Delta^{-1} \varphi) \stackrel{2.14}{=} -(\partial_t \rho, \varphi)_{\Delta^{-1}}$$

und man sieht, daß in diesem Sinne $\partial_t \rho$ der steilste Abstieg des Energiefunktionals E ist.

2.2 Die Linearisierung der Cahn-Hilliard Gleichung

Für die Cahn-Hilliard Gleichung sind außer den trivialen keine Lösungen mit expliziter Darstellung bekannt. Als Testfall sowohl für die numerischen Algorithmen als auch für die Fehlerabschätzungen betrachten wir daher die linearisierte Cahn-Hilliard-Gleichung, für die sich explizite Lösungen angeben lassen.

Die linearisierte Cahn-Hilliard Gleichung ist eine sinnvolle Näherung für die Modellierung der ersten Phase der Evolution, der spinodalen Entmischung. Maier-Paape und Wanner haben in [50] und [51] gezeigt, in welchem Sinn sich die Näherung rechtfertigen läßt. Hoppe und Nash haben in [56] untersucht, wie sich dieser Umstand für die numerische Berechnung ausnutzen läßt.

Herleitung der Gleichung

Setzt man

$$(2.15) \quad \rho(t, x) = \bar{\rho} + \varepsilon \eta(t, x)$$

mit Konstanten $\bar{\rho}$ und ε , so ergibt sich in erster Ordnung in ε die folgende linearisierte Gleichung für η :

$$\partial_t \eta = \psi''(\bar{\rho}) \Delta \eta - \gamma \Delta^2 \eta.$$

Schreibt man diese Gleichung als System und verwendet wieder die Bezeichnung ρ statt η , so ergibt sich das Gleichungssystem:

$$(2.16) \quad \partial_t \rho = \Delta w,$$

$$(2.17) \quad w = \psi''(\bar{\rho}) \rho - \gamma \Delta \rho \quad \text{auf } \Omega \times [0; T]$$

$$(2.18) \quad \rho(0) = \rho_0 \quad \text{auf } \Omega.$$

Darstellung der Lösung

Mit l_i bezeichnen wir die i -te Eigenfunktion des Laplace-Operators mit Neumann-Randwerten, den zugehörigen Eigenwert mit λ_i . Das heißt, es soll für $i \in \mathbb{N}$ gelten:

$$\Delta l_i = \lambda_i l_i \quad \text{auf } \Omega \quad \quad \partial_{\nu} l_i = 0 \quad \text{auf } \partial \Omega.$$

Die l_i bilden eine Orthonormalbasis von $L^2(\Omega)$ und eine Orthogonalbasis von $H^{1,2}(\Omega)$. Deswegen läßt sich die Lösung von (2.16)–(2.18) darstellen durch:

$$\rho(t, x) = \sum_{i=1}^{\infty} \rho_i(t) l_i(x).$$

Setzt man diese Darstellung in die Gleichung

$$(2.19) \quad \partial_t \rho = \Delta (\psi''(\bar{\rho}) \rho - \gamma \Delta \rho)$$

ein, so ergibt sich ein entkoppeltes System von gewöhnlichen Differentialgleichungen für die Koeffizienten $\rho_i(t)$:

$$\begin{aligned} \partial_t \sum_{i=1}^{\infty} \rho_i(t) l_i(x) &= \psi''(\bar{\rho}) \Delta \sum_{i=1}^{\infty} \rho_i(t) l_i(x) - \gamma \Delta^2 \sum_{i=1}^{\infty} \rho_i(t) l_i(x) \\ \iff \sum_{i=1}^{\infty} \dot{\rho}_i(t) l_i(x) &= \sum_{i=1}^{\infty} \left(\psi''(\bar{\rho}) \lambda_i \rho_i(t) l_i(x) - \gamma \lambda_i^2 \rho_i(t) l_i(x) \right) \\ \iff \forall i \in \mathbb{N} \quad \dot{\rho}_i(t) &= (\psi''(\bar{\rho}) \lambda_i - \gamma \lambda_i^2) \rho_i(t) \\ \iff \forall i \in \mathbb{N} \quad \rho_i(t) &= \rho_{0_i} \exp \left((\psi''(\bar{\rho}) \lambda_i - \gamma \lambda_i^2) t \right) \end{aligned}$$

In einer Raumdimension, also etwa $\Omega =]0, L[$, ist $l_i(x) = \frac{1}{L\sqrt{\pi}} \cos\left(\frac{i\pi}{L}x\right)$ und entsprechend $\lambda_i = -\frac{i^2\pi^2}{L^2}$. Eine explizite Darstellung der Lösung ist dann:

$$\rho(t, x) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\rho_{0_i}}{L\sqrt{\pi}} \exp \left(\frac{i^2\pi^2}{L^2} \left(\gamma \frac{i^2\pi^2}{L^2} - \psi''(\bar{\rho}) \right) t \right) \cos \left(\frac{i\pi}{L} x \right)$$

2.3 Das Cahn-Larché Modell – Einbeziehung von Elastizität

Das Cahn-Hilliard Modell kann wesentliche Aspekte der Experimente nicht erfassen. Zum einen ist das Modell isotrop und dementsprechend treten Bevorzugungen bestimmter Richtungen nicht in Erscheinung. Während im Experiment neben runden – beispielsweise in Ni-Al-Si Legierungen [55] – auch quaderförmige Partikel – zum Beispiel in Ni-Al Systemen [49] – beobachtet werden, sind Partikel im Cahn-Hilliard Modell stets rund. Zum anderen beobachtet man im Experiment, daß sich Partikel wie an Perlenschnüren aufreihen oder sich gegenseitig abstoßen (siehe Abbildung (1.2) unten).

Als Grund für diese zusätzlichen Effekte werden elastische Verzerrungen angenommen. Man geht davon aus, daß der Gitterabstand der Atome im Metallgitter der Legierung vom Mischungsverhältnis abhängig ist. Die damit verbundenen Deformationen rufen Spannungen im Material hervor. Die Dynamik des Systems – das heißt die Diffusion – läuft nunmehr auch daraufhin hinaus, die aus den elastischen Spannungen resultierende Energie zu minimieren. Dies ergibt also einen zusätzlichen Beitrag zum Energiefunktional und somit zur Differenz der chemischen Potentiale. Aus der Struktur des Metallgitters können sich dann Anisotropien ergeben.

Darüber hinaus kann der Elastizitätstensor, der die elastischen Eigenschaften des Materials beschreibt, von der Konzentration abhängen. Diese inhomogene Elastizität führt zu einer Vielfalt zusätzlicher Effekte. Das so erweiterte Modell geht auf Cahn, Larché [45] und Onuki [59] zurück, die dabei auf Ideen von Eshelby [29] und Khachaturyan [44] zurückgriffen.

Das elastische Gleichgewicht

Deformation, Verschiebung und Verzerrung

In der Elastizitätstheorie [14, 52] geht man davon aus, daß für den betrachteten Körper eine Referenzkonfiguration $\bar{\Omega} \subset \mathbb{R}^d$ bekannt ist. Der aktuelle Zustand des Körpers wird durch eine Abbildung

$$\phi : \bar{\Omega} \longrightarrow \mathbb{R}^d$$

beschrieben. ϕ wird als Deformation bezeichnet, soll hinreichend glatt sein und der Bedingung

$$\det(\nabla\phi) > 0$$

genügen. Die Verschiebung \mathbf{u} ist dann durch

$$\phi(x) = x + \mathbf{u}(x)$$

gegeben. Werden nur kleine Deformationen betrachtet, so ist eine linearisierte Theorie zulässig, in der die wesentlichen Größen nur von der infinitesimalen Verzerrung

$$\mathcal{E}(\mathbf{u}) := \frac{1}{2}(\nabla\mathbf{u} + \nabla\mathbf{u}^T)$$

abhängen. Für symmetrische Tensoren \mathcal{A} und \mathcal{B} verwenden wir das Skalarprodukt

$$\mathcal{A} : \mathcal{B} := \sum_{i,j} \mathcal{A}_{ij} \mathcal{B}_{ij} = \text{Spur}[\mathcal{A}^T \mathcal{B}]$$

und die dazu gehörende Norm

$$|\mathcal{A}| := \sqrt{\mathcal{A} : \mathcal{A}}.$$

Energiedichte und Spannung

Wie oben erwähnt, betrachten wir ein erweitertes Energiefunktional, wobei wir die elastische Energiedichte

$$(2.20) \quad W(\rho, \mathbf{u}) = \frac{1}{2} ((\mathcal{E}(\mathbf{u}) - \bar{\mathcal{E}}(\rho)) : \mathcal{C}(\rho) [\mathcal{E}(\mathbf{u}) - \bar{\mathcal{E}}(\rho)])$$

als zusätzlichen Beitrag haben. $\bar{\mathcal{E}}(\rho)$ ist dabei die Verzerrung im spannungsfreien Zustand bei homogener Konzentration ρ . Wir nehmen an, daß $\bar{\mathcal{E}}(\rho)$ ein Vielfaches der Identität ist, d.h.

$$(2.21) \quad \bar{\mathcal{E}}(\rho) = e\rho\mathbb{1}.$$

Die dabei auftretende Konstante e wird üblicherweise als Fehlpassung bezeichnet. Der Elastizitätstensor vermittelt den Zusammenhang zwischen der Verzerrung \mathcal{E} und der Spannung \mathcal{S} . Diese wiederum ist entscheidend für das Verhalten des Körpers, denn der Körper befindet sich im elastischen Gleichgewicht, wenn

$$(2.22) \quad \text{div } \mathcal{S} = 0$$

ist. Auf den Elastizitätstensor \mathcal{C} gehen wir im nächsten Abschnitt ein.

Aus dem Ausdruck für die elastische Energie ergibt sich, daß die resultierende Spannung

$$\mathcal{S} = \mathcal{C}(\rho) [\mathcal{E}(\mathbf{u}) - \bar{\mathcal{E}}(\rho)]$$

ist, und die Gleichgewichtsbedingung (2.22) liest sich dann als

$$(2.23) \quad \operatorname{div}(\mathcal{C}(\rho) [\mathcal{E}(\mathbf{u}) - \bar{\mathcal{E}}(\rho)]) = 0.$$

Als Randbedingung hierfür nehmen wir $\partial_\nu \mathcal{S} = 0$ an. Während die Konzentration ρ sich auf einer Zeitskala von Tagen bis Wochen ändert, passen sich die elastischen Größen in etwa mit Schallgeschwindigkeit an. Daher ist es gerechtfertigt, die Gültigkeit von (2.23) für alle Zeiten anzunehmen.

Zur Lösbarkeit dieser Gleichung bemerken wir, daß durch (2.23) zwar die Verzerrung \mathcal{E} eindeutig festgelegt ist, nicht jedoch die Verschiebung \mathbf{u} . Dies liegt daran, daß der Differentialoperator \mathcal{E} einen nichttrivialen Kern hat (siehe z.B. [6] p. 247, Bemerkung 3.2):

$$\operatorname{Kern}(\mathcal{E}) = \{ \mathbf{f} : \mathbb{R}^d \longrightarrow \mathbb{R}^d \mid \mathbf{f}(x) = \mathbf{a} \wedge x + \mathbf{b}, \text{ mit } \mathbf{a}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^d \}.$$

Da sich im folgenden herausstellen wird, daß der Beitrag der Elastizität zur Cahn-Hilliard Gleichung nur von $\mathcal{E}(\mathbf{u})$ abhängt, stellt diese Mehrdeutigkeit kein prinzipielles Problem dar. Für die Ableitung der Fehlerabschätzungen wollen wir verabreden, daß wir von den $\mathbf{u} \in (H^{1,2})^d$, die (2.23) lösen, dasjenige mit der kleinsten $L^2(\Omega)$ Norm auswählen. Die gleiche Mehrdeutigkeit zeigt sich auch in den diskretisierten Modellen, die wir im nächsten Kapitel darstellen. Die Matrizen der entstehenden linearen Gleichungssysteme haben dementsprechend nicht vollen Rang. Um Konvergenz der iterativen Gleichungslöser zu erzielen, verwenden wir nach jedem Schritt geeignete Projektionen (siehe [67] für Details).

Der Elastizitätstensor

Die elastischen Eigenschaften des Materials gehen über den Elastizitätstensor \mathcal{C} ein. Wir unterscheiden zwei Fälle: Ist \mathcal{C} konstant, also nicht von ρ abhängig, so sprechen wir von homogener Elastizität. Im anderen also inhomogenen Fall nehmen wir folgende Beziehung an:

$$\mathcal{C}(\rho) = \mathcal{C}^P + m(\rho)(\mathcal{C}^P - \mathcal{C}^M)$$

mit konstanten Tensoren \mathcal{C}^P und \mathcal{C}^M sowie einer glatten Interpolationsfunktion $m(\cdot)$. Für die Nichtlinearität (2.6) mit den Minima 1 und -1 , die die Phasen charakterisieren, suchen wir eine glatte Funktion m , die

$$\begin{aligned} m(-1) &= 0 & m(1) &= 1 \\ m'(-1) &= 0 & m'(1) &= 0 \end{aligned}$$

erfüllt. Wir wählen

$$m(t) = \begin{cases} 0 & \text{für } t \leq -1 \\ \frac{1}{4}(-t^3 + 3t + 2) & \text{für } -1 < t < 1 \\ 1 & \text{für } 1 \leq t. \end{cases}$$

Für die konstanten Tensoren \mathcal{C}^P und \mathcal{C}^M oder im homogenen Fall für

$$\mathcal{C} = (\mathcal{C}_{ijmn})_{i,j,m,n=1,\dots,d}$$

nehmen wir positive Definitheit, also die Existenz eines $d_0 > 0$ mit

$$(2.24) \quad \mathcal{E} : \mathcal{C}[\mathcal{E}] \geq d_0 |\mathcal{E}|^2$$

für alle symmetrischen $\mathcal{E} \in \mathbb{R}^{d \times d}$ und die üblichen Symmetriebedingungen linearer Elastizität an:

$$\mathcal{C}_{ijmn} = \mathcal{C}_{ijnm} = \mathcal{C}_{jimn},$$

$$\mathcal{C}_{ijmn} = \mathcal{C}_{mnij}.$$

Zwei Fälle sind von besonderem Interesse: Im isotropen Fall ist

$$(2.25) \quad \mathcal{C}_{ijmn} = \lambda \delta_{ij} \delta_{mn} + \mu (\delta_{im} \delta_{jn} + \delta_{in} \delta_{jm})$$

mit den Lamé-Konstanten λ und μ . Dann ist für alle symmetrischen $\mathcal{E} \in \mathbb{R}^{d \times d}$:

$$\begin{aligned} \mathcal{C}[\mathcal{E}] &= \left(\sum_{m,n=1}^d \mathcal{C}_{ijmn} \mathcal{E}_{mn} \right)_{i,j=1,\dots,d} = \lambda(\operatorname{tr} \mathcal{E}) \cdot Id + \mu(\mathcal{E} + \mathcal{E}^T) \\ &= \lambda(\operatorname{tr} \mathcal{E}) \cdot Id + 2\mu \mathcal{E}. \end{aligned}$$

Für viele Systeme ist es jedoch realistischer, kubische Symmetrie anzunehmen (siehe [39], p. 168). In diesem Fall gibt es drei Freiheitsgrade für den Elastizitätstensor. Mit der Notation

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_{iiii} &:= \mathcal{C}_{11} & i = 1, \dots, d, \\ \mathcal{C}_{iijj} &:= \mathcal{C}_{12} & i \neq j, \\ \mathcal{C}_{ijij} &:= \mathcal{C}_{44} & i \neq j, \end{aligned}$$

wobei $\mathcal{C}_{11}, \mathcal{C}_{12}$, und \mathcal{C}_{44} gegebene Konstanten sind. Alle anderen Komponenten von \mathcal{C} sind dann entweder durch die kubische Symmetrie gegeben oder sind gleich Null gesetzt. Das bedeutet, daß für jede orthogonale Matrix $Q \in \mathbb{R}^{d \times d}$ mit $\det Q = 1$, die den d -dimensionalen Würfel $[-1, 1]^d$ invariant läßt, gilt

$$Q \mathcal{C}[\mathcal{E}] Q^T = \mathcal{C}[Q \mathcal{E} Q^T].$$

Der Elastizitätstensor kann dann als

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_{ijmn} &= (\mathcal{C}_{11} - \mathcal{C}_{12} - 2\mathcal{C}_{44}) \delta_{ij} \delta_{jm} \delta_{mn} \\ &\quad + \mathcal{C}_{12} \delta_{ij} \delta_{mn} \\ &\quad + \mathcal{C}_{44} (\delta_{im} \delta_{jn} + \delta_{in} \delta_{jm}). \end{aligned}$$

geschrieben werden.

Erweiterung der Cahn-Hilliard-Gleichung

Homogene Elastizität

Die erste Variation des erweiterten Energiefunktional

$$E(\rho) := \int_{\Omega} \left(\psi(\rho) + \frac{\gamma}{2} |\nabla \rho|^2 + W(\rho, \mathbf{u}) \right) dx$$

mit $W(\rho, \mathbf{u}) = \frac{1}{2} (\mathcal{E}(\mathbf{u}) - \bar{\mathcal{E}}(\rho)) : \mathcal{C} [\mathcal{E}(\mathbf{u}) - \bar{\mathcal{E}}(\rho)]$ ist

$$w = \psi'(\rho) - \gamma \Delta \rho - \mathcal{S} : \bar{\mathcal{E}}'(\rho).$$

Für $\bar{\mathcal{E}}$ wie in (2.21) gilt $\bar{\mathcal{E}}'(\rho) = e \mathbb{1}$ also

$$\mathcal{S} : \bar{\mathcal{E}}'(\rho) = e \operatorname{Spur}(\mathcal{S})$$

und somit läßt sich die erweiterte Cahn-Hilliard-Gleichung als

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \Delta (\psi'(\rho) - \gamma \Delta \rho - e \operatorname{Spur}(\mathcal{S})),$$

schreiben.

Inhomogene Elastizität

Hängt der Elastizitätstensor von ρ ab, so ergibt sich ein weiterer Beitrag im Ausdruck für w :

$$(2.26) \quad w = \psi'(\rho) - \gamma \Delta \rho - e \operatorname{Spur}(\mathcal{S}) + \frac{1}{2} (\mathcal{E}(\mathbf{u}) - \bar{\mathcal{E}}(\rho)) : \mathcal{C}'(\rho) (\mathcal{E}(\mathbf{u}) - \bar{\mathcal{E}}(\rho))$$

und die Gleichung wird zu

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \Delta \left(\psi'(\rho) - \gamma \Delta \rho - e \operatorname{Spur}(\mathcal{S}) + \frac{1}{2} (\mathcal{E}(\mathbf{u}) - \bar{\mathcal{E}}(\rho)) : \mathcal{C}'(\rho) (\mathcal{E}(\mathbf{u}) - \bar{\mathcal{E}}(\rho)) \right),$$

Schwache Formulierung

Die schwache Formulierung der Gleichgewichtsbedingung (2.23) ergibt sich durch Multiplikation der Gleichung mit einer Testfunktion $\boldsymbol{\xi} \in (H^{1,2})^d(\Omega)$, Integration über Ω und partieller Integration:

$$\int_{\Omega} \mathcal{E}(\boldsymbol{\xi}) : \mathcal{C}(\rho) (\mathcal{E}(\mathbf{u}) - \bar{\mathcal{E}}(\rho)) \, dx = 0 \quad \forall \boldsymbol{\xi} \in (H^{1,2})^d(\Omega).$$

Um die Notation übersichtlicher zu gestalten, wollen wir folgende Schreibweise einführen: Für zwei Funktionen \mathcal{A} und \mathcal{B} auf Ω , deren Werte symmetrisch $d \times d$ -Matrizen sind sei das Skalarprodukt

$$\langle \mathcal{A}, \mathcal{B} \rangle_{\mathcal{C}(\rho)} := \int_{\Omega} \mathcal{A} : \mathcal{C}(\rho) \mathcal{B} \, dx$$

definiert. Damit läßt sich die schwache Formulierung der Gleichgewichtsbedingung (2.23) wie folgt schreiben:

$$\langle \mathcal{E}(\mathbf{u}) - \bar{\mathcal{E}}(\rho), \mathcal{E}(\boldsymbol{\xi}) \rangle_{\mathcal{C}(\rho)} = 0 \quad \forall \boldsymbol{\xi} \in (H^{1,2})^d(\Omega).$$

Für den allgemeinen, das heißt inhomogenen, Fall ist die schwache Formulierung:

(**P_{C.-L.}**) : *Gesucht sind*

$$\rho \in L^2(0, T; H^{1,2}(\Omega)) \cap H^{1,2}(0, T; (H^{1,2}(\Omega))^*),$$

$$w \in L^2(0, T; H^{1,2}(\Omega)),$$

$$\mathbf{u} \in L^2(0, T; (H^{1,2}(\Omega))^d)$$

so daß für fast jedes $t \in (0, T)$ und für jedes $\zeta \in H^{1,2}(\Omega)$ und jedes $\boldsymbol{\xi} \in (H^{1,2})^d(\Omega)$

$$(2.27) \quad \langle \partial_t \rho, \zeta \rangle = -(\nabla w, \nabla \zeta)$$

$$(2.28) \quad (w, \zeta) = (\psi'(\rho), \zeta) + \gamma (\nabla \rho, \nabla \zeta) - e (\operatorname{Spur}(\mathcal{S}), \zeta) + \frac{1}{2} \left((\mathcal{E}(\mathbf{u}) - \bar{\mathcal{E}}(\rho)) : \mathcal{C}'(\rho) (\mathcal{E}(\mathbf{u}) - \bar{\mathcal{E}}(\rho)), \zeta \right),$$

$$(2.29) \quad 0 = \langle \mathcal{E}(\mathbf{u}) - \bar{\mathcal{E}}(\rho), \mathcal{E}(\boldsymbol{\xi}) \rangle_{\mathcal{C}(\rho)},$$

$$(2.30) \quad \rho(\cdot, 0) = \rho_0 \text{ fast überall in } \Omega$$

wobei wie oben (\cdot, \cdot) das L^2 -Skalarprodukt und $\langle \cdot, \cdot \rangle$ die Dualitätspaarung zwischen dem Sobolevraum $H^{1,2}(\Omega)$ und dem entsprechenden Dualraum $H^{1,2}(\Omega)^*$ bezeichnet und $\rho_0 \in H^{1,2}(\Omega)$ die Bedingung $\int_{\Omega} \psi(\rho_0) \, dx < \infty$ erfüllen möge.

Eigenschaften des Modells

Für das Cahn-Larché Modell geht der Beweis der Existenz von Lösungen auf Garecke zurück [33]. Bei polynomialer Nichtlinearität (2.6) wird dort gezeigt:

2.3 Satz. *Ist $\rho_0 \in H^{1,2}(\Omega)$ und $\int_{\Omega} \psi(\rho_0) dx < \infty$, so existiert eine globale Lösung mit:*

$$\begin{aligned} \rho &\in C^{0, \frac{1}{4}}(0, T; L^2(\Omega)), \\ \partial_t \rho &\in L^2(0, T; (H^{1,2}(\Omega))^*), \\ \mathbf{u} &\in L^\infty(0, T; H^{1,2}(\Omega, \mathbb{R}^d)). \end{aligned}$$

Im Falle homogener Elastizität ist diese Lösung eindeutig bestimmt.

Im Falle logarithmischer Nichtlinearität (2.5) wird unter den dort aufgeführten Voraussetzungen gezeigt:

2.4 Satz. *Es existiert eine globale Lösung mit:*

$$\begin{aligned} \rho &\in C^{0, \frac{1}{4}}(0, T; L^2(\Omega)), \\ \partial_t \rho &\in L^2(0, T; (H^{1,2}(\Omega))^*), \\ \text{und es gibt ein } p > 2, \text{ so daß } &\mathbf{u} \in L^\infty(0, T; H^{1,p}(\Omega, \mathbb{R}^d)) \\ \text{sowie ein } q > 1, \text{ so daß } &\ln(\rho) \in L^q([0, T] \times \Omega), \end{aligned}$$

Im Falle homogener Elastizität ist diese Lösung eindeutig bestimmt.

Für den Fall homogener Elastizität und polynomialer Nichtlinearität haben Carrive, Miranville und Piétrus unabhängig davon Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen in [10] gezeigt.

Wie bei den anderen Modellen auch gilt Massenerhaltung, die Ljapunov-Eigenschaft des Energiefunktionals und die Gradientenflußstruktur.

Kapitel 3

Die Diskretisierung der Modelle

Wie in Kapitel (2) sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d, 1 \leq d \leq 3$ ein beschränktes, konvexes Gebiet und ρ_0 die Konzentration zu Beginn des Betrachtungszeitraums $[0, T]$. Dieses Intervall unterteilen wir in N Zeitschritte, bezeichnen mit τ_n die Zeitschrittweite des n -ten Zeitschrittes und setzen $t_n := \sum_{i=1}^n \tau_i$. Zusätzlich sei $t_0 = 0$ und $\tau = \max_{n=1, \dots, N} \{\tau_n\}$ definiert. Zu jedem der Zeitpunkte t_n konstruieren wir ein Gitter M^n mit maximaler Feinheit

$$h := \max_{s \in M^n} \{\text{diam } s\}.$$

und einen damit verbunden, endlichdimensionalen Ansatzraum V_n^h . Ausgehend von einer Approximation der Anfangsdaten ρ_0 in V_0^h berechnen wir je eine Folge von Funktionen $\rho_n^h \in V_n^h$ und $w_n^h \in V_n^h$, sowie im Falle des Cahn-Larché Modells $\mathbf{u}_n^h \in (V_n^h)^d$. Durch Fortsetzung gewinnen wir Funktionen $\rho^h, w^h \in L^\infty(0, T; H^{1,2}(\Omega))$ und $\mathbf{u}^h \in L^\infty(0, T; (H^{1,2}(\Omega))^d)$, die Lösungen der Gleichungen (2.10)–(2.11) beziehungsweise (2.27)–(2.29) approximieren sollen.

Die Ansatzräume bestehen aus stückweise affinen, stetigen Funktionen und bezüglich der Zeitdiskretisierung unterscheiden wir zwischen dem Cahn-Hilliard Modell und dem Cahn-Larché Modell mit homogener Elastizität auf der einen und dem Cahn-Larché Modell mit inhomogener Elastizität auf der anderen Seite. Für den ersten Fall verweisen wir auf die Darstellung in [35, 67]. Dort werden das implizite Euler-Verfahren, das Crank-Nicolson-Verfahren sowie das θ -Zwischenschritt-Verfahren ausführlich dargestellt.

In diesem Kapitel wenden wir uns nur dem aufwendigeren Cahn-Larché Modell mit inhomogener Elastizität zu. Wir betrachten drei Varianten: das implizite Euler-Verfahren, das entkoppelte Euler-Verfahren und das θ -Zwischenschritt-Verfahren [8] mit Entkoppelung der Elastizität. Für Varianten der ersten beiden werden wir im folgenden Kapitel Konvergenz gegen Lösungen von (2.27) – (2.29) zeigen. Wegen der erheblich höheren Komplexität des θ -Zwischenschritt-Verfahrens ist es sehr schwierig, Konvergenzaussagen für diese Art der Zeitdiskretisierung zu zeigen. Für lineare Probleme wird in [54] quadratische Konvergenz und starke A-Stabilität gezeigt. Diese Eigenschaften erlauben die Wahl vergleichsweise großer

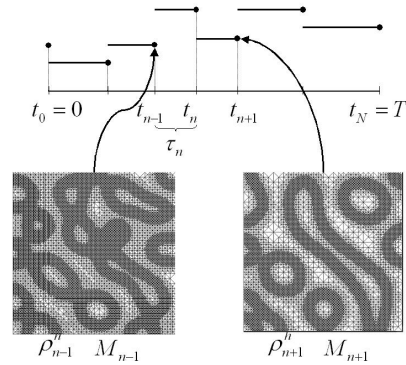


Abbildung 3.1: Überblick Diskretisierung

Zeitschrittweiten und machen das Verfahren insbesondere für die Berechnung des Langzeitverhaltens der Cahn-Hilliard und Cahn-Larché Modells attraktiv.

Im Falle inhomogener Elastizität sind sowohl der Beitrag des elastischen Systems zum chemischen Potential als auch das Elastizitätssystem nichtlinear. Die voll implizite Behandlung dieser Nichtlinearität ist algorithmisch sehr aufwendig. Daher entkoppeln wir für die Implementation das Elastizitätssystem und die Lösung der Diffusionsgleichung. Beim impliziten Euler-Verfahren kann die Gültigkeit der gleichen Konvergenzaussagen gezeigt werden wie beim impliziten Euler-Verfahren ohne Entkoppelung der Elastizität.

3.1 Gitterkonstruktion und Finite-Element Räume

Die Triangulierung

Wir beschränken uns in der Darstellung auf polygonal berandete Gebiete und können daher auf Randapproximation verzichten. Eine Triangulierung M^n ist nun eine Menge von Dreiecken, die das Gebiet, auf dem gerechnet werden soll, überdecken und für die gilt:

$$\forall s_1, s_2 \in M^n : \quad s_1 \cap s_2 = \begin{cases} \emptyset \text{ oder} \\ \text{gemeinsamer Eckpunkt oder} \\ \text{gemeinsame Kante.} \end{cases}$$

Darüber hinaus setzen wir von den Gittern folgendes voraus: Bezeichnen wir zu einem Dreieck $s \in M^n$ die Menge der Dreiecke, die mit s mindestens einen Punkt gemeinsam haben, mit $\omega(s)$, so soll es eine Konstante σ geben, mit $\text{diam } \omega(s) < \sigma \text{ diam } s$. Außerdem soll jedes Dreieck s nur in höchstens k Mengen $\omega(s)$ liegen. Für beliebige Funktionen $f \in H^{k,2}(\Omega)$ gilt dann:

$$\sum_{s \in M^n} |f|_{H^{k,2}(\omega_s)}^2 \leq k |f|_{H^{k,2}(\Omega)}^2.$$

Die Menge der inneren Kanten von M^n bezeichnen wir mit \mathcal{K}^n .

Der Finite Element Raum

Wir wollen stetige, stückweise affine Ansatzfunktionen, also Courant-Elemente, verwenden. Das bedeutet, daß unser Ansatzraum folgende Gestalt hat:

$$V_n^h := \left\{ \varphi \in C^0(\bar{\Omega}) \mid \varphi|_s \text{ ist affin für jedes } s \in M^n \right\} \subset H^{1,2}(\Omega).$$

Für die Elastizitätsgleichung brauchen wir den entsprechenden Raum der vektorwertigen Ansatzfunktionen:

$$(V_n^h)^d := \left\{ \varphi = (\varphi_1, \dots, \varphi_d)^T \mid \varphi_i \in V_n^h \text{ für } 1 \leq i \leq d \right\}.$$

Ist K die Anzahl der Knoten $(x_i)_{1 \leq i \leq K}$ des Gitters, so ist $\dim(V_n^h) = K$ und wir wählen als Basis von V_n^h die übliche „Hütchenbasis“ $(\varphi_i)_{1 \leq i \leq K}$. Diese ist dadurch charakterisiert, daß $\varphi_i(x_j) = \delta_{ij}$ ist. Wir wollen folgende Schreibweise vereinbaren: Ist $v \in V_n^h$, so läßt es sich bezüglich der gewählten Basis darstellen als $v = \sum_{i=1}^K v_i \varphi_i$, wobei die Koeffizienten v_i eindeutig bestimmt sind. Diesen Koeffizientenvektor wollen wir mit \vec{v} bezeichnen.

Für die Diskretisierung verwenden wir die Methode der gelumpten Massen. Zunächst sei daran erinnert, was man unter der Massenmatrix versteht. Seien $p, q \in V_n^h$. Beide lassen sich

bezüglich der gewählten „Hütchenbasis“ darstellen als

$$p = \sum_{i=1}^K \vec{p}_i \varphi_i \quad \text{und} \quad q = \sum_{j=1}^K \vec{q}_j \varphi_j.$$

Dann ist das L^2 -Skalarprodukt von p und q

$$(p, q) = \left(\sum_{i=1}^K \vec{p}_i \varphi_i, \sum_{j=1}^K \vec{q}_j \varphi_j \right) = \sum_{i,j=1}^K \vec{p}_i \vec{q}_j (\varphi_i, \varphi_j) = (\vec{p})^T \tilde{\mathcal{M}} \vec{q},$$

wobei die Massenmatrix $\tilde{\mathcal{M}}$ definiert ist als:

$$(3.1) \quad \tilde{\mathcal{M}}_{ij} := (\varphi_i, \varphi_j) = \int_{\Omega} \varphi_i(x) \varphi_j(x) dx.$$

Für stetige Funktionen $p, q \in C^0(\bar{\Omega})$ nähern wir nun das L^2 -Skalarprodukt mit Hilfe des Lagrange-Interpolations-Operator \mathcal{I}^n wie folgt an:

$$(3.2) \quad (p, q) \approx (p, q)^h := \int_{\Omega} \mathcal{I}^n(pq) dx = \sum_{i=1}^K \mathcal{M}_{ii} \vec{p}_i \vec{q}_i \quad \text{mit} \quad \mathcal{M}_{ii} := \sum_{j=1}^K \tilde{\mathcal{M}}_{ij}.$$

\mathcal{M} sei also die Diagonalmatrix, bei der die Diagonaleinträge die Zeilensummen von $\tilde{\mathcal{M}}$ sind. Diese Näherung ergibt sich, wenn man die Integration in (3.1) nicht exakt sondern mit Hilfe einer Quadraturformel berechnet [63]. Der wesentliche Vorteil dabei ist, daß das Invertieren der gelumpten Massenmatrix wesentlich einfacher wird. Da wir im folgenden ausschließlich die gelumpte Massenmatrix verwenden werden, werden wir den Zusatz „gelumpt“ in Zukunft weglassen und einfach von der Massenmatrix \mathcal{M} sprechen.

Für die Näherung (3.2) gelten folgende Aussagen, die [23] entnommen sind und auch dort bewiesen werden.

3.1 Satz (Fehlerabschätzung für die gelumpten Massen). *Seien $\varphi_1^h, \varphi_2^h \in V_n^h$ und $f \in H^{2,2}(\Omega)$ beliebig, dann gilt:*

$$a) \quad \left| (\varphi_1^h, \varphi_2^h)^h - (\varphi_1^h, \varphi_2^h) \right| \leq ch \|\varphi_1^h\|_{H^{1,2}(\Omega)} \|\varphi_2^h\|_{H^{1,2}(\Omega)}$$

$$b) \quad \left| (\varphi_1^h, f)^h - (\varphi_1^h, f) \right| \leq ch^2 \|\varphi_1^h\|_{H^{1,2}(\Omega)} \|f\|_{H^{2,2}(\Omega)}$$

$$c) \quad \left| (\varphi_1^h, f)^h - (\varphi_1^h, f) \right| \leq ch \left(h \|f\|_{H^{2,2}(\Omega)} + \|f\|_{H^{1,2}(\Omega)} \right) \|\varphi_1^h\|_{L^2(\Omega)}$$

Dem Skalarprodukt $(\cdot, \cdot)^h$ ist eine Seminorm $|\cdot|_h$ zugeordnet, definiert durch:

$$\forall v \in C^0(\bar{\Omega}) \quad |v|_h := \sqrt{(v, v)^h}.$$

Dafür gilt dann der Satz:

3.2 Satz. *Es gibt Konstanten c_0 und c_1 , so daß*

$$\forall \varphi^h \in V_n^h \quad c_0 \|\varphi^h\|_{L^2(\Omega)} \leq |\varphi^h|_h \leq c_1 \|\varphi^h\|_{L^2(\Omega)}.$$

Interpolationsoperatoren und Approximationsaussagen

Für die später zu führenden Beweise benötigen wir ein Standardresultat [15] über V_n^h , das eine Aussage darüber macht, wie gut sich Funktionen in $H^{1,2}$ durch Funktionen in V_n^h annähern lassen.

3.3 Satz (Approximationseigenschaft von V_n^h). Sei $v \in H^{2,2}$. Dann gilt

$$\inf_{\varphi \in V_n^h} \left(\|v - \varphi\|_{L^2(\Omega)} + h \|\nabla(v - \varphi)\|_{L^2(\Omega)} \right) \leq ch^2$$

wobei c eine Konstante ist, die von v abhängig sein kann.

Wie oben bezeichnen wir mit \mathcal{I}^n den zum Gitter M^n gehörenden Lagrange-Interpolations-Operator. Des weiteren benötigen wir den Clément-Interpolations-Operator Π^n zum Gitter M^n . Für jedes Element $s \in M^n$ und jede Funktion $f \in H^{k,2}(\Omega)$ gilt:

$$\|f - \Pi^n f\|_{L^2(s)} \leq C_{\Pi^n} h_s^k |f|_{H^{k,2}(\omega_s)}$$

sowie

$$\|\nabla(f - \Pi^n f)\|_{L^2(s)} \leq C_{\Pi^n} h_s^{k-1} |f|_{H^{k,2}(\omega_s)}.$$

Entsprechend gilt für Kanten e :

$$\|f - \Pi^n f\|_{L^2(e)} \leq C_{\Pi^n} h_e^{k-\frac{1}{2}} |f|_{H^{k,2}(\omega_s)}.$$

Wie oben ist dabei $\omega(s)$ die Menge der Dreiecke, die mit dem Dreieck s mindestens einen Punkt gemeinsam haben.

Semidiskretes Schema und Matrixdarstellung

Wesentliche Idee des Finite-Element-Ansatzes ist es, in der Variationsformulierung den Raum $H^{1,2}$ durch einen endlich-dimensionalen Teilraum S^h zu ersetzen und zwar sowohl was den Bereich, in dem man die Lösungen sucht, als auch was die Menge der Testfunktionen angeht. Dazu sei

$$V^h = \left\{ \varphi^h \in C(0, T; H^{1,2}) \mid \varphi^h(t) \in V_n^h \text{ für } t_{n-1} < t \leq t_n \right\}$$

Das semidiskrete Schema für die Cahn-Hilliard Gleichung ist also:

(PC.-H.,semi) : Gesucht sind $\rho^h \in V^h$, $w^h \in V^h$ so, daß für $n = 1, \dots, N$ und jedes $t_{n-1} < t < t_n$ gilt:

$$(3.3) \quad (\partial_t \rho^h, \varphi^h)^h = -(\nabla w^h, \nabla \varphi^h)$$

$$(3.4) \quad (w^h, \varphi^h)^h = (\psi'(\rho^h), \varphi^h)^h + \gamma(\nabla \rho^h, \nabla \varphi^h)$$

für jedes $\varphi^h \in V_n^h$.

Entsprechend formulieren für das Cahn-Larché Modell:

($\mathbf{P}_{\mathbf{C}\text{-L.,semi}}$): Gesucht sind $\rho^h \in V^h$, $w^h \in V^h$ und $\mathbf{u}^h \in (V^h)^d$ so, daß für $n = 1, \dots, N$ und jedes $t_{n-1} < t < t_n$ gilt:

$$(3.5) \quad (\partial_t \rho^h, \varphi^h)^h = -(\nabla w^h, \nabla \varphi^h)$$

$$(3.6) \quad (w^h, \varphi^h)^h = (\psi'(\rho^h), \varphi^h)^h + \gamma(\nabla \rho^h, \nabla \varphi^h) - e(\text{Spur}(\mathcal{S}^h), \varphi^h)^h$$

$$(3.7) \quad + ((\mathcal{E}(\mathbf{u}^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho^h)) : \mathcal{C}'(\rho^h) (\mathcal{E}(\mathbf{u}^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho^h)), \varphi^h)^h,$$

$$(3.8) \quad 0 = \left\langle \mathcal{E}(\mathbf{u}^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho^h), \mathcal{E}(\boldsymbol{\xi}^h) \right\rangle_{\mathcal{C}(\rho^h)},$$

für jedes $\varphi^h \in V_n^h$ und jedes $\boldsymbol{\xi}^h \in (V^h)^d$.

Dabei sei $\mathcal{S}^h := \mathcal{C}(\rho^h) (\mathcal{E}(\mathbf{u}^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho^h))$. Für die $(\cdot, \cdot)^h$ -Terme haben wir im letzten Abschnitt schon eine Matrixdarstellung mit Hilfe der Massenmatrix hergeleitet. Analog verfahren wir mit den $(\nabla \cdot, \nabla \cdot)$ -Termen durch Einführung der Steifigkeitsmatrix \mathcal{A} . Diese sei definiert durch

$$\mathcal{A}_{ij} := (\nabla \varphi_i, \nabla \varphi_j) = \int_{\Omega} \nabla \varphi_i \nabla \varphi_j \, dx,$$

wobei φ_i und φ_j jeweils Basisfunktionen aus der Hütchenbasis sind. Damit läßt sich beispielsweise der Vektor $(\nabla w^h, \nabla \varphi_i)_{i=1, \dots, K}$ schreiben als $\mathcal{A} \vec{w}^h$.

Die Matrixdarstellung des Systems (3.3)–(3.4) lautet dann:

$$\begin{aligned} \mathcal{M} \partial_t \vec{\rho}^h &= -\mathcal{A} \vec{w}^h \\ \mathcal{M} \vec{w}^h &= \overrightarrow{\mathcal{M} \psi'(\rho^h)} + \gamma \mathcal{A} \vec{\rho}^h. \end{aligned}$$

Um die Elastizitätsterme auch durch Matrizen darstellen zu können, legen wir zunächst eine Basis $(\boldsymbol{\xi}_i)_{1 \leq i \leq d \cdot K}$ von $(V_n^h)^d$ fest.

$$\boldsymbol{\xi}_{j+di} := e_i \varphi_j$$

mit e_i als dem i -ten Einheitsvektor in \mathbb{R}^d . Dann können wir die Elastizitätsmatrix \mathcal{G} definieren durch:

$$\mathcal{G}_{ij} := \langle \mathcal{E}(\boldsymbol{\xi}_i), \mathcal{E}(\boldsymbol{\xi}_j) \rangle_{\mathcal{C}(\rho_n^h)} = \int_{\Omega} \mathcal{E}(\boldsymbol{\xi}_i) : \mathcal{C}(\rho_n^h) \mathcal{E}(\boldsymbol{\xi}_j) \, dx \quad 1 \leq i, j \leq d \cdot K.$$

Da \mathcal{E} - wie schon im vorherigen Kapitel erwähnt - nicht injektiv ist, ist die Matrix \mathcal{G} nicht regulär. Zusätzlich sei $\bar{\mathcal{G}}$ erklärt als

$$\bar{\mathcal{G}}_{ij} := \langle \mathcal{E}(\boldsymbol{\xi}_i), \bar{\mathcal{E}}(\varphi_j) \rangle_{\mathcal{C}(\rho_n^h)} = \int_{\Omega} \mathcal{E}(\boldsymbol{\xi}_i) : \mathcal{C}(\rho_n^h) \bar{\mathcal{E}}(\varphi_j) \, dx \quad 1 \leq i \leq d \cdot K, 1 \leq j \leq K.$$

Der eine Beitrag der Elastizität ist dann

$$\begin{aligned} (\text{Spur}(\mathcal{S}^h), \varphi_i^h) &= \langle \mathcal{E}(\mathbf{u}^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho^h), \bar{\mathcal{E}}(\varphi_i^h) \rangle_{\mathcal{C}(\rho^h)} \\ &= \langle \mathcal{E}(\mathbf{u}^h), \bar{\mathcal{E}}(\varphi_i^h) \rangle_{\mathcal{C}(\rho^h)} - e \int_{\Omega} \rho^h \mathbb{1} : \mathcal{C} e \varphi_i^h \mathbb{1} \, dx \\ &= (\bar{\mathcal{G}}^T \vec{\mathbf{u}}^h)_i - e^2 (\mathbb{1} : \mathcal{C} \mathbb{1}) (\tilde{\mathcal{M}} \vec{\rho}^h)_i. \end{aligned}$$

Damit läßt sich (3.5)–(3.8) im Falle homogener Elastizität als

$$(3.9) \quad \mathcal{M} \partial_t \vec{\rho}^h = -\mathcal{A} \vec{w}^h$$

$$(3.10) \quad \mathcal{M}\bar{w}^h = \mathcal{M}\overline{\psi'(\rho^h)} + (\gamma\mathcal{A} + e^2(\mathbb{1} : \mathcal{C}\mathbb{1})\tilde{\mathcal{M}})\bar{\rho}^h - \bar{\mathcal{G}}^T \bar{\mathbf{u}}^h$$

$$(3.11) \quad \mathcal{G}\bar{\mathbf{u}}^h = \bar{\mathcal{G}}\bar{\rho}^h$$

schreiben. Im inhomogenen Fall ist die zweite Gleichung

$$\begin{aligned} \mathcal{M}\bar{w}^h &= \mathcal{M}\overline{\psi'(\rho^h)} + (\gamma\mathcal{A} + e^2(\mathbb{1} : \mathcal{C}\mathbb{1})\tilde{\mathcal{M}})\bar{\rho}^h - \bar{\mathcal{G}}^T \bar{\mathbf{u}}^h \\ &\quad + \mathcal{M}\left(\overline{(\mathcal{E}(\mathbf{u}^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho^h)) : \mathcal{C}'(\rho^h) (\mathcal{E}(\mathbf{u}^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho^h))}\right) \end{aligned}$$

Diese semidiskreten Schemata bilden jeweils K -dimensionale Systeme von gewöhnlichen Differentialgleichungen. Um diese näherungsweise zu lösen werden wir im nächsten Abschnitt verschiedene Diskretisierungen der Zeitableitung betrachten.

3.2 Das implizite Euler-Verfahren

Die übliche Finite-Element Approximation von $(\mathbf{P}_{\mathbf{C},-\mathbf{L}})$ mit Hilfe des impliziten Euler-Verfahrens führt auf das Schema

$(\mathbf{P}_{\mathbf{C},-\mathbf{L}}, \mathbf{Euler})$: Ist für $n = 1, \dots, N$ $\rho_{n-1}^h \in V_{n-1}^h$ gegeben, so bestimme $\rho_n^h \in V_n^h$, $w_n^h \in V_n^h$ und $\mathbf{u}_n^h \in (V_n^h)^d$ so, daß für jedes $\varphi^h \in V_n^h$ und jedes $\boldsymbol{\xi}^h \in (V_n^h)^d$ gilt:

$$(3.12) \quad (\partial_{\tau_n} \rho_n^h, \varphi^h)^h = -(\nabla w_n^h, \nabla \varphi^h)$$

$$(3.13) \quad (w_n^h, \varphi^h)^h = (\psi'(\rho_n^h), \varphi^h)^h + \gamma(\nabla \rho_n^h, \nabla \varphi^h) - e(\text{Spur}(\mathcal{S}_n^h), \varphi^h)^h \\ + ((\mathcal{E}(\mathbf{u}_n^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho_n^h)) : \mathcal{C}'(\rho_n^h) (\mathcal{E}(\mathbf{u}_n^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho_n^h)), \varphi^h)^h,$$

$$(3.14) \quad 0 = \left\langle \mathcal{E}(\mathbf{u}_n^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho_n^h), \mathcal{E}(\boldsymbol{\xi}^h) \right\rangle_{\mathcal{C}(\rho_n^h)}.$$

Um die Lösbarkeit des Schemas zu zeigen und für die Konvergenzbetrachtungen im nächsten Kapitel ist es hilfreich, eine Variante zu untersuchen, bei der jeder Zeitschritt die Lösung eines Minimierungsproblems darstellt.

Das Minimierungsproblem

In jedem Zeitschritt betrachten wir das Funktional auf $V_n^h \times (V_n^h)^d$:

$$E^n(r, \mathbf{v}) := \int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{2\tau_n} |\nabla \Delta_h^{-1}(r - \mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h)|^2 + \frac{\gamma}{2} |\nabla r|^2 \right\} dx + (\psi(r) + W(r, \mathbf{v}), 1)^h,$$

wobei W die elastische Energiedichte definiert in (2.20) und der Operator $\Delta_h^{-1} : V_n^h \rightarrow V_n^h$ analog zu (2.13) folgendermaßen definiert sei: Zu gegebener Funktion $f^h \in V_n^h$ sei $v^h = \Delta_h^{-1} f^h$ die Lösung von

$$(f^h, \varphi^h)^h = -(\nabla v^h, \nabla \varphi^h) \quad \forall \varphi^h \in V_n^h,$$

die $\int_{\Omega} v^h dx = 0$ erfüllt.

Wir bestimmen dann die Lösung zum nächsten Zeitpunkt t_n als Minimalstellen von E^n :

$(\mathbf{P}_{\text{Min.}})$: Gesucht sind $\rho_n^h \in V_n^h$ und $\mathbf{u}_n^h \in (V_n^h)^d$ so, daß

$$(\rho_n^h, \mathbf{u}_n^h) \text{ ist globales Minimum von } E^n.$$

Existenz von globalen Minima von E^n

Wir wollen die Existenz von globalen Minima von E^n und damit die Lösbarkeit von $(\mathbf{P}_{\text{Min.}})$ zeigen und verwenden dabei die direkte Methode. Dazu zeigen wir Beschränktheit nach unten, Koerzivität und Stetigkeit des Funktionals.

Zunächst ist offensichtlich, daß wegen der positiven Definitheit von \mathcal{C} das Funktional E^n durch Null nach unten beschränkt ist.

Koerzivität von E^n

Wir wollen zeigen, daß E^n auf dem Raum $V_n^h \times (V_n^h)^d$ koerziv ist. Dazu bemerken wir, daß aufgrund von Satz (3.2) und der Youngschen Ungleichung für beliebige $f^h \in V_n^h$ und $\delta_1 > 0$ gilt:

$$\|f^h\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq \frac{1}{c_1^2} |f^h|_h^2 = -\frac{1}{c_1^2} (\nabla \Delta_h^{-1} f^h, \nabla f^h) \leq \frac{1}{2c_1^2} \left(\frac{\|\nabla \Delta_h^{-1} f^h\|_{L^2(\Omega)}^2}{\delta_1} + \delta_1 \|\nabla f^h\|_{L^2(\Omega)}^2 \right).$$

Die elastische Energiedichte läßt sich ebenfalls unter Verwendung der Youngschen Ungleichung mit $\delta = 2$ und der positiven Definitheit des Elastizitätstensors (2.24) nach unten abschätzen

$$\begin{aligned} W(r, \mathbf{v}) &= \frac{1}{2} ((\mathcal{E}(\mathbf{v}) - \bar{\mathcal{E}}(r)) : \mathcal{C}(r) ((\mathcal{E}(\mathbf{v}) - \bar{\mathcal{E}}(r))) \\ &= \frac{1}{2} (\mathcal{E}(\mathbf{v}) : \mathcal{C}\mathcal{E}(\mathbf{v}) - 2\mathcal{E}(\mathbf{v}) : \mathcal{C}\bar{\mathcal{E}}(r) + \bar{\mathcal{E}}(r) : \mathcal{C}\bar{\mathcal{E}}(r)) \\ &\geq \frac{1}{2} \left(\mathcal{E}(\mathbf{v}) : \mathcal{C}\mathcal{E}(\mathbf{v}) - \left(\frac{1}{2}\mathcal{E}(\mathbf{v}) : \mathcal{C}\mathcal{E}(\mathbf{v}) + 2\bar{\mathcal{E}}(r) : \mathcal{C}\bar{\mathcal{E}}(r) \right) + \bar{\mathcal{E}}(r) : \mathcal{C}\bar{\mathcal{E}}(r) \right) \\ &\geq \frac{d_0}{4} |\mathcal{E}(\mathbf{v})|^2 - \frac{1}{2} d_0 e^2 \text{Spur}(\mathbb{1})^2 |r|^2. \end{aligned}$$

Somit ist mit der Äquivalenz der gelumpten Massenhilbnorm mit der L^2 -norm auf V_n^h (Satz (3.2)):

$$\begin{aligned} (W(r, \mathbf{v}), 1)^h &\geq \left(\frac{d_0}{4} |\mathcal{E}(\mathbf{v})|^2 - \frac{1}{2} d_0 e^2 \text{Spur}(\mathbb{1})^2 |r|^2, 1 \right)^h \\ &\geq \frac{d_0}{4} |\mathcal{E}(\mathbf{v})|_h^2 - \frac{1}{2} d_0 e^2 \text{Spur}(\mathbb{1})^2 |r|_h^2 \\ &\geq \frac{c_0^2 d_0}{4} \|\mathcal{E}(\mathbf{v})\|_{L^2(\Omega)}^2 - \frac{1}{2} c_1^2 d_0 e^2 \text{Spur}(\mathbb{1})^2 \|r\|_{L^2(\Omega)}^2. \end{aligned}$$

Da die Nichtlinearität ψ durch Null nach unten abgeschätzt werden kann, haben wir mit den beiden zuvor gezeigten Abschätzungen:

$$\begin{aligned} E^n(r, \mathbf{v}) &= \frac{1}{2\tau_n} \|\nabla \Delta_h^{-1} (r - \mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h)\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{\gamma}{2} \|\nabla r\|_{L^2(\Omega)}^2 + (\psi(r) + W(r, \mathbf{v}), 1)^h \\ &\geq \frac{1}{4\tau_n} \left(\delta_1 c_1^2 \|r - \mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h\|_{L^2(\Omega)}^2 - \delta_1^2 \|\nabla (r - \mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h)\|_{L^2(\Omega)}^2 \right) \\ &\quad + \frac{\gamma}{2} \|\nabla r\|_{L^2(\Omega)}^2 + (\psi(r), 1)^h + \frac{c_0^2 d_0}{4} \|\mathcal{E}(\mathbf{v})\|_{L^2(\Omega)}^2 - \frac{1}{2} c_1^2 d_0 e^2 \text{Spur}(\mathbb{1})^2 \|r\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ &\geq \frac{1}{4\tau_n} \left[\delta_1 c_1^2 \left(\frac{\|r\|_{L^2(\Omega)}^2}{2} - \|\mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h\|_{L^2(\Omega)}^2 \right) \right. \\ &\quad \left. - 2\delta_1^2 \left(\|\nabla r\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\nabla \mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h\|_{L^2(\Omega)}^2 \right) \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{\gamma}{2} \|\nabla r\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{c_0^2 d_0}{4} \|\mathcal{E}(\mathbf{v})\|_{L^2(\Omega)}^2 - \frac{1}{2} c_1^2 d_0 e^2 \text{Spur}(\mathbb{1})^2 \|r\|_{L^2(\Omega)}^2 \\
& \geq \left(\frac{\delta_1 c_1^2}{8\tau_n} - \frac{1}{2} c_1^2 d_0 e^2 \text{Spur}(\mathbb{1})^2 \right) \|r\|_{L^2(\Omega)}^2 + \left(\frac{\gamma}{2} - \frac{\delta_1^2}{2\tau_n} \right) \|\nabla r\|_{L^2(\Omega)}^2 \\
& \quad + \frac{c_0^2 d_0}{4} \|\mathcal{E}(\mathbf{v})\|_{L^2(\Omega)}^2 - \left(\frac{\delta_1 c_1}{2\tau_n} \|\mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{\delta_1^2}{\tau_n} \|\nabla \mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h\|_{L^2(\Omega)}^2 \right).
\end{aligned}$$

Damit die Koeffizienten vor den ersten beiden Termen positiv sind, muß

$$4d_0 e^2 \text{Spur}(\mathbb{1})^2 \tau_n < \delta_1 < \sqrt{\frac{\gamma \tau_n}{2}}$$

sein. Ein solches δ_1 existiert genau dann, wenn

$$\tau_n < \frac{\gamma}{2c_*^2}$$

mit $c_* = 4d_0 e^2 \text{Spur}(\mathbb{1})^2$ ist, was im folgenden für alle Zeitschritte als gültig angenommen wird. Zusammen mit der Kornschen Ungleichung folgt die Koerzivität von $E^n(r, \mathbf{v})$ auf dem Raum $V_n^h \times (V_n^h)^d$.

Stetigkeit

Der erste und dritte Term von $E^n(r, \mathbf{v})$ sind konvex und somit stetig auf $V_n^h \times (V_n^h)^d$. Der zweite Term $\int_{\Omega} \psi(r) dx$ ist die Summe aus einem konvexen und einem konkaven Funktional und somit ebenfalls stetig auf $V_n^h \times (V_n^h)^d$. Die Stetigkeit von W ist klar. Aus der Beschränktheit nach unten, der Koerzivität und der Stetigkeit von E^n folgt die Existenz eines globalen Minimums.

Euler-Lagrange Gleichungen für E^n

Die Lösung ρ_n^h und \mathbf{u}_n^h von $(\mathbf{P}_{\text{Min.}})$ erfüllen die Euler-Lagrange Gleichungen zum Funktional E^n , die wir im folgenden herleiten wollen. Da die Differenzierbarkeit der auftretenden parameterabhängigen Integrale unproblematisch ist, können wir die erste Variation von E^n direkt bestimmen:

$$\begin{aligned}
\delta E^n(r, \mathbf{v}; \varphi^h, \boldsymbol{\xi}^h) &= \frac{d}{d\varepsilon} E^n(r + \varepsilon \varphi^h, \mathbf{v} + \varepsilon \boldsymbol{\xi}^h) \Big|_{\varepsilon=0} \\
&= \frac{d}{d\varepsilon} \left[\int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{2\tau_n} |\nabla \Delta_h^{-1}(r + \varepsilon \varphi^h - \mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h)|^2 + \frac{\gamma}{2} |\nabla(r + \varepsilon \varphi^h)|^2 \right\} dx \right. \\
&\quad \left. + \left(\psi(r + \varepsilon \varphi^h) + W(r + \varepsilon \varphi^h, \mathbf{v} + \varepsilon \boldsymbol{\xi}^h), 1 \right)^h \right]_{\varepsilon=0} \\
&= \frac{1}{\tau_n} (\nabla \Delta_h^{-1}(r - \mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h), \nabla \Delta_h^{-1} \varphi^h) + \gamma (\nabla r, \nabla \varphi^h) + (\psi'(r), \varphi^h)^h \\
&\quad - e(\mathbb{1} : C(r) (\mathcal{E}(\mathbf{v}) - \bar{\mathcal{E}}(r)), \varphi^h)^h \\
&\quad + \frac{1}{2} ((\mathcal{E}(\mathbf{v}) - \bar{\mathcal{E}}(r)) : C'(r) (\mathcal{E}(\mathbf{v}) - \bar{\mathcal{E}}(r)), \varphi^h)^h \\
&\quad + \left\langle \mathcal{E}(\mathbf{v}) - \bar{\mathcal{E}}(r), \mathcal{E}(\boldsymbol{\xi}^h) \right\rangle_{C(r)}.
\end{aligned}$$

Für ρ_n^h und \mathbf{u}_n^h gilt also für beliebige $\varphi^h \in V_n^h$ und $\boldsymbol{\xi}^h \in (V_n^h)^d$

$$0 = \delta E^n(\rho_n^h, \mathbf{u}_n^h; \varphi^h, \boldsymbol{\xi}^h)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{\tau_n} (\nabla \Delta_h^{-1} (\rho_n^h - \mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h), \nabla \Delta_h^{-1} \varphi^h) + \gamma (\nabla \rho_n^h, \nabla \varphi^h) + (\psi'(\rho_n^h), \varphi^h)^h \\
&\quad - e (\text{Spur}(\mathcal{S}_n^h), \varphi^h)^h + \frac{1}{2} ((\mathcal{E}(\mathbf{u}_n^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho_n^h)) : \mathcal{C}'(\rho_n^h) (\mathcal{E}(\mathbf{u}_n^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho_n^h)), \varphi^h)^h \\
&\quad + \left\langle \mathcal{E}(\mathbf{u}_n^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho_n^h), \mathcal{E}(\boldsymbol{\xi}^h) \right\rangle_{\mathcal{C}(\rho_n^h)}.
\end{aligned}$$

Dabei sei $\mathcal{S}_n^h := \mathcal{C}(\rho_n^h) (\mathcal{E}(\mathbf{u}_n^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho_n^h))$. Definieren wir nun

$$(3.15) \quad w_n^h := \Delta_h^{-1} \frac{\rho_n^h - \mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h}{\tau_n},$$

so folgt wegen der Definition von Δ_h^{-1} für beliebige $\varphi^h \in V_n^h$:

$$\left(\frac{\rho_n^h - \mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h}{\tau_n}, \varphi^h \right)^h = - (\nabla w_n^h, \nabla \varphi^h),$$

und

$$\begin{aligned}
(w_n^h, \varphi^h) &= \gamma (\nabla \rho_n^h, \nabla \varphi^h) + (\psi'(\rho_n^h), \varphi^h)^h \\
&\quad - e (\text{Spur}(\mathcal{S}_n^h), \varphi^h)^h + \frac{1}{2} ((\mathcal{E}(\mathbf{u}_n^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho_n^h)) : \mathcal{C}'(\rho_n^h) (\mathcal{E}(\mathbf{u}_n^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho_n^h)), \varphi^h)^h
\end{aligned}$$

sowie für beliebige $\boldsymbol{\xi}^h \in (V_n^h)^d$

$$0 = \left\langle \mathcal{E}(\mathbf{u}_n^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho_n^h), \mathcal{E}(\boldsymbol{\xi}^h) \right\rangle_{\mathcal{C}(\rho_n^h)}$$

Das Schema $(\mathbf{P}_{\mathbf{C.-L.,Euler}})$ läuft also auf die Lösung der Euler-Lagrange Gleichungen des Funktionals E^n hinaus. Der oben geführte Beweis der Existenz eines globalen Minimums garantiert demzufolge auch die Lösbarkeit des Schemas $(\mathbf{P}_{\mathbf{C.-L.,Euler}})$. Die Äquivalenz der Schemata $(\mathbf{P}_{\mathbf{C.-L.,Euler}})$ und $(\mathbf{P}_{\text{Min.}})$ ist jedoch nur dann gegeben, wenn E^n nur genau einen stationären Punkt hat. Dann ist $(\mathbf{P}_{\mathbf{C.-L.,Euler}})$ eindeutig lösbar und die Lösung ist dann das globale Minimum von E^n . Das Funktional E^n ist jedoch für kein $\tau_n > 0$ global konvex: Die Berechnung der zweiten Variation ergibt nämlich

$$\begin{aligned}
\delta^2 E^n(r, \mathbf{v}; \varphi^h, \boldsymbol{\xi}^h) &= \frac{d^2}{d\varepsilon^2} E^n(r + \varepsilon \varphi^h, \mathbf{v} + \varepsilon \boldsymbol{\xi}^h) \Big|_{\varepsilon=0} \\
&= \frac{1}{\tau_n} \|\nabla \Delta_h^{-1} \varphi^h\|_{L^2(\Omega)}^2 + \gamma \|\nabla \varphi^h\|_{L^2(\Omega)}^2 + (\psi''(r) \varphi^h, \varphi^h)^h \\
&\quad + \left((\mathcal{E}(\boldsymbol{\xi}^h) - \bar{\mathcal{E}}(\varphi^h)) : \mathcal{C}(r) (\mathcal{E}(\boldsymbol{\xi}^h) - \bar{\mathcal{E}}(\varphi^h)), 1 \right)^h \\
&\quad + 2 \left((\mathcal{E}(\boldsymbol{\xi}^h) - \bar{\mathcal{E}}(\varphi^h)) : \mathcal{C}'(r) \varphi^h (\mathcal{E}(\mathbf{v}) - \bar{\mathcal{E}}(r)), 1 \right)^h \\
&\quad + \frac{1}{2} \left((\mathcal{E}(\mathbf{v}) - \bar{\mathcal{E}}(r)) : \mathcal{C}''(r) \varphi^{h^2} (\mathcal{E}(\mathbf{v}) - \bar{\mathcal{E}}(r)), 1 \right)^h.
\end{aligned}$$

Insbesondere der letzte Summand ist problematisch, da zum einen $\mathcal{C}''(r)$ je nachdem, welchen Wert r annimmt positiv oder negativ definit ist, zum anderen $\mathcal{E}(\mathbf{v}) - \bar{\mathcal{E}}(r)$ nicht als beschränkt angenommen werden kann.

Fortsetzung in der Zeit

Haben wir auf diese Weise Folgen von Finite-Element Funktionen ρ_n^h , w_n^h und \mathbf{u}_n^h erzeugt, so können wir daraus durch Fortsetzung in der Zeit Funktionen $\rho^h, w^h \in L^\infty(0, T; H^{1,2}(\Omega))$

und $\mathbf{u}^h \in L^\infty(0, T; (H^{1,2}(\Omega))^d)$ konstruieren. Zwei Möglichkeiten, dies zu tun, werden im folgenden eine Rolle spielen: Zum einen betrachten wir die die stückweise konstante, linksstetige Fortsetzung der ρ_n^h bzw. der w_n^h in der Zeit. Das heißt wir setzen

$$\begin{aligned}\rho^h(t, \cdot) &:= \rho_n^h(\cdot) && \text{für } t_{n-1} < t \leq t_n \\ w^h(t, \cdot) &:= w_n^h(\cdot) && \text{für } t_{n-1} < t \leq t_n.\end{aligned}$$

Zum anderen verwenden wir die stückweise affine Fortsetzung

$$\begin{aligned}\bar{\rho}^h(t, \cdot) &:= \beta \rho_{n-1}^h(\cdot) + (1 - \beta) \rho_n^h(\cdot) \\ \bar{w}^h(t, \cdot) &:= \beta w_{n-1}^h(\cdot) + (1 - \beta) w_n^h(\cdot) \\ \bar{\mathbf{u}}^h(t, \cdot) &:= \beta \mathbf{u}_{n-1}^h(\cdot) + (1 - \beta) \mathbf{u}_n^h(\cdot)\end{aligned}$$

mit $t = \beta t_{n-1} + (1 - \beta) t_n$ und $0 \leq \beta \leq 1$. Für diese Fortsetzungen werden wir in Kapitel 4 Konvergenz in Räumen wie $L^\infty(0, T; L^2(\Omega))$ zeigen. Darüber hinaus zeigen wir in Kapitel 5 für den Fall homogener Elastizität a posteriori Fehlerabschätzungen.

3.3 Das entkoppelte Euler-Verfahren

Um ein einfacheres numerisches Schema zu erhalten entkoppeln wir die Lösung der Diffusionsgleichung von der Lösung der Elastizitätsgleichung. Dies führt zu einem Verfahren mit zwei Schritten:

(P_{C.-L.}entkoppelt) : Ist für $n = 1, \dots, N$ $\rho_{n-1}^h \in V_{n-1}^h$ und $\mathbf{u}_{n-1}^h \in (V_{n-1}^h)^d$ gegeben, so bestimme im ersten Schritt $\rho_n^h \in V_n^h$, $w_n^h \in V_n^h$ so, daß für jedes $\varphi^h \in V_n^h$ gilt:

$$(3.16) \quad (\partial_{\tau_n} \rho_n^h, \varphi^h)^h = - (\nabla w_n^h, \nabla \varphi^h)$$

$$(3.17) \quad (w_n^h, \varphi^h)^h = (\psi'(\rho_n^h), \varphi^h)^h + \gamma (\nabla \rho_n^h, \nabla \varphi^h) - e (\text{Spur}(\mathcal{S}_{n-1}^h), \varphi^h)^h$$

$$(3.18) \quad + ((\mathcal{E}(\mathbf{u}_{n-1}^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho_n^h)) : \mathcal{C}'(\rho_n^h) (\mathcal{E}(\mathbf{u}_{n-1}^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho_n^h)), \varphi^h)^h,$$

wobei $\mathcal{S}_{n-1}^h = \mathcal{C}(\rho_n^h) (\mathcal{E}(\mathbf{u}_{n-1}^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho_n^h))$ sei. Im zweiten Schritt bestimme zu dem berechneten ρ_n^h ein $\mathbf{u}_n^h \in (V_n^h)^d$, so daß für jedes $\boldsymbol{\xi}^h \in (V_n^h)^d$ gilt:

$$(3.19) \quad 0 = \left\langle \mathcal{E}(\mathbf{u}_n^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho_n^h), \mathcal{E}(\boldsymbol{\xi}^h) \right\rangle_{\mathcal{C}(\rho_n^h)}$$

Analog zum Vorgehen beim impliziten Euler-Verfahren betrachten wir die jeweiligen Schritte als Minimierungsprobleme. Wir setzen für gegebene $\bar{\rho}^h \in V^h$ und $\bar{\mathbf{u}}^h \in (V^h)^d$:

$$E_1^{n, \bar{\mathbf{u}}^h}(r) := \int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{2\tau_n} |\nabla \Delta_h^{-1}(r - \mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h)|^2 + \frac{\gamma}{2} |\nabla r|^2 \right\} dx + (\psi(r) + W(r, \bar{\mathbf{u}}^h), 1)^h$$

und

$$E_2^{n, \bar{\rho}^h}(\mathbf{v}) := \int_{\Omega} \mathcal{I}^n W(\bar{\rho}^h, \mathbf{v}) dx = (W(\bar{\rho}^h, \mathbf{v}), 1)^h.$$

Wir betrachten also das Verfahren

(P_{Min.}entkoppelt) : Gesucht sind $\rho_n^h \in V_n^h$ und $\mathbf{u}_n^h \in (V^h)^d$ so, daß

$$\begin{aligned}\rho_n^h &\text{ ist globales Minimum von } E_1^{n, \mathbf{u}_{n-1}^h}(\cdot), \\ \mathbf{u}_n^h &\text{ ist globales Minimum von } E_2^{n, \rho_n^h}(\cdot).\end{aligned}$$

Analog zu dem Vorgehen für E^n läßt sich zeigen, daß die beiden Teilschritte des Verfahrens (**P**C.–**L**.,**entkoppelt**) Euler-Lagrange Gleichungen zu den entsprechenden Funktionalen sind. Beschränktheit nach unten, Koerzivität und Stetigkeit übertragen sich von E^n auf E_1^{n,\bar{u}^h} und $E_2^{n,\bar{\rho}^h}$. Damit ist auch wie oben die Existenz der Minima und somit die Lösbarkeit der diskreten Probleme gesichert.

3.4 Das θ -Zwischenschritt-Verfahren

Beim θ -Zwischenschritt-Verfahren [8, 54] wird jeder Zeitschritt der Länge τ in drei Teilschritte unterteilt. Der erste und dritte dieser Teilschritte sollen dabei die Länge $\theta\tau$ mit $0 < \theta < 1/2$ haben. Die Länge des mittleren Teilschrittes – des Zwischenschrittes – ist dann $1 - 2\theta$. Darüber hinaus findet noch ein Aufspalten des linearen Teils der Gleichung in explizite und implizite Teile statt und der nichtlineare Teil wird abwechselnd explizit und implizit genommen. Wir betrachten zunächst die Modellgleichung

$$(3.20) \quad (\partial_t y(t), \varphi) + (\mathcal{L}y(t), \varphi) + (\Xi(y(t)), \varphi) = (f(t), \varphi) \quad \forall \varphi \in V$$

in der \mathcal{L} ein beliebiger linearer Operator, Ξ eine nichtlineare Funktion und V ein geeigneter Raum von Testfunktionen sein soll. Dann lautet das θ -Schema für diese Gleichung: $\forall \varphi \in V$

$$\begin{aligned} \text{I)} \quad & \left(\frac{y_{n-1+\theta} - y_{n-1}}{\theta\tau}, \varphi \right) + \alpha (\mathcal{L}y_{n-1+\theta}, \varphi) + \beta (\mathcal{L}y_{n-1}, \varphi) + (\Xi(y_{n-1}), \varphi) = (f_{n-1}, \varphi) \\ \text{II)} \quad & \left(\frac{y_{n-\theta} - y_{n-1+\theta}}{(1-2\theta)\tau}, \varphi \right) + \beta (\mathcal{L}y_{n-\theta}, \varphi) + \alpha (\mathcal{L}y_{n-1+\theta}, \varphi) + (\Xi(y_{n-\theta}), \varphi) = (f_{n-1+\theta}, \varphi) \\ \text{III)} \quad & \left(\frac{y_n - y_{n-\theta}}{\theta\tau}, \varphi \right) + \alpha (\mathcal{L}y_n, \varphi) + \beta (\mathcal{L}y_{n-\theta}, \varphi) + (\Xi(y_{n-\theta}), \varphi) = (f_{n-\theta}, \varphi) \end{aligned}$$

Dabei sind α, β und θ Parameter des Verfahrens, für die $0 < \theta < 1/2$ und $\beta = 1 - \alpha$ gilt. Schreiben wir (3.20) in Matrixform

$$\mathcal{M}\partial_t \vec{y}(t) + \mathcal{L}\vec{y}(t) + \Xi(\vec{y}(t)) = \mathcal{M}f(t),$$

so lautet das entsprechende Schema:

$$\begin{aligned} \text{I)} \quad & (\mathcal{M} + \alpha\theta\tau\mathcal{L})\vec{y}_{n-1+\theta} = (\mathcal{M} - \beta\theta\tau\mathcal{L})\vec{y}_{n-1} - \theta\tau\Xi(\vec{y}_{n-1}) + \mathcal{M}\vec{f}_{n-1} \\ \text{II)} \quad & (\mathcal{M} + \beta(1-2\theta)\tau\mathcal{L})\vec{y}_{n-\theta} + (1-2\theta)\tau\Xi(\vec{y}_{n-\theta}) = (\mathcal{M} - \alpha(1-2\theta)\tau\mathcal{L})\vec{y}_{n-1+\theta} + \mathcal{M}\vec{f}_{n-1+\theta} \\ \text{III)} \quad & (\mathcal{M} + \alpha\theta\tau\mathcal{L})\vec{y}_n = (\mathcal{M} - \beta\theta\tau\mathcal{L})\vec{y}_{n-\theta} - \theta\tau\Xi(\vec{y}_{n-\theta}) + \mathcal{M}\vec{f}_{n-\theta} \end{aligned}$$

Wir haben dabei die rechte Seite f jeweils zum alten Zeitpunkt ausgewertet, während man sie normalerweise zum jeweils neuen Zeitpunkt nehmen würde. Der Grund für diese Modifikation ist der folgende: In der Anwendung auf das Cahn-Larché-Modell entkoppeln wir das Elastizitätssystem von der Berechnung der Konzentrationsentwicklung. Das heißt, vor jedem Teilschritt berechnen wir die zur Konzentration zum alten Zeitpunkt passende Verschiebung. Diese Verschiebung setzen wir dann in die Elastizitätsbeiträge zur Konzentrationsgleichung ein. Dies ergibt Beiträge der Art f_n , die aber jeweils expliziten Charakter haben.

Insgesamt haben wir also für den ersten Teilschritt des θ -Zwischenschritt-Verfahrens in Matrixschreibweise:

($\mathbf{P}_{\mathbf{C},-\mathbf{L},\theta\mathbf{I}}$) : Ist $\vec{\rho}_{n-1}^h$ gegeben, so bestimme im ersten Schritt $\vec{\mathbf{u}}_{n-1}^h$ als Lösung von:

$$\mathcal{G}\vec{\mathbf{u}}_{n-1}^h = \bar{\mathcal{G}}\vec{\rho}_{n-1}^h$$

Berechne damit

$$f_{n-1} = -e \text{Spur}(\mathcal{S}_{n-1}^h) + (\mathcal{E}(\mathbf{u}_{n-1}^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho_{n-1}^h)) : \mathcal{C}'(\rho_{n-1}^h) (\mathcal{E}(\mathbf{u}_{n-1}^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho_{n-1}^h))$$

mit $\mathcal{S}_{n-1}^h = \mathcal{C}(\rho_{n-1}^h) (\mathcal{E}(\mathbf{u}_{n-1}^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho_{n-1}^h))$. Bestimme dann $\vec{\rho}_{n-1+\theta}^h$ als Lösung von:

(3.21)

$$(\mathcal{M} + \alpha\theta\tau\gamma\mathcal{A}\mathcal{M}^{-1}\mathcal{A})\vec{\rho}_{n-1+\theta}^h = (\mathcal{M} - \beta\theta\tau\gamma\mathcal{A}\mathcal{M}^{-1}\mathcal{A})\vec{\rho}_{n-1}^h + \theta\tau\psi'(\vec{\rho}_{n-1}^h) + \mathcal{M}\vec{f}_{n-1}.$$

Der Zwischenschritt ist dann

($\mathbf{P}_{\mathbf{C},-\mathbf{L},\theta\mathbf{II}}$) : Aus $\vec{\rho}_{n-1+\theta}^h$ aus dem ersten Teilschritt bestimme $\vec{\mathbf{u}}_{n-1+\theta}^h$ als Lösung von:

$$\mathcal{G}\vec{\mathbf{u}}_{n-1+\theta}^h = \bar{\mathcal{G}}\vec{\rho}_{n-1+\theta}^h$$

Berechne damit

$$f_{n-1+\theta} = -e \text{Spur}(\mathcal{S}_{n-1+\theta}^h) + (\mathcal{E}(\mathbf{u}_{n-1+\theta}^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho_{n-1+\theta}^h)) : \mathcal{C}'(\rho_{n-1+\theta}^h) (\mathcal{E}(\mathbf{u}_{n-1+\theta}^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho_{n-1+\theta}^h))$$

mit

$$\mathcal{S}_{n-1+\theta}^h = \mathcal{C}(\rho_{n-1+\theta}^h) (\mathcal{E}(\mathbf{u}_{n-1+\theta}^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho_{n-1+\theta}^h)).$$

Bestimme dann $\vec{\rho}_{n-\theta}^h$ als Lösung von:

$$\begin{aligned} (\mathcal{M} + \beta\tau(1-2\theta)\gamma\mathcal{A}\mathcal{M}^{-1}\mathcal{A})\vec{\rho}_{n-\theta}^h - \tau(1-2\theta)\phi(\vec{\rho}_{n-\theta}^h) = \\ = (\mathcal{M} - \alpha\tau(1-2\theta)\gamma\mathcal{A}\mathcal{M}^{-1}\mathcal{A})\vec{\rho}_{n-1+\theta}^h + \mathcal{M}\vec{f}_{n-1+\theta}. \end{aligned}$$

Der dritte Teilschritt ist äquivalent zum ersten:

($\mathbf{P}_{\mathbf{C},-\mathbf{L},\theta\mathbf{III}}$) : Aus $\vec{\rho}_{n-\theta}^h$ aus dem zweiten Teilschritt bestimme $\vec{\mathbf{u}}_{n-\theta}^h$ als Lösung von:

$$\mathcal{G}\vec{\mathbf{u}}_{n-\theta}^h = \bar{\mathcal{G}}\vec{\rho}_{n-\theta}^h$$

Berechne damit

$$f_{n-\theta} = -e \text{Spur}(\mathcal{S}_{n-\theta}^h) + (\mathcal{E}(\mathbf{u}_{n-\theta}^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho_{n-\theta}^h)) : \mathcal{C}'(\rho_{n-\theta}^h) (\mathcal{E}(\mathbf{u}_{n-\theta}^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho_{n-\theta}^h))$$

mit

$$\mathcal{S}_{n-\theta}^h = \mathcal{C}(\rho_{n-\theta}^h) (\mathcal{E}(\mathbf{u}_{n-\theta}^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho_{n-\theta}^h)).$$

Bestimme dann $\vec{\rho}_n^h$ als Lösung von:

$$(3.22) \quad (\mathcal{M} + \alpha\theta\tau\gamma\mathcal{A}\mathcal{M}^{-1}\mathcal{A})\vec{\rho}_n^h = (\mathcal{M} - \beta\theta\tau\gamma\mathcal{A}\mathcal{M}^{-1}\mathcal{A})\vec{\rho}_{n-\theta}^h - \theta\tau\phi(\vec{\rho}_{n-\theta}^h) + \mathcal{M}\vec{f}_{n-\theta}.$$

3.5 Adaptive Steuerung der Gitterfeinheit

In Kapitel 5 werden wir für die (linearisierte) Cahn-Hilliard Gleichung und die Cahn-Larché-Gleichung mit homogener Elastizität lokale a posteriori Fehlerschätzer der Form

$$\|e(T, \cdot)\|_{L^2(\Omega)} \leq \|e(0, \cdot)\|_{L^2(\Omega)} + \max_{n=1, \dots, N} \left(\sum_{s \in M^n} \eta_{s,n}^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

mit $e := \rho - \rho^h$ und nur von der diskreten Lösung abhängigen lokalen Beiträgen $\eta_{s,n}$ herleiten. Wie wir diese Fehlerschätzer zur Adaption des Gitters nutzen, wollen wir im folgenden darstellen [57, 27, 28, 65, 64].

Nach der Generierung eines angemessenen Anfangsgitters und der Approximation des Startwertes auf diesem Gitter verwenden wir den folgenden Algorithmus: In jedem Zeitschritt wird die folgende Iteration durchgeführt

1. Berechne auf dem aktuellen Gitter die Lösung für den neuen Zeitpunkt.
2. Berechne die Abschätzung des Gesamtfehlers
3. Ist der Schätzwert für den Gesamtfehler unterhalb einer vorgegebenen Toleranz TOL , so akzeptiere die Lösung und das zugehörige Gitter und gehe zum nächsten Zeitschritt.
4. Andernfalls verfeinere alle Elemente s , für die gilt:

$$\eta_{s,n} > \frac{\Gamma_h^2 TOL^2}{4K}$$

mit dem Verfeinerungsparameter Γ_h und K der Anzahl der Elemente des aktuellen Gitters. Vergrößere alle Elemente s , für die gilt:

$$\eta_{s,n} < \frac{\gamma_h^2 TOL^2}{4K}$$

mit dem Verfeinerungsparameter γ_h . Dabei soll nur dann vergrößert werden, falls in der Nachbarschaft nicht verfeinert wird und die Konformität des Gitters erhalten bleibt.

5. Gehe zu Schritt 1.

Kapitel 4

Konvergenz der diskreten Modelle

Für das Cahn-Hilliard Modell wurden Konvergenz und a priori Fehlerabschätzungen von Elliot, French und Millner [23] für die Ortsdiskretisierte Finite-Element Approximation gezeigt. Blesgen und Rotthäuser [5] haben dies auf das volldiskrete Schema mit implizitem Euler- und Crank-Nicolson-Verfahren ausgedehnt. Für das Cahn-Larché-Modell mit homogener Elastizität wurden entsprechende Ergebnisse in [35] gezeigt. Das Hauptresultat dort ist für ein semidiskretes Schema wie in $(\mathbf{P}_{\mathbf{C.-L.},\text{semi}})$:

4.1 Satz (A priori Fehlerabschätzung für das semi-diskrete Schema). *Seien ρ, w und \mathbf{u} Lösungen der Cahn-Larché Gleichung mit homogener Elastizität auf einem konvexen, polygonal berandeten Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ($d \in \{1, 2, 3\}$) mit*

$$\begin{aligned}\rho &\in L^\infty(0, T; H^{1,2}(\Omega)) \\ \partial_t \rho &\in L^\infty(0, T; H^{1,2}(\Omega)) \\ \mathbf{u} &\in L^\infty(0, T; (H^{1,2}(\Omega))^d)\end{aligned}$$

und sei $\|\rho_0 - \rho_0^h\|_{L^2(\Omega)} \leq ch^2$.

Dann gelten die folgenden Fehlerabschätzungen:

$$\begin{aligned}\|\rho - \rho^h\|_{L^\infty(L^2(\Omega))} + \|w - w^h\|_{L^2(L^2(\Omega))} + \|\partial_t \rho - \partial_t \rho^h\|_{L^2(L^2(\Omega))} &\leq ch^2, \\ \|\rho - \rho^h\|_{L^\infty(H^{1,2}(\Omega))} + \|w - w^h\|_{L^2(H^{1,2}(\Omega))} &\leq ch, \\ \|\mathcal{E}(\mathbf{u} - \mathbf{u}^h)\|_{L^\infty(0, T; (L^2)^d)} &\leq ch.\end{aligned}$$

In [67] werden entsprechende Resultate für die volldiskreten Schemata mit implizitem Euler- und Crank-Nicolson-Verfahren gezeigt. Die Diskretisierung entsprach dabei vollständig der in dieser Arbeit verwendeten, wenn man von zusätzlichen Termen, die von der Inhomogenität der Elastizität herrühren, absieht.

Offen war bislang der Fall des Cahn-Larché-Modells mit inhomogener Elastizität. Da kein Eindeutigkeitsresultat zu erwarten ist [33], sind auch Fehlerabschätzungen der oben aufgeführten Art nicht möglich. Dennoch kann Konvergenz von der Teilfolgen von Lösungen der diskreten Probleme $(\mathbf{P}_{\text{Min.}})$ und $(\mathbf{P}_{\text{Min., entkoppelt}})$ gegen Lösungen des kontinuierlichen Problems $\mathbf{P}_{\mathbf{C.-L.}}$ für $h \rightarrow 0$ und $\tau \rightarrow 0$ gezeigt werden. Ziel dieses Kapitels ist also der Beweis des folgenden Satzes:

4.2 Satz (Konvergenz der diskreten Lösungen). Seien ρ , w und \mathbf{u} Lösungen von $(\mathbf{P}_{\mathbf{C.-L.}})$. Für $h \rightarrow 0$ und $\tau \rightarrow 0$ existiert dann eine Teilfolge $(\rho^h, w^h, \mathbf{u}^h)_{m \in \mathbb{N}}$, wobei jedes Folgenglied Lösung von $(\mathbf{P}_{\mathbf{Min.}})$ ist, mit:

- $\rho^h \rightarrow \rho$ punktweise fast überall sowie in $L^\infty(0, T; L^2(\Omega))$ und in $L^2(\Omega_T)$,
- $w^h \rightharpoonup w$ schwach in $L^2(0, T; H^{1,2}(\Omega))$,
- $\mathbf{u}^h \rightarrow \mathbf{u}$ punktweise fast überall sowie in $L^2(0, T; (H^{1,2}(\Omega))^d)$ und in $L^2(\Omega_T)$.

Dasselbe gilt, falls die Folgenglieder Lösungen von $(\mathbf{P}_{\mathbf{Min.,entkoppelt}})$ sind.

Beim Beweis nutzen wir die Gradientenflußstruktur des Systems, die sich auch auf die Diskretisierung überträgt, aus. Das Vorgehen dabei ist wie folgt:

Aus der Minimierungseigenschaft der diskreten Lösung gewinnen wir die Ljapunov-Eigenschaft des Energiefunktionals für die diskreten Lösungen und damit a priori-Abschätzungen. Mit deren Hilfe können wir durch ein Kompaktheitsargument die Existenz konvergenter Teilfolgen sicherstellen. Die Grenzwerte dieser Teilfolgen sind Lösungen des kontinuierlichen Problems $\mathbf{P}_{\mathbf{C.-L.}}$. Die Argumentation ist ähnlich wie beim Beweis der Existenz von Lösungen des kontinuierlichen Problems $\mathbf{P}_{\mathbf{C.-L.}}$ in [33]. Wir führen den Beweis zunächst für das Verfahren $(\mathbf{P}_{\mathbf{Min.}})$ und geben anschließend die Modifikationen an, die für das entkoppelte Schema $(\mathbf{P}_{\mathbf{Min.,entkoppelt}})$ nötig sind.

Das Verfahren $(\mathbf{P}_{\mathbf{Min.}})$ war definiert als:

$(\mathbf{P}_{\mathbf{Min.}})$: Gesucht sind $\rho_n^h \in V_n^h$ und $\mathbf{u}_n^h \in (V^h)^d$ so, daß

$$(\rho_n^h, \mathbf{u}_n^h) \text{ ist globales Minimum von } E^n.$$

Dabei war

$$E^n(r, \mathbf{v}) := \int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{2\tau_n} |\nabla \Delta_h^{-1}(r - \mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h)|^2 + \frac{\gamma}{2} |\nabla r|^2 \right\} dx + (\psi(r) + W(r, \mathbf{v}), 1)^h,$$

4.1 A priori-Abschätzungen

Wir wollen die folgende diskrete Dissipationsungleichung für die in der Zeit stückweise konstanten Fortsetzungen ρ^h , w^h und \mathbf{u}^h zeigen:

$$(4.1) \quad E(\rho^h(t, \cdot), \mathbf{u}^h(t, \cdot)) + \frac{1}{2} \int_0^T \|\nabla w^h(t, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 dt \leq E(\rho_0^h, \mathbf{u}_0^h).$$

Dabei sei $\rho_0^h \in V_n^h$ eine Approximation des Startwertes ρ_0 und $\mathbf{u}_0^h \in (V_n^h)^d$ das dazu passende Verschiebungsfeld. Genauer gesagt minimiere \mathbf{u}_0^h das Funktional $\mathbf{v} \mapsto \int_{\Omega} W(\rho_0^h, \mathbf{v}) dx$. Da ρ_n^h und \mathbf{u}_n^h das Funktional $E^n(\cdot, \cdot)$ minimieren, gilt

$$E^n(\rho_n^h, \mathbf{u}_n^h) \leq E^n(\mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h, \mathbf{u}_{n-1}^h).$$

Einsetzen der Definition von E^n ergibt

$$(4.2) \quad E(\rho_n^h, \mathbf{u}_n^h) + \frac{1}{2\tau_n} \|\nabla \Delta_h^{-1}(\rho_n^h - \mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h)\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq E(\mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h, \mathbf{u}_{n-1}^h).$$

Für den zweiten Summanden auf der linken Seite gilt aufgrund der Definition des Operators Δ_h^{-1} , der Darstellung (3.15) von w_n^h und der ersten Gleichung des diskreten Schemas (3.12):

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\tau_n} \|\nabla \Delta_h^{-1}(\rho_n^h - \mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h)\|_{L^2(\Omega)}^2 &= -\frac{\tau_n}{2} \left(\frac{\rho_n^h - \mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h}{\tau_n}, \Delta_h^{-1} \frac{\rho_n^h - \mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h}{\tau_n} \right)^h \\ &= -\frac{\tau_n}{2} \left(\frac{\rho_n^h - \mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h}{\tau_n}, w_n^h \right)^h \\ &= \frac{\tau_n}{2} \|\nabla w_n^h\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ &= \frac{1}{2} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \|\nabla w^h(t, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 dt. \end{aligned}$$

Einsetzen in (4.2) und Iteration des Arguments liefert die Aussage (4.1).

Mit der Poincaré- und der Kornschen Ungleichung folgt die gleichmäßige Beschränktheit der ρ_n^h und \mathbf{u}_n^h . Das heißt, es existiert eine Konstante $C > 0$, abhängig von ρ_0 , so daß:

$$(4.3) \quad \sup_{t \in [0, T]} \left\{ \|\rho^h(t, \cdot)\|_{H^{1,2}(\Omega)} + \|\mathbf{u}^h(t, \cdot)\|_{H^{1,2}(\Omega)} \right\} \leq C$$

Darüber hinaus folgt aus Ungleichung (4.1) die Beschränktheit von w^h bezüglich der $L^2(\Omega \times [0, T])$ -Norm:

$$(4.4) \quad \|\nabla w^h\|_{L^2(\Omega_T)} \leq C$$

sowie die Abschätzung

$$(4.5) \quad \sup_{t \in [0, T]} \int_{\Omega} \psi'(\rho^h) dx \leq C.$$

Unser nächstes Ziel ist es, Zeitdifferenzen von $\bar{\rho}^h$ und ρ^h abzuschätzen. Da $\bar{\rho}^h$ die in der Zeit stückweise affine Fortsetzung der ρ_n^h ist, können wir die erste Gleichung des diskreten Schemas (3.12) für fast alle $t \in [0, T]$ auch folgendermaßen schreiben:

$$(4.6) \quad (\partial_t \bar{\rho}^h(t), \varphi^h)^h + (\nabla w_n^h, \nabla \varphi^h) = 0 \quad \forall \varphi^h \in V_n^h$$

Für beliebige $0 \leq s_1 < s_2 \leq T$ folgt mit $\varphi^h = \bar{\rho}^h(s_2) - \bar{\rho}^h(s_1)$ nach Integration von (4.6) über das Zeitintervall $[s_1, s_2]$:

$$|\bar{\rho}^h(s_2) - \bar{\rho}^h(s_1)|_h^2 + \int_{s_1}^{s_2} (\nabla w^h(t), \nabla \bar{\rho}^h(s_2) - \nabla \bar{\rho}^h(s_1)) dt = 0.$$

Wegen der gleichmäßigen Beschränktheit der ρ_n^h in $H^{1,2}(\Omega)$ (4.3) und der daraus folgenden Beschränktheit von $\bar{\rho}^h$ in $L^\infty(H^{1,2}(\Omega))$ folgt:

$$\begin{aligned} |\bar{\rho}^h(s_2) - \bar{\rho}^h(s_1)|_h^2 &\leq C \|\bar{\rho}^h\|_{L^\infty(H^{1,2}(\Omega))} \int_{s_1}^{s_2} \|\nabla w^h(t)\|_{L^2(\Omega)} dt \\ &\stackrel{\text{Hölder}}{\leq} C \|\bar{\rho}^h\|_{L^\infty(H^{1,2}(\Omega))} (s_2 - s_1)^{\frac{1}{2}} \|\nabla w^h\|_{L^2(\Omega_T)}. \end{aligned}$$

Daraus folgt die Existenz einer Konstanten $C > 0$, so daß

$$(4.7) \quad \|\bar{\rho}^h(s_2) - \bar{\rho}^h(s_1)\|_{L^2(\Omega)} \leq C |s_2 - s_1|^{\frac{1}{4}}$$

also die gleichgradige Stetigkeit der $\bar{\rho}^h$ bezüglich der Zeit.

4.2 Das Kompaktheitsargument

Da die Folge der $\bar{\rho}^h$ für $h \rightarrow 0$ und $\tau \rightarrow 0$ in $L^\infty(0, T; H^{1,2}(\Omega))$ gleichmäßig beschränkt ist und die Einbettung von $H^{1,2}(\Omega)$ nach $L^2(\Omega)$ kompakt ist und schließlich aus (4.3) und (4.7) die gleichgradige Stetigkeit folgt, kann der Satz von Arzelà-Ascoli angewandt werden. Daraus ergibt sich die Existenz einer konvergenten Teilfolge. Das heißt, es gibt ein $\rho^* \in C^{0,\alpha}(0, T; L^2(\Omega))$ mit

$$\bar{\rho}^h \rightarrow \rho^* \quad \text{in } C^{0,\alpha}(0, T; L^2(\Omega))$$

für jedes $0 < \alpha < \frac{1}{4}$.

Für $t \in [0, T]$ sowie n und $\beta \in (0, 1)$ so, daß $t = \beta t_{n-1} + (1 - \beta)t_n$, gilt dann:

$$\begin{aligned} \|\rho^h(t, \cdot) - \bar{\rho}(t, \cdot)\|_{L^2(\Omega)} &= \|\rho_n^h - \beta \mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h - (1 - \beta) \rho_n^h\|_{L^2(\Omega)} \\ &= \beta \|\rho_n^h - \mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h\|_{L^2(\Omega)} \\ &\leq C \tau_n^{\frac{1}{4}} \rightarrow 0. \end{aligned}$$

Daraus folgt $\rho^h \rightarrow \rho^*$ in $L^\infty(0, T; L^2(\Omega))$ sowie Konvergenz der ρ^h in $L^2(\Omega_T)$. Außerdem folgt entlang einer Teilfolge fast überall punktweise Konvergenz.

Wir wenden uns nun der Nichtlinearität zu. Offenbar gibt es zu jedem $\delta > 0$ eine Konstante C_δ , so daß $|\psi'(\cdot)| \leq \delta \psi(\cdot) + C_\delta$ ist. Somit ist für alle meßbaren Mengen $E \subset \Omega$:

$$\int_E |\psi'(\rho^h)| \, dx \leq \delta \int_E |\psi(\rho^h)| \, dx + C_\delta |E| \leq \delta C + C_\delta |E|.$$

Also konvergiert $\int_E |\psi'(\rho^h)| \, dx$ für $|E| \rightarrow 0$ gleichmäßig in h und τ gegen Null. Mit dem Konvergenzsatz von Vitali können wir daher $\psi'(\rho^h) \rightarrow \psi'(\rho^*)$ in $L^1([0, T] \times \Omega)$ folgern.

Bezüglich des Verschiebungsfeldes ergibt sich aus der Abschätzung (4.3) schwache Konvergenz entlang einer Teilfolge, also

$$\mathbf{u}^h \rightharpoonup \mathbf{u}^* \quad \text{in } L^2(0, T; (H^{1,2}(\Omega))^d)$$

Um starke Konvergenz zu erhalten verwenden wir lokale L^2 -Projektion auf $(V^h)^d$. Wir benutzen komponentenweise den Clément-Interpolations-Operator Π^n [15] als Projektionsoperator. Es gilt:

$$(4.8) \quad \lim_{h \rightarrow 0} \|\mathbf{u}^* - \Pi^n \mathbf{u}^*\|_{H^{1,2}(\Omega)} = 0$$

Testen der diskreten Bestimmungsgleichung für das Verschiebungsfeld (3.14) mit der Funktion $\mathbf{u}^h - \Pi^n \mathbf{u}^* \in (V^h)^d$ und Zeitintegration ergibt:

$$(4.9) \quad 0 = \int_0^T \langle \mathcal{E}(\mathbf{u}^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho^h), \mathcal{E}(\mathbf{u}^h - \Pi^n \mathbf{u}^*) \rangle_{C(\rho^h)} \, dt$$

Dann ist

$$\begin{aligned} d_0 \int_0^T \|\mathcal{E}(\mathbf{u}^h - \mathbf{u}^*)\|_{L^2(\Omega)}^2 \, dt &\leq \\ &\leq 2d_0 \int_0^T \|\mathcal{E}(\mathbf{u}^h - \Pi^n \mathbf{u}^*)\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\mathcal{E}(\Pi^n \mathbf{u}^* - \mathbf{u}^*)\|_{L^2(\Omega)}^2 \, dt \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\leq 2 \int_0^T \langle \mathcal{E}(\mathbf{u}^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho^h) - \mathcal{E}(\Pi^n \mathbf{u}^*) + \bar{\mathcal{E}}(\rho^h), \mathcal{E}(\mathbf{u}^h - \Pi^n \mathbf{u}^*) \rangle_{\mathcal{C}(\rho^h)} dt \\
&\quad + 2d_0 \int_0^T \|\mathcal{E}(\Pi^n \mathbf{u}^* - \mathbf{u}^*)\|_{L^2(\Omega)}^2 dt \\
&\stackrel{4.9}{=} -2 \int_0^T \langle \mathcal{E}(\Pi^n \mathbf{u}^*) - \bar{\mathcal{E}}(\rho^h), \mathcal{E}(\mathbf{u}^h - \Pi^n \mathbf{u}^*) \rangle_{\mathcal{C}(\rho^h)} dt + 2d_0 \int_0^T \|\mathcal{E}(\Pi^n \mathbf{u}^* - \mathbf{u}^*)\|_{L^2(\Omega)}^2 dt \\
&= -2 \int_0^T (\mathcal{E}(\mathbf{u}^h - \Pi^n \mathbf{u}^*)) : \mathcal{C}(\rho^h) (\mathcal{E}(\Pi^n \mathbf{u}^*) - \bar{\mathcal{E}}(\rho^h)) dt + 2d_0 \int_0^T \|\mathcal{E}(\Pi^n \mathbf{u}^* - \mathbf{u}^*)\|_{L^2(\Omega)}^2 dt.
\end{aligned}$$

Der erste Summand auf der rechten Seite verschwindet für $h \rightarrow 0$, da der erste Faktor des Skalarproduktes schwach gegen Null konvergiert und der zweite Faktor stark gegen $\mathcal{C}(\rho^*) (\mathcal{E}(\mathbf{u}^*) - \bar{\mathcal{E}}(\rho^*))$ geht. Der zweite Summand geht wegen (4.8) gegen Null. Mit der Kornschen Ungleichung folgt dann starke Konvergenz der \mathbf{u}^h in $L^2(0, T; (H^{1,2}(\Omega))^d)$. Daraus folgt für fast alle $t \in [0, T]$ $L^2(\Omega)$ -Konvergenz $\mathcal{E}(\mathbf{u}^h(t, \cdot)) \rightarrow \mathcal{E}(\mathbf{u}^*(t, \cdot))$. Wir wollen zeigen, daß damit auch der Beitrag der Elastizität zum chemischen Potential

$$(4.10) \quad W_{,\rho}(\rho_n^h, \mathbf{u}_n^h) = -e \mathbb{1} : \mathcal{C}(\rho_n^h) (\mathcal{E}(\mathbf{u}_n^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho_n^h)) + ((\mathcal{E}(\mathbf{u}_n^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho_n^h)) : \mathcal{C}'(\rho_n^h) (\mathcal{E}(\mathbf{u}_n^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho_n^h)))$$

für fast jedes $t \in [0, T]$ in $L^1(\Omega)$ konvergiert. Für den ersten Summanden in (4.10) gilt:

$$\begin{aligned}
|e \mathbb{1} : \mathcal{C}(\rho_n^h) (\mathcal{E}(\mathbf{u}_n^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho_n^h))| &\leq \frac{1}{2} \left(|e \mathcal{C}(\rho_n^h) \mathbb{1}|^2 + |\mathcal{E}(\mathbf{u}_n^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho_n^h)|^2 \right) \\
&\leq c \left(|\mathcal{E}(\mathbf{u}_n^h)|^2 + |\rho_n^h|^2 + 1 \right).
\end{aligned}$$

Wegen

$$\mathcal{C}'(r) = \begin{cases} 0 & \text{für } r^2 \geq 1 \\ \frac{3}{4} (1 - r^2) (\mathcal{C}^P - \mathcal{C}^M) & \text{für } -1 < r < 1 \end{cases}$$

gilt $\mathcal{C}'_{ijmn} \leq \frac{3}{4} |\mathcal{C}_{ijmn}^P - \mathcal{C}_{ijmn}^M|$ und daher

$$\begin{aligned}
((\mathcal{E}(\mathbf{u}_n^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho_n^h)) : \mathcal{C}'(\rho_n^h) (\mathcal{E}(\mathbf{u}_n^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho_n^h))) &\leq c |\mathcal{E}(\mathbf{u}_n^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho_n^h)|^2 \\
&\leq 2c \left(|\mathcal{E}(\mathbf{u}_n^h)|^2 + |\rho_n^h|^2 \right).
\end{aligned}$$

Mit dem Satz von Lebesgue folgt, daß $W_{,\rho}(\rho_n^h, \mathbf{u}_n^h)$ in $L^2(0, T; L^1(\Omega))$ konvergiert.

Für das chemische Potential w^h haben wir schon in (4.4) eine Abschätzung von ∇w^h in $L^2([0, T] \times \Omega)$ gezeigt.

Aus der zweiten Gleichung des diskreten Schemas folgt mit $\varphi^h = 1$:

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega} w_n^h dx &= \int_{\Omega} \mathcal{I}^n (\psi'(\rho_n^h) - e \text{Spur}(\mathcal{S}_n^h)) dx \\
&\quad + \int_{\Omega} \mathcal{I}^n ((\mathcal{E}(\mathbf{u}_n^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho_n^h)) : \mathcal{C}'(\rho_n^h) (\mathcal{E}(\mathbf{u}_n^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho_n^h))) dx.
\end{aligned}$$

Aus dem bereits Gezeigten folgt, daß die rechte Seite gleichmäßig beschränkt ist. Mit der verallgemeinerten Poincaré-Ungleichung können wir dann schließen, daß w^h gleichmäßig in $L^2(0, T; H^{1,2}(\Omega))$ beschränkt ist. Dies impliziert die Existenz einer in $L^2(0, T; H^{1,2}(\Omega))$ schwach konvergenten Teilfolge mit $w^h \rightharpoonup w^*$.

4.3 Lösungseigenschaft der Grenzwerte

Es bleibt zu zeigen, daß die Grenzwerte Lösungen des kontinuierlichen Problems sind. Dazu wollen wir in den Bestimmungsgleichungen des diskreten Schemas zum Grenzwert $h \rightarrow 0$ und $\tau \rightarrow 0$ übergehen. Sei $\zeta \in H^{1,2}(\Omega)$ beliebig. Wir testen die erste Gleichung des Schemas mit $\Pi^n \zeta$ und erhalten

$$(\partial_{\tau_n} \rho_n^h, \Pi^n \zeta)^h = (\nabla w_n^h, \nabla \Pi^n \zeta)$$

Aufgrund der Konvergenz $\partial_{\tau_n} \rho_n^h \rightarrow \partial_t \rho^*$ in $H^{1,2}(\Omega)^*$ für fast alle $t \in [0, T]$, der Konvergenz $\Pi^n \zeta \rightarrow \zeta$ und der Fehlerabschätzung (3.1) für das gelumpfte-Massen-Skalarprodukt konvergiert die linke Seite gegen $\langle \partial_t \rho^*, \zeta \rangle$. Für die rechte Seite hat man ebenfalls für fast alle $t \in [0, T]$ die schwache Konvergenz $\nabla w_n^h \rightarrow \nabla w^*$ sowie die starke Konvergenz $\nabla \Pi^n \zeta \rightarrow \nabla \zeta$. Insgesamt also $(\nabla w_n^h, \nabla \Pi^n \zeta) \rightarrow (\nabla w^*, \nabla \zeta)$.

Testen der zweiten Gleichung des Schemas mit $\Pi^n \zeta$ ergibt:

$$\begin{aligned} (w_n^h, \Pi^n \zeta)^h &= (\psi'(\rho_n^h), \Pi^n \zeta)^h + \gamma (\nabla \rho_n^h, \nabla \Pi^n \zeta) - e (\text{Spur}(\mathcal{S}_n^h), \Pi^n \zeta)^h \\ &\quad + ((\mathcal{E}(\mathbf{u}_n^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho_n^h)) : \mathcal{C}'(\rho_n^h) (\mathcal{E}(\mathbf{u}_n^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho_n^h)), \Pi^n \zeta)^h \end{aligned}$$

Wie oben folgt die Konvergenz der einzelnen Terme gegen die entsprechenden kontinuierlichen Größen. Für den Grenzübergang in der dritten Gleichung nutzen wir die Tatsache, daß $|\mathcal{C}(\rho_n^h) (\mathcal{E}(\mathbf{u}_n^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho_n^h))| \leq c (|\mathcal{E}(\mathbf{u}_n^h)| + |\rho_n^h| + 1)$ ist und die starke Konvergenz von ρ^h und \mathbf{u}^h in $L^2(\Omega)$ beziehungsweise $L^2(\Omega)^d$ für fast alle $t \in [0, T]$.

Insgesamt erfüllen die Grenzwerte ρ^* , w^* und \mathbf{u}^* also die schwache Formulierung $\mathbf{P}_{\mathbf{C}, -\mathbf{L}}$.

4.4 Der Beweis für das entkoppelte Verfahren

Es sei daran erinnert, daß das entkoppelte Verfahren folgendermaßen erklärt war:

$(\mathbf{P}_{\text{Min.,entkoppelt}})$: Gesucht sind $\rho_n^h \in V_n^h$ und $\mathbf{u}_n^h \in (V^h)^d$ so, daß

$$\begin{aligned} \rho_n^h &\text{ ist globales Minimum von } E_1^{n, \mathbf{u}_n^h}(\cdot), \\ \mathbf{u}_n^h &\text{ ist globales Minimum von } E_2^{n, \rho_n^h}(\cdot). \end{aligned}$$

Und für gegebene $\bar{\rho}^h \in V^h$ und $\bar{\mathbf{u}}^h \in (V^h)^d$ war:

$$E_1^{n, \bar{\mathbf{u}}^h}(r) := \int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{2\tau_n} |\nabla \Delta_h^{-1}(r - \mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h)|^2 + \frac{\gamma}{2} |\nabla r|^2 \right\} dx + (\psi(r) + W(r, \bar{\mathbf{u}}^h), 1)^h$$

und

$$E_2^{n, \bar{\rho}^h}(\mathbf{v}) := \int_{\Omega} \mathcal{I}^n W(\bar{\rho}^h, \mathbf{v}) dx = (W(\bar{\rho}^h, \mathbf{v}), 1)^h.$$

Ziel ist es, wie oben a priori-Abschätzungen für die Fortsetzungen der Lösungen in der Zeit zu gewinnen. Erster Schritt dahin ist wieder die diskrete Dissipationsungleichung (4.1). Da die Lösungen der beiden Teilschritte die Funktionale $E_1^{n, \bar{\mathbf{u}}^h}$ beziehungsweise $E_2^{n, \bar{\rho}^h}$ minimieren, gilt:

$$\begin{aligned} E^n(\mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h, \mathbf{u}_{n-1}^h) &= E_1^{n, \mathbf{u}_{n-1}^h}(\mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h) \\ &\geq E_1^{n, \mathbf{u}_{n-1}^h}(\rho_n^h) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= E^n(\rho_n^h, \mathbf{u}_{n-1}^h) \\
&= \int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{2\tau_n} |\nabla \Delta_h^{-1}(\rho_n^h - \mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h)|^2 + \frac{\gamma}{2} |\nabla \rho_n^h|^2 \right\} dx \\
&\quad + (\psi(\rho_n^h), 1)^h + E_2^{n, \rho_n^h}(\mathbf{u}_{n-1}^h) \\
&\geq \int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{2\tau_n} |\nabla \Delta_h^{-1}(\rho_n^h - \mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h)|^2 + \frac{\gamma}{2} |\nabla \rho_n^h|^2 \right\} dx \\
&\quad + (\psi(\rho_n^h), 1)^h + E_2^{n, \rho_n^h}(\mathbf{u}_n^h) \\
&= E^n(\rho_n^h, \mathbf{u}_n^h)
\end{aligned}$$

und daraus folgt wie oben

$$E(\rho_n^h, \mathbf{u}_n^h) + \frac{1}{2\tau_n} \|\nabla \Delta_h^{-1}(\rho_n^h - \mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h)\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq E(\mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h, \mathbf{u}_{n-1}^h)$$

und somit

$$E(\rho^h(t, \cdot), \mathbf{u}^h(t, \cdot)) + \frac{1}{2} \int_0^T \|\nabla w^h(t, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 dt \leq E(\rho_0^h, \mathbf{u}_0^h).$$

Ebenfalls ganz entsprechend ergeben sich daraus die apriori-Abschätzungen (4.3), (4.4) und (4.5). Da sich die erste Gleichung des impliziten Euler-Verfahrens (3.12) und die erste Gleichung des ersten Teilschritts des entkoppelten Euler-Verfahrens (3.16) entsprechen, ergibt sich auch die Zeitabschätzung (4.7) analog. Die gleichen Kompaktheitsargumente wie oben führen dann zur Existenz konvergenter Teilfolgen. Zusätzliche Überlegungen sind nur nötig um die Stetigkeit von \mathbf{u}^* in der Zeit also insbesondere

$$\mathbf{u}_{n-1}^h \rightarrow \mathbf{u}^*$$

für $\tau \rightarrow 0$ und $h \rightarrow 0$ zu zeigen. Für $\boldsymbol{\xi} \in (H^{1,2}(\Omega))^d$ gilt wegen der Stetigkeit von ρ^* in der Zeit

$$\begin{aligned}
\lim_{\tau \rightarrow 0, h \rightarrow 0} \int_{\Omega} \mathcal{E}(\mathbf{u}_{n-1}^h) : \mathcal{C}(\rho_{n-1}^h) \mathcal{E}(\Pi^{n-1} \boldsymbol{\xi}) &= \lim_{\tau \rightarrow 0, h \rightarrow 0} \int_{\Omega} \mathcal{E}(\Pi^{n-1} \boldsymbol{\xi}) : \mathcal{C}(\rho_{n-1}^h) \bar{\mathcal{E}}(\rho_{n-1}^h) \\
&= \lim_{\tau \rightarrow 0, h \rightarrow 0} \int_{\Omega} \mathcal{E}(\Pi^n \boldsymbol{\xi}) : \mathcal{C}(\rho_n^h) \bar{\mathcal{E}}(\rho_n^h) \\
&= \lim_{\tau \rightarrow 0, h \rightarrow 0} \int_{\Omega} \mathcal{E}(\mathbf{u}_n^h) : \mathcal{C}(\rho_n^h) \mathcal{E}(\Pi^n \boldsymbol{\xi}).
\end{aligned}$$

Aufgrund der Stetigkeit des Skalarproduktes ist dann in $L^2(0, T; (H^{1,2}(\Omega))^d)$:

$$\lim_{\tau \rightarrow 0, h \rightarrow 0} \mathcal{E}(\mathbf{u}_{n-1}^h) = \lim_{\tau \rightarrow 0, h \rightarrow 0} \mathcal{E}(\mathbf{u}_n^h).$$

Damit läßt sich die Lösungseigenschaft der Grenzwerte analog zum voll impliziten Verfahren beweisen.

Kapitel 5

A Posteriori Fehlerabschätzung

In diesem Kapitel wollen wir a posteriori-Fehlerschätzer herleiten. Da für das Cahn-Larché Modell mit inhomogener Elastizität Eindeutigkeit der Lösung nicht gezeigt werden kann, beschränken wir uns auf die Fälle

- das linearisierte Cahn-Hilliard Modell,
- das nichtlineare Cahn-Hilliard Modell,
- das Cahn-Larché Modell mit homogener Elastizität.

Um gleiche Beweisschritte nicht unnötig wiederholen zu müssen, fassen wir diese drei Modelle in einer einheitlichen Notation zusammen. Wir betrachten

$$(5.1) \quad \partial_t \rho = \Delta w,$$

$$(5.2) \quad w = \phi(\rho) - \gamma \Delta \rho - A\rho \quad \text{auf } \Omega \times [0, T]$$

$$(5.3) \quad \rho(0) = \rho_0 \quad \text{in } \Omega$$

oder in schwacher Formulierung

$$(5.4) \quad \langle \partial_t \rho, \zeta \rangle = -(\nabla w, \nabla \zeta)$$

$$(5.5) \quad (w, \zeta) = (\phi(\rho), \zeta) + \gamma(\nabla \rho, \nabla \zeta) - (A\rho, \zeta),$$

$$(5.6) \quad \rho(\cdot, 0) = \rho_0 \text{ fast überall in } \Omega$$

für fast jedes $t \in (0, T)$ und für jedes $\zeta \in H^{1,2}(\Omega)$.

Dabei ist $\phi(\rho)$ entweder $\psi'(\rho)$ oder $\psi''(\bar{\rho})\rho$ je nachdem, ob wir das nichtlineare oder das linearisierte Modell betrachten. Der lineare Operator A ist entweder Null oder der Beitrag des Elastizitätssystems

$$A\rho := e \operatorname{Spur}(\mathcal{S}) = e \langle \mathcal{E}(D\rho) - \bar{\mathcal{E}}(\rho), \mathbb{1} \rangle_{\mathcal{C}}.$$

Dabei bezeichnen wir den Lösungsoperator des elastischen Systems mit $D : H^{1,2}(\Omega) \rightarrow (H^{1,2}(\Omega))^d$. Mit anderen Worten: Zu gegebener Konzentration $r \in H^{1,2}(\Omega)$ sei $\mathbf{v} = Dr$ Lösung von

$$\langle \mathcal{E}(\mathbf{v}) - \bar{\mathcal{E}}(r), \mathcal{E}(\boldsymbol{\xi}) \rangle_{\mathcal{C}} = 0$$

für jedes $\boldsymbol{\xi} \in (H^{1,2}(\Omega))^d$. Sowohl D als auch A sind linear in ρ . An dieser Stelle sind aber ohne weiteres auch andere lineare Operatoren möglich.

In Bezug auf die Zeitdiskretisierung beschränken wir uns auf das implizite Euler-Verfahren. Dabei seien ρ^h und w^h die in der Zeit stückweise konstante, linksstetige Fortsetzungen der Lösungen der Gleichungen

$$(5.7) \quad (\partial_{\tau_n} \rho_n^h, \varphi^h)^h = -(\nabla w_n^h, \nabla \varphi^h)$$

$$(5.8) \quad (w_n^h, \varphi^h)^h = (\phi(\rho_n^h), \varphi^h)^h + \gamma(\nabla \rho_n^h, \nabla \varphi^h) - (A^h \rho_n^h, \varphi^h)^h,$$

für beliebige $\varphi^h \in V_n^h$, wobei A^h eine geeignete Approximation von A sein soll. Für den Fall, dass $A\rho$ der Beitrag homogener Elastizität ist, habe A^h analog zu A die folgende Gestalt: Sei

$$D^h : V^h \rightarrow (V^h)^d \\ \rho_n^h \mapsto \mathbf{u}_n^h$$

Lösungsoperator der Gleichung

$$0 = \langle \mathcal{E}(\mathbf{u}_n^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho_n^h), \mathcal{E}(\boldsymbol{\xi}^h) \rangle_{\mathcal{C}}$$

für jedes $\boldsymbol{\xi}^h \in (V_n^h)^d$. Dann ist

$$A^h \rho_n^h = e \langle \mathcal{E}(D^h \rho_n^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho_n^h), \mathbb{1} \rangle_{\mathcal{C}}.$$

Für die Ableitung der Fehlerschätzer machen wir von Dualitäts-Techniken Gebrauch, die auf Eriksson und Johnson sowie auf Nochetto, Schmidt und Verdi zurückgehen ([27], [28], [57]).

5.1 Das duale Problem

Für das duale Problem führen wir die Hilfsgröße $\tilde{\rho}$ ein. Für $t_{n-1} < t \leq t_n$ sei

$$\tilde{\rho}(t, x) = \begin{cases} \bar{\rho} & \text{für das linearisierte Modell,} \\ \sqrt{\frac{\rho^2 + \rho_n^h \rho + \rho_n^{h2}}{3}} & \text{für das nichtlineare Modell.} \end{cases}$$

Dabei ist $\bar{\rho}$ die Konstante, bei deren Wert die Nichtlinearität eingefroren wird (siehe 2.15). In beiden Fällen gilt

$$(5.9) \quad \phi(\rho) - \phi(\rho_n^h) = \phi'(\tilde{\rho})(\rho - \rho_n^h)$$

und wir nehmen für das folgende $\|\phi'(\tilde{\rho})\|_{L^\infty(\Omega)} < \infty$ an. Wir formulieren nun das duale Problem:

(P_{dual}) : *Gesucht sind*

$$\alpha \in L^2(0, T; H^{1,2}(\Omega)) \cap H^{1,2}(0, T; (H^{1,2}(\Omega))^*),$$

$$\beta \in L^2(0, T; H^{1,2}(\Omega)),$$

so daß für fast jedes $t \in (0, T)$ und für jedes $\zeta \in H^{1,2}(\Omega)$ gilt:

$$(5.10) \quad -\langle \partial_t \alpha, \zeta \rangle = (\phi'(\tilde{\rho})\beta, \zeta) - (A'\beta, \zeta) + \gamma(\nabla \zeta, \nabla \beta)$$

$$(5.11) \quad (\nabla \zeta, \nabla \alpha) = -(\zeta, \beta)$$

$$(5.12) \quad \alpha(T, \cdot) = \alpha_T(\cdot) \text{ fast überall in } \Omega,$$

Dabei sei A' der zu A duale Operator. Von A' setzen wir L^2 -Beschränktheit voraus, also die Existenz einer Konstanten C_{dual} , so daß für jedes $f \in L^2(\Omega)$ gilt:

$$\|A'f\|_{L^2(\Omega)} \leq C_{dual} \|f\|_{L^2(\Omega)}.$$

Das duale Problem ist also eine linearisierte Cahn-Larché-Gleichung rückwärts in der Zeit, bei der die Nichtlinearität zu verschiedenen Zeiten und Orten eingefroren ist. Für die Lösungen α und $\beta = \Delta\alpha$ machen wir die folgenden Stabilitätsannahmen. Für beliebiges $t \in [0, T]$ gelte:

- L^2 -Abschätzung:

$$(5.13) \quad \|\alpha(t, x)\|_{L^2(\Omega)} \leq C_{\bar{\rho}} \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}$$

- Abschätzung von Zeitintegralen des Gradienten von α :

$$(5.14) \quad \int_t^T \|\nabla\alpha(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds \leq C_{\nabla}^2 \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}^2$$

- Abschätzung von Zeitintegralen von $\Delta\alpha$:

$$(5.15) \quad \int_t^T \|\Delta\alpha(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds \leq C_{\Delta}^2 \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}^2$$

- Abschätzung von Zeitintegralen von $\Delta^2\alpha$:

$$(5.16) \quad \int_t^T (T-s) \|\Delta^2\alpha(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds \leq C_{\Delta^2}^2 \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}^2$$

- Abschätzung von Zeitintegralen des Gradienten von β :

$$(5.17) \quad \int_t^T (T-s)^{\frac{1}{2}} \|\nabla\beta(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds \leq C_{\nabla^2}^2 \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}^2$$

Die Gültigkeit dieser Annahmen für das linearisierte Problem (2.16)–(2.17) mit $A = 0$ beweisen wir im Anhang zu diesem Kapitel. Für den nichtlinearen Fall ist der Nachweis der Gültigkeit dieser Annahmen noch offen, erscheint aber durchaus möglich.

Das kontinuierliche und das duale Problem lassen sich mit dem Operator \mathcal{L} , gegeben durch

$$\mathcal{L} = \begin{pmatrix} \partial_t & -\Delta \\ \gamma\Delta + A & 1 \end{pmatrix}$$

und dem entsprechenden dualen Operator \mathcal{L}'

$$\mathcal{L}' = \begin{pmatrix} -\partial_t & \gamma\Delta + A' \\ -\Delta & 1 \end{pmatrix}$$

darstellen. Die kontinuierliche Gleichung ist dann

$$\mathcal{L} \begin{pmatrix} \rho \\ w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi'(\rho) \end{pmatrix},$$

während das duale Problem sich als

$$\mathcal{L}' \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi'(\bar{\rho})\beta \\ 0 \end{pmatrix}$$

schreiben läßt.

5.2 Fehlerdarstellung

Für die Darstellung des Fehlers testen wir das duale Problem mit dem Fehler und nutzen die Dualität zwischen kontinuierlichem und dualen Problem, die Gleichungen des kontinuierlichen Problems sowie die Definition von $\tilde{\rho}$ um die Terme, die von der kontinuierlichen Lösung abhängen zu eliminieren.

Es sei $e_\rho := \rho - \rho^h$. Dann setzen wir in das duale Problem (\mathbf{P}_{dual}) als Testfunktion den soeben definierten Fehler e_ρ ein und integrieren über das Zeitintervall $[0, T]$. Es ergibt sich:

$$-\int_0^T \langle \partial_t \alpha, e_\rho \rangle dt = \int_0^T (\phi'(\tilde{\rho})\beta, e_\rho) - (A'\beta, e_\rho) + \gamma (\nabla e_\rho, \nabla \beta) dt.$$

Umsortieren der Terme und einsetzen von $e_\rho := \rho - \rho^h$ führt zu:

$$\begin{aligned} \int_0^T (\phi'(\tilde{\rho})e_\rho, \beta) dt &= \int_0^T -\langle \partial_t \alpha, \rho \rangle + (A'\beta, \rho) - \gamma (\nabla \rho, \nabla \beta) dt \\ &\quad + \int_0^T \langle \partial_t \alpha, \rho^h \rangle - (A'\beta, \rho^h) + \gamma (\nabla \rho^h, \nabla \beta) dt. \end{aligned}$$

Links nutzen wir die Bestimmungsgleichung für $\tilde{\rho}$ (5.9), auf der rechten Seite führen wir partielle Integration durch:

$$\begin{aligned} \int_0^T (\phi(\rho) - \phi(\rho^h), \beta) dt &= -(\rho, \alpha) \Big|_0^T + \int_0^T \langle \alpha, \partial_t \rho \rangle + (\beta, A\rho) - \gamma (\nabla \rho, \nabla \beta) dt \\ &\quad + \int_0^T \langle \partial_t \alpha, \rho^h \rangle - (\beta, A\rho^h) + \gamma (\nabla \rho^h, \nabla \beta) dt. \end{aligned}$$

Testet man (5.1) mit α und (5.11) mit w , so folgt:

$$\langle \partial_t \rho, \alpha \rangle = -(\nabla w, \nabla \alpha) = (w, \beta)$$

und setzt man dies ein, so hat man

$$\begin{aligned} \int_0^T - (w, \beta) + (\phi(\rho), \beta) + \gamma (\nabla \rho, \nabla \beta) - (A\rho, \beta) dt \\ = -(\rho, \alpha) \Big|_0^T + \int_0^T (\phi(\rho^h), \beta) + \langle \partial_t \alpha, \rho^h \rangle - (\beta, A\rho^h) + \gamma (\nabla \rho^h, \nabla \beta) dt. \end{aligned}$$

Wegen (5.2) ist die linke Seite gleich Null. Für die Randterme in der Zeit nutzen wir wieder $\rho = e_\rho + \rho^h$ und erhalten

$$(e_\rho(T), \alpha_T) = (e_\rho(0), \alpha(0)) - (\rho^h, \alpha) \Big|_0^T + \int_0^T (\phi(\rho^h), \beta) + \langle \partial_t \alpha, \rho^h \rangle - (\beta, A\rho^h) + \gamma (\nabla \rho^h, \nabla \beta) dt.$$

Seien T_α und T_β die Lösungsoperatoren des dualen Problems, also

$$T_\alpha : L^2(\Omega) \rightarrow L^2(0, T; H^{1,2}(\Omega)) \cap H^{1,2}(0, T; (H^{1,2}(\Omega))^*)$$

$$\alpha_T \mapsto \alpha$$

und

$$T_\beta : L^2(\Omega) \rightarrow L^2(0, T; H^{1,2}(\Omega))$$

$$\alpha_T \mapsto \beta$$

sowie das parabolische Residuum als
(5.18)

$$\mathcal{R}(\rho^h, w^h, T_\alpha \alpha_T, T_\beta \alpha_T) := -(\rho^h, \alpha) \Big|_0^T + \int_0^T (\phi(\rho^h), \beta) + \langle \partial_t \alpha, \rho^h \rangle - (\beta, A \rho^h) + \gamma (\nabla \rho^h, \nabla \beta) \, dt$$

definiert. Dann läßt sich der Fehler in der L^2 -Norm folgendermaßen abschätzen:

$$\begin{aligned} \|e_\rho(T)\|_{L^2(\Omega)} &= \sup_{\alpha_T \in L^2(\Omega)} \frac{\int_\Omega e_\rho(T) \alpha_T}{\|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}} \\ &= \sup_{\alpha_T \in L^2(\Omega)} \frac{(e_\rho(0), \alpha(0)) + \mathcal{R}(\rho^h, w^h, \alpha, \beta)}{\|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}} \\ &\leq \sup_{\alpha_T \in L^2(\Omega)} \frac{\|e_\rho(0)\|_{L^2(\Omega)} \|\alpha(0)\|_{L^2(\Omega)}}{\|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}} + \sup_{\alpha_T \in L^2(\Omega)} \frac{\mathcal{R}(\rho^h, w^h, \alpha, \beta)}{\|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}} \\ &\leq C_{\bar{\rho}} \|e_\rho(0)\|_{L^2(\Omega)} + \sup_{\alpha_T \in L^2(\Omega)} \frac{\mathcal{R}(\rho^h, w^h, \alpha, \beta)}{\|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}}. \end{aligned}$$

Im folgenden Abschnitt werden wir das Residuum \mathcal{R} gegen eine Summe aus Produkten von berechenbaren Größen und $\|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}$ abschätzen. Dabei gehen insbesondere die Stabilitätseigenschaften des dualen Problems (5.13)–(5.17) ein.

Abschätzungen in schwächeren Normen, wie zum Beispiel der $(H^{1,2})^*$ -Norm sind natürlich ebenfalls in diesem Rahmen möglich. Da in diesem Fall in der obigen Fehlerabschätzung $H^{1,2}$ -Normen im Nenner auftreten, muß man das Residuum nur gegen ein Produkt aus einer berechenbaren Größe und $\|\alpha_T\|_{H^{1,2}(\Omega)}$ abschätzen. Entsprechend schwächere Stabilitätsannahmen müssen an das duale Problem gestellt werden [27, 28, 57].

5.3 Das parabolische Residuum

Darstellung des Residuums

Zunächst formen wir den Zeitableitungsterm um. Es gilt:

$$\begin{aligned} \int_0^T \langle \rho^h, \partial_t \alpha \rangle dt &= \sum_{n=1}^N \int_{t_{n-1}}^{t_n} \langle \rho^h, \partial_t \alpha \rangle dt \\ &= \sum_{n=1}^N \langle \rho_n^h, \int_{t_{n-1}}^{t_n} \partial_t \alpha \, dt \rangle \\ &= \sum_{n=1}^N (\rho_n^h, \alpha_n - \alpha_{n-1}) \\ &= (\rho_N^h, \alpha_N) - (\rho_0^h, \alpha_0) - \sum_{n=1}^N (\rho_n^h - \rho_{n-1}^h, \alpha_{n-1}), \end{aligned}$$

wobei $\alpha_n(\cdot) := \alpha(t_n, \cdot)$ sein soll. Die letzte Summe kann dabei wie folgt ausgedrückt werden:

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^N (\rho_n^h - \rho_{n-1}^h, \alpha_{n-1}) &= \sum_{n=1}^N \int_{t_{n-1}}^{t_n} (\partial_{\tau_n} \rho_n^h, \alpha) dt \\ &+ \sum_{n=1}^N \int_{t_{n-1}}^{t_n} (\partial_{\tau_n} \rho_n^h, \alpha_{n-1} - \alpha) dt \\ &+ \sum_{n=1}^N (\mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h - \rho_{n-1}^h, \alpha_{n-1}). \end{aligned}$$

Insgesamt ist also

$$\begin{aligned} -(\rho^h, \alpha) \Big|_0^T + \int_0^T \langle \rho^h, \partial_t \alpha \rangle dt &= - \sum_{n=1}^N \int_{t_{n-1}}^{t_n} (\partial_{\tau_n} \rho_n^h, \alpha) dt - \sum_{n=1}^N \int_{t_{n-1}}^{t_n} (\partial_{\tau_n} \rho_n^h, \alpha_{n-1} - \alpha) dt \\ &- \sum_{n=1}^N (\mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h - \rho_{n-1}^h, \alpha_{n-1}). \end{aligned}$$

Setzt man dies in die Definition des Residuums (5.18) ein, so folgt

$$\begin{aligned} \mathcal{R}(\rho^h, w^h, \alpha, \beta) &= - \sum_{n=1}^N \int_{t_{n-1}}^{t_n} (\partial_{\tau_n} \rho_n^h, \alpha) dt - \sum_{n=1}^N \int_{t_{n-1}}^{t_n} (\partial_{\tau_n} \rho_n^h, \alpha_{n-1} - \alpha) dt \\ &- \sum_{n=1}^N (\mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h - \rho_{n-1}^h, \alpha_{n-1}) + \int_0^T (\phi(\rho^h), \beta) - (\beta, A\rho^h) + \gamma(\nabla \rho^h, \nabla \beta) dt \\ &= - \sum_{n=1}^N (\mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h - \rho_{n-1}^h, \alpha_{n-1}) + \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left[-(\partial_{\tau_n} \rho_n^h, \alpha) - (\partial_{\tau_n} \rho_n^h, \alpha_{n-1} - \alpha) \right. \\ &\left. + (\phi(\rho_n^h), \beta) - (A\rho_n^h, \beta) + \gamma(\nabla \rho_n^h, \nabla \beta) \right] dt. \end{aligned}$$

Um im nächsten Schritt Galerkin-Orthogonalität ausnutzen zu können, testen wir (5.11) mit $\zeta = w^h$ und integrieren über $[0, T]$. Addition der beiden Gleichungen ergibt:

$$\begin{aligned} \mathcal{R}(\rho^h, w^h, \alpha, \beta) &= \sum_{n=1}^N -(\mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h - \rho_{n-1}^h, \alpha_{n-1}) + \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left[-(\partial_{\tau_n} \rho_n^h, \alpha) - (\partial_{\tau_n} \rho_n^h, \alpha_{n-1} - \alpha) \right. \\ &\left. + (\phi(\rho_n^h) - w_n^h - A\rho_n^h, \beta) + \gamma(\nabla \rho_n^h, \nabla \beta) - (\nabla w_n^h, \nabla \alpha) \right] dt. \end{aligned}$$

Setzt man in der ersten Gleichung des diskreten Problems (5.7) $\varphi^h := \Pi^n \alpha$, in der zweiten Gleichung $\varphi^h := \Pi^n \beta$ und addiert, so folgt:

$$0 = (\partial_{\tau_n} \rho_n^h, \Pi^n \alpha)^h - (\phi(\rho_n^h) - w_n^h - A\rho_n^h, \Pi^n \beta)^h - \gamma(\nabla \rho_n^h, \nabla \Pi^n \beta) + (\nabla w_n^h, \nabla \Pi^n \alpha)$$

Integration über das Intervall $[0, T]$ und Addition zur Darstellung des Residuums, d.h. Ausnutzen der Galerkin-Orthogonalität, ergibt:

$$\begin{aligned}
(5.19) \quad \mathcal{R}(\rho^h, w^h, \alpha, \beta) &= \\
&= - \underbrace{\sum_{n=1}^N (\mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h - \rho_{n-1}^h, \alpha_{n-1})}_{\text{Vergrößerungsfehler}} \\
&\quad - \underbrace{\sum_{n=1}^N \int_{t_{n-1}}^{t_n} (\partial_{\tau_n} \rho_n^h, \alpha - \Pi^n \alpha) dt}_{\text{Zeitfehler I}} - \underbrace{\sum_{n=1}^N \int_{t_{n-1}}^{t_n} [(\partial_{\tau_n} \rho_n^h, \Pi^n \alpha) - (\partial_{\tau_n} \rho_n^h, \Pi^n \alpha)^h] dt}_{\text{gelumpfte Massenfehler I}} \\
&\quad - \underbrace{\sum_{n=1}^N \int_{t_{n-1}}^{t_n} (\partial_{\tau_n} \rho_n^h, \alpha_{n-1} - \alpha) dt}_{\text{Zeitfehler II}} \\
&\quad + \underbrace{\sum_{n=1}^N \int_{t_{n-1}}^{t_n} (\phi(\rho_n^h) - w_n^h - A^h \rho_n^h, \beta - \Pi^n \beta) dt}_{\text{inneres Residuum}} - \underbrace{\sum_{n=1}^N \int_{t_{n-1}}^{t_n} ((A - A^h) \rho_n^h, \beta) dt}_{\text{Elastizitätsfehler}} \\
&\quad + \underbrace{\sum_{n=1}^N \int_{t_{n-1}}^{t_n} [(\phi(\rho_n^h) - w_n^h - A^h \rho_n^h, \Pi^n \beta) - (\phi(\rho_n^h) - w_n^h - A^h \rho_n^h, \Pi^n \beta)^h] dt}_{\text{gelumpfte Massenfehler II}} \\
&\quad + \underbrace{\sum_{n=1}^N \int_{t_{n-1}}^{t_n} \gamma (\nabla \rho_n^h, \nabla(\beta - \Pi^n \beta)) dt}_{\text{Gradienten von } \rho_n^h} - \underbrace{\sum_{n=1}^N \int_{t_{n-1}}^{t_n} (\nabla w_n^h, \nabla(\alpha - \Pi^n \alpha)) dt}_{\text{Gradienten von } w_n^h}
\end{aligned}$$

Abschätzungen der Residuentерme

Wir wollen die einzelnen Terme der Darstellung des Residuums der Reihe nach abschätzen. Wir benutzen dabei neben den Stabilitätseigenschaften der dualen Lösung elliptische Regularitätsabschätzungen der Art:

$$\|f\|_{H^{2,2}(\Omega)} \leq C_{ell} \|\Delta f\|_{L^2(\Omega)}.$$

In mehreren der folgenden Abschätzungen machen wir außerdem von der Tatsache Gebrauch, daß

$$\begin{aligned}
(5.20) \quad \int_{t_{n-1}}^{t_n} (T-t)^{-\frac{1}{2}} dt &= -2(T-t)^{\frac{1}{2}} \Big|_{t_{n-1}}^{t_n} = 2 \left((T-t_{n-1})^{\frac{1}{2}} - (T-t_n)^{\frac{1}{2}} \right) \\
&\leq 2 \left((T-t_{n-1}) - (T-t_n) \right)^{\frac{1}{2}} = 2\sqrt{\tau_n}
\end{aligned}$$

ist. Außerdem ist für $n < N$ und $t_{n-1} \leq t \leq t_n$:

$$t_n + \tau_n \leq T \implies \tau_n \leq T - t \iff \frac{1}{T-t} \leq \frac{1}{\tau_n}$$

und somit

$$(5.21) \quad \int_{t_{n-1}}^{t_n} \frac{1}{T-t} dt \leq 1.$$

Der Vergrößerungsfehler

Der Vergrößerungsfehler aus (5.19) ist einfach abgeschätzt durch:

$$\begin{aligned} \left| \sum_{n=1}^N (\mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h - \rho_{n-1}^h, \alpha_{n-1}) \right| &\leq \sum_{n=1}^N \|\mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h - \rho_{n-1}^h\|_{L^2(\Omega)} \|\alpha_{n-1}\|_{L^2(\Omega)} \\ &\leq C_{\tilde{\rho}} \sum_{n=1}^N \left(\sum_{s \in M^n} \|\mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h - \rho_{n-1}^h\|_{L^2(s)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}. \end{aligned}$$

Die Zeitfehler I und II

Bezüglich des Zeitfehlers I gilt

$$\begin{aligned} \left| \sum_{n=1}^N \int_{t_{n-1}}^{t_n} (\partial_{\tau_n} \rho_n^h, \alpha - \Pi^n \alpha) dt \right| &= \left| \sum_{n=1}^N \int_{t_{n-1}}^{t_n} (\partial_{\tau_n} \rho_n^h, \alpha(t, \cdot) - \Pi^n \alpha(t, \cdot)) dt \right| \\ &\leq \sum_{n=1}^N \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left(\sum_{s \in M^n} \|\partial_{\tau_n} \rho_n^h\|_{L^2(s)} \|\alpha - \Pi^n \alpha\|_{L^2(s)} \right) dt \\ &\leq \sum_{n=1}^N C_{\Pi^n} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left(\sum_{s \in M^n} \|\partial_{\tau_n} \rho_n^h\|_{L^2(s)} h_s^2 \|\alpha\|_{H^{2,2}(s)} \right) dt \\ &\leq \sum_{n=1}^N C_{\Pi^n} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left(\sum_{s \in M^n} \|\partial_{\tau_n} \rho_n^h\|_{L^2(s)}^2 h_s^4 \right)^{\frac{1}{2}} \|\alpha\|_{H^{2,2}(\Omega)} dt \\ &\leq \left(\sum_{n=1}^N C_{\Pi^n}^2 \tau_n \sum_{s \in M^n} \left\| \frac{\rho_n^h - \mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h}{\tau_n} \right\|_{L^2(s)}^2 h_s^4 \right)^{\frac{1}{2}} \left(\int_0^T \|\alpha(t, \cdot)\|_{H^{2,2}(\Omega)}^2 dt \right)^{\frac{1}{2}} \\ &\leq C_{ell} \left(\sum_{n=1}^N C_{\Pi^n}^2 \sum_{s \in M^n} \frac{h_s^4}{\tau_n} \|\rho_n^h - \mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h\|_{L^2(s)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \left(\int_0^T \|\Delta \alpha(t, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 dt \right)^{\frac{1}{2}} \\ &\leq C_{ell} C_{\Delta} \left(\sum_{n=1}^N C_{\Pi^n}^2 \sum_{s \in M^n} \frac{h_s^4}{\tau_n} \|\rho_n^h - \mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h\|_{L^2(s)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}, \end{aligned}$$

während der zweite Zeitfehler abgeschätzt werden kann durch

$$\begin{aligned} \left| \sum_{n=1}^N \int_{t_{n-1}}^{t_n} (\partial_{\tau_n} \rho_n^h, \alpha_{n-1} - \alpha) dt \right| &= \\ &\leq \sum_{n=1}^N \int_{t_{n-1}}^{t_n} \|\partial_{\tau_n} \rho_n^h\|_{L^2(\Omega)} \|\alpha_{n-1} - \alpha\|_{L^2(\Omega)} dt \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\leq \sum_{n=1}^N \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left(\sum_{s \in M^n} \|\partial_{\tau_n} \rho_n^h\|_{L^2(s)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} 2C_{\bar{\rho}} \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)} dt \\
&\leq 2C_{\bar{\rho}} \sum_{n=1}^N \left(\sum_{s \in M^n} \|\rho_n^h - \mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h\|_{L^2(s)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}
\end{aligned}$$

Der gelumppte Massenfehler I

Zur Abschätzung der Quadraturfehler verwenden wir das elementweise gelumppte Massenskalarpoduktes (für $s \in M^n$):

$$(\zeta_1^h, \zeta_2^h)_s^h := \int_s \mathcal{I}^n (\zeta_1^h \zeta_2^h) dx.$$

Es gilt die folgende Ungleichung (vgl. Satz (3.1)):

$$\left| (\zeta_1^h, \zeta_2^h)_s - (\zeta_1^h, \zeta_2^h)_s^h \right| \leq C_M h_s \|\zeta_1^h\|_{L^2(s)} \|\nabla \zeta_2^h\|_{L^2(s)}$$

Damit ist

$$\begin{aligned}
&\sum_{n=1}^N \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left[(\partial_{\tau_n} \rho_n^h, \Pi^n \alpha) - (\partial_{\tau_n} \rho_n^h, \Pi^n \alpha)^h \right] dt = \\
&= \sum_{n=1}^N \int_{t_{n-1}}^{t_n} \sum_{s \in M^n} \left[(\partial_{\tau_n} \rho_n^h, \Pi^n \alpha)_s - (\partial_{\tau_n} \rho_n^h, \Pi^n \alpha)_s^h \right] dt \\
&\leq C_M \sum_{n=1}^N \int_{t_{n-1}}^{t_n} \sum_{s \in M^n} h_s \|\partial_{\tau_n} \rho_n^h\|_{L^2(s)} \|\nabla \Pi^n \alpha\|_{L^2(s)} dt \\
&\leq C_M \sum_{n=1}^N \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left[\sum_{s \in M^n} h_s \|\partial_{\tau_n} \rho_n^h\|_{L^2(s)} \|\nabla(\alpha - \Pi^n \alpha)\|_{L^2(s)} \right. \\
&\quad \left. + \sum_{s \in M^n} h_s \|\partial_{\tau_n} \rho_n^h\|_{L^2(s)} \|\nabla \alpha\|_{L^2(s)} \right] dt \\
&\leq C_M \sum_{n=1}^N \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left[\sum_{s \in M^n} C_{\Pi^n} h_s^2 \|\partial_{\tau_n} \rho_n^h\|_{L^2(s)} \|\alpha\|_{H^{2,2}(s)} \right. \\
&\quad \left. + \sum_{s \in M^n} h_s \|\partial_{\tau_n} \rho_n^h\|_{L^2(s)} \|\nabla \alpha\|_{L^2(s)} \right] dt \\
&\leq C_M \sum_{n=1}^N \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left[\left(\sum_{s \in M^n} C_{\Pi^n}^2 h_s^4 \|\partial_{\tau_n} \rho_n^h\|_{L^2(s)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} C_{ell} \|\Delta \alpha\|_{L^2(\Omega)} \right. \\
&\quad \left. + \left(\sum_{s \in M^n} h_s^2 \|\partial_{\tau_n} \rho_n^h\|_{L^2(s)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \|\nabla \alpha\|_{L^2(\Omega)} \right] dt
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\leq C_M \left[C_{ell} \left(\sum_{n=1}^N C_{\Pi^n}^2 \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left[\sum_{s \in M^n} h_s^4 \|\partial_{\tau_n} \rho_n^h\|_{L^2(s)}^2 \right] dt \right)^{\frac{1}{2}} \left(\int_0^T \|\Delta \alpha\|_{L^2(\Omega)}^2 dt \right)^{\frac{1}{2}} \right. \\
&\quad \left. + \left(\sum_{n=1}^N \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left[\sum_{s \in M^n} h_s^2 \|\partial_{\tau_n} \rho_n^h\|_{L^2(s)}^2 \right] dt \right)^{\frac{1}{2}} \left(\int_0^T \|\nabla \alpha\|_{L^2(\Omega)}^2 dt \right)^{\frac{1}{2}} \right] \\
&\leq C_M \left[C_{ell} \left(\sum_{n=1}^N C_{\Pi^n}^2 \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left[\sum_{s \in M^n} h_s^4 \|\partial_{\tau_n} \rho_n^h\|_{L^2(s)}^2 \right] dt \right)^{\frac{1}{2}} C_{\Delta} \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)} \right. \\
&\quad \left. + \left(\sum_{n=1}^N \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left[\sum_{s \in M^n} h_s^2 \|\partial_{\tau_n} \rho_n^h\|_{L^2(s)}^2 \right] dt \right)^{\frac{1}{2}} C_{\nabla} \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)} \right] \\
&\leq C_M \left[C_{ell} C_{\Delta} \left(\sum_{n=1}^N C_{\Pi^n}^2 \sum_{s \in M^n} \frac{h_s^4}{\tau_n} \|\rho_n^h - \mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h\|_{L^2(s)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \right. \\
&\quad \left. + C_{\nabla} \left(\sum_{n=1}^N \sum_{s \in M^n} \frac{h_s^2}{\tau_n} \|\rho_n^h - \mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h\|_{L^2(s)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \right] \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}.
\end{aligned}$$

Der Elastizitätsfehler

Wir erinnern an die Bezeichnungen D und D^h für den Lösungsoperator des kontinuierlichen beziehungsweise diskreten Elastizitäts-Systems. Mit dieser Bezeichnung ist

$$\begin{aligned}
\left| \int_0^T ((A - A^h)\rho^h, \beta) dt \right| &\leq \left(\sum_{n=1}^N \|(A - A^h)\rho_n^h\|_{L^2(\Omega)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \left(\int_0^T \|\beta\|_{L^2(\Omega)}^2 dt \right)^{\frac{1}{2}} \\
&\leq e \left(\sum_{n=1}^N \|\text{Spur } \mathcal{CE}(D\rho_n^h - D^h\rho_n^h)\|_{L^2(\Omega)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} C_{\Delta} \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)} \\
&\leq C_{elast} C_{\Delta} \left(\sum_{n=1}^N \|\mathcal{E}(D\rho_n^h - \mathbf{u}_n^h)\|_{\mathcal{C}}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}
\end{aligned}$$

Der Fehler in der Energienorm kann dann abgeschätzt werden durch (siehe [61]):

$$\|\mathcal{E}(D\rho_n^h - \mathbf{u}_n^h)\|_{\mathcal{C}} \leq C_{elast} \left(\sum_{s \in M^n} \left(h_s e(C_{11} + C_{12}) \|\nabla \rho_n^h\|_{L^2(s)} + \frac{1}{2} h_s^{\frac{1}{2}} \|\boldsymbol{\nu} \cdot [\mathcal{S}_n^h]\|_{L^2(\partial s)} \right)^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

mit $\mathcal{S}_n^h = \mathcal{C}(\mathcal{E}(\mathbf{u}_n^h) - \bar{\mathcal{E}}(\rho_n^h))$.

Das innere Residuum

Für die Abschätzung des inneren Residuums und des zugehörigen Quadraturfehlers spalten wir das Zeitintervall $[0, T]$ in den letzten Zeitschritt und den Rest auf. Wir behandeln den Rest, also das Intervall $[0, t_{N-1}]$, zuerst:

$$\left| \int_0^{t_{N-1}} (\phi(\rho^h) - w^h - A^h \rho^h, \beta - \Pi^n \beta) dt \right| \leq$$

$$\begin{aligned}
&\leq \sum_{n=1}^{N-1} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left(\sum_{s \in M^n} \|\phi(\rho_n^h) - w_n^h - A^h \rho_n^h\|_{L^2(s)} \|\beta - \Pi^n \beta\|_{L^2(s)} \right) dt \\
&\leq \sum_{n=1}^{N-1} C_{\Pi^n} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left(\sum_{s \in M^n} \frac{1}{\sqrt{T-t}} \|\phi(\rho_n^h) - w_n^h - A^h \rho_n^h\|_{L^2(s)} h_s^2 \|\beta\|_{H^{2,2}(s)} \sqrt{T-t} \right) dt \\
&\leq C_{ell} \sum_{n=1}^{N-1} C_{\Pi^n} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left[\left(\sum_{s \in M^n} \|\phi(\rho_n^h) - w_n^h - A^h \rho_n^h\|_{L^2(s)}^2 \frac{h_s^4}{T-t} \right)^{\frac{1}{2}} \sqrt{T-t} \|\Delta\beta(t, \cdot)\|_{L^2(\Omega)} \right] dt \\
&\leq C_{ell} \left(\sum_{n=1}^{N-1} C_{\Pi^n}^2 \sum_{s \in M^n} \|\phi(\rho_n^h) - w_n^h - A^h \rho_n^h\|_{L^2(s)}^2 h_s^4 \right)^{\frac{1}{2}} \left(\int_0^{t_{N-1}} (T-t) \|\Delta\beta(t, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 dt \right)^{\frac{1}{2}} \\
&\leq C_{ell} \left(\sum_{n=1}^{N-1} C_{\Pi^n}^2 \sum_{s \in M^n} \|\phi(\rho_n^h) - w_n^h - A^h \rho_n^h\|_{L^2(s)}^2 h_s^4 \right)^{\frac{1}{2}} \left(\int_0^T (T-t) \|\Delta\beta(t, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 dt \right)^{\frac{1}{2}} \\
&\leq C_{ell} C_{\Delta^2} \left(\sum_{n=1}^{N-1} C_{\Pi^n}^2 \sum_{s \in M^n} \|\phi(\rho_n^h) - w_n^h - A^h \rho_n^h\|_{L^2(s)}^2 h_s^4 \right)^{\frac{1}{2}} \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}.
\end{aligned}$$

Für das letzte Zeitintervall definieren wir $B(\cdot) := \int_{t_{N-1}}^T \beta(t, \cdot) dt$, was mit Hilfe von $\Delta\beta = \frac{1}{\gamma}(\partial_t \alpha + \phi'(\bar{\rho})\beta - A'\beta)$, der Beschränktheit von $\phi'(\bar{\rho})$, A' und Stabilität der dualen Lösung abgeschätzt werden kann durch:

$$\begin{aligned}
\|\Delta B\|_{L^2(\Omega)}^2 &\leq \frac{1}{\gamma^2} \|\alpha_T - \alpha_{t_{N-1}}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{1}{\gamma^2} \int_{t_{N-1}}^T \|(\phi'(\bar{\rho}) - A')\beta\|_{L^2(\Omega)}^2 dt \\
&\leq \frac{1}{\gamma^2} \underbrace{[(1 + C_{\bar{\rho}})^2 + (\phi'(\bar{\rho}))^2 + C_{Dual}^2] C_{\Delta}^2}_{=: C_B^2} \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}^2.
\end{aligned}$$

Somit erhalten wir

$$\begin{aligned}
&\left| \int_{t_{N-1}}^T \left(\phi(\rho^h) - w^h(t, \cdot) - A^h \rho^h(t, \cdot), \beta(t, \cdot) - \Pi^N \beta(t, \cdot) \right) dt \right| \leq \\
&\leq |(\phi(\rho_N^h) - w_N^h - A^h \rho_N^h, B - \Pi^N B)| \\
&\leq C_{ell} C_{\Pi^N} C_B \left(\sum_{s \in M^N} \|\phi(\rho_N^h) - w_N^h - A^h \rho_N^h\|_{L^2(s)}^2 h_s^4 \right)^{\frac{1}{2}} \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}.
\end{aligned}$$

Faßt man die beiden Abschätzungen für $[0, t_{N-1}]$ und $[t_{N-1}, T]$ zusammen, so ergibt sich:

$$\begin{aligned}
&\left| \sum_{n=1}^N \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left(\phi(\rho^h(t, \cdot)) - w^h(t, \cdot), \beta(t, \cdot) - \Pi^n \beta(t, \cdot) \right) dt \right| \leq \\
&\leq C_{ell} \max\{C_{\Delta^2}, C_B\} \left(2 \sum_{n=1}^N C_{\Pi^n}^2 \sum_{s \in M^n} \|\phi(\rho_n^h) - w_n^h - A^h \rho_n^h\|_{L^2(s)}^2 h_s^4 \right)^{\frac{1}{2}} \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}.
\end{aligned}$$

Der gelumppte Massenfehler II

Wie oben spalten wir das Zeitintervall $[0, T]$ in den letzten Zeitschritt, in dem

$$\begin{aligned} \|\nabla B\|_{L^2(\Omega)} &\leq \left(\int_{t_{N-1}}^T (T-t)^{-\frac{1}{2}} dt \right)^{\frac{1}{2}} \left(\int_{t_{N-1}}^T (T-t)^{\frac{1}{2}} \|\nabla \beta(t, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 dt \right)^{\frac{1}{2}} \\ &\leq 2(\tau_N)^{\frac{1}{4}} C_{\nabla^2} \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)} \end{aligned}$$

gilt und den Rest auf. Auf dem letzten Zeitschritt haben wir, da Clément-Interpolation und Zeitintegration vertauschen

$$\begin{aligned} &\left| \int_{t_{N-1}}^T \left[(\phi(\rho^h) - w^h - A^h \rho^h, \Pi^N \beta) - (\phi(\rho^h) - w^h - A^h \rho^h, \Pi^N \beta)^h \right] dt \right| = \\ &= \left| \left(\phi(\rho_N^h) - w_N^h - A^h \rho_N^h, \int_{t_{N-1}}^T \Pi^N \beta dt \right) - \left(\phi(\rho_N^h) - w_N^h - A^h \rho_N^h, \int_{t_{N-1}}^T \Pi^N \beta dt \right)^h \right| \\ &= \left| (\phi(\rho_N^h) - w_N^h - A^h \rho_N^h, \Pi^N B) - (\phi(\rho_N^h) - w_N^h - A^h \rho_N^h, \Pi^N B)^h \right| \\ &\leq C_M \sum_{s \in M^N} \left[h_s \|\phi(\rho_N^h) - w_N^h - A^h \rho_N^h\|_{L^2(s)} \|\nabla(B - \Pi^N B)\|_{L^2(s)} \right. \\ &\quad \left. + h_s \|\phi(\rho_N^h) - w_N^h - A^h \rho_N^h\|_{L^2(s)} \|\nabla B\|_{L^2(s)} \right] \\ &\leq C_M C_{ell} \left[C_{\Pi^N}^2 \sum_{s \in M^N} h_s^4 \|\phi(\rho_N^h) - w_N^h - A^h \rho_N^h\|_{L^2(s)}^2 \right]^{\frac{1}{2}} \|\Delta B\|_{L^2(\Omega)} \\ &\quad + C_M \left[\sum_{s \in M^N} h_s^2 \|\phi(\rho_N^h) - w_N^h - A^h \rho_N^h\|_{L^2(s)}^2 \right]^{\frac{1}{2}} \|\nabla B\|_{L^2(\Omega)} \\ &\leq C_M C_{ell} C_B \left[C_{\Pi^N}^2 \sum_{s \in M^N} h_s^4 \|\phi(\rho_N^h) - w_N^h - A^h \rho_N^h\|_{L^2(s)}^2 \right]^{\frac{1}{2}} \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)} \\ &\quad + C_M \left[\sum_{s \in M^N} h_s^2 \|\phi(\rho_N^h) - w_N^h - A^h \rho_N^h\|_{L^2(s)}^2 \right]^{\frac{1}{2}} 2(\tau_N)^{\frac{1}{4}} C_{\nabla^2} \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)} \\ &\leq C_M C_{ell} C_B \left[C_{\Pi^N}^2 \sum_{s \in M^N} h_s^4 \|\phi(\rho_N^h) - w_N^h - A^h \rho_N^h\|_{L^2(s)}^2 \right]^{\frac{1}{2}} \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)} \\ &\quad + C_M \left[4C_{\nabla^2}^2 \sqrt{\tau_N} \sum_{s \in M^N} h_s^2 \|\phi(\rho_N^h) - w_N^h - A^h \rho_N^h\|_{L^2(s)}^2 \right]^{\frac{1}{2}} \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)} \end{aligned}$$

Und auf dem Rest des Intervalls $[0, T]$ gilt:

$$\sum_{n=1}^{N-1} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left[(\phi(\rho_n^h) - w_n^h - A^h \rho_n^h, \Pi^n \beta) - (\phi(\rho_n^h) - w_n^h - A^h \rho_n^h, \Pi^n \beta)^h \right] dt \leq$$

$$\begin{aligned}
&\leq C_M \sum_{n=1}^{N-1} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left[\sum_{s \in M^n} h_s \|\phi(\rho_n^h) - w_n^h - A^h \rho_n^h\|_{L^2(s)} \|\nabla(\beta - \Pi^n \beta)\|_{L^2(s)} \right. \\
&\quad \left. + \sum_{s \in M^n} h_s \|\phi(\rho_n^h) - w_n^h - A^h \rho_n^h\|_{L^2(s)} \|\nabla \beta\|_{L^2(s)} \right] dt \\
&\leq C_M \sum_{n=1}^{N-1} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left[\sum_{s \in M^n} C_{\Pi^n} h_s^2 \frac{\|\phi(\rho_n^h) - w_n^h - A^h \rho_n^h\|_{L^2(s)}}{\sqrt{T-t}} \sqrt{T-t} \|\beta\|_{H^{2,2}(s)} \right. \\
&\quad \left. + \sum_{s \in M^n} \frac{h_s}{(T-t)^{\frac{1}{4}}} \|\phi(\rho_n^h) - w_n^h - A^h \rho_n^h\|_{L^2(s)} (T-t)^{\frac{1}{4}} \|\nabla \beta\|_{L^2(s)} \right] dt \\
&\leq C_M \sum_{n=1}^{N-1} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left[\left(\sum_{s \in M^n} C_{\Pi^n}^2 \frac{h_s^4}{T-t} \|\phi(\rho_n^h) - w_n^h - A^h \rho_n^h\|_{L^2(s)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} C_{ell} \sqrt{T-t} \|\Delta \beta\|_{L^2(\Omega)} \right. \\
&\quad \left. + \left((T-t)^{-\frac{1}{2}} \sum_{s \in M^n} h_s^2 \|\phi(\rho_n^h) - w_n^h - A^h \rho_n^h\|_{L^2(s)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} (T-t)^{\frac{1}{4}} \|\nabla \beta\|_{L^2(\Omega)} \right] dt \\
&\leq C_M \left[C_{ell} \left(\sum_{n=1}^{N-1} C_{\Pi^n}^2 \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left[\sum_{s \in M^n} \frac{h_s^4}{T-t} \|\phi(\rho_n^h) - w_n^h - A^h \rho_n^h\|_{L^2(s)}^2 \right] dt \right)^{\frac{1}{2}} \right. \\
&\quad \cdot \left(\int_0^T (T-t) \|\Delta \beta\|_{L^2(\Omega)}^2 dt \right)^{\frac{1}{2}} \\
&\quad \left. + \left(\sum_{n=1}^{N-1} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left[(T-t)^{-\frac{1}{2}} \sum_{s \in M^n} h_s^2 \|\phi(\rho_n^h) - w_n^h - A^h \rho_n^h\|_{L^2(s)}^2 \right] dt \right)^{\frac{1}{2}} \right. \\
&\quad \left. \cdot \left(\int_0^T (T-t)^{\frac{1}{2}} \|\nabla \beta\|_{L^2(\Omega)}^2 dt \right)^{\frac{1}{2}} \right] \\
&\leq C_M \left[C_{ell} \left(\sum_{n=1}^{N-1} C_{\Pi^n}^2 \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left[\sum_{s \in M^n} \frac{h_s^4}{T-t} \|\phi(\rho_n^h) - w_n^h - A^h \rho_n^h\|_{L^2(s)}^2 \right] dt \right)^{\frac{1}{2}} C_{\Delta^2} \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)} \right. \\
&\quad \left. + \left(\sum_{n=1}^{N-1} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left[(T-t)^{-\frac{1}{2}} \sum_{s \in M^n} h_s^2 \|\phi(\rho_n^h) - w_n^h - A^h \rho_n^h\|_{L^2(s)}^2 \right] dt \right)^{\frac{1}{2}} C_{\nabla^2} \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)} \right] \\
&\leq C_M \left[C_{ell} C_{\Delta^2} \left(\sum_{n=1}^{N-1} C_{\Pi^n}^2 \sum_{s \in M^n} h_s^4 \|\phi(\rho_n^h) - w_n^h - A^h \rho_n^h\|_{L^2(s)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \right. \\
&\quad \left. + \left(C_{\nabla^2}^2 \sum_{n=1}^{N-1} \sqrt{\tau_n} \sum_{s \in M^n} h_s^2 \|\phi(\rho_n^h) - w_n^h - A^h \rho_n^h\|_{L^2(s)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \right] \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}.
\end{aligned}$$

Insgesamt ist also

$$\sum_{n=1}^N \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left[(\phi(\rho_n^h) - w_n^h - A^h \rho_n^h, \Pi^n \beta) - (\phi(\rho_n^h) - w_n^h - A^h \rho_n^h, \Pi^n \beta)^h \right] dt \leq$$

$$\begin{aligned}
&\leq C_M \left[C_{ell} \max\{C_{\Delta^2}, C_B\} \left(2 \sum_{n=1}^N C_{\Pi^n}^2 \sum_{s \in M^n} h_s^4 \|\phi(\rho_n^h) - w_n^h - A^h \rho_n^h\|_{L^2(s)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \right. \\
&\quad \left. + 2C_{\nabla^2} \left(\sum_{n=1}^N \sqrt{\tau_n} \sum_{s \in M^n} h_s^2 \|\phi(\rho_n^h) - w_n^h - A^h \rho_n^h\|_{L^2(s)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \right] \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}.
\end{aligned}$$

Die Gradiententerme

Bei der folgenden Abschätzung der letzten beiden Terme aus (5.19) werden wir elementweise partiell integrieren, dabei also eine Ableitung auf die diskreten Lösungen wälzen. Da die Gradienten von ρ_n^h und w_n^h elementweise konstant sind, bleiben nur die Randterme übrig. Für jede innere Kante des Gitters ergeben sich zwei Randterme jeweils mit unterschiedlichem Vorzeichen. Ist e eine innere Kante, so bezeichnen wir mit $[\nabla \rho_n^h]_e$ die Differenz der Normalenableitungen auf den jeweils an e angrenzenden Elementen. In den folgenden Abschätzungen durchläuft e dementsprechend alle inneren Kanten des jeweiligen Gitters.

Den vorletzten Term spalten wir wieder auf in den Anteil, der sich auf das Intervall $[0, t_{N-1}]$ bezieht und den Anteil des letzten Zeitschrittes:

$$\begin{aligned}
&\left| \sum_{n=1}^{N-1} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \gamma (\nabla \rho_n^h, \nabla(\beta - \Pi^n \beta)) \right| \leq \\
&\leq \gamma \sum_{n=1}^{N-1} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \sum_e \|\llbracket \nabla \rho_n^h \rrbracket_e\|_{L^2(e)} \|\beta - \Pi^n \beta\|_{L^2(e)} dt \\
&\leq \gamma \sum_{n=1}^{N-1} C_{\Pi^n} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left(\sum_e \frac{h_e^3}{T-t} \|\llbracket \nabla \rho_n^h \rrbracket_e\|_{L^2(e)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \sqrt{T-t} \|\beta\|_{H^{2,2}(\Omega)} dt \\
&\leq C_{ell} \gamma \sum_{n=1}^{N-1} C_{\Pi^n} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left(\sum_e \frac{h_e^3}{T-t} \|\llbracket \nabla \rho_n^h \rrbracket_e\|_{L^2(e)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \sqrt{T-t} \|\Delta \beta\|_{L^2(\Omega)} dt \\
&\leq C_{ell} \gamma \left(\sum_{n=1}^{N-1} C_{\Pi^n}^2 \sum_e h_e^3 \|\llbracket \nabla \rho_n^h \rrbracket_e\|_{L^2(e)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \left(\int_0^{t_{N-1}} (T-t) \|\Delta \beta(t, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 dt \right)^{\frac{1}{2}} \\
&\leq C_{ell} C_{\Delta^2} \gamma \left(\sum_{n=1}^{N-1} C_{\Pi^n}^2 \sum_e h_e^3 \|\llbracket \nabla \rho_n^h \rrbracket_e\|_{L^2(e)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}.
\end{aligned}$$

Und für den letzten Zeitschritt gilt

$$\begin{aligned}
&\left| \int_{t_{N-1}}^T \gamma (\nabla \rho^h, \nabla(\beta - \Pi^N \beta)) \right| = \gamma |(\nabla \rho_N^h, \nabla(B - \Pi^N B))| \\
&\leq \gamma \sum_e \|\llbracket \nabla \rho_N^h \rrbracket_e\|_{L^2(e)} \|B - \Pi^N B\|_{L^2(e)} \\
&\leq C_{ell} C_{\Pi^N} \gamma \sum_e \|\llbracket \nabla \rho_N^h \rrbracket_e\|_{L^2(e)} h_e^{\frac{3}{2}} |B|_{H^{2,2}(\omega_s)} \\
&\leq C_{ell} C_{\Pi^N} \gamma \left(\sum_e h_e^3 \|\llbracket \nabla \rho_N^h \rrbracket_e\|_{L^2(e)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \|\Delta B\|_{L^2(\Omega)}
\end{aligned}$$

$$\leq C_{ell} C_B \gamma \left(C_{\Pi^N}^2 \sum_e h_e^3 \|\nabla \rho_N^h\|_{L^2(e)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}.$$

Also haben wir insgesamt für den ersten Kantensprungterm

$$\begin{aligned} \left| \sum_{n=1}^N \int_{t_{n-1}}^{t_n} \gamma (\nabla \rho_n^h, \nabla (\beta - \Pi^n \beta)) \right| &\leq \\ &\leq C_{ell} \gamma \left[C_{\Delta^2} \left(\sum_{n=1}^{N-1} C_{\Pi^n}^2 \sum_e h_e^3 \|\nabla \rho_n^h\|_{L^2(e)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \right. \\ &\quad \left. + C_B \left(C_{\Pi^N}^2 \sum_e h_e^3 \|\nabla \rho_N^h\|_{L^2(e)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \right] \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)} \\ &\leq C_{ell} \gamma \max\{C_{\Delta^2}, C_B\} \left(2 \sum_{n=1}^N C_{\Pi^n}^2 \sum_e h_e^3 \|\nabla \rho_n^h\|_{L^2(e)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}. \end{aligned}$$

Der zweite Kantensprungterm ist entsprechend

$$\begin{aligned} \left| \sum_{n=1}^N \int_{t_{n-1}}^{t_n} (\nabla w^h, \nabla (\alpha - \Pi^n \alpha)) \right| &\leq \\ &\leq \sum_{n=1}^N \int_{t_{n-1}}^{t_n} \sum_e \|\nabla w_n^h\|_{L^2(e)} \|\alpha - \Pi^n \alpha\|_{L^2(e)} dt \\ &\leq \sum_{n=1}^N C_{\Pi^n} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left(\sum_e h_e^3 \|\nabla w_n^h\|_{L^2(e)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} |\alpha|_{H^{2,2}(\omega_s)} dt \\ &\leq C_{ell} \left(\sum_{n=1}^N C_{\Pi^n}^2 \int_{t_{n-1}}^{t_n} \sum_e h_e^3 \|\nabla w_n^h\|_{L^2(e)}^2 dt \right)^{\frac{1}{2}} \left(\int_0^T \|\Delta \alpha(t, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 dt \right)^{\frac{1}{2}} \\ &\leq C_{ell} C_{\Delta} \left(\sum_{n=1}^N C_{\Pi^n}^2 \tau_n \sum_e h_e^3 \|\nabla w_n^h\|_{L^2(e)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}. \end{aligned}$$

Zusammenfassung der Abschätzungen des Residuums

Wir fassen die oben einzeln gezeigten Abschätzungen zusammen und wandeln die L^2 -Normen bezüglich der Zeit in L^∞ -Normen um.

$$\begin{aligned} \left| \mathcal{R}(\rho^h, w^h, \alpha, \beta) \right| &\leq \\ &\leq \left\{ \left[\sum_{n=1}^N \sum_{s \in M^n} h_s^2 \|\phi(\rho_n^h) - w_n^h - A^h \rho_n^h\|_{L^2(s)}^2 \right. \right. \\ &\quad \left. \cdot \left(6(1 + C_M^2) C_{ell}^2 \max\{C_{\Delta^2}, C_B\}^2 C_{\Pi^n}^2 h_s^2 + 12 C_M^2 C_{\nabla^2}^2 \tau_n \right) \right]^{\frac{1}{2}} \\ &\quad \left. + \left[\sum_{n=1}^N \sum_{s \in M^n} \frac{1}{\tau_n} \|\rho_n^h - \mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h\|_{L^2(s)}^2 \right] \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \cdot \left(4(1 + C_M^2) C_{ell}^2 C_\Delta^2 C_{\Pi^n}^2 h_s^4 + 4C_M^2 C_\nabla^2 h_s^2 + 16C_{\bar{\rho}}^2 \tau_n \right) \Big]^\frac{1}{2} \\
& + \left[\sum_{n=1}^N \sum_{s \in M^n} C_{\bar{\rho}}^2 \|\mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h - \rho_{n-1}^h\|_{L^2(s)}^2 \right]^\frac{1}{2} \\
& + \left[\sum_{n=1}^N \sum_e h_e^3 \|\nabla \rho_n^h\|_{L^2(e)}^2 2C_{\Pi^n}^2 C_{ell}^2 \gamma^2 \max\{C_{\Delta^2}, C_B\}^2 \right]^\frac{1}{2} \\
& + \left[\sum_{n=1}^N \sum_e h_e^3 \tau_n \|\nabla w_n^h\|_{L^2(e)}^2 C_{\Pi^n}^2 C_{ell}^2 C_\Delta^2 \right]^\frac{1}{2} \\
& + \left[\sum_{n=1}^N \sum_{s \in M^n} \left(h_s e(C_{11} + C_{12}) \|\nabla \rho_n^h\|_{L^2(s)} + \frac{1}{2} h_s^\frac{1}{2} \|\boldsymbol{\nu} \cdot [\mathcal{S}_n^h]\|_{L^2(\partial s)} \right)^2 C_{elast}^2 C_\Delta^2 \right]^\frac{1}{2} \Big\} \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)} \\
\leq & \left\{ \left[T \max_{n=1, \dots, N} \sum_{s \in M^n} \frac{h_s^2}{\tau_n} \|\phi(\rho_n^h) - w_n^h - A^h \rho_n^h\|_{L^2(s)}^2 \cdot \right. \right. \\
& \cdot \left(6(1 + C_M^2) C_{ell}^2 \max\{C_{\Delta^2}, C_B\}^2 C_{\Pi^n}^2 h_s^2 + 12C_M^2 C_{\nabla^2} \sqrt{\tau_n} \right) \Big]^\frac{1}{2} \\
& + \left[T \max_{n=1, \dots, N} \frac{1}{\tau_n^2} \|\rho_n^h - \mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h\|_{L^2(s)}^2 \cdot \right. \\
& \cdot \left(4(1 + C_M^2) C_{ell}^2 C_\Delta^2 C_{\Pi^n}^2 h_s^4 + 4C_M^2 C_\nabla^2 h_s^2 + 16C_{\bar{\rho}}^2 \tau_n \right) \Big]^\frac{1}{2} \\
& + \left[T \max_{n=1, \dots, N} \sum_{s \in M^n} \frac{C_{\bar{\rho}}^2}{\tau_n} \|\mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h - \rho_{n-1}^h\|_{L^2(s)}^2 \right]^\frac{1}{2} \\
& + \left[T \max_{n=1, \dots, N} \sum_e \frac{h_e^3}{\tau_n} \|\nabla \rho_n^h\|_{L^2(e)}^2 2C_{\Pi^n}^2 C_{ell}^2 \gamma^2 \max\{C_{\Delta^2}, C_B\}^2 \right]^\frac{1}{2} \\
& + \left[T \max_{n=1, \dots, N} \sum_e h_e^3 \|\nabla w_n^h\|_{L^2(e)}^2 C_{\Pi^n}^2 C_{ell}^2 C_\Delta^2 \right]^\frac{1}{2} \\
& + \left[T \max_{n=1, \dots, N} \sum_{s \in M^n} \left(h_s e(C_{11} + C_{12}) \|\nabla \rho_n^h\|_{L^2(s)} + \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + \frac{1}{2} h_s^\frac{1}{2} \|\boldsymbol{\nu} \cdot [\mathcal{S}_n^h]\|_{L^2(\partial s)} \right)^2 \frac{C_{elast}^2 C_\Delta^2}{\tau_n} \right]^\frac{1}{2} \Big\} \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}.
\end{aligned}$$

Die neun Summanden, aus denen das parabolische Residuum (5.19) besteht, lassen sich also durch die unten stehende Summe aus den sechs Fehlerbeiträgen inneres Residuum, Zeitfehler, Elastizitätsfehler, Vergrößerungsfehler, Kantensprünge der Gradienten von ρ_n^h und w_n^h abschätzen.

Mit den Konstanten

$$\begin{aligned}
(5.22) \quad c_1(h_s, \tau_n) &= \frac{h_s^2}{\tau_n} \left(6(1 + C_M^2) C_{ell}^2 \max\{C_{\Delta^2}, C_B\}^2 C_{\Pi^n}^2 h_s^2 + 12C_M^2 C_{\nabla^2} \sqrt{\tau_n} \right) \\
c_2(h_s, \tau_n) &= \frac{1}{\tau_n^2} \left(4(1 + C_M^2) C_{ell}^2 C_\Delta^2 C_{\Pi^n}^2 h_s^4 + 4C_M^2 C_\nabla^2 h_s^2 + 16C_{\bar{\rho}}^2 \tau_n \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
c_3(\tau_n) &= \frac{C_{\bar{\rho}}^2}{\tau_n} \\
c_4(h_e, \tau_n) &= 2C_{\Pi^n}^2 C_{ell}^2 \gamma^2 \max\{C_{\Delta^2}, C_B\}^2 \frac{h_e^3}{\tau_n} \\
c_5(h_e) &= C_{\Pi^n}^2 C_{ell}^2 C_{\Delta}^2 h_e^3. \\
c_6(\tau_n) &= \frac{C_{elast}^2 C_{\Delta}^2}{\tau_n}
\end{aligned}$$

haben wir insgesamt also die folgende Fehlerabschätzung:

5.1 Satz (A posteriori Abschätzung). *Sind ρ, w Lösungen von (5.1)– (5.3), ρ^h, w^h Lösungen von (5.7)– (5.8) und erfüllen die Lösungen des dualen Problems die Stabilitätsannahmen (5.13)– (5.17), so gilt für die Differenz $e_\rho(T, \cdot) = \rho(T, \cdot) - \rho^h(T, \cdot)$ die Abschätzung*

$$\begin{aligned}
\|e_\rho(T)\|_{L^2(\Omega)} &\leq C_{\bar{\rho}} \|e_\rho(0)\|_{L^2(\Omega)} \\
&+ \left[T \max_{n=1, \dots, N} \sum_{s \in M^n} c_1(h_s, \tau_n) \|\phi(\rho_n^h) - w_n^h - A^h \rho_n^h\|_{L^2(s)}^2 \right]^{\frac{1}{2}} \\
&+ \left[T \max_{n=1, \dots, N} \sum_{s \in M^n} c_2(h_s, \tau_n) \|\rho_n^h - \mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h\|_{L^2(s)}^2 \right]^{\frac{1}{2}} \\
&+ \left[T \max_{n=1, \dots, N} \sum_{s \in M^n} c_3(\tau_n) \|\mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h - \rho_{n-1}^h\|_{L^2(s)}^2 \right]^{\frac{1}{2}} \\
&+ \left[T \max_{n=1, \dots, N} \sum_e c_4(h_e, \tau_n) \|\nabla \rho_n^h\|_{L^2(e)}^2 \right]^{\frac{1}{2}} \\
&+ \left[T \max_{n=1, \dots, N} \sum_e c_5(h_e) \|\nabla w_n^h\|_{L^2(e)}^2 \right]^{\frac{1}{2}} \\
&+ \left[T \max_{n=1, \dots, N} \sum_{s \in M^n} c_6(\tau_n) \left(h_s e(C_{11} + C_{12}) \|\nabla \rho_n^h\|_{L^2(s)} + \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{1}{2} h_s^{\frac{1}{2}} \|\nu \cdot [\mathcal{S}_n^h]\|_{L^2(\partial s)} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}.
\end{aligned}$$

5.4 Abhängigkeit der Konstanten von den Daten

Die Stabilitätskonstanten, die in der obigen Abschätzung auftauchen, hängen insbesondere von γ ab. Im linearisierten Fall, für den wir die Konstanten explizit bestimmen können (siehe den Anhang zu diesem Kapitel), gilt, daß für $\gamma \rightarrow 0$ die Konstanten gegen unendlich gehen. Dasselbe Problem tritt auch bei den üblichen a priori-Fehlerabschätzungen [22, 5, 35] auf, bei denen Anwendung des Gronwall-Lemmas auf Konstanten der Gestalt

$$C \approx e^{\frac{1}{\gamma}}$$

führt. Diese ungünstige Abhängigkeit tritt jedoch auch bei anderen nichtlinearen Problemen auf [57, 27, 28].

Ebenfalls problematisch ist die Abhängigkeit der Konstanten von T . Im linearisierten Fall hängt beispielsweise C_ρ auch exponentiell von T ab. Da aus der Sicht der Anwendung und

der Modellierung gerade der Fall von großem T und kleinem γ interessant ist, sind Verbesserungen in dieser Hinsicht besonders wünschenswert.

Basierend auf einer Spektralanalyse [12] haben Feng und Prohl [30, 31] a priori-Fehlerabschätzungen für die Allen-Cahn- und die Cahn-Hilliard-Gleichung bewiesen, bei denen die Konstanten für kleiner werdendes γ nur polynomial anwachsen. Durch Verwendung und Modifikation dieser Ergebnisse lassen sich die gezeigten Abschätzungen möglicherweise verbessern.

Trotz dieser Probleme hat die Fehlerabschätzung (5.1) durchaus praktischen Aussagewert. Wie wir im Abschnitt (6.3) ausführen werden, können die wesentlichen Fehlerbeiträge identifiziert und deren relatives Gewicht bestimmt werden.

5.5 Implementation

In diesem Abschnitt widmen wir uns der Implementation der lokalen Fehlerschätzer, die wir, wie in Abschnitt 3.5 beschrieben, zur adaptiven Gittergenerierung nutzen. Der Gesamtfehler läßt sich wie oben gezeigt durch die Summe

$$\|e_\rho(T)\|_{L^2(\Omega)} \leq C_{\bar{\rho}} \|e_\rho(0)\|_{L^2(\Omega)} + \sum_{k=1}^6 \left[T \max_{n=1, \dots, N} \sum_{s \in M^n} c_k(h_s, \tau_n) E^{lok,k}(s) \right]^{\frac{1}{2}}$$

mit lokalen Fehlerbeiträgen $E^{lok,k}(s)$ und Konstanten $c_k(h_s, \tau_n)$ abschätzen.

Berechnung der lokalen Fehlerbeiträge

In diesem Abschnitt wollen wir eine berechenbare Darstellung der lokalen Fehlerbeiträge $E^{lok,k}(s)$ herleiten. Dazu betrachten wir zunächst die auftretenden lokalen L^2 -Normen.

Berechnung der lokalen L^2 -Normen

In den Fehlerschätzern treten elementweise L^2 -Normen auf. Um diese zu berechnen, benutzen wir lokale Massenmatrizen $\mathcal{M}^{lok,s}$:

$$\mathcal{M}_{ij}^{lok,s} = \int_s \varphi_i^h \varphi_j^h dx. \quad i, j = 1, \dots, 3$$

Für die in der Implementation verwendeten Dreiecke ergibt Integration mittels der Seitenmittenuadratur für das Dreieck s

$$\mathcal{M}_{ij}^{lok,s} = \frac{|s|}{12} (\delta_{ij} + 1).$$

Damit ist dann für $f^h \in V^n$

$$\|f^h\|_{L^2(s)}^2 = \sum_{i,j} \bar{f}_i^h \bar{f}_j^h \mathcal{M}_{ij}^{lok,s} = \bar{f}^h \cdot \mathcal{M}^{lok,s} \bar{f}^h = \frac{|s|}{12} \sum_{i,j=0}^2 \bar{f}_i^h \bar{f}_j^h (\delta_{ij} + 1).$$

Entsprechend verwenden wir die lokale Steifigkeitsmatrix

$$\mathcal{A}_{ij}^{lok,s} = \int_s \nabla \varphi_i^h \nabla \varphi_j^h dx.$$

Das innere Residuum

Wir betrachten den Term

$$\|\phi(\rho_n^h) - w_n^h - A^h \rho_n^h\|_{L^2(s)}^2.$$

Aus (3.10) folgt, daß

$$\overrightarrow{\phi(\rho_n^h)} - \vec{w}_n^h - A^h \vec{\rho}_n^h = -\gamma \mathcal{M}^{-1} \mathcal{A} \vec{\rho}_n^h$$

Somit ist

$$\|\psi''(\bar{\rho}) \rho_n^h - w_n^h - A^h \rho_n^h\|_{L^2(s)}^2 = \gamma^2 (\mathcal{M}^{-1} \mathcal{A} \vec{\rho}_n^h) \cdot \mathcal{M}^{lok,s} (\mathcal{M}^{-1} \mathcal{A} \vec{\rho}_n^h)$$

Als ersten lokalen Fehlerbeitrag $E^{lok,1}$ definieren wir also:

$$E^{lok,1}(s) = (\mathcal{M}^{-1} \mathcal{A} \vec{\rho}_n^h) \cdot \mathcal{M}^{lok,s} (\mathcal{M}^{-1} \mathcal{A} \vec{\rho}_n^h),$$

wobei wir die Konstante γ^2 der großen Konstante c_1 zuschlagen. Mit anderen Worten wir ersetzen $c_1(h_s, \tau_n)$ in 5.22 durch

$$\tilde{c}_1(h_s, \tau_n) = \frac{h_s^2}{\tau_n} \gamma^2 \left(6 (1 + C_M^2) C_{ell}^2 \max\{C_{\Delta^2}, C_B\}^2 C_{\Pi^n}^2 h_s^2 + 12 C_M^2 C_{\nabla^2}^2 \sqrt{\tau_n} \right).$$

Zeitfehler

Analog zum obigen Vorgehen gelangen wir zum zweiten lokalen Fehlerbeitrag $E^{lok,2}$:

$$E^{lok,2}(s) = (\mathcal{M} \vec{\rho}_n^h - \mathcal{M} \vec{\rho}_n^h) \cdot \mathcal{M}^{lok,s} (\mathcal{M} \vec{\rho}_n^h - \mathcal{M} \vec{\rho}_n^h).$$

Vergrößerungsfehler

Bei dem adaptiven Algorithmus wie er in Abschnitt 3.5 dargestellt ist, ergibt sich im Bezug auf den Vergrößerungsfehler das Problem, daß nicht bekannt ist, ob durch lokales Vergrößern die vorgegebenen Toleranzen überschritten werden. Dieses Problem kann man entweder durch eine Iteration umgehen – also durch testweises Vergrößern und anschließendes eventuelles Zurücknehmen der Vergrößerung – oder durch die Annahme bei der Berechnung des Vergrößerungsfehler, daß jedes Element vergrößert wird. Wir wählen die zweite Möglichkeit und berechnen also $E^{lok,3}$:

$$E^{lok,3}(s) = (\mathcal{M} \mathcal{I}^* \vec{\rho}_{n-1}^h - \mathcal{M} \vec{\rho}_{n-1}^h) \cdot \mathcal{M}^{lok,s} (\mathcal{M} \mathcal{I}^* \vec{\rho}_{n-1}^h - \mathcal{M} \vec{\rho}_{n-1}^h),$$

wobei \mathcal{I}^* die Lagrange-Interpolation auf das Gitter bezeichnet, das entsteht, wenn man in M^{n-1} einmal global vergrößert.

Kantensprünge der Gradienten

Da die Sprünge der Gradienten auf den Kanten konstant sind, gilt

$$\|[\nabla \rho_n^h]_e\|_{L^2(e)}^2 = h_e [\nabla \rho_n^h]_e^2.$$

Wir definieren also

$$E^{lok,4}(s) = \frac{1}{2} \sum_{e \in s} h_e [\nabla \rho_n^h]_e^2$$

und ersetzen $c_4(h_s, \tau_n)$ in 5.22 durch

$$\tilde{c}_4(h_e, \tau_n) = 2 C_{\Pi^n}^2 C_{ell}^2 \gamma^2 \max\{C_{\Delta^2}, C_B\}^2 \frac{h_e^3}{\tau_n}.$$

Entsprechend ist für den Kantensprung von w_n^h :

$$E^{lok,5}(s) = \frac{1}{2} \sum_{e \in s} h_e [\nabla w_n^h]_e^2$$

und

$$\tilde{c}_5(h_e) = C_{\Pi^n}^2 C_{ell}^2 C_{\Delta}^2 h_e^3.$$

Elastizitätsfehler

Der Fehlerbeitrag aus dem Elastizitätssystem besteht aus zwei Teilen. Der eine ist die lokale L^2 -Norm des Gradienten der Konzentration. Dieser Teil berechnet sich mit Hilfe der lokalen Steifigkeitsmatrix wie folgt:

$$\|\nabla \rho_n^h\|_{L^2(s)}^2 = \sum_{i,j} \bar{\rho}_{n,i}^h \bar{\rho}_{n,j}^h \mathcal{A}_{ij}^{lok,s}.$$

Der andere ist der Sprung der Spur der Spannung. Bei der Berechnung des Sprungterms ist zu beachten, daß der von ρ_n^h abhängige Teil der Spannung auf den Elementgrenzen stetig ist und sich somit zu Null addiert. Es geht also nur der verschiebungsabhängige Teil in den Fehlerbeitrag ein.

Bestimmung der Konstanten für die linearisierte Cahn-Hilliard Gleichung

Wir wollen nun die Konstanten c_k beziehungsweise \tilde{c}_k für die linearisierte Cahn-Hilliard Gleichung ohne Elastizität bestimmen und unterscheiden dabei zwei Fälle, je nachdem ob $\psi''(\bar{\rho}) < 0$ ist oder nicht. Für konvexe Gebiete, die wir ausschließlich betrachten, ist $C_{ell} = 1$.

Der Fall $\psi''(\bar{\rho}) > 0$

Im Anhang zu diesem Kapitel wird gezeigt, daß in diesem Fall die Stabilitätskonstanten durch

$$\begin{aligned} C_{\bar{\rho}} = C_{\bar{\rho}} = 1 & & C_{\Delta} = \frac{1}{\sqrt{2\gamma}} \\ C_{\nabla} = \frac{1}{\sqrt{2\psi''(\bar{\rho})}} & & C_{\Delta^2} = \frac{1}{2\gamma}. \end{aligned}$$

gegeben sind. Die abgeleitete Stabilitätskonstante C_B ist dann:

$$C_B = \frac{\sqrt{4 + \frac{\psi''(\bar{\rho})^2}{2\gamma}}}{\gamma} = \sqrt{\frac{8\gamma + \psi''(\bar{\rho})^2}{\gamma^3}}$$

und diese ist größer als C_{Δ^2} . Somit ist der Vorfaktor vor $E^{lok,1}(s)$:

$$\begin{aligned} \tilde{c}_1(h_s, \tau_n) &:= \gamma^2 \frac{h_s^2}{\tau_n} \left(6(1 + C_M^2) \max\{C_{\Delta^2}, C_B\}^2 C_{\Pi^n}^2 h_s^2 + 12C_M^2 C_{\Delta} C_{\Delta^2} \sqrt{\tau_n} \right) \\ &= \frac{h_s^2}{\tau_n} \left(6(1 + C_M^2) C_{\Pi^n}^2 \frac{8\gamma + \psi''(\bar{\rho})^2}{\gamma} h_s^2 + 6C_M^2 \sqrt{\frac{\gamma\tau_n}{2}} \right) \end{aligned}$$

Für den Vorfaktor von $E^{lok,2}(s)$ ergibt sich:

$$\begin{aligned} c_2(h_s, \tau_n) &:= \frac{1}{\tau_n^2} \left(4(1 + C_M^2) C_\Delta^2 C_{\Pi_n}^2 h_s^4 + 4C_M^2 C_\nabla^2 h_s^2 + 16C_{\bar{\rho}}^2 \tau_n \right) \\ &= \frac{1}{\tau_n^2} \left((1 + C_M^2) C_{\Pi_n}^2 \frac{2}{\gamma} h_s^4 + \frac{2C_M^2}{\psi''(\bar{\rho})} h_s^2 + 16\tau_n \right). \end{aligned}$$

Der Vorfaktor von $E^{lok,3}(s)$ ist $c_3(\tau_n) = \frac{C_{\bar{\rho}}^2}{\tau_n}$ und von $E^{lok,4}(s)$

$$\tilde{c}_4(\tau_n) := \frac{2C_{\Pi_n}^2 (8\gamma + \psi''(\bar{\rho})^2) h_e^3}{\tau_n \gamma}$$

sowie

$$\tilde{c}_5 := \frac{C_{\Pi_n}^2}{2\gamma} h_e^3.$$

Für die praktische Umsetzung setzen wir zusätzlich

$$C_{\Pi_n} = C_M = 1.$$

Wir nehmen also an, daß die Konstanten für die Interpolations- und die gelumpfte Massenabschätzung gleich 1 sind. Für eine genauere Analyse dieser Konstanten siehe [11]. Die Daten, die in Abschnitt 6.3 präsentiert werden, sind also mit den folgenden Vorfaktoren der Elementfehlerschätzer berechnet worden:

$$\begin{aligned} \tilde{c}_1 &= \frac{h_s^2}{\tau_n} \left(12 \frac{8\gamma + \psi''(\bar{\rho})^2}{\gamma} h_s^2 + 6\sqrt{\frac{\gamma\tau_n}{2}} \right) \\ c_2 &= \frac{1}{\tau_n^2} \left(\frac{4}{\gamma} h_s^4 + \frac{2}{\psi''(\bar{\rho})} h_s^2 + 16\tau_n \right) \\ c_3 &= \frac{C_{\bar{\rho}}^2}{\tau_n} \\ \tilde{c}_4 &= \frac{2(8\gamma + \psi''(\bar{\rho})^2) h_e^3}{\tau_n \gamma} \\ \tilde{c}_5 &= \frac{h_e^3}{2\gamma}. \end{aligned}$$

Der Fall $\psi''(\bar{\rho}) < 0$

In diesem Fall sind die Stabilitätskonstanten gegeben durch

$$\begin{aligned} C_{\bar{\rho}} &= \exp\left(\frac{T(\psi''(\bar{\rho}))^2}{4\gamma}\right) \\ C_\Delta &= \frac{1}{4\sqrt{\gamma}} \frac{1}{\sqrt{(C_{\bar{\rho}}^2 - \frac{7}{8}) - \sqrt{(C_{\bar{\rho}}^2 - \frac{7}{8})^2 - \frac{1}{64}}}} \\ C_\nabla &= \sqrt[4]{\frac{C_\Delta^2 2\gamma (C_{\bar{\rho}}^2 - 1)}{\psi''(\bar{\rho})^2}} \\ C_{\Delta^2} &= \frac{C_\Delta}{\sqrt{2 \left[2\psi''(\bar{\rho}) \left(2\psi''(\bar{\rho})T + \sqrt{4\psi''(\bar{\rho})^2 T^2 + 2\gamma T} \right) + \gamma \right]}}. \end{aligned}$$

Die abgeleitete Stabilitätskonstante C_B

$$C_B = \frac{1}{\gamma} \sqrt{(1 + C_{\bar{\rho}})^2 + \psi''(\bar{\rho})^2 C_{\Delta}^2}$$

läßt sich nicht mehr weiter vereinfachen.

Setzen wir wie vorhin $C_{\Pi^n} = C_M = 1$ und betrachten den Fall $C_B \geq C_{\Delta^2}$, so sind die Vorfaktoren vor den Fehlerbeiträgen $E^{lok,k}(s)$:

$$\begin{aligned} \tilde{c}_1(h_s, \tau_n) &= 12\gamma^2 \frac{h_s^2}{\tau_n} \left(\max\{C_{\Delta^2}, C_B\}^2 h_s^2 + C_{\Delta} C_{\Delta^2} \sqrt{\tau_n} \right) \\ c_2(h_s, \tau_n) &= \frac{4}{\tau_n^2} \left(2C_{\Delta}^2 h_s^4 + C_{\nabla}^2 h_s^2 + 4C_{\bar{\rho}}^2 \tau_n \right) \\ c_3 &= \frac{C_{\bar{\rho}}^2}{\tau_n} \\ \tilde{c}_4 &= \frac{2\gamma^2 \max\{C_{\Delta^2}, C_B\}^2 h_e^3}{\tau_n} \\ \tilde{c}_5 &= C_{\Delta}^2 h_e^3 \end{aligned}$$

Bestimmung der Konstanten für die Cahn-Hilliard und die Cahn-Larché Gleichung

Über die Größe der Stabilitätskonstanten wissen wir im nichtlinearen Fall nichts. Um konkrete Rechnungen durchzuführen verwenden wir die folgende Heuristik: Auf jedem Element s berechnen wir die durchschnittliche Konzentration. Wir verwenden dann die auf diesem Element die Ausdrücke aus dem linearen Fall mit $\bar{\rho} = \frac{1}{|s|} \int_s \rho_n^h$.

Diese Heuristik läßt sich folgendermaßen rechtfertigen. Hat man ρ^h bis zum Zeitpunkt t_n aber nicht darüber hinaus berechnet, so ergibt sich zunächst das Problem, welche Gestalt $\tilde{\rho}$ für das Zeitintervall $[t_n, T]$ hat. In Ermangelung besserer Information nehmen wir an, daß

$$\tilde{\rho}(t, x) = \rho_n^h(x) \quad \forall t \in [t_n, T]$$

ist. Lokal unterscheiden wir zwei Fälle: Innerhalb der Phasen ist ρ_n^h und somit vermutlich auch $\tilde{\rho}$ lokal ungefähr konstant und nimmt Werte an, für die $\phi'(\bar{\rho}) > 0$ ist. Dementsprechend kann die Lösung des dualen Problems für die linearisierte Cahn-Hilliard Gleichung als akzeptable Approximation angesehen werden, und die zugehörigen Stabilitätskonstanten verwendet werden. Innerhalb der Interface-Zonen ist die Situation kritischer. Fehler, die hier auftreten, können große Auswirkungen auf den Fehler zum Endzeitpunkt haben. Deswegen benutzen wir hier die Stabilitätskonstanten vom linearisierten Problem, denen die exponentiell wachsende Fehlerausbreitung zugrundeliegt. Insgesamt verstärkt diese Heuristik die Tendenz der Fehlerschätzer, hohe Gewichte in die Phasengrenzen zu legen und den Fehler im Inneren der Phasen als geringer zu schätzen.

Heuristische Adaptivität

Bei der praktischen Umsetzung der in diesem Kapitel hergeleiteten Fehlerschätzer zeigt sich, daß in aller Regel die Regionen, in denen Phasengrenzen sind, verfeinert werden, die Gebiete in denen die Lösung eine der beiden Phasen annimmt, hingegen vergrößert werden. Diese Beobachtung rechtfertigt die folgende Heuristik, die wir vor der Herleitung der Fehlerschätzer verwendet haben [67, 35]:

1. Berechne auf dem aktuellen Gitter die Lösung für den neuen Zeitpunkt.
2. Verfeinere alle Dreiecke, die im Bereich der Phasengrenzen liegen und größer sind als eine vorgegebene Maximalfeinheit.
3. Vergrößere unter Erhaltung der Konformität des Gitters alle Dreiecke, die im Bereich der Phasen liegen.

Als Kriterium für die Unterscheidung zwischen Phasengrenzen und Phasen bieten sich der Betrag des Abstandes der Lösung von den Minima von ψ oder der Gradient von ρ an.

Anhang: Beweis der Stabilitätsabschätzungen

In diesem Anhang beweisen wir die Stabilitätsabschätzungen (5.13)–(5.17) für den Fall der linearisierten Cahn-Hilliard Gleichung mit $A = 0$.

Lösungsdarstellung

Die starke Formulierung des Problems (5.10)–(5.11) vereinfacht sich zu

$$(5.23) \quad \partial_t \alpha = \Delta (\gamma \Delta \alpha - \psi''(\bar{\rho}) \alpha),$$

also bis auf Vorzeichenwechsel identisch mit dem Problem (2.19). Analog zum dortigen Vorgehen (l_i i-te Eigenfunktion des Laplace-Operators, λ_i der zugehörige Eigenwert) erhält man

$$\dot{\alpha}_i(t) = (\gamma \lambda_i^2 - \psi''(\bar{\rho}) \lambda_i) \alpha_i(t),$$

woraus folgt, daß

$$\alpha_i(t) = \alpha_{i,T} \exp \left((\gamma \lambda_i^2 - \psi''(\bar{\rho}) \lambda_i) (t - T) \right)$$

ist und somit

$$\alpha(t, x) = \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_{i,T} \exp \left((\gamma \lambda_i^2 - \psi''(\bar{\rho}) \lambda_i) (t - T) \right) l_i(x).$$

Für $\beta = \Delta \alpha$ ergibt sich entsprechend

$$\beta(t, x) = \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_{i,T} \lambda_i \exp \left((\gamma \lambda_i^2 - \psi''(\bar{\rho}) \lambda_i) (t - T) \right) l_i(x).$$

Dies zeigt, daß die Lösungen des dualen Problems in $C^\infty(0, T; H^{1,2}(\Omega))$ liegen.

Von diesen Lösungsdarstellungen ausgehend, werden wir im folgenden Stabilitätsabschätzungen herleiten.

Da die l_i eine Orthonormalbasis von $L^2(\Omega)$ bilden, gilt

$$\begin{aligned} \|\alpha(t, x)\|_{L^2(\Omega)}^2 &= \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i^2(t) \\ &= \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_{i,T}^2 \exp \left(2 (\gamma \lambda_i^2 - \psi''(\bar{\rho}) \lambda_i) (t - T) \right) \\ &\leq \max_{i \in \mathbb{N}} \left[\exp \left(2 (\gamma \lambda_i^2 - \psi''(\bar{\rho}) \lambda_i) (t - T) \right) \right] \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_{i,T}^2 \end{aligned}$$

$$= \max_{i \in \mathbb{N}} \left[\exp \left(2 (\gamma \lambda_i^2 - \psi''(\bar{\rho}) \lambda_i) (t - T) \right) \right] \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}^2$$

Wegen $0 \leq t \leq T$, der Monotonie der Exponentialfunktion und der Negativität der Eigenwerte des Laplaceoperators ist

$$\begin{aligned} \max_{i \in \mathbb{N}} \left[\exp \left(2 (\gamma \lambda_i^2 - \psi''(\bar{\rho}) \lambda_i) (t - T) \right) \right] &= \exp \left(2 (t - T) \min_{i \in \mathbb{N}} (\gamma \lambda_i^2 - \psi''(\bar{\rho}) \lambda_i) \right) \\ &\leq \exp \left(2 (t - T) \min_{x \in \mathbb{R}_-} (\gamma x^2 - \psi''(\bar{\rho}) x) \right) \\ &= \begin{cases} \exp \left((T - t) \frac{(\psi''(\bar{\rho}))^2}{2\gamma} \right), & \text{für } \psi''(\bar{\rho}) < 0 \\ 1, & \text{für } \psi''(\bar{\rho}) \geq 0 \end{cases} \end{aligned}$$

da das Polynom $\gamma x^2 - \psi''(\bar{\rho}) x$ an seiner Minimalstelle $\frac{\psi''(\bar{\rho})}{2\gamma}$ den Wert $-\frac{(\psi''(\bar{\rho}))^2}{4\gamma}$ annimmt. Ist $\psi''(\bar{\rho}) < 0$, so ist das Minimum in \mathbb{R}_- , andernfalls wird es am Rand bei 0 angenommen.

Also folgt:

$$\|\alpha(t, x)\|_{L^2(\Omega)} \leq C_{\bar{\rho}} \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}$$

mit

$$C_{\bar{\rho}} = \begin{cases} \exp \left(\frac{T(\psi''(\bar{\rho}))^2}{4\gamma} \right), & \text{für } \psi''(\bar{\rho}) < 0 \\ 1, & \text{für } \psi''(\bar{\rho}) \geq 0 \end{cases}$$

Diese Konstante ist für $\psi''(\bar{\rho}) < 0$ und kleinem γ von astronomischer Größe (siehe auch Abschnitt 5.4). Für Gebiete ungünstiger Gestalt ist die Abschätzung aber scharf, z.B. wenn wie oben $\Omega =]0, L[$ ist und entsprechend $\lambda_i = -\frac{i^2 \pi^2}{L^2}$. Ist dann für ein $j \in \mathbb{N}$ die Gleichung $j = \frac{L}{\pi} \sqrt{\frac{-\psi''(\bar{\rho})}{2\gamma}}$ erfüllt, so gilt für $\alpha_T := l_j$ in (5.5) Gleichheit, weil dann

$$\lambda_j = -\frac{j^2 \pi^2}{L^2} = -\frac{\psi''(\bar{\rho})}{2\gamma}$$

gilt, die Minimalstelle des Polynoms $\gamma x^2 - \psi''(\bar{\rho}) x$ also von einem der Eigenwerte getroffen wird.

Der Fall $\psi''(\bar{\rho}) \geq 0$

Wir betrachten zunächst den Fall $\psi''(\bar{\rho}) \geq 0$, also $|\bar{\rho}| \geq \frac{1}{\sqrt{3}}$.

Testet man Gleichung (5.23) mit α und integriert von t bis T , so ergibt sich:

$$\begin{aligned} \int_t^T (\partial_t \alpha, \alpha) &= \gamma \int_t^T (\Delta^2 \alpha, \alpha) - \psi''(\bar{\rho}) \int_t^T (\Delta \alpha, \alpha) \\ \implies \frac{1}{2} \int_t^T \partial_t \|\alpha\|_{L^2(\Omega)}^2 &= \gamma \int_t^T \|\Delta \alpha\|_{L^2(\Omega)}^2 + \psi''(\bar{\rho}) \int_t^T \|\nabla \alpha\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ \implies \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}^2 &= \|\alpha(t, x)\|_{L^2(\Omega)}^2 + 2\gamma \int_t^T \|\Delta \alpha\|_{L^2(\Omega)}^2 + 2\psi''(\bar{\rho}) \int_t^T \|\nabla \alpha\|_{L^2(\Omega)}^2 \end{aligned}$$

Alle Terme auf der rechten Seite haben positives Vorzeichen. Daher ist jeder Summand einzeln kleiner oder gleich der linken Seite. Insbesondere gilt:

$$(5.24) \quad \int_t^T \|\Delta\alpha(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds \leq \frac{1}{2\gamma} \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}^2$$

und

$$(5.25) \quad \int_t^T \|\nabla\alpha(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds \leq \frac{1}{2\psi''(\bar{\rho})} \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}^2.$$

Des weiteren gilt:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left((T-t) \|\Delta\alpha(t, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 \right) &= -\|\Delta\alpha(t, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 + 2(T-t) (\Delta\alpha, \Delta\partial_t\alpha) \\ &= -\|\Delta\alpha(t, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 + 2(T-t) (\Delta\alpha, \Delta(\gamma\Delta^2\alpha - \psi''(\bar{\rho})\Delta\alpha)) \\ &= -\|\Delta\alpha(t, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ &\quad + 2(T-t) \left[\gamma \|\Delta^2\alpha\|_{L^2(\Omega)}^2 + \psi''(\bar{\rho}) \|\nabla\Delta\alpha\|_{L^2(\Omega)}^2 \right]. \end{aligned}$$

Integration von t bis T und Multiplikation mit -1 ergibt:

$$\begin{aligned} (T-t) \|\Delta\alpha(t, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 &= \int_t^T \|\Delta\alpha(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds - \\ &\quad - 2 \int_t^T (T-s) \left[\gamma \|\Delta^2\alpha(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 + \psi''(\bar{\rho}) \|\nabla\Delta\alpha(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 \right] ds. \end{aligned}$$

Daraus folgt mit (5.24):

$$(T-t) \|\Delta\alpha(t, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq \int_t^T \|\Delta\alpha(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds \leq \frac{1}{2\gamma} \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}^2,$$

sowie

$$(5.26) \quad \int_t^T (T-s) \|\Delta^2\alpha(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds \leq \frac{1}{4\gamma^2} \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}^2$$

und

$$(5.27) \quad \int_t^T (T-s) \|\nabla\Delta\alpha(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds \leq \frac{1}{4\gamma\psi''(\bar{\rho})} \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}^2.$$

Die Abschätzung von $\nabla\beta = \nabla\Delta\alpha$ kann alternativ auch so erfolgen:

$$\begin{aligned} \int_t^T (T-s)^{\frac{1}{2}} \|\nabla\beta(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds &= \int_t^T (T-s)^{\frac{1}{2}} \|\nabla\Delta\alpha(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds \\ &= - \int_t^T \left(\Delta\alpha(s, \cdot), (T-s)^{\frac{1}{2}} \Delta^2\alpha(s, \cdot) \right) ds \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\leq \frac{\delta}{2} \int_t^T \|\Delta\alpha(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds + \frac{1}{2\delta} \int_t^T (T-s) \|\Delta^2\alpha(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds \\
&\leq \frac{1}{2} \left(\frac{\delta}{2\gamma} + \frac{1}{4\gamma^2\delta} \right) \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}^2 \\
&\leq \frac{1}{2\sqrt{2\gamma^3}} \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}^2
\end{aligned}$$

mit der optimalen Wahl von $\delta = \frac{1}{\sqrt{2\gamma}}$.

Für die Abschätzung von $\|\partial_t\alpha\|_{L^2(\Omega)}^2$ verwenden wir wieder die explizite Lösungsdarstellung:

$$\partial_t\alpha(t, x) = \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_{i,T} (\gamma\lambda_i^2 - \psi''(\bar{\rho})\lambda_i) \exp\left((\gamma\lambda_i^2 - \psi''(\bar{\rho})\lambda_i) (t-T) \right) l_i(x).$$

Daraus folgt:

$$\begin{aligned}
\|\partial_t\alpha(t, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 &= \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_{i,T}^2 (\gamma\lambda_i^2 - \psi''(\bar{\rho})\lambda_i)^2 \exp\left(2(\gamma\lambda_i^2 - \psi''(\bar{\rho})\lambda_i) (t-T) \right) \\
&\leq \max_{i \in \mathbb{N}} \left[(\gamma\lambda_i^2 - \psi''(\bar{\rho})\lambda_i)^2 \exp\left(2(\gamma\lambda_i^2 - \psi''(\bar{\rho})\lambda_i) (t-T) \right) \right] \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}^2 \\
&\leq \max_{x \in \mathbb{R}_-} \underbrace{\left[(\gamma x^2 - \psi''(\bar{\rho})x)^2 \exp\left(2(\gamma x^2 - \psi''(\bar{\rho})x) (t-T) \right) \right]}_{=: f(x)} \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}^2.
\end{aligned}$$

f hat in \mathbb{R}_- nur ein lokales Maximum nämlich an der Stelle

$$x_{max} = \frac{\psi''(\bar{\rho})}{2\gamma} - \sqrt{\frac{\psi''(\bar{\rho})^2}{4\gamma^2} + \frac{1}{\gamma(T-t)}}$$

und hat dort den Wert $\frac{1}{(T-t)^2 e^2}$. Am Rand von \mathbb{R}_- – also für $x = 0$ und $x \rightarrow -\infty$ – ergeben sich Minima von f , so daß x_{max} auch globales Maximum ist.

Dann gilt also

$$\|\partial_t\alpha(t, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq \frac{1}{(T-t)^2 e^2} \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}^2.$$

Der Fall $\psi''(\bar{\rho}) < 0$

Für den Fall $\psi''(\bar{\rho}) < 0$, also $|\bar{\rho}| < \frac{1}{\sqrt{3}}$ folgt zunächst

$$\begin{aligned}
(5.28) \quad \int_t^T \|\alpha(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds &\leq \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}^2 \int_t^T \exp\left((T-s) \frac{(\psi''(\bar{\rho}))^2}{2\gamma} \right) ds \\
&\leq \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}^2 \frac{2\gamma}{\psi''(\bar{\rho})^2} (C_{\bar{\rho}}^2 - 1)
\end{aligned}$$

Testen von Gleichung (5.23) mit α und Intergration von t bis T ergibt wie oben:

$$\|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}^2 - \|\alpha(t, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 = 2\gamma \int_t^T \|\Delta\alpha(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds - 2\psi''(\bar{\rho}) \int_t^T \left(\Delta\alpha(s, \cdot), \alpha(s, \cdot) \right) ds$$

$$\geq 2\gamma \int_t^T \|\Delta\alpha(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds - 2|\psi''(\bar{\rho})| \int_t^T \left| \left(\Delta\alpha(s, \cdot), \alpha(s, \cdot) \right) \right| ds.$$

Mit der Youngschen Ungleichung folgt für $\delta > 0$:

$$\begin{aligned} \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}^2 &\geq \|\alpha(t, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 + 2\gamma \int_t^T \|\Delta\alpha(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds \\ &\quad - |\psi''(\bar{\rho})| \int_t^T \left(\delta \|\Delta\alpha(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{1}{\delta} \|\alpha(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 \right) ds \\ &\stackrel{(5.28)}{\geq} \|\alpha(t, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 + (2\gamma - |\psi''(\bar{\rho})| \delta) \int_t^T \|\Delta\alpha(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds \\ &\quad - \frac{2\gamma (C_{\bar{\rho}}^2 - 1)}{\delta |\psi''(\bar{\rho})|} \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}^2. \end{aligned}$$

Umstellen der Terme und weglassen von $\|\alpha(t, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2$ führt zu

$$\left(1 + \frac{2\gamma (C_{\bar{\rho}}^2 - 1)}{\delta |\psi''(\bar{\rho})|} \right) \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}^2 \geq (2\gamma - \delta |\psi''(\bar{\rho})|) \int_t^T \|\Delta\alpha(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds.$$

Wir wollen $\delta > 0$ nun so wählen, daß zum einen $2\gamma - |\psi''(\bar{\rho})| \delta > 0$ also $\delta < \frac{2\gamma}{|\psi''(\bar{\rho})|}$ ist, und zum anderen soll

$$C_{\Delta}^2(\delta) := \frac{1 + \frac{2\gamma(C_{\bar{\rho}}^2 - 1)}{|\psi''(\bar{\rho})|\delta}}{2\gamma - |\psi''(\bar{\rho})|\delta}$$

möglichst klein werden. Mit $\tilde{\delta} := |\psi''(\bar{\rho})| \delta$ und $\tilde{C} := 2\gamma (C_{\bar{\rho}}^2 - 1)$ ist

$$C_{\Delta}^2(\tilde{\delta}) = \frac{1 + \frac{\tilde{C}}{\tilde{\delta}}}{2\gamma - \tilde{\delta}} = \frac{\tilde{\delta} + \tilde{C}}{2\gamma\tilde{\delta} - \tilde{\delta}^2}$$

und somit

$$\frac{d}{d\tilde{\delta}} C_{\Delta}^2(\tilde{\delta}) = \frac{2\gamma\tilde{\delta} - \tilde{\delta}^2 - (\tilde{\delta} + \tilde{C}) 2(\gamma - \tilde{\delta})}{(2\gamma\tilde{\delta} - \tilde{\delta}^2)^2}.$$

Nullsetzen liefert unter Beachtung von $0 < \delta < \frac{2\gamma}{|\psi''(\bar{\rho})|}$ also $0 < \tilde{\delta} < 2\gamma$:

$$\begin{aligned} 2\gamma\tilde{\delta} - \tilde{\delta}^2 &= 2(\tilde{\delta} + \tilde{C})(\gamma - \tilde{\delta}) = 2\gamma\tilde{\delta} - 2\tilde{\delta}^2 + 2\gamma\tilde{C} - 2\tilde{C}\tilde{\delta} \\ \iff 0 &= \tilde{\delta}^2 + 2\tilde{C}\tilde{\delta} - 2\gamma\tilde{C} \\ \iff \tilde{\delta} &= -\tilde{C} + \sqrt{\tilde{C}^2 + 2\gamma\tilde{C}}. \end{aligned}$$

Durch Ausrechnen der zweiten Ableitung von $C_{\Delta}(\tilde{\delta})$ bestätigt man leicht, daß es sich dabei tatsächlich um eine Minimalstelle handelt. Wir wählen also

$$\begin{aligned} \delta &= \frac{\tilde{\delta}}{|\psi''(\bar{\rho})|} \\ &= \frac{1}{|\psi''(\bar{\rho})|} \left(-2\gamma (C_{\bar{\rho}}^2 - 1) + \sqrt{4\gamma^2 (C_{\bar{\rho}}^2 - 1)^2 + 4\gamma^2 (C_{\bar{\rho}}^2 - 1)} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{2\gamma}{|\psi''(\bar{\rho})|} \left(-(C_{\bar{\rho}}^2 - 1) + \sqrt{(C_{\bar{\rho}}^2 - 1) \left(C_{\bar{\rho}}^2 - \frac{3}{4} \right)} \right) \\
&= \frac{2\gamma}{|\psi''(\bar{\rho})|} \left(-(C_{\bar{\rho}}^2 - 1) + \sqrt{\left(C_{\bar{\rho}}^2 - \frac{7}{8} \right)^2 - \frac{1}{64}} \right)
\end{aligned}$$

Bei so gewähltem δ respektive $\tilde{\delta}$ ist

$$\begin{aligned}
C_{\Delta}^2 &= \frac{\sqrt{\tilde{C}^2 + 2\gamma\tilde{C}}}{\left(2\gamma + \tilde{C} - \sqrt{\tilde{C}^2 + 2\gamma\tilde{C}} \right) \left(-\tilde{C} + \sqrt{\tilde{C}^2 + 2\gamma\tilde{C}} \right)} \\
&= \frac{1}{2} \frac{\sqrt{\tilde{C}^2 + 2\gamma\tilde{C}}}{-4\gamma\tilde{C} - 2\tilde{C}^2 + 2(\tilde{C} + \gamma)\sqrt{\tilde{C}^2 + 2\gamma\tilde{C}}} \\
&= \frac{1}{2 \left(\tilde{C} + \gamma - \sqrt{\tilde{C}^2 + 2\gamma\tilde{C}} \right)} \\
&= \frac{1}{2(\gamma - \tilde{\delta})}.
\end{aligned}$$

Für $C_{\bar{\rho}} \rightarrow 1$, also $\delta \rightarrow 0$ und somit auch $\tilde{\delta} \rightarrow 0$, ergibt der obige Ausdruck als Grenzwert erwartungsgemäß den Wert $\frac{1}{2\gamma}$. Für $C_{\bar{\rho}} \rightarrow \infty$ gilt $\tilde{\delta} \rightarrow \frac{\gamma}{2}$ und somit $C_{\Delta}^2 \rightarrow \frac{1}{\gamma}$. Für $\gamma \rightarrow 0$ geht C_{Δ}^2 gegen unendlich.

Insgesamt haben wir also:

$$\begin{aligned}
\|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}^2 &\geq \frac{1}{C_{\Delta}^2} \int_t^T \|\Delta\alpha(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds \\
&\geq 16\gamma \left[\left(C_{\bar{\rho}}^2 - \frac{7}{8} \right) - \sqrt{\left(C_{\bar{\rho}}^2 - \frac{7}{8} \right)^2 - \frac{1}{64}} \right] \int_t^T \|\Delta\alpha(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds.
\end{aligned}$$

Für die Gradienten-Abschätzung benutzen wir die soeben gezeigten Abschätzungen und wieder die Youngsche Ungleichung:

$$\begin{aligned}
\int_t^T \|\nabla\alpha(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds &= \int_t^T (-\Delta\alpha(s, \cdot), \alpha(s, \cdot)) ds \\
&\leq \frac{1}{2} \int_t^T \frac{1}{\delta} \|\Delta\alpha(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 + \delta \|\alpha(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds \\
&\leq \frac{1}{2} \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}^2 \left[\frac{C_{\Delta}^2}{\delta} + \frac{2\gamma\delta}{|\psi''(\bar{\rho})|^2} (C_{\bar{\rho}}^2 - 1) \right]
\end{aligned}$$

Optimale Wahl von δ ist hier $\sqrt{\frac{C_{\Delta}^2 |\psi''(\bar{\rho})|^2}{2\gamma(C_{\bar{\rho}}^2 - 1)}}$. Mit dieser Wahl folgt dann

$$\int_t^T \|\nabla\alpha(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds \leq \underbrace{\sqrt{\frac{C_{\Delta}^2 2\gamma (C_{\bar{\rho}}^2 - 1)}{|\psi''(\bar{\rho})|^2}}}_{:=C_{\nabla}^2} \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}^2$$

Wir wenden uns nun der Abschätzung von $\Delta^2\alpha = \Delta\beta$ zu. Wie oben ist

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(T-t) \|\Delta\alpha(t, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 &= \\ &= -\|\Delta\alpha(t, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 + 2(T-t) (\Delta\alpha, \Delta^2(\gamma\Delta\alpha - \psi''(\bar{\rho})\alpha)) \\ &= -\|\Delta\alpha(t, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 + 2(T-t) \left[\gamma \|\Delta^2\alpha\|_{L^2(\Omega)}^2 - \psi''(\bar{\rho}) (\Delta\alpha, \Delta^2\alpha) \right]. \end{aligned}$$

Integration von t bis T und Umsortieren der Terme ergibt:

$$\begin{aligned} \int_t^T \|\Delta\alpha(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds &= (T-t) \|\Delta\alpha(t, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ &\quad + 2\gamma \int_t^T (T-s) \|\Delta^2\alpha(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds \\ &\quad + 2|\psi''(\bar{\rho})| \int_t^T (T-s) (\Delta\alpha, \Delta^2\alpha) ds \\ &\geq (T-t) \|\Delta\alpha(t, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ &\quad + 2\gamma \int_t^T (T-s) \|\Delta^2\alpha(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds \\ &\quad - 2|\psi''(\bar{\rho})| \int_t^T (T-s) \left[\frac{1}{\delta} \|\Delta\alpha(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 + \delta \|\Delta^2\alpha(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 \right] ds \end{aligned}$$

Daraus folgt

$$\begin{aligned} \left(1 + \frac{2|\psi''(\bar{\rho})|T}{\delta} \right) \int_t^T \|\Delta\alpha(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds &\geq \\ &\geq 2(\gamma - \delta|\psi''(\bar{\rho})|) \int_t^T (T-s) \|\Delta^2\alpha(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds \end{aligned}$$

Diesmal ist $0 < \delta < \frac{\gamma}{|\psi''(\bar{\rho})|}$ so zu wählen, daß

$$C_{\Delta^2}^2(\delta) := C_{\Delta}^2 \frac{1 + \frac{2|\psi''(\bar{\rho})|T}{\delta}}{2(\gamma - \delta|\psi''(\bar{\rho})|)}$$

minimal wird. Eine ähnlich Rechnung wie oben zeigt, daß für

$$\delta = 2\psi''(\bar{\rho})T + \sqrt{4\psi''(\bar{\rho})^2T^2 + 2T\gamma}$$

oben definiertes $C_{\Delta^2}^2$ minimal wird. Dann ist

$$C_{\Delta^2}^2 = \frac{C_{\Delta}^2}{2 \left[2\psi''(\bar{\rho}) \left(2\psi''(\bar{\rho})T + \sqrt{4\psi''(\bar{\rho})^2T^2 + 2\gamma T} \right) + \gamma \right]}$$

und

$$\int_t^T (T-s) \|\Delta^2\alpha(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds \leq C_{\Delta^2}^2 \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}^2.$$

Die Konstante $C_{\Delta^2}^2$ zeigt für $\gamma \rightarrow 0$ das gleiche Verhalten wie C_{Δ}^2 :

$$\lim_{\gamma \rightarrow 0} C_{\Delta^2}^2 = \infty$$

Die Abschätzung von $\nabla\beta = \nabla\Delta\alpha$ ist analog zum Fall $\psi''(\bar{\rho}) \geq 0$:

$$\begin{aligned} \int_t^T (T-s)^{\frac{1}{2}} \|\nabla\beta(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds &= \int_t^T (T-s)^{\frac{1}{2}} \|\nabla\Delta\alpha(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds \\ &\leq \frac{\delta}{2} \int_t^T \|\Delta\alpha(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds + \frac{1}{2\delta} \int_t^T (T-s) \|\Delta^2\alpha(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds \\ &\leq \frac{1}{2} \left(\delta C_{\Delta}^2 + \frac{C_{\Delta^2}^2}{\delta} \right) \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ &\leq C_{\Delta} C_{\Delta^2} \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}^2 \end{aligned}$$

mit der optimalen Wahl von $\delta = \frac{C_{\Delta^2}}{C_{\Delta}}$.

Schließlich wollen wir wieder die Zeitableitung von α abschätzen. Wie oben folgt aus der expliziten Darstellung der Lösung:

$$\|\partial_t \alpha(t, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq \max_{x \in \mathbb{R}_-} \left[\underbrace{(\gamma x^2 - \psi''(\bar{\rho})x)^2 \exp\left(2(\gamma x^2 - \psi''(\bar{\rho})x)(t-T)\right)}_{=: f(x)} \right] \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}^2.$$

Für $(T-t)\psi''(\bar{\rho})^2 \geq 4\gamma$ hat f in \mathbb{R}_- nur ein lokales Maximum nämlich an der Stelle

$$x_{max} = \frac{\psi''(\bar{\rho})}{2\gamma} - \sqrt{\frac{\psi''(\bar{\rho})^2}{4\gamma^2} + \frac{1}{\gamma(T-t)}}$$

und hat den Wert $\frac{1}{(T-t)^2 e^2}$.

Im anderen Fall – also $(T-t)\psi''(\bar{\rho})^2 < 4\gamma$ – ist auch an der Stelle

$$x'_{max} = \frac{\psi''(\bar{\rho})}{2\gamma}$$

ein lokales Maximum vorhanden mit

$$f(x'_{max}) = \left(\frac{\psi''(\bar{\rho})^2}{4\gamma} \right)^2 \exp\left(2(T-t) \frac{\psi''(\bar{\rho})^2}{4\gamma}\right)$$

Dann ist, da f am Rand von \mathbb{R}_- verschwindet

$$\begin{aligned} \max_{x \in \mathbb{R}_-} \{f(x)\} &= \max \left\{ \frac{1}{(T-t)^2 e^2}, \left(\frac{\psi''(\bar{\rho})^2}{4\gamma} \right)^2 \exp\left(2(T-t) \frac{\psi''(\bar{\rho})^2}{4\gamma}\right) \right\} \\ &= \frac{1}{(T-t)^2 e^2} \max \left\{ 1, \underbrace{\left(\frac{\psi''(\bar{\rho})^2}{4\gamma} \right)^2}_{<1} \exp\left(\underbrace{2(T-t) \frac{\psi''(\bar{\rho})^2}{4\gamma}}_{<1} \right) \right\} \\ &\leq \frac{1}{(T-t)^2 e^2} \max \{1, e^4\} \\ &\leq \frac{e^2}{(T-t)^2} \end{aligned}$$

Also insgesamt

$$\|\partial_t \alpha(t, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq \max \left\{ \frac{1}{(T-t)^2 e^2}, \frac{e^2}{(T-t)^2} \right\} \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}^2 = \frac{e^2}{(T-t)^2} \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}^2.$$

Insgesamt haben wir die folgenden Abschätzungen gezeigt:

- L^2 -Abschätzung:

$$\|\alpha(t, x)\|_{L^2(\Omega)} \leq C_{\bar{\rho}} \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}$$

mit

$$C_{\bar{\rho}} = \begin{cases} 1, & \text{für } \psi''(\bar{\rho}) \geq 0 \\ \exp\left(\frac{T(\psi''(\bar{\rho}))^2}{4\gamma}\right), & \text{für } \psi''(\bar{\rho}) < 0 \end{cases}$$

- Abschätzung von Zeitintegralen von $\Delta\alpha$:

$$\int_t^T \|\Delta\alpha(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds \leq C_{\Delta}^2 \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}^2$$

mit

$$C_{\Delta}^2 = \begin{cases} \frac{1}{2\gamma}, & \text{für } \psi''(\bar{\rho}) \geq 0 \\ \frac{1}{16\gamma} \frac{1}{(C_{\bar{\rho}}^2 - \frac{7}{8}) - \sqrt{(C_{\bar{\rho}}^2 - \frac{7}{8})^2 - \frac{1}{64}}}, & \text{für } \psi''(\bar{\rho}) < 0 \end{cases}$$

- Abschätzung von Zeitintegralen des Gradienten von α :

$$\int_t^T \|\nabla\alpha(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds \leq C_{\nabla}^2 \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}^2$$

mit

$$C_{\nabla}^2 = \begin{cases} \frac{1}{2\psi''(\bar{\rho})}, & \text{für } \psi''(\bar{\rho}) \geq 0 \\ \sqrt{\frac{C_{\Delta}^2 2\gamma(C_{\bar{\rho}}^2 - 1)}{\psi''(\bar{\rho})^2}}, & \text{für } \psi''(\bar{\rho}) < 0 \end{cases}$$

- Abschätzung von Zeitintegralen von $\Delta^2\alpha$:

$$\int_t^T (T-s) \|\Delta^2\alpha(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds \leq C_{\Delta^2}^2 \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}^2$$

mit

$$C_{\Delta^2}^2 = \begin{cases} \frac{1}{4\gamma^2}, & \text{für } \psi''(\bar{\rho}) \geq 0 \\ \frac{C_{\Delta}^2}{2[2\psi''(\bar{\rho})(2\psi''(\bar{\rho})T + \sqrt{4\psi''(\bar{\rho})^2 T^2 + 2\gamma T}) + \gamma]}, & \text{für } \psi''(\bar{\rho}) < 0 \end{cases}$$

- Abschätzung von Zeitintegralen des Gradienten von β :

$$\int_t^T (T-s)^{\frac{1}{2}} \|\nabla\beta(s, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 ds \leq C_{\Delta} C_{\Delta^2} \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}^2$$

- Abschätzung der Norm der Zeitableitung von α :

$$\|\partial_t \alpha(t, \cdot)\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq C_{\partial_t}^2 \frac{1}{(T-t)^2} \|\alpha_T\|_{L^2(\Omega)}^2$$

mit

$$C_{\partial_t}^2 = \begin{cases} \frac{1}{e^2}, & \text{für } \psi''(\bar{\rho}) \geq 0 \\ e^2, & \text{für } \psi''(\bar{\rho}) < 0 \end{cases}$$

Kapitel 6

Numerische Ergebnisse

6.1 Ergebnisverifikation

In diesem Abschnitt widmen wir uns der Verifikation der implementierten Algorithmen. Für das linearisierte Modell vergleichen wir die Interpolation der exakten Lösung mit der Finite-Element-Lösung. Des weiteren untersuchen wir, ob die Implementation das erwartete Skalierungsverhalten zeigt. Schließlich beschäftigen wir uns mit der Frage, für welche τ und h wir im Bereich der Asymptotik sind.

Das linearisierte Modell

Für die im diesem Abschnitt gezeigten Ergebnisse wurde als Nichtlinearität

$$\psi(\rho) = \frac{1}{4}(\rho^2 - 0.4^2)^2$$

und also

$$\psi''(\bar{\rho}) = 3\bar{\rho}^2 - 0.16.$$

angenommen. Des weiteren war $\gamma = 10^{-4}$ und $\Omega = [0, 1]^2$ das Einheitsquadrat.

Wie in Kapitel 2 gezeigt wurde, läßt sich die linearisierte Cahn-Hilliard-Gleichung explizit lösen. Ist $\Omega = [0, 1]^2$ das Einheitsquadrat, so sind die Funktionen

$$l_{ij} = \cos(i\pi x) \cos(j\pi y)$$

Eigenfunktionen des Laplaceoperators zum jeweiligen Eigenwert

$$\lambda_{ij} = -(i^2 + j^2)\pi^2.$$

Wir wählen die Funktion

$$(6.1) \quad 0.4 l_{22} = 0.4 \cos(2\pi x) \cos(2\pi y)$$

mit dem Eigenwert $\lambda_{22} = -8\pi^2$ als Startwert (siehe Abbildung 6.1) und erhalten als Lösung der Gleichung:

$$\rho_{ref}(t, x, y) = 0.4 \cos(2\pi x) \cos(2\pi y) \exp\left(\left(\psi''(\bar{\rho})\lambda_{22} - \gamma\lambda_{22}^2\right)t\right)$$

$\psi''(\bar{\rho}) > 0$						
Level	h	τ	$\ \mathcal{I}^n \rho - \rho^h\ _{L^2(\Omega)}$	EOC_{L^2}	$\ \mathcal{I}^n \rho - \rho^h\ _{L^\infty(\Omega)}$	EOC_{L^∞}
10	$\sqrt{2}/32$	$20 \cdot 10^{-4}$	$9.94 \cdot 10^{-4}$		$24.25 \cdot 10^{-4}$	
11	$1/32$	$10 \cdot 10^{-4}$	$5.50 \cdot 10^{-4}$	1.707	$13.34 \cdot 10^{-4}$	1.724
12	$\sqrt{2}/64$	$5 \cdot 10^{-4}$	$2.52 \cdot 10^{-4}$	2.250	$6.18 \cdot 10^{-4}$	2.220
13	$1/64$	$2.5 \cdot 10^{-4}$	$1.39 \cdot 10^{-4}$	1.712	$3.65 \cdot 10^{-4}$	1.519
14	$\sqrt{2}/128$	$1.25 \cdot 10^{-4}$	$0.64 \cdot 10^{-4}$	2.23	$2.27 \cdot 10^{-4}$	1.370

$\psi''(\bar{\rho}) < 0$						
Level	h	τ	$\ \mathcal{I}^n \rho - \rho^h\ _{L^2(\Omega)}$	EOC_{L^2}	$\ \mathcal{I}^n \rho - \rho^h\ _{L^\infty(\Omega)}$	EOC_{L^∞}
10	$\sqrt{2}/32$	$20 \cdot 10^{-4}$	$7.26 \cdot 10^{-4}$		$15.01 \cdot 10^{-4}$	
11	$1/32$	$10 \cdot 10^{-4}$	$3.50 \cdot 10^{-4}$	2.105	$8.34 \cdot 10^{-4}$	1.696
12	$\sqrt{2}/64$	$5 \cdot 10^{-4}$	$1.80 \cdot 10^{-4}$	1.919	$3.88 \cdot 10^{-4}$	2.028
13	$1/64$	$2.5 \cdot 10^{-4}$	$0.88 \cdot 10^{-4}$	2.065	$3.05 \cdot 10^{-4}$	0.694
14	$\sqrt{2}/128$	$1.25 \cdot 10^{-4}$	$0.47 \cdot 10^{-4}$	1.810	$3.21 \cdot 10^{-4}$	-0.147

Tabelle 6.1: Norm des tatsächlichen Fehlers

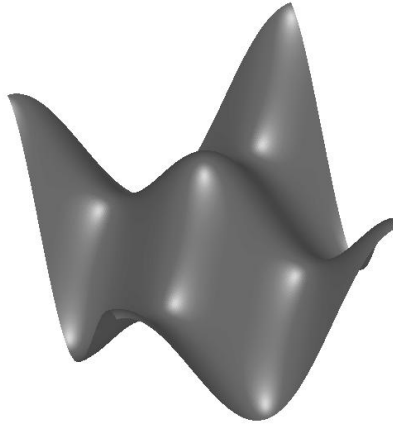


Abbildung 6.1: Konzentration $\rho_{ref}(0)$

Aufgrund der apriori-Abschätzungen für Finite-Element-Approximationen von parabolischen Gleichungen erwarten wir eine Abhängigkeit des Fehlers der Art

$$\|\rho - \rho^h\|_{L^2(\Omega)} \approx ch^2 + c\tau + c.$$

Die in Tabelle 6.1 gezeigten Ergebnisse bestätigen dies sowohl für den Fall $\psi''(\bar{\rho}) > 0$ als auch für $\psi''(\bar{\rho}) < 0$. Im ersten Fall war $\bar{\rho} = -0.375$ und im zweiten $\bar{\rho} = 0$. Eine Halbierung von h und eine Viertelung von τ bewirken eine Viertelung des Fehlers, solange der konstante Fehleranteil klein ist.

Skalierungsverhalten

Löst $\rho(t, x)$ die Cahn-Hilliard Gleichung auf $[0, T] \times \Omega$ zum Parameter γ und Anfangsdaten $\rho_0(x)$, so läßt sich daraus auch eine entsprechende Lösung auf einem skalierten Gebiet mit skaliertem Zeit und verändertem Parameter γ konstruieren. Es sei

$$\hat{\Omega} = \lambda\Omega \quad \hat{T} = \lambda^2 T$$

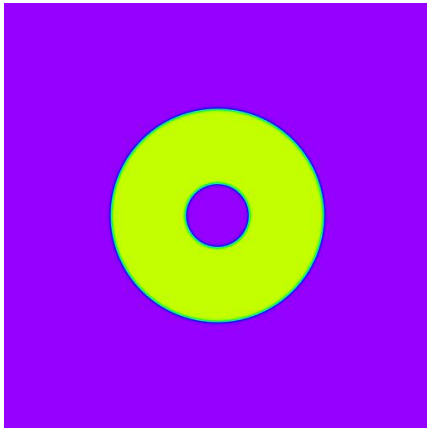
$$\hat{x} = \lambda x \quad \hat{t} = \lambda^2 t$$

die Koordinatentransformation. Dann löst

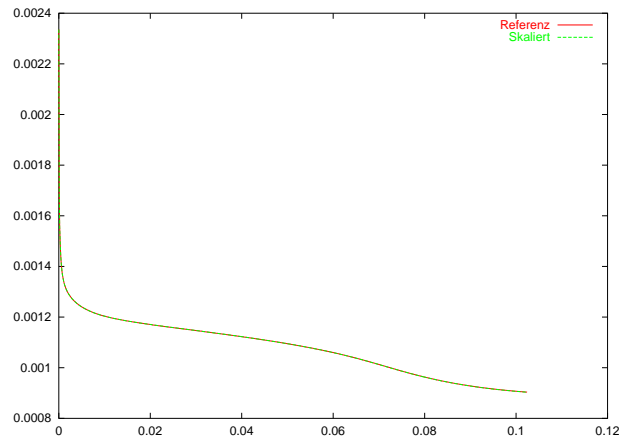
$$\hat{\rho}(\hat{t}, \hat{x}) := \rho\left(\frac{1}{\lambda^2}\hat{t}, \frac{1}{\lambda}\hat{x}\right) = \rho(t, x)$$

die Cahn-Hilliard Gleichung zum Parameter $\hat{\gamma} = \lambda^2 \gamma$ und Anfangsdaten $\hat{\rho}_0(\hat{x}) := \rho_0\left(\frac{\hat{x}}{\lambda}\right) = \rho_0(x)$. Denn es ist $\Delta_x = \lambda^2 \Delta_{\hat{x}}$ und $\partial_t = \lambda^2 \partial_{\hat{t}}$ und somit:

$$\begin{aligned} \partial_{\hat{t}} \hat{\rho}(\hat{t}, \hat{x}) &= \frac{1}{\lambda^2} \partial_t \rho(t, x) \\ &= \frac{1}{\lambda^2} \Delta_x \left(\phi(\rho(t, x)) - \gamma \Delta_x \rho(t, x) \right) \\ &= \Delta_{\hat{x}} \left(\phi(\hat{\rho}(\hat{t}, \hat{x})) - \hat{\gamma} \Delta_{\hat{x}} \hat{\rho}(\hat{t}, \hat{x}) \right). \end{aligned}$$



(a) Startwert ρ_{ring}



(b) Verlauf der Energie

Abbildung 6.2: Testbeispiel für das Skalierungsverhalten

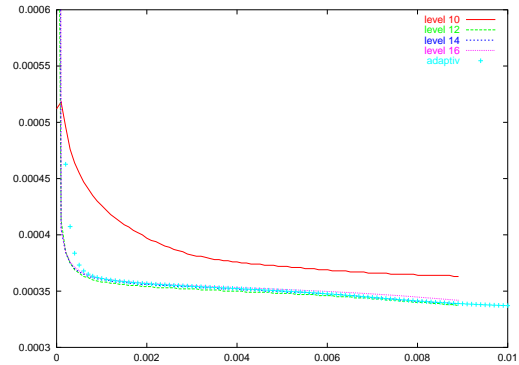
Dieses Skalierungsverhalten wollen wir experimentell nachvollziehen. Als Testproblem dafür wählen wir einen schrumpfenden Kreisring (siehe Abbildung 6.2(a)). Um glatte Anfangsdaten zu haben, approximieren wir das Profil der Phasengrenze in erster Ordnung durch eine tanh-Funktion. Unser Startwert ist also mit $r = \sqrt{x^2 + y^2}$

$$\rho_{ring}(r) = \begin{cases} -\tanh\left(\frac{r-r_1}{\sqrt{\gamma}}\right) & \text{für } r > \frac{1}{2}(r_1 + r_2), \\ \tanh\left(\frac{r-r_2}{\sqrt{\gamma}}\right) & \text{für } r \leq \frac{1}{2}(r_1 + r_2), \end{cases}$$

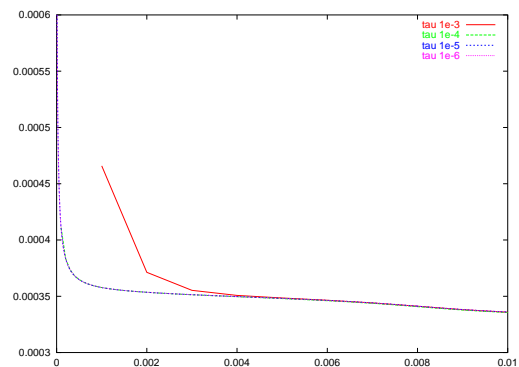
wobei r_1 der äußere und r_2 der innere Radius ist. Die Lösung ist dabei durch stetiges Kleinerwerden der beiden Radien gekennzeichnet. Dabei schrumpft der innere Kreis schneller als der äußere und verschwindet schließlich ganz. Der Zeitpunkt des endgültigen Verschwindens ist dabei nur von r_1 , r_2 und γ abhängig. Konkret wählen wir $r_1 = 0.25$, $r_2 = 0.075$ und $\gamma = 10^{-5}$ sowie den Skalierungsfaktor $\lambda = 2$. Das Ergebnis ist in Abbildung 6.2(b) wiedergegeben. Dort werden der Verlauf des Energiefunktional für die Referenzkonfiguration und der entsprechend skalierte Energieverlauf der Lösung des skalierten Problems verglichen. Es ergibt sich exakte Übereinstimmung. Die Diskretisierung und die Implementierung der Algorithmen zeigen also das gleiche Skalierungsverhalten wie das zugrundeliegende Problem.

Asymptotik

Wir wollen untersuchen, wie klein wir h und τ wählen müssen, um mit der berechneten Lösung im Bereich der Asymptotik zu liegen. Wir berechnen also zu verschiedenen Gittern und Zeitschrittweiten Lösungen und vergleichen die entsprechende zeitliche Entwicklung. Da wir insbesondere an der Abnahme des Energiefunktionals E interessiert sind, nehmen wir dieses auch als Indikator. Als erstes betrachten wir die in Abbildung 6.4 gezeigte Entwicklung mit $\gamma = 10^{-5}$ für verschieden feine uniforme Gitter (von 10 bis 16fach verfeinertes Makrogitter) und für ein adaptiv verfeinertes Gitter. Abbildung 6.3(a) zeigt die Ergebnisse. Beim Übergang von Level 10 zu Level 12 ändert sich der Verlauf noch deutlich. Dies weist darauf hin, daß bei 10fach verfeinertem Makrogitter die Phasengrenzen noch nicht hinreichend gut aufgelöst werden. Bei weiterer Verfeinerung – uniform oder adaptiv – ändert sich der Energieverlauf kaum noch. Bezüglich der Zeitschrittweite sind die Ergebnisse in Abbildung 6.3(b) zusammengefaßt. Auf einem uniformen Gitter (14fach verfeinert) wurden für verschiedene Zeitschrittweiten die Testevolution aus Abbildung 6.4 berechnet. Es zeigt sich, daß für $\tau = 10^{-3}$ die Entwicklung in ihrem zeitlichen Verlauf noch nicht richtig wiedergegeben wird. Für kleinere Zeitschrittweiten sind keine wesentlichen Unterschiede mehr feststellbar. Dies deutet daraufhin, daß sich für diese Zeitschrittweiten der Algorithmus im Bereich der Asymptotik befindet. Obwohl nicht ausgeschlossen werden kann, daß sich bei weiterer Verfeinerung der Orts- oder Zeitschrittweite die Ergebnisse signifikant ändern, erscheint dies im Lichte der durchgeführten Tests eher unwahrscheinlich.



(a) verschieden feine Gitter



(b) verschiedene Zeitschrittweiten

Abbildung 6.3: Verlauf der Energie

Obwohl nicht ausgeschlossen werden kann, daß sich bei weiterer Verfeinerung der Orts- oder Zeitschrittweite die Ergebnisse signifikant ändern, erscheint dies im Lichte der durchgeführten Tests eher unwahrscheinlich.

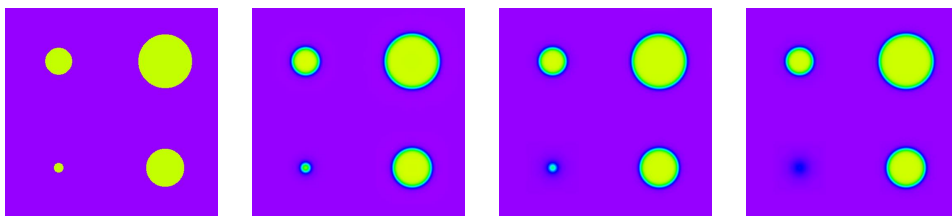


Abbildung 6.4: Testbeispiel für Asymptotik

6.2 Vergleich Cahn-Hilliard und Mullins-Sekerka Modell

Die in Abbildung (6.2(a)) gezeigte Ausgangssituation kann auch im Rahmen des Mullins-Sekerka Modells beschrieben werden, das in der Einleitung kurz skizziert wurde. In [62] wird gezeigt, daß der Verlauf der Radien sich als Lösung der folgenden gewöhnlichen Differentialgleichungen ergibt:

$$\dot{r}_1 = -\frac{\sigma}{4\beta^2} \frac{1}{r_1} \frac{r_1 + r_2}{r_1 r_2 \ln \frac{r_1}{r_2}}$$

$$\dot{r}_2 = -\frac{\sigma}{4\beta^2} \frac{1}{r_2} \frac{r_1 + r_2}{r_1 r_2 \ln \frac{r_1}{r_2}}$$

Dabei ist β der Parameter, der die Gestalt des W-Potentials

$$\Psi(\rho) = \frac{1}{4}(\rho^2 - \beta^2)^2$$

bestimmt. σ ist gegeben durch

$$\sigma = \frac{4}{3\sqrt{2}}\beta^3.$$

Setzt man dies ein, so ergibt sich:

$$\dot{r}_1 = -\frac{\beta}{3\sqrt{2}} \frac{1}{r_1} \frac{r_1 + r_2}{r_1 r_2 \ln \frac{r_1}{r_2}} \quad \dot{r}_2 = -\frac{\beta}{3\sqrt{2}} \frac{1}{r_2} \frac{r_1 + r_2}{r_1 r_2 \ln \frac{r_1}{r_2}}.$$

Numerische Integration der gewöhnlichen Differentialgleichungen mit MATLAB ergab für den Verlauf der Summe der Radien den in Abbildung 6.6(a) gezeigten Graphen. Dabei war $r_1(0) = 0.25$ und $r_2(0) = 0.025$.

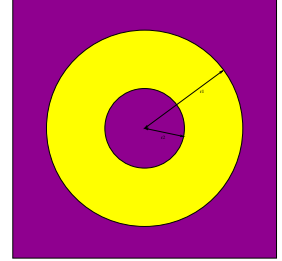
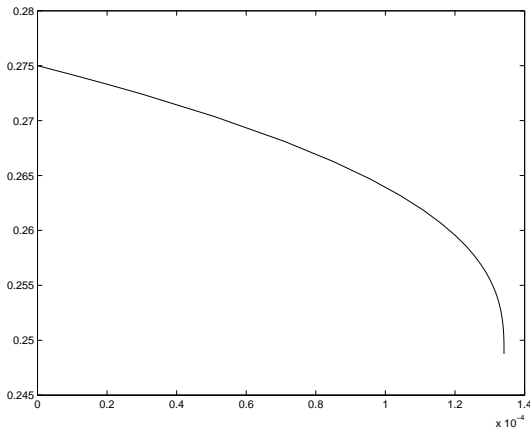
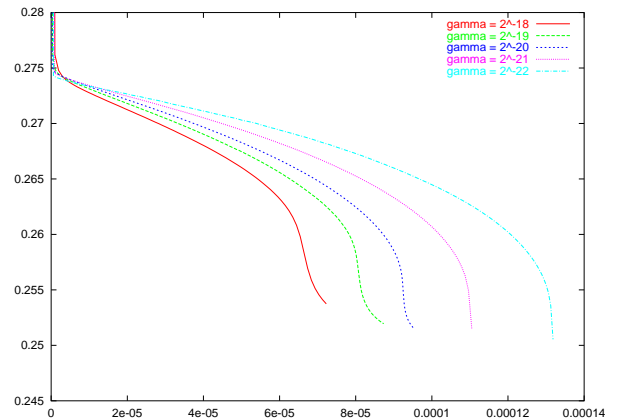


Abbildung 6.5: Skizze der Ausgangssituation



(a) Mullins-Sekerka Modell



(b) Cahn-Hilliard Modell

Abbildung 6.6: Verlauf der Radiensumme im Vergleich

In [3, 60] wird die Konvergenz des geeignet skalierten Cahn-Hilliard Modells gegen das Mullins-Sekerka Modell gezeigt. Ist E das Energiefunktional des Cahn-Hilliard Modells

aus (2.7), so konvergiert die Größe

$$\frac{1}{\sqrt{\gamma}\sigma} E \rightarrow 2\pi(r_1 + r_2)$$

gegen die Länge des Interfaces. Die Zeit wird dabei mit $\sqrt{\gamma}$ skaliert. In Abbildung 6.6(b) haben wir für verschiedene Werte von γ die Größe $\frac{1}{2\pi\sqrt{\gamma}\sigma} E$ gegen $\sqrt{\gamma}t$ aufgetragen, wobei t die Zeit im Cahn-Hilliard Modell bezeichnet. Für sehr kleine Werte von γ zeigt sich das erwartete Verhalten.

6.3 Verhalten der Fehlerschätzer

In diesem Abschnitt soll das Verhalten der in Kapitel 5 hergeleiteten Fehlerschätzer untersucht werden. Zunächst interessiert uns die folgende Anwendung: Von einer gegebenen Anfangskonfiguration ausgehend, wird mit festem, uniformen Gitter und fester Zeitschrittweite die linearisierte Cahn-Hilliard-Gleichung gelöst. Der Fehler zum Endzeitpunkt wird mittels der hergeleiteten Fehlerschätzer abgeschätzt. Für uniforme Gitter ist der Vergrößerungsfehler $E^{lok,3} = 0$. Des weiteren interessiert uns die durch die Fehlerschätzer gesteuerte adaptive Gitterverfeinerung. Generell wird sich zeigen, daß die Fehlerschätzer die von ihrer Gestalt her zu erwartenden Abhängigkeiten von der Orts- und der Zeitschrittweite aufweisen. Wie schon in Abschnitt 5.4 erwähnt sind die Abschätzungen teilweise äußerst grob, zeigen jedoch, welche Fehleranteile dominieren.

Das linearisierte Modell

Im folgenden vernachlässigen wir den Fehler in den Anfangsdaten. Für die konstante Zeitschrittweite $\tau = 10^{-4}$ und die Endzeit $T = 10^{-3}$ sind bei variierender Ortsdiskretisierung die Schätzwerte für den Gesamtfehler und die einzelnen Beiträge dazu in Tabelle (6.2) wiedergegeben.

$\psi''(\bar{\rho}) > 0$						
Level	h	Fehlerschätzer	$\sqrt{\tilde{c}_1} E^{lok,1}$	$\sqrt{c_2} E^{lok,2}$	$\sqrt{\tilde{c}_4} E^{lok,4}$	$\sqrt{\tilde{c}_5} E^{lok,5}$
14	$\sqrt{2}/128$	0.7185	0.544245	4.982906e-07	0.173606	0.000645
16	$\sqrt{2}/256$	0.1798	0.136214	9.700489e-08	0.043425	0.000161
18	$\sqrt{2}/512$	0.0450	0.034143	2.292899e-08	0.010859	0.000040
20	$\sqrt{2}/1024$	0.0115	0.008643	5.011175e-09	0.002719	0.000113

$\psi''(\bar{\rho}) < 0$						
Level	h	Fehlerschätzer	$\sqrt{\tilde{c}_1} E^{lok,1}$	$\sqrt{c_2} E^{lok,2}$	$\sqrt{\tilde{c}_4} E^{lok,4}$	$\sqrt{\tilde{c}_5} E^{lok,5}$
14	$\sqrt{2}/128$	0.635664	0.481107	4.825217e-07	0.153163	0.001393
16	$\sqrt{2}/256$	0.159783	0.121123	7.259697e-08	0.038311	0.000349
18	$\sqrt{2}/512$	0.040725	0.031057	1.505581e-08	0.009580	0.000087
20	$\sqrt{2}/1024$	0.011016	0.008498	3.129331e-09	0.002395	0.000122

Tabelle 6.2: Verhalten der Fehlerschätzer bei variierender Ortsschrittweite

Zum einen fällt dabei auf, daß eine Halbierung der Ortsschrittweite ungefähr eine Viertelung des geschätzten Fehlers nach sich zieht, was nach der Gestalt der Fehlerschätzer auch zu Erwarten war. Zum anderen ist auffallend, daß es bedeutende Unterschiede bezüglich der Größe zwischen den einzelnen Beiträgen gibt. So fällt zum Beispiel der Zeitfehler, also der zweite Fehlerschätzerterm, praktisch überhaupt nicht ins Gewicht. Auch der vierte

Fehlerschätzerterm, der auf den Kantensprüngen des Gradienten von w basiert, ist deutlich kleiner als die beiden hauptsächlichen Beiträge, nämlich $\tilde{c}_1 E^{lok,1}$ und $\tilde{c}_4 E^{lok,4}$.

$\psi''(\bar{\rho}) > 0$					
τ	Fehlerschätzer	$\sqrt{\tilde{c}_1 E^{lok,1}}$	$\sqrt{c_2 E^{lok,2}}$	$\sqrt{\tilde{c}_4 E^{lok,4}}$	$\sqrt{\tilde{c}_5 E^{lok,5}}$
$6.25 \cdot 10^{-5}$	9.004809	6.825739	1.169674e-06	2.177736	0.001333
$1.25 \cdot 10^{-4}$	6.368675	4.827230	1.381947e-06	1.540111	0.001333
$2.5 \cdot 10^{-4}$	4.505018	3.414352	1.730316e-06	1.089330	0.001334
$5 \cdot 10^{-4}$	3.187731	2.415689	2.272899e-06	0.770705	0.001335
10^{-3}	2.256987	1.710070	3.086199e-06	0.545576	0.001338

$\psi''(\bar{\rho}) < 0$					
τ	Fehlerschätzer	$\sqrt{\tilde{c}_1 E^{lok,1}}$	$\sqrt{c_2 E^{lok,2}}$	$\sqrt{\tilde{c}_4 E^{lok,4}}$	$\sqrt{\tilde{c}_5 E^{lok,5}}$
$6.25 \cdot 10^{-5}$	32395.57	32269.47	1.415541e-06	126.095796	0.003513
$1.25 \cdot 10^{-4}$	22908.15	22818.98	1.417600e-06	89.166677	0.003514
$2.5 \cdot 10^{-4}$	16199.99	16136.93	1.425844e-06	63.055971	0.003516
$5 \cdot 10^{-4}$	11457.24	11412.64	1.458183e-06	44.595384	0.003518
10^{-3}	8104.50	8072.95	1.580596e-06	31.545206	0.003521

Tabelle 6.3: Verhalten der Fehlerschätzer bei variierender Zeitschrittweite zum Zeitpunkt $T = 0.01$

In Tabelle (6.3) wird die Abhängigkeit des Fehlerschätzers von der Zeitschrittweite bei fester Ortsschrittweite $h = \sqrt{2}/128$ gezeigt. Man erkennt, daß sich die beiden führenden Fehlerkomponenten $\sqrt{\tilde{c}_1 E^{lok,1}}$ und $\sqrt{\tilde{c}_4 E^{lok,4}}$ wie $\frac{1}{\sqrt{\tau}}$ verhalten. Anders ausgedrückt sie halbieren sich bei Viertelung der Zeitschrittweite. Dieses Verhalten ist bei der Gestalt der Koeffizienten \tilde{c}_1 und \tilde{c}_4 auch nicht anders zu erwarten. Die absolute Höhe der Fehlerschätzer im Fall $\psi''(\bar{\rho}) < 0$ erklärt sich durch das exponentielle Anwachsen der Stabilitätskonstanten.

$\psi''(\bar{\rho}) > 0$					
τ	Fehlerschätzer	$\sqrt{\tilde{c}_1 E^{lok,1}}$	$\sqrt{c_2 E^{lok,2}}$	$\sqrt{\tilde{c}_4 E^{lok,4}}$	$\sqrt{\tilde{c}_5 E^{lok,5}}$
$6.25 \cdot 10^{-5}$	0.879505	0.666701	1.090196e-07	0.212639	0.000164
$1.25 \cdot 10^{-4}$	0.878445	0.665819	1.861650e-07	0.212392	0.000234
$2.5 \cdot 10^{-4}$	0.876240	0.664060	3.325603e-07	0.211847	0.000332
$5 \cdot 10^{-4}$	0.871775	0.660569	6.178212e-07	0.210740	0.000466
10^{-3}	0.862882	0.653691	1.176172e-06	0.208547	0.000643

$\psi''(\bar{\rho}) < 0$					
τ	Fehlerschätzer	$\sqrt{c_1 E^{lok,1}}$	$\sqrt{c_2 E^{lok,2}}$	$\sqrt{c_4 E^{lok,4}}$	$\sqrt{c_5 E^{lok,5}}$
$6.25 \cdot 10^{-5}$	1937.108041	1929.570513	2.883123e-08	7.537362	0.000165
$1.25 \cdot 10^{-4}$	1939.944251	1932.394347	4.457693e-08	7.549667	0.000237
$2.5 \cdot 10^{-4}$	1945.650588	1938.077733	7.274355e-08	7.572514	0.000340
$5 \cdot 10^{-4}$	1957.195491	1949.577239	1.277792e-07	7.617763	0.000489
10^{-3}	1980.828322	1973.117727	2.530472e-07	7.709885	0.000709

Tabelle 6.4: Fehlerschätzer für einen Zeitschritt bei variierender Zeitschrittweite

In Tabelle (6.4) ist das Verhalten der Fehlerschätzer für einen einzigen Zeitschritt variabler Weite bei konstantem Gitter wiedergegeben (d.h. $T = \tau$). Zu erkennen ist, daß der Zeitfehler $\sqrt{c_2 E^{lok,2}}$ bei kleiner werdender Zeitschrittweite in etwa linear abnimmt. Die Fehlerschätzer zeigen also die richtige Konsistenzordnung des Verfahrens. Allerdings ist der Zeitfehler der mit Abstand kleinste Fehlerbeitrag, so daß die Höhe des Gesamtschätzers kaum von der

Zeitschrittweite abhängt. Das Verhalten der beiden großen Fehlerschätzerbeiträge $\sqrt{\tilde{c}_1 E^{lok,1}}$ und $\sqrt{\tilde{c}_4 E^{lok,4}}$ läßt sich dadurch erklären, daß im Fall $\psi''(\bar{\rho}) > 0$ die Lösung im Zeitverlauf geglättet wird. Bei größeren Zeitschritten werden also glattere Lösungen berechnet als bei kleineren. Im Fall $\psi''(\bar{\rho}) < 0$ zeigt sich das umgekehrte Verhalten.

Da bei der Bestimmung der Konstanten $C_{\Pi^n} = C_M = 1$ gesetzt wurden und der Anfangsfehler vernachlässigt wurde, ist ein direkter quantitativer Vergleich zwischen tatsächlichem und geschätztem Fehler nur bedingt möglich. In Tabelle (6.7) sind zum einen der Fehlerschätzer als auch das Quadrat der Lösung – allerdings in unterschiedlicher Skalierung – wiedergegeben.

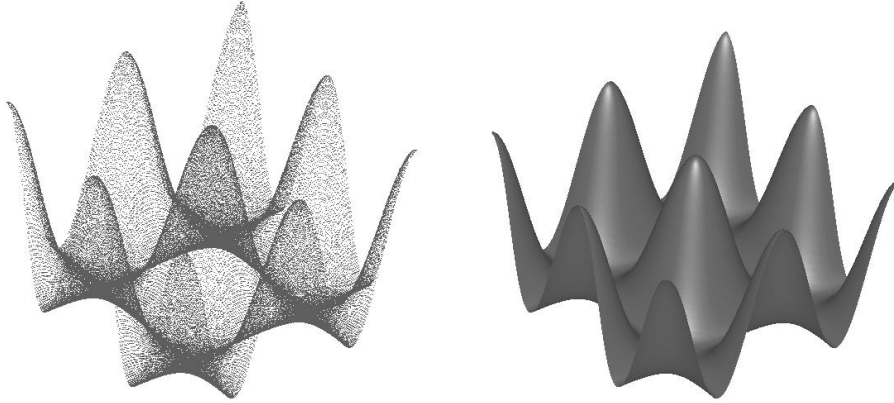


Abbildung 6.7: Fehlerschätzer und Quadrat der Konzentration zum Zeitpunkt $T = 0.001$ (unterschiedliche Skalierung)

Da die betrachtete Lösung Eigenfunktion des Laplace-Operators ist und die dominierenden Fehlerschätzerterme diskrete Näherungen davon sind, ist die augenscheinliche Entsprechung in Abbildung (6.7) auch nicht überraschend. Der tatsächliche Fehler $\int_s (\rho^h - \mathcal{I}^n \rho)^2 dx$ hat ebenfalls die gleiche Gestalt.

Das bisher betrachtete Beispiel ist nicht typisch für die im Cahn-Hilliard oder Cahn-Larché Modell auftretenden Konfigurationen. Für die in Abbildung 6.1 gezeigte Ausgangssituation ergibt sich nichts, was getrennten Phasen und steilen Übergängen ähnlich sieht. Um den typischerweise auftretenden Situationen näherzukommen, betrachten wir als zweites Beispiel den folgenden Startwert

$$(6.2) \quad \sum_{j=0}^{13} \frac{1}{2j+1} \cos(2\pi(2j+1)x + \pi j)$$

Die Ausgangssituation und die Entwicklung für den Fall $\psi''(\bar{\rho}) < 0$ ist in Abbildung 6.8 dargestellt. Bezüglich der Fehlerschätzer interessiert uns hauptsächlich die Frage, welche Fehleranteile bei adaptivem Gitter welches Gewicht haben. Abbildung 6.9(a) zeigt das adaptive Gitter zum Endzeitpunkt ($T=0.01$). Deutlich ist zu erkennen, daß die Phasengrenzen verfeinert wurden und daß demnach dort die Fehlerbeiträge als am größten geschätzt wurden. Tabelle 6.5 zeigt die unterschiedlichen Fehlerbeiträge. Es ist festzustellen, daß das innere Residuum und in geringerem Maße der Gradientensprung der Konzentration die dominanten Fehleranteile sind. Der Zeitfehler ist dagegen nahezu bedeutungslos.

Das Cahn-Hilliard Modell

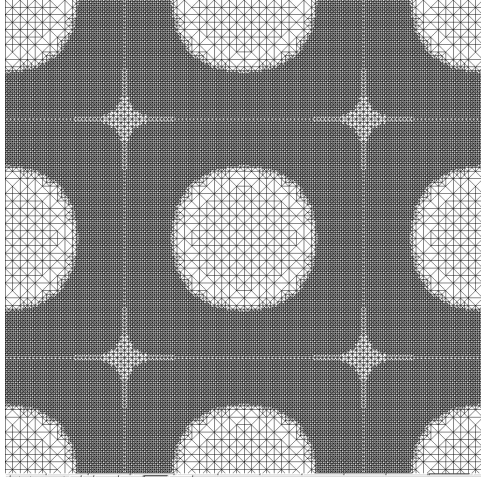


Abbildung 6.10: Adaptives Gitter

Wir betrachten das gleiche Beispiel wie im linearisierten Fall, das heißt der Anfangswert war durch 6.1 gegeben. Als erstes untersuchen wir, wie der geschätzte Fehler sich für unterschiedlich feine uniforme Gitter verhält. Die Ergebnisse sind in Tabelle 6.6 wiedergegeben. Als zweites betrachten wir Ergebnisse, die mit dem adaptiven Algorithmus aus Abschnitt 3.5 erzeugt worden sind. Für eine gegebene Toleranz von 885 sind die Fehlerbeiträge im oberen Teil von Tabelle 6.7 dargestellt. Das zugehörige Gitter zum Endzeitpunkt ist in Abbildung 6.10 gezeigt. Dieses Gitter hat 46185 Knoten, wobei der Fehler mit dem uniformen Gitter mit 66049 Knoten vergleichbar ist. Auch für das Cahn-Hilliard Modell wollen wir das zweite Beispiel mit dem Startwert (6.2) analysieren. Abbildung 6.9(b) zeigt das adaptive Gitter und der untere Teil von Tabelle 6.7 die Werte der einzelnen Komponenten.

Es fällt auf, daß das die Verfeinerung im nichtlinearen Fall stärker auf die Phasengrenzen konzentriert ist als im linearisierten Fall. Dies ist Folge der in Abschnitt 3.5 erläuterten Heuristik zur Schätzung der Stabilitätskonstanten des dualen Problems. Dies hat auch zur Folge, daß die absoluten Werte der Fehlerschätzer deutlich größer sind.

Level	Anzahl Knoten	Gesamtfehler	$\psi'(\rho_n^h) - w_n^h$	$\rho_n^h - \mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h$
14	16641	3.518223e+03	3.494707e+03	8.658785e-07
16	66049	8.854629e+02	8.795775e+02	7.848744e-08
18	263169	2.210307e+02	2.195596e+02	1.624602e-08
20	1050625	5.524541e+01	5.487763e+01	3.515705e-09

Level	Anzahl Knoten	$[\nabla \rho_n^h]_e$	$[\nabla w_n^h]_e$	$\mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h - \rho_{n-1}^h$
14	16641	2.351425e+01	6.753194e-04	5.468509e-04
16	66049	5.885056e+00	1.690928e-04	1.361633e-04
18	263169	1.471047e+00	4.230021e-05	3.400636e-05
20	1050625	3.677556e-01	1.058207e-05	8.499445e-06

Tabelle 6.6: Fehlerschätzer für unterschiedliche feine uniforme Gitter

1. Beispiel					
Gesamtfehler	$\psi'(\rho_n^h) - w_n^h$	$\rho_n^h - \mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h$	$[\nabla \rho_n^h]_e$	$[\nabla w_n^h]_e$	$\mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h - \rho_{n-1}^h$
8.570972e+02	8.494003e+02	2.256839e-06	7.692923e+00	1.589555e-03	2.398574e-03

2. Beispiel					
Gesamtfehler	$\psi''(\bar{\rho}) - w_n^h$	$\rho_n^h - \mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h$	$[\nabla \rho_n^h]_e$	$[\nabla w_n^h]_e$	$\mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h - \rho_{n-1}^h$
$2.0528 \cdot 10^3$	$2.0364 \cdot 10^3$	$8.4151 \cdot 10^{-4}$	$1.6161 \cdot 10^1$	$2.3781 \cdot 10^{-1}$	$1.6833 \cdot 10^{-2}$

Tabelle 6.7: Fehlerschätzer für die adaptive Rechnung

Das Cahn-Larché Modell

In diesem Abschnitt untersuchen wir die zusätzlichen Fehlerbeiträge, die sich durch das Elastizitätssystem ergeben. Wir betrachten dabei den Fall homogener, anisotroper Elastizität mit dem Elastizitätstensor

$$\mathcal{C}_{11} = 2 \quad \mathcal{C}_{12} = 1 \quad \mathcal{C}_{44} = 10$$

und rechnen die beiden Beispiele (6.1) und (6.2) bis zur Zeit $T = 0.01$. Tabelle 6.8 zeigt die Werte der Fehlerschätzerkomponenten am Ende der Rechnung.

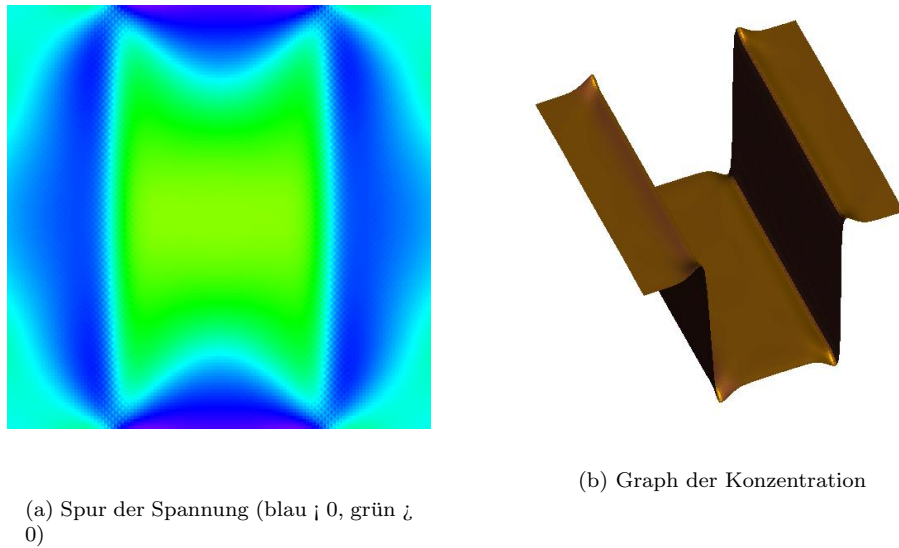


Abbildung 6.11: Negative Anisotropie des Elastizitätstensors

Beispiel	Gesamtfehler	$\psi''(\bar{\rho}) - w_n^h$	$\rho_n^h - \mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h$
(6.1)	$6.5346 \cdot 10^2$	$6.46 \cdot 10^2$	$3.1355 \cdot 10^{-5}$
(6.2)	$3.3863 \cdot 10^3$	$3.3648 \cdot 10^3$	$8.1224 \cdot 10^{-4}$

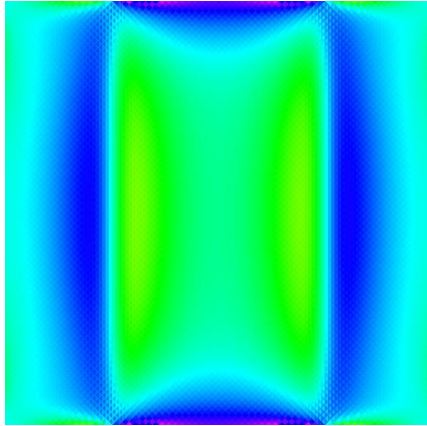
Beispiel	$ \nabla \rho_n^h _e$	$ \nabla w_n^h _e$	$\mathcal{I}^n \rho_{n-1}^h - \rho_{n-1}^h$	Elastizität
(6.1)	7.2954	$5.31 \cdot 10^{-2}$	$3.69 \cdot 10^{-3}$	$1.02 \cdot 10^{-1}$
(6.2)	$2.1146 \cdot 10^1$	$2.4 \cdot 10^{-1}$	$1.46 \cdot 10^{-2}$	$9.5 \cdot 10^{-2}$

Tabelle 6.8: Fehlerschätzer für adaptive Rechnung mit Elastizität

Bei fast allen Fehlerschätzerbeiträgen läßt sich anhand der Lösung intuitiv recht gut entscheiden, wo große Fehlerbeiträge auftreten und wo nicht. Eine Ausnahme davon bildet der Beitrag des Elastizitätssystems aufgrund des darin auftretenden Spannungsterms. Bei anisotroper Elastizität treten Effekte mit großer Reichweite auf und es nicht auf den ersten Blick klar, wo hohe Spannungen auftreten und wo nicht. Um eine bessere Vorstellung von der Gestalt der Elastizitätskomponente der Fehlerschätzer zu bekommen, betrachten wir das Beispiel (6.2) einmal mit positiver und einmal mit negativer Elastizität. Im Falle negativer Elastizität (mit dem oben angegebenen Elastizitätstensor) sind die beiden Phasengrenzen energetisch günstig ausgerichtet, während im positiven Fall, mit dem Elastizitätstensor gegeben durch

$$\mathcal{C}_{11} = 10 \quad \mathcal{C}_{12} = 1 \quad \mathcal{C}_{44} = 1$$

die Phasengrenzen genau falsch liegen. In den Abbildungen 6.11 und 6.12 sind jeweils die Spur der Spannung, also einer der Beiträge des Elastizitätssystems und die Konzentration wiedergegeben. Der andere Beitrag ist die Norm des Gradienten der Konzentration. Wie erwartet ist im Falle negativer Anisotropie der Fehlerbeitrag nicht in der Umgebung um die Phasengrenze konzentriert.



(a) Spur der Spannung (blau;0, grün;0)



(b) Graph der Konzentration

Abbildung 6.12: Positive Anisotropie des Elastizitätstensors

6.4 Vergrößerungsraten und Geschwindigkeit der Evolution

Eine der aus Sicht der Anwendung gesehen wichtigsten Fragen ist die nach der langfristigen Geschwindigkeit der Evolution. Da sich die makroskopischen Eigenschaften der Legierung mit zunehmender Vergrößerung der Mikrostruktur verändern – und zwar meistens verschlechtern – ist das Verständnis der Faktoren, die die Vergrößerungsgeschwindigkeit beeinflussen, eines der Hauptziele der Modellierung.

Als Maß für die Geschwindigkeit der Vergrößerung nehmen wir die Rate, mit der die Energie (2.7) abnimmt. Andere Maße wie zum Beispiel die Abnahme der Partikelzahl pro Fläche, die Zunahme der durchschnittlichen Partikelgröße oder des durchschnittlichen Abstandes zwischen Partikeln sind denkbar, haben aber den Nachteil, dass eine genaue Bestimmung von Partikelgrößen und Radien problematisch ist, insbesondere im Falle des Verschwindens und des Zusammenstoßens von Partikeln.

Stattdessen nehmen wir den Wert des Energiefunctionals (2.7) als Maß für die Grobheit der Mikrostruktur. Der Zusammenhang zu den anderen Grobheitsmaßen ist wie folgt: Nachdem die Phasentrennung abgeschlossen ist, tragen nur noch die Phasenübergänge wesentlich zur Energie bei. Dieser Beitrag ist proportional zur Länge des Interfaces und somit proportional zur Summe der Umfänge der Partikel. Dies wiederum ist – proportional zum Produkt aus der Anzahl der Partikel N und dem durchschnittlichen Partikelradius \bar{r} . Da das Volumen beider Phasen konstant ist, gilt

$$N\bar{r}^2 \approx C$$

und somit

$$E \sim N\bar{r} \sim N \frac{1}{\sqrt{N}} = \sqrt{N}.$$

Da das Mullins-Sekerka Modell unter der Skalierung $x \rightarrow \lambda x, t \rightarrow \lambda^3 t$ invariant ist, erwartet man, daß in diesem Modell die charakteristische Länge wie $t^{1/3}$ wächst. Wegen der Erhaltung des Phasenvolumens bedeutet dies, daß die Energie sich wie $t^{-1/3}$ verhalten sollte. Für das Cahn-Hilliard Modell erwarten wir analoges Verhalten. Es zeigt sich jedoch, daß es in Abhängigkeit von den Startwerten eine sehr lange Einschwingzeit gibt, bis sich die erwartete Vergrößerungsrate einstellt. Zunächst beschränken wir uns auf den Fall ohne Elastizität. Den Einfluß der Elastizität auf die Vergrößerungsrate untersuchen wir im nächsten Abschnitt.

Anfangsdaten: Gestörte homogene Mischung

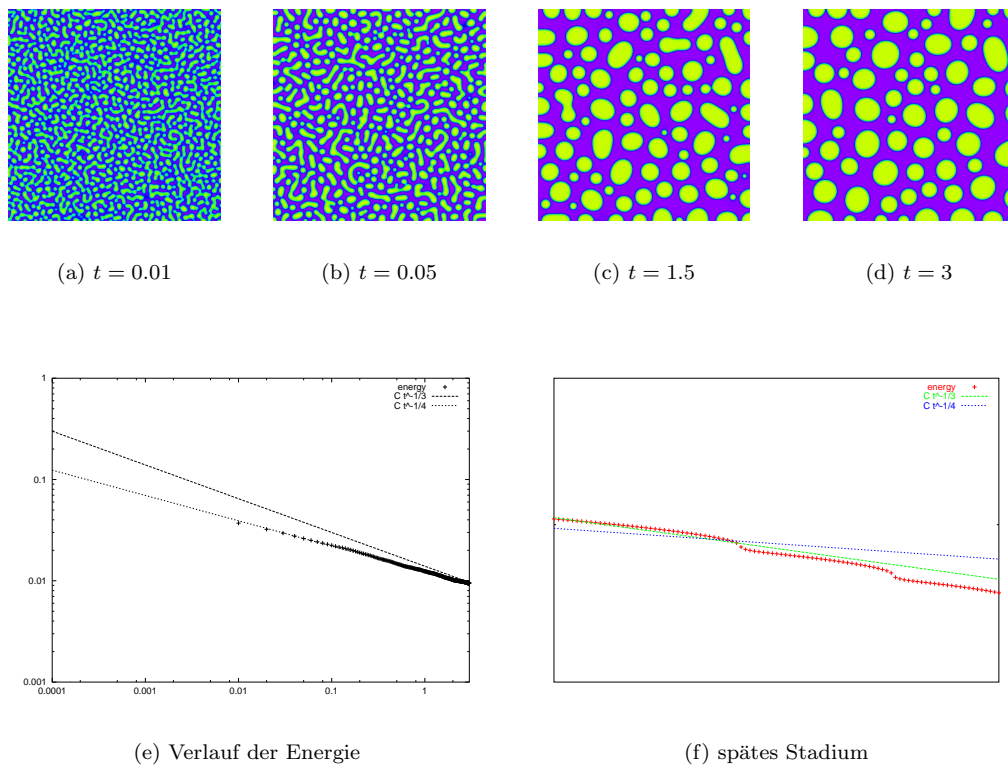


Abbildung 6.13: Anfangsdaten: Gestörte homogene Mischung

Abbildung 6.13 zeigt eine Evolution bei der sich die Verteilung der Partikel aus der spinodalen Entmischung ergibt. Ω war das Quadrat $[0, 3] \times [0, 3]$ und als Parameter für das Energiefunktional haben wir $\gamma = 10^{-5}$ und $\beta = 0.4$ gewählt. Die Zeitschrittweite war konstant $5 \cdot 10^{-4}$ und die zugrundeliegenden Gitter wurden mit der in Abschnitt 3.5 dargestellten Heuristik adaptiv verfeinert. Im Gegensatz zur linken unteren Seite von Abbildung 6.13, wo die Energie wie $t^{-1/4}$ abnimmt, beobachten wir ein Verhalten, das in Abbildung 6.13 rechts unten dargestellt ist. Nach sehr langer Zeit ($t > 7$) ändert sich die Abklingrate der Energie. Es zeigen sich Zeitabschnitte, in denen die Energie wie $E \approx Ct^{-1/3}$ abnimmt, und dazwischen gibt es kurzzeitig ein schnelleres Absinken der Energie. Diese Zeiten sind durch das Verschwinden von Partikeln gekennzeichnet, während zwischen diesen Stufen der Verlauf der Entwicklung aus Wachsen und Schrumpfen der Partikel besteht.

Die Übergangszeit ab der sich die erwartete Vergrößerungsrate einstellt, ist drastisch kürzer, wenn bei den Anfangsdaten beide Phasen den gleichen Massenanteil haben. Während in der

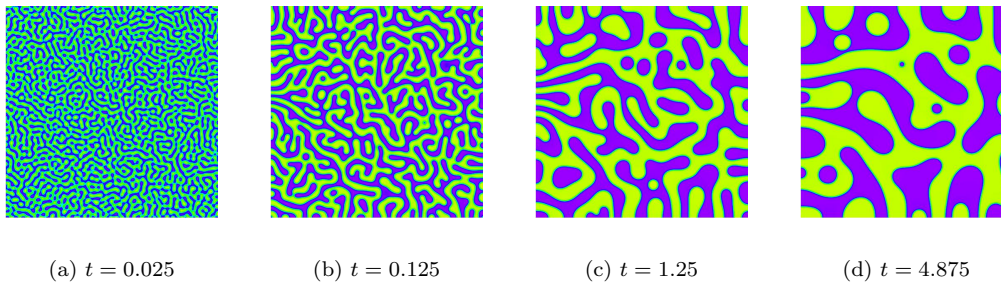


Abbildung 6.14: Verlauf mit gleichen Massenanteilen

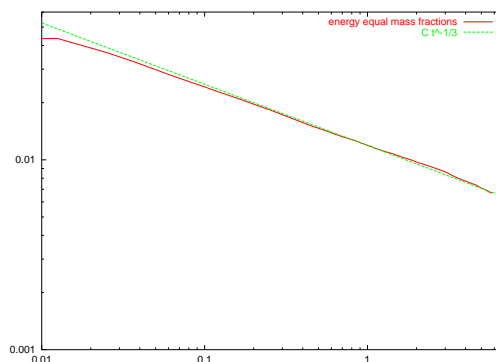


Abbildung 6.15: Verlauf der Energie mit gleichen Massenanteilen

obigen Rechnung die Massenanteile 60:40 waren, sind in der in Abbildung 6.14 die Massenanteile gleich. Die übrigen Parameter waren dieselben wie bei der ersten Rechnung. Es ist deutlich zu sehen, daß sich, schon kurz nachdem sich die Phasentrennung vollzogen hat, das System entsprechend der erwarteten Vergrößerungsrate verhält. Bemerkenswert ist, daß sich in der Übergangszeit ein anderes exponentielles Wachstumsverhalten einstellt. Im ersten Beispiel (Abbildung 6.13 unten) gilt für die Übergangszeit $E \approx Ct^{-\frac{1}{4}}$. Bei anderen Rechnungen sind in Abhängigkeit vom Verhältnis der Massen der Phasen Exponenten zwischen $-\frac{1}{6}$ und $-\frac{1}{3}$ aufgetreten.

Anfangsdaten: Gesetzte Partikel

Ein ganz ähnliches Verhalten zeigt sich, wenn man von Anfangsdaten mit zufällig gesetzten Partikeln ausgeht. In der in Abbildung 6.16 gezeigten Rechnung wurden als Anfangsdaten 2000 kreisförmige Partikel gesetzt, deren Mittelpunkte und Radien zufällig gewählt wurden. Dabei waren die Radien in dem Intervall $[0, 0.02]$ gleichverteilt. Der untere Teil von Abbildung 6.16 zeigt den Verlauf der Energie. Auch hier stellt sich nach einer längeren Übergangszeit das erwartete Verhalten ein. Allerdings gibt es im Gegensatz zu oben während der Übergangszeit kein exponentielles Abklingen der Energie.

Anfangsdaten: Gesetzte Partikelstümpfe

Schließlich betrachten wir Anfangsdaten, bei denen spinodale Entmischung stattfindet aber die Verteilung der Partikel in gewisser Weise vorbestimmt ist (siehe Abbildung 6.17). Als

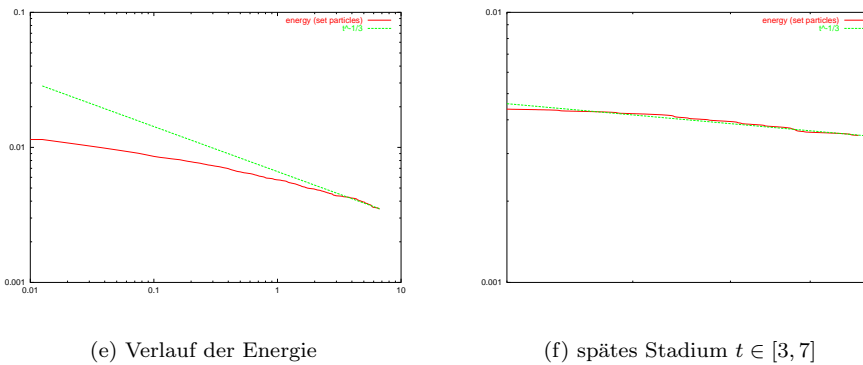
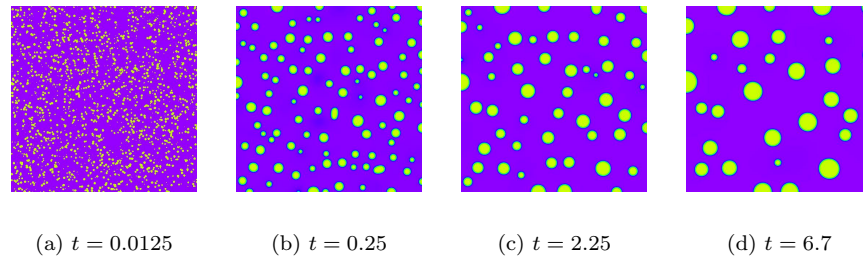
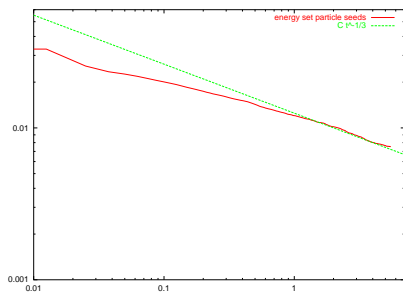
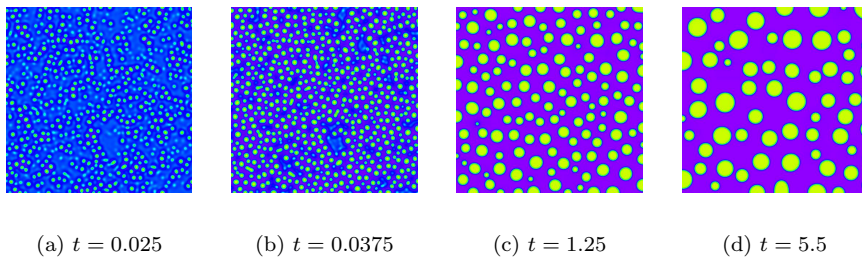


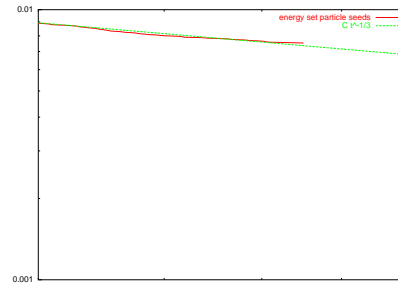
Abbildung 6.16: Anfangsdaten: Gesetzte Partikel

Partikelstumpf bezeichnen wir ein kreisförmiges Gebiet, in dem die Konzentration etwas höher als in der umgebenden homogenen Mischung ist, aber sowohl die Konzentration dieser Mischung als auch die Konzentration im Inneren von den Minima von Ψ deutlich verschieden ist. Auch hier ergibt sich eine Übergangszeit von signifikanter Länge, die jedoch kürzer ist, als beim Fall gesetzter Partikel oder der gestörten homogenen Mischung.

Insgesamt ist festzustellen, daß sich zwar letztendlich in allen Fällen die erwartete Vergrößerungsrate einstellt, aber in Abhängigkeit von der Ausgangsverteilung der Partikel eine lange Übergangszeit typisch ist.



(e) Verlauf der Energie



(f) spätes Stadium $t \in [3, 7]$

Abbildung 6.17: Anfangsdaten: Gesetzte Partikelstümpfe

6.5 Effekte der Elastizität

Auswirkung auf die Gestalt der Mikrostruktur

Der Übergang vom Cahn-Hilliard zum Cahn-Larché Modell durch Einbeziehung von Elastizität hat im Fall von Anisotropie oder Inhomogenität deutliche Auswirkungen auf die sich ergebende Mikrostruktur. Nur im Falle homogener und isotroper Elastizität sind die Ergebnisse beider Modelle qualitativ gleich.

Ausrichtung der Phasengrenzen

Als ersten Effekt der Elastizität betrachten wir den Fall kubischer Anisotropie des Elastizitätstensors, der zur Ausrichtung von Phasengrenzen entlang der Koordinatenrichtungen führt.

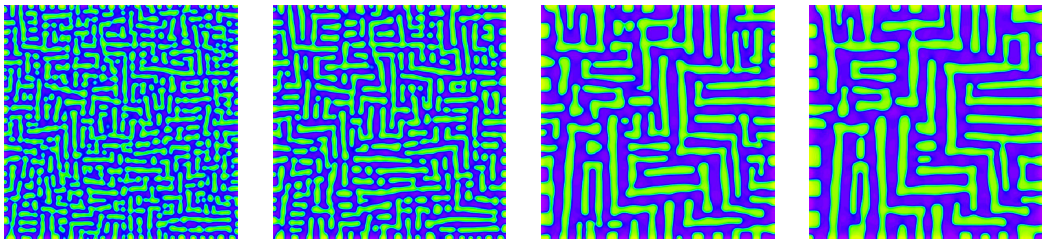


Abbildung 6.18: Effekt homogener, anisotroper Elastizität

Auswirkung auf die spinodale Entmischung

Der Effekt kubischer Anisotropie kann schon unmittelbar nach der spinodalen Entmischung beobachtet werden (siehe Abbildung 6.19). Der Vergleich zwischen der Entwicklung mit und ohne Elastizität macht deutlich, daß die anisotrope Elastizität schon während der spinodalen Entmischung eine signifikante Rolle spielt. In [34] konnte dieses Verhalten erklärt werden. Startet man mit einer zufälligen Störung einer homogenen Mischung, so wird die Dynamik des Systems während der Entmischung durch eine invariante Manigfaltigkeit dominiert, die tangential zu den instabilsten Eigenvektoren des linearisierten Evolutionsoperators ist. Im Falle kubischer Anisotropie sind in den instabilsten Eigenvektoren deutlich die Vorzugsrichtungen zu erkennen. Um dies zu verdeutlichen, haben wir die Fouriertransformierte der Konzentration gegen Ende des Entmischungsvorgangs berechnet. Dabei haben wir das FFTW-Software Packet verwendet (siehe <http://www.fftw.org>).

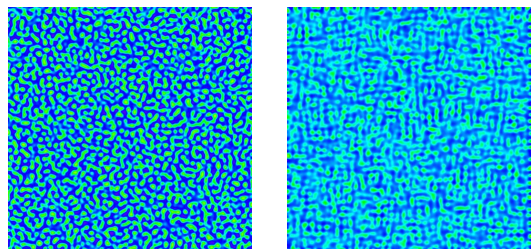


Abbildung 6.19: Links: ohne Elastizität, rechts: mit anisotroper, homogener Elastizität

Zunächst betrachten wir den Fall ohne Elastizität. Abbildung 6.20 zeigt, daß während der Entmischung Koeffizientenvektoren in einem Ringbereich am stärksten angeregt werden. Weder das Bild der Konzentration noch das der Fourierkoeffizienten zeigt irgendwelche Vorzugsrichtungen.

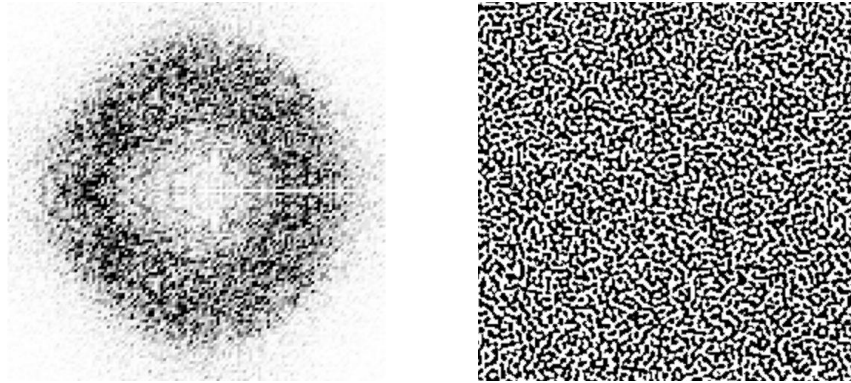


Abbildung 6.20: Betrag der Fourierkoeffizienten (links), Vorzeichen der Konzentration (rechts), ohne Elastizität

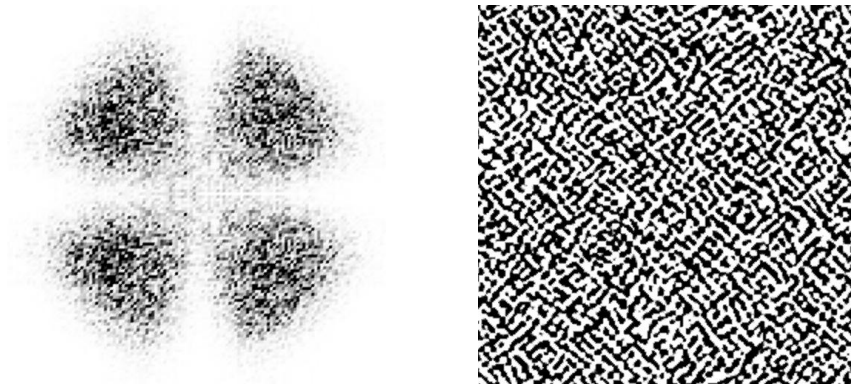


Abbildung 6.21: Betrag der Fourierkoeffizienten (links), Vorzeichen der Konzentration (rechts), positive Anisotropie des Elastizitätstensors;

Im Gegensatz dazu ist im Fall positiver (Abbildung 6.21) oder negativer Elastizität (Abbildung 6.22) deutlich zu sehen, daß Koeffizientenvektoren in bestimmten Bereichen am stärksten angeregt werden. Den angeregten Moden entsprechen Muster in der Konzentration, bei denen die kubische Anisotropie deutlich zu sehen ist.

Bei den drei oben gezeigten Rechnungen war Ω das Einheitsquadrat und es wurden periodische Randbedingungen verwendet. Beide Phasen hatten gleichen Massenanteile und es war $\gamma = 10^{-6}$. Als elastische Parameter haben wir im Falle positiver Anisotropie $C_{11} = 10$, $C_{12} = 1$, $C_{44} = 1$ und $e = \frac{\sqrt{2}}{10}$ verwendet, während im Falle negativer Elastizität $C_{11} = 2$, $C_{12} = 1$, $C_{44} = 100$ und $e = 0.2$ gewählt wurde.

Ausrichtung und Abstoßung von Partikeln

Ein Effekt, der ausschließlich bei inhomogener Elastizität zu beobachten ist, ist die Ausrichtung von Partikeln aneinander und die Abstoßung von Partikeln. Wie in der Abbildung 6.23 zu sehen ist, richten sich zwei Partikel aneinander aus und plazieren sich in maximalem Abstand voneinander (bei periodischen Randbedingungen). Ohne inhomogene Elastizität würden sich beide Partikel rasch vereinigen. Derselbe Effekt kann auch in weniger künstlichen Situationen beobachtet werden. In Abbildung 6.24 wurde unter periodischen Randbedingungen von zufällig positionierten, jeweils gleich großen Partikeln ausgegangen.

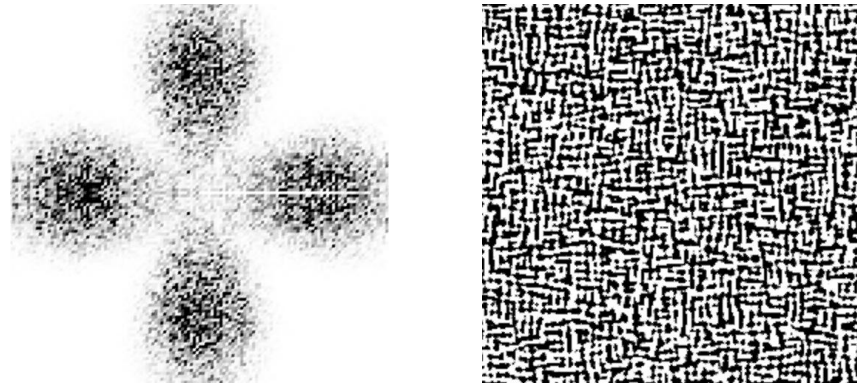


Abbildung 6.22: Betrag der Fourierkoeffizienten (links), Vorzeichen der Konzentration (rechts), negative Anisotropie des Elastizitätstensors;

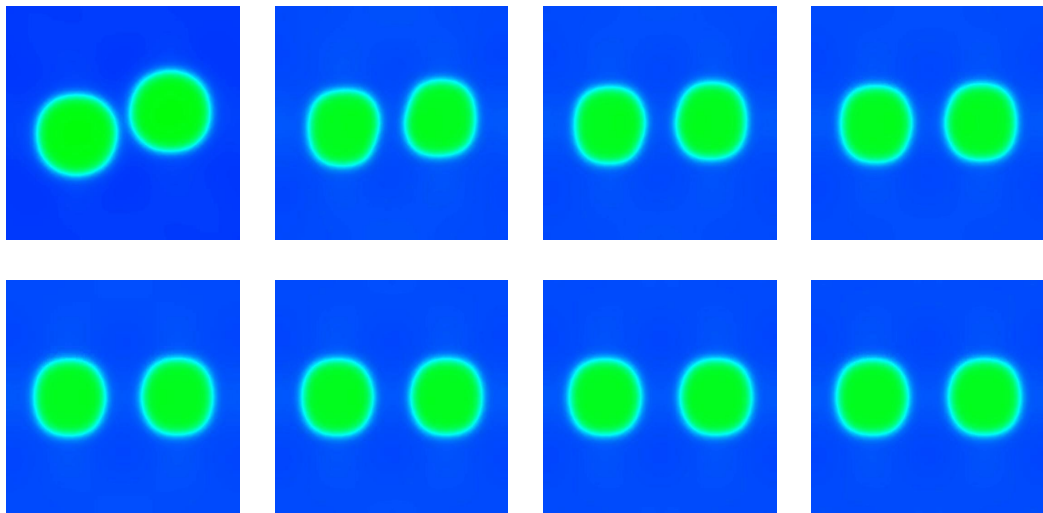


Abbildung 6.23: Effekt inhomogener, anisotroper Elastizität: Ausrichtung und Abstoßung von Partikeln

Das Rechengebiet war das Einheitsquadrat, es wurde jedoch um den Aufreihungseffekt zu verdeutlichen in der Darstellung einmal kopiert. Dieselben Effekte finden sich auch in Rechnungen, die von der spinodalen Entmischung ausgehen (siehe Abbildung 6.25).

Verhältnis Matrix- zu Partikelphase

Das Cahn-Hilliard Modell ist bezüglich der beiden Phasen symmetrisch in dem Sinne, daß, wenn man den Startwert mit -1 multipliziert, die Entwicklung bis auf die Vertauschung der Phasen identisch verläuft. Sind die Massenanteile der beiden Phasen gleich, so ist es unmöglich zu entscheiden, welche Phase die Partikelphase und welche die Matrixphase ist (vgl. Abbildung 6.14). In manchen Bereichen formt die eine Phase Partikel, während anderswo die gleiche Phase umgebende Matrix darstellt. Ist das Massenverhältnis ungleich, so formt immer die kleinere Phase die Partikel. Diese Regel kann durch Minimierung der Phasengrenzen erklärt werden.

Ein interessanter, theoretisch noch unverstandener, Effekt ist, daß beim Cahn-Larché Modell mit inhomogener Elastizität eine andere Regel über die Partikelbildung entscheidet. Numeri-

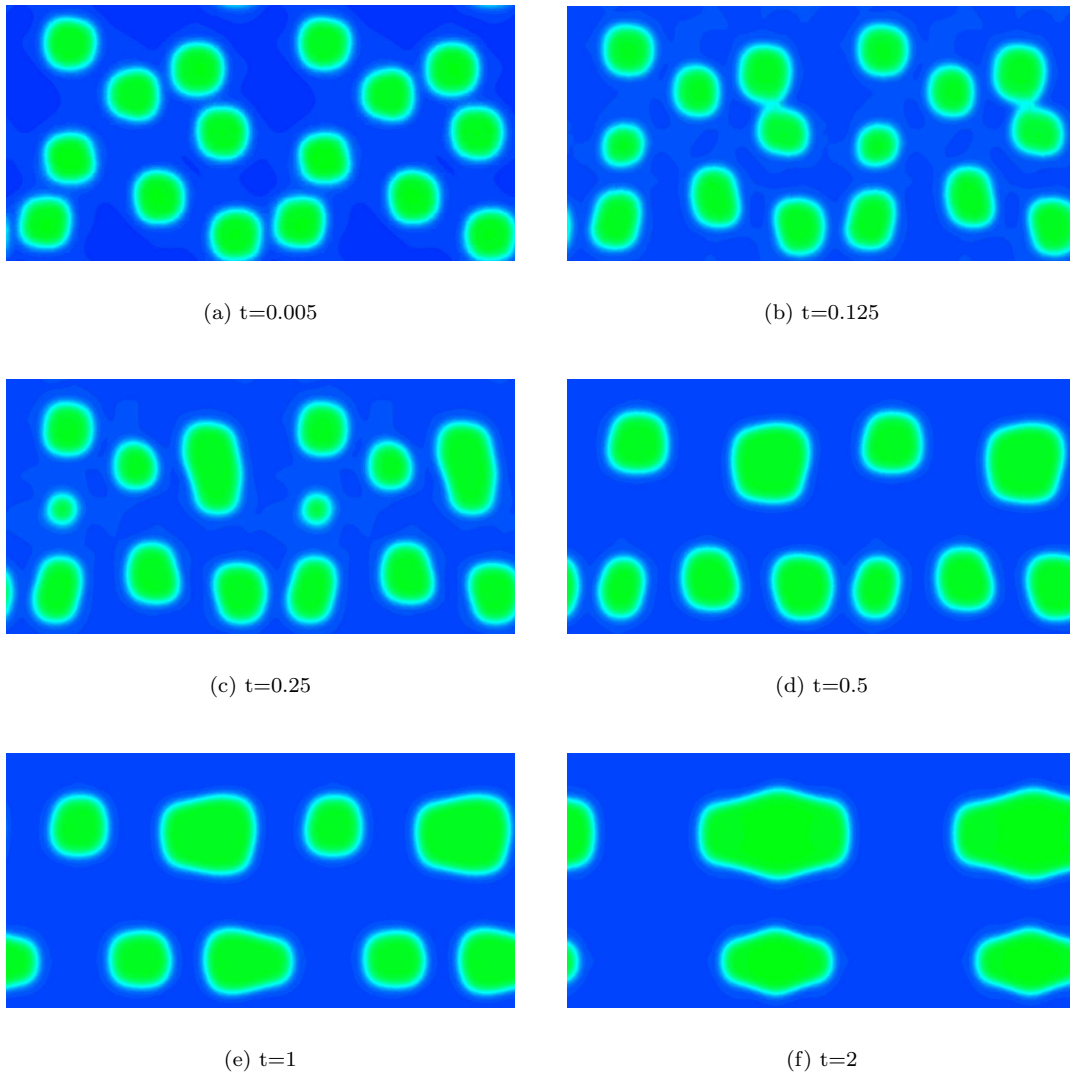


Abbildung 6.24: Effekt inhomogener, anisotroper Elastizität: Ausrichtung und Abstoßung von Partikeln

sche Experimente zeigen, daß immer die elastisch härtere Phase die Partikel bildet, während die weichere Phase die umgebende Matrix formt. In Abbildung 6.26 sind zwei Rechnungen mit identischen Anfangswerten gezeigt. Alle Parameter bis auf die Elastizitätstensoren der beiden reinen Phasen sind bei beiden Rechnungen gleich. Die Elastizitätstensoren der beiden reinen Phasen sind jeweils vertauscht, so daß in der linken Evolution die massenreichere Phase die elastisch härtere ist, während rechts diese Phase die elastisch weichere ist. Auch hier kann man die Ausrichtung der Partikel aneinander beobachten.

In Abbildung 6.27 wurde als Startwert eine Konfiguration mit Partikeln aus der elastisch weicheren Phase gewählt. Im Laufe der Entwicklung kehrt sich das Verhältnis von Matrix- und Partikelphase jedoch um.

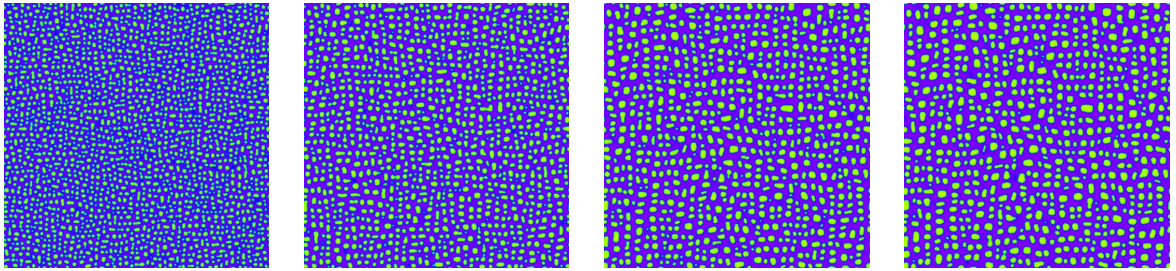


Abbildung 6.25: Evolution mit inhomogener, anisotroper Elastizität

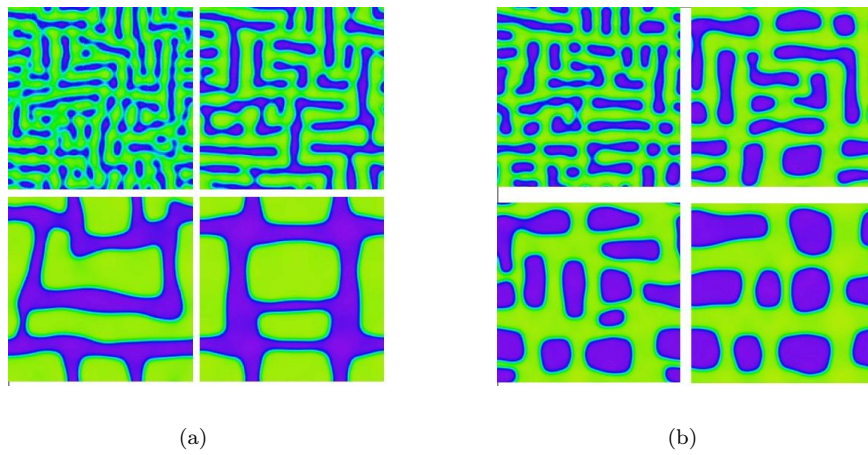


Abbildung 6.26: Verhältnis Matrix- zu Partikelphase: Die elastisch härtere Phase formt die Partikel.

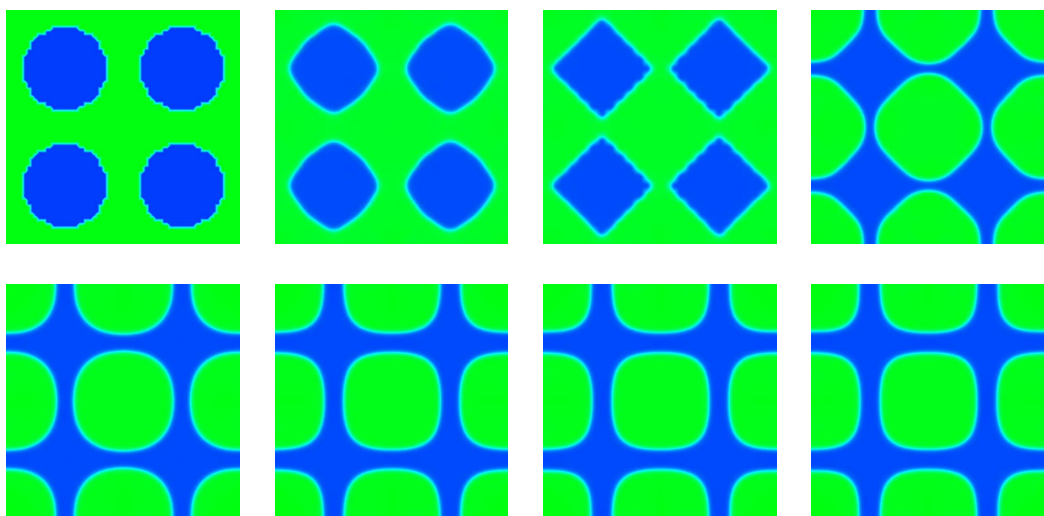


Abbildung 6.27: Effekt inhomogener, anisotroper Elastizität: Wechsel von Matrix- und Partikelphase

Auswirkung der Elastizität auf die Vergrößerungsrate

Schließlich möchten wir die Auswirkungen der Elastizität auf die Vergrößerungsrate untersuchen. Um die Ergebnisse mit den Resultaten des Cahn-Hilliard Modells vergleichen zu können, betrachten wir den nicht-elastischen Anteil der Energie. Wie zu Beginn des Abschnitts 6.4 ausgeführt, ist typischerweise – das heißt nach der spinodalen Entmischung – der nicht-elastische Anteil der Energie in den Phasengrenzen konzentriert. Der elastische Anteil hingegen läßt sich im allgemeinen nicht auf einfache Art lokalisieren.

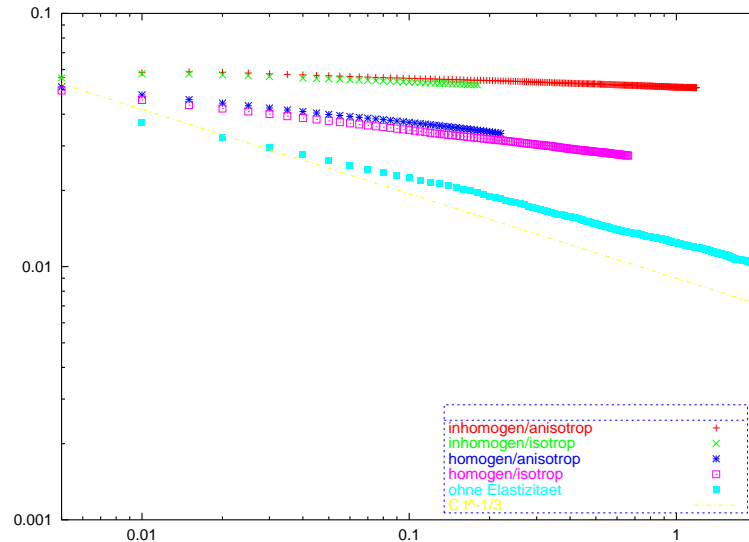


Abbildung 6.28: Verlauf des nichtelastischen Anteils der Energie

Abbildung 6.28 zeigt die entsprechenden Verläufe für verschiedene Fälle. Die obersten beiden Kurven, also die mit der langsamsten Vergrößerung, gehören zu Rechnungen mit inhomogener Elastizität. Die nächst schnelleren Kurven beziehen sich auf Rechnungen mit homogener Elastizität, während der schnellste Abfall der Energie bei der Rechnung ohne Elastizität zu verzeichnen war. Ob die Elastizität isotrop oder anisotrop ist, scheint auf die Vergrößerungsrate kaum Einfluß zu haben.

Danksagung

Zum Schluß dieser Arbeit möchte ich Herrn Prof. Dr. M. Rumpf und Herrn Prof. Dr. H. Garcke für die Vergabe des Themas und die engagierte Betreuung herzlich danken.

Literaturverzeichnis

- [1] N. Akaiwa, K. Thornton und P.W. Voorhees. Dynamics of late-stage phase separation in crystalline solids. *Physical Review Letters*, 86(7):1259–1262, 2001.
- [2] N. Akaiwa, K. Thornton und P.W. Voorhees. Large-scale simulations of microstructural evolution in elastically stressed solids. *Journal of computational physics*, 173:61–86, 2001.
- [3] N. Alikakos, P. Bates und X. Chen. Convergence of the Cahn-Hilliard equation to the Hele-Shaw model. *Arch. Rat. Mech. Anal.*, 128:165–205, 1994.
- [4] H.W. Alt. *Lineare Funktionalanalysis*. Springer, 1. edition, 1985.
- [5] Th. Blesgen und A. Rotthäuser. Finite-Element-Methoden für die Cahn-Hilliard-Gleichung in zwei Raumdimensionen. Diplomarbeit, 1993.
- [6] D. Braes. *Finite Elemente*. Springer, 1992.
- [7] S.C. Brenner und L.R. Scott. *The mathematical Theory of Finite Element Methods*. Springer, 1994.
- [8] M.O. Bristeau, R. Glowinski und J. Periaux. Numerical methods for the Navier-Stokes equations: Applications to the simulation of compressible and incompressible viscous flows. In *Computer Physics Report*, Research Report UH/MD-4. University of Houston, 1987.
- [9] J.W. Cahn und J.E. Hilliard. Free energy of a non-uniform system i. interfacial free energy. *J. Chem. Phys.*, 28:258–267, 1958.
- [10] M. Carrive, A. Miranville und A. Piétrus. The Cahn-Hilliard equation for deformable elastic continua. *Adv. Math. Sci. Appl.*, 10(2):539–569, 2000.
- [11] C. Carstensen und S.A. Funken. Constants in Clément-interpolation error and residual based a posteriori error estimates in finite element methods. *East-West Journal of Numerical Mathematics*, 8(3):153–175, 2000.
- [12] X. Chen. Spectrum for the Allen-Cahn, Cahn-Hilliard, and phase-field equations for generic interfaces. *Commun. in Part. Diff. Equ.*, 197:1371–1395, 1994.
- [13] P.G. Ciarlet. *The Finite Element Method for Elliptic Problems*. North-Holland, 1978.
- [14] P.G. Ciarlet. *Mathematical elasticity*. North-Holland, 1988.
- [15] P. Clément. Approximation by finite element functions using local regularization. *Rev. Française Automat. Informat. Recherche Opérationelle Sér. Rouge Anal. Numér. R-2*, pages 77–84, 1975.
- [16] M.I.M. Copetti und C.M. Elliott. Numerical analysis of the Cahn-Hilliard equation with a logarithmic free energy. *Numer. Math.*, 63:39–65, 1992.

- [17] D. De Fontaine. An analysis of clustering und ordering in multicomponent solid solutions- I. stability criteria. *Journal Phys. Chem. Solids*, 33:287–310, 1972.
- [18] D. De Fontaine. An analysis of clustering and ordering in multicomponent solid solutions- II. fluctuations and kinetics. *Journal Phys. Chem. Solids*, 34:1285–1304, 1973.
- [19] W. Dreyer und W.H. Müller. Modeling diffusional coarsening in eutectic tin/lead solders: a quantitative approach. *Int. J. Solids Struct.*, 38(8):1433–1458, 2001.
- [20] W. Dreyer und W.H. Müller. Modeling diffusional coarsening in microelectronic solders. *Preprint No. 654, Weierstraß-Institut für Angewandte Analysis und Stochastik Berlin*, 2001.
- [21] C.M. Elliott. The Cahn-Hilliard model for the kinetics of phase separation. *Num. Math.*, 1988.
- [22] C.M. Elliott, D.A. French und F.A. Milner. Numerical studies of the Cahn-Hilliard equation for phase separation. *I.M.A. J.Appl.Math.*, 38:97–128, 1987.
- [23] C.M. Elliott, D.A. French und F.A. Milner. A 2nd order splitting method for the Cahn-Hilliard-equation. *Num. Math.*, 54:575–590, 1989.
- [24] C.M. Elliott und H. Garcke. On the Cahn-Hilliard equation with degenerate mobility. *SIAM J. Math. Anal.*, 27:404–423, 1996.
- [25] C.M. Elliott und S. Luckhaus. A generalised diffusion equation for phase separation of a multi-component mixture with interfacial free energy. *IMA Preprint Series*, 887, 1991.
- [26] C.M. Elliott und Z. Songmu. On the Cahn-Hilliard equation. *Arch. Ration. Mech. Anal.*, 96:339–357, 1986.
- [27] K. Eriksson und C. Johnson. Adaptive finite element methods for parabolic problems i: A linear model problem. *SIAM J. Numer. Anal.*, 28:43–77, 1991.
- [28] K. Eriksson und C. Johnson. Adaptive finite element methods for parabolic problems iv: nonlinear problems. *SIAM J. Numer. Anal.*, 32:1729–1749, 1995.
- [29] J.D. Eshelby. The continuum theory of lattice defects. *Solid State Physics*, 3:79–144, 1956.
- [30] X. Feng und A. Prohl. Numerical analysis of the Cahn-Hilliard equation and approximation for the Hele-Shaw problem, part i: Error analysis under minimum regularities. *Preprint des IMA, University of Minnesota*, 1798, 2001.
- [31] X. Feng und A. Prohl. Numerical analysis of the Cahn-Hilliard equation and approximation for the Hele-Shaw problem, part ii: Error analysis and convergence of the interface. *Preprint des IMA, University of Minnesota*, 1799, 2001.
- [32] P. Fratzl, O. Penrose und J.L. Lebowitz. Modelling of phase separation in alloys with coherent elastic misfit. *J. Stat. Physics*, 95(5/6):1429–1503, 1999.
- [33] H. Garcke. *On mathematical models for phase separation in elastically stressed solids*. Bonn, 2000. Habilitationsschrift.
- [34] H. Garcke, S. Maier-Paape und U. Weikard. Spinodal decomposition in the presence of elastic interactions. In S. Hildebrandt and H. Karcher, editors, *Geometric Analysis and Nonlinear Partial Differential Equations, Abschlußband des Sonderforschungsbereich 256 der DFG*. Springer, 2002.

- [35] H. Garcke, M. Rumpf und U. Weikard. The Cahn-Hilliard equation with elasticity: Finite element approximation and qualitative studies. *Interfaces and Free Boundaries*, 3:101–118, 2001.
- [36] D. Gilbarg und N. Trudinger. *Elliptic Partial Differential Equations of Second Order*. Springer, 2. edition, 1983.
- [37] GRAPE, Graphics Programming Environment. Sonderforschungsbereich 256.
- [38] M. Gurtin. Generalized Ginzburg-Landau and Cahn-Hilliard equations based on a microforce balance. *Physica D*, 92:178–192, 1996.
- [39] M.E. Gurtin. *An introduction to Continuum Mechanics*. Academic Press, 1981.
- [40] J.J. Hoyt. Spinodal decomposition in ternary alloys. *Acta Metallurgica*, 37:2489–2497, 1989.
- [41] J.J. Hoyt. The continuum theory of nucleation in multicomponent systems. *Acta Metallurgica*, 38:1405–1412, 1990.
- [42] J.J. Hoyt. Linear spinodal decomposition in a regular ternary alloy. *Acta Metallurgica*, 38:227–231, 1990.
- [43] C. Johnson und V. Thomée. Error estimates for some mixed finite element methods for parabolic type problems. *RAIRO*, 15:41–78, 1981.
- [44] A. Khachaturyan. *Theory of structural transformations in solids*. John Wiley & Sons, 1983.
- [45] F. C. Larché und J. W. Cahn. The effect of self-stress on diffusion in solids. *Acta Metall.*, 30:1835–1845, 1982.
- [46] P.H. Leo, J.S. Lowengrub und H.J. Jou. Microstructural evolution in inhomogeneous elastic media. *Journal of computational physics*, 131:109–148, 1997.
- [47] P.H. Leo, J.S. Lowengrub und H.J. Jou. A diffuse interface model for microstructural evolution in elastically stressed solids. *Acta Mater.*, 46:2113–2130, 1998.
- [48] I.M. Lifshitz und V.V. Slyozov. The kinetics of precipitation from supersaturated solid solutions. *J. Phys. Chem. Solids*, 19:35–50, 1961.
- [49] A. Maheshwari und A.J. Ardell. Morphological evolution of coherent misfitting precipitates in anisotropic elastic media. *Phys. Rev. Lett.*, 70:2305–2308, 1993.
- [50] S. Maier-Paape und T. Wanner. Spinodal decomposition for the Cahn-Hilliard equation in higher dimensions. part i: Probability and wavelength estimate. *Communications in Mathematical Physics*, 195(2):435–464, 1998.
- [51] S. Maier-Paape und T. Wanner. Spinodal decomposition for the Cahn-Hilliard equation in higher dimensions: Nonlinear dynamics. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 151(3):187–219, 2000.
- [52] J.W. Marsden und T.J.R. Hughes. *Mathematical Foundations of Elasticity*. Prentice-Hall, 1983.
- [53] H. Mughrabi und U. Tetzlaff. Microstructure and high-temperature strength of monocrystalline nickel-base super-alloys. *Adv. Eng. Materials*, 2:363–366, 2000.
- [54] S. Müller-Urbaniak. Eine Analyse des Zweischritt- θ -Verfahrens zur Lösung der instationären Navier-Stokes-Gleichungen. *Preprint des SFB 359*, 94 - 01, 1994.

- [55] G. Muralidharan, J.E. Epperson, M. Petri und Haydn Chen. Coherency strains and coarsening in Ni-Al-Si alloys: an experimental study. In W.C. Johnson, J.M. Howe, D.E. Laughlin und W.A. Soffa, editors, *Solid-solid phase transformations*. The Minerals, Metals & Materials Society, 1994.
- [56] E.-M. Nash. *Finite-Element und Spektral-Galerkin Verfahren zur numerischen Lösung der Cahn-Hilliard Gleichung und verwandter Evolutionsgleichungen*. Dissertation, Institut für Mathematik, Universität Augsburg, 2000.
- [57] R.H. Nochetto, A. Schmidt und C. Verdi. A posteriori error estimation and adaptivity for degenerate parabolic problems. *Math. Comput.*, 69:1–24, 2000.
- [58] A. Novick-Cohen. The Cahn-Hilliard equation: mathematical and modelling perspectives. *Adv. Math. Sci. Appl.*, 8:965–985, 1998.
- [59] A. Onuki. Ginzburg-Landau approach to elastic effects in the phase separation of solids. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 58:3065–3068, 1989.
- [60] R. Pego. Front migration in the nonlinear Cahn-Hilliard equation. *Proc. Roy. Soc. London A*, 422:261–278, 1989.
- [61] R. Rannacher und F.-T. Suttmeier. A feed-back approach to error control in finite element methods: application to linear elasticity. *Computational Mechanics*, 19:434–446, 1997.
- [62] B. Stoth. Convergence of the Cahn-Hilliard equation to the Mullins-Sekerka problem in spherical symmetry. *Journal of Differential equations*, 125(1):154–183, 1996.
- [63] V. Thomée. *Galerkin Finite Element Methods for Parabolic Problems*. Springer, 1984.
- [64] R. Verfürth. A posteriori error estimation and adaptive mesh refinement techniques. *J. Comp. Appl. Math.*, 50:67–83, 1994.
- [65] R. Verfürth. *A Review of a posteriori error estimation and adaptive mesh refinement techniques*. Wiley/Teubner, 1996.
- [66] C. Wagner. Theorie der Alterung von Niederschlägen durch Umlösen. *Z. Elektrochem.*, 65:581–594, 1961.
- [67] U. Weikard. Numerische Lösungen der Cahn-Hilliard-Gleichung unter Einbeziehung elastischer Materialeigenschaften. Diplomarbeit, 1998.

LEBENS LAUF
ULRICH WEIKARD
GEBOREN AM 28.5.1972 IN LEVERKUSEN

SCHULE:

11.6.1991 Abitur am Freiherr-vom-Stein Gymnasium in Leverkusen

WEHRDIENST:

1.7.1991 – 30.6.1992 Wehrdienst als Fernmelder in Kastellaun und Rheinbach, abkommandiert zum Presse- und Informationsamt der Bundesregierung in Bonn.

STUDIUM:

Mathematik:

- 09/1992 – 02/1994 Diplomstudiengang Mathematik an der Universität Augsburg.
- 04/1994 – 02/1995 Wechsel an die Philipps-Universität Marburg, dort Vordiplom.
- 04/1995 – 05/1999 Rheinische Friedrich-Wilhelms Universität Bonn, dort Diplom am 29.4.1999.

Wirtschaftswissenschaft:

- 09/95 – 02/98 Integrierter Studiengang Wirtschaftswissenschaft an der Fernuniversität Hagen, Vordiplom.
- 07/1999 – 06/2002 Distance Learning MBA an der Edinburgh Business School der Heriot-Watt University

PROMOTION:

- seit 05/1999 Promotionsstudium am Institut für Angewandte Mathematik der Universität Bonn auf dem Gebiet der Numerik partieller Differentialgleichungen.