Eine Verallgemeinerung der Navier–Stokes–Gleichungen auf Zweiphasenströmungen

Inaugural–Dissertation zur Erlangung des Doktorgrades der Hohen Mathematisch–Naturwissenschaftlichen Fakultät der Rheinischen Friedrich–Wilhelms–Universität zu Bonn

> vorgelegt von Dipl.–Math. Thomas Blesgen aus Bonn

Bonn, im November 1997

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

Berichterstatter: Prof. Dr. S. Luckhaus

Korreferent: Prof. Dr. H. J. Neugebauer

Tag der Promotion: 18. 12. 1997

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung

2	The	oretische Grundlagen	4
	2.1	Einführung	4
	2.2	Notationen und Gewichtungsfunktionen	6
	2.3	Mischungsentropie	9
	2.4	Formulierung des Gleichungssystems	11
	2.5	Physikalische Interpretation des Spannungstensors	13
	2.6	Typ des Gleichungssystems	15
	2.7	Zustandsgleichungen	18
		2.7.1 Ideales Gas	19
		2.7.2 Van–der–Waals–Gase	20
		2.7.3 Auswertung der Druckbedingung	22
		2.7.4 Folgerungen für das Gesamtsystem	23
	2.8	Entdimensionalisierung der Gleichungen	25
	2.9	Modellannahmen	29
	2.10	Entropieabschätzung	30
3	Lok	ale Existenz und Eindeutigkeit der Lösung	36
	3.1	Neuformulierung der Gleichungen	36
	3.2	Transformation des Problems	38
	3.3	Abschätzung der linearen Gleichungen	39
	3.4	Formulierung der Fixpunktiteration	48
	3.5	Beweis des lokalen Existenzsatzes	51
	3.6	Eindeutigkeit der Lösung	54
4	Nur	nerisches Lösungsverfahren	59
	4.1	Motivation des Verfahrens	59
	4.2	Homogenität der numerischen Flüsse	63
	4.3	Koordinatentransformation, Eigenwerte des Systems	63

1

	4.4	Berechnung der numerischen Flüsse im Programm	65
	4.5	Gestörte Homogenitätsbedingung	67
	4.6	Berechnung der 2. Ableitungen	67
		4.6.1 Stützstellenbasierte Berechnung der 2. Ableitungen	68
		4.6.2 Elementbasierte Berechnung der 2. Ableitungen	69
	4.7	Behandlung der Randwerte	72
	4.8	Zeitschrittweitensteuerung	74
5	Sim	ulationsergebnisse	75
	5.1	Programmvalidierung und Spezialfälle	75
	5.2	Polynomielle und logarithmische Mischungsentropie	76
	5.3	Bedeutung von ε für die Phasenbildung	80
	5.4	Einfluß des Temperaturfeldes auf die Phasenbildung	81
	5.5	Einfluß des Geschwindigkeitsfeldes auf die Phasenbildung $\ \ldots\ \ldots\ \ldots\ \ldots$	85
6	Abs	chließende Bemerkungen und Ausblick	88
\mathbf{A}	Gru	ndlagen und Bezeichnungen	90
	A.1	Funktionenräume	90
	A.2	$Vektor- \ und \ Tensornotationen \ \ . \ . \ . \ . \ . \ . \ . \ . \ . $	91
	A.3	Thermodynamische Grundlagen	91
	A.4	Entropieabschätzung für Navier–Stokes–Gleichungen	93
в	Ver	gleich mit anderen Modellen	95
	B.1	Reaktionsmodell nach Woods	95
	B.2	Variationsansatz für die innere Energie	96
\mathbf{Li}	terat	urverzeichnis	99

Denn wahrhaftig steckt die Kunst in der Natur. Wer sie herausreißen kann, der hat sie. ALBRECHT DÜRER (1564–1642)

Kapitel 1

Einleitung

In den letzten dreißig Jahren wurde eine Reihe von thermodynamischen Modellen entwickelt, welche die Entstehung von Phasen und den zeitlichen Wandel von Phasengrenzen beschreiben. Hier sind als wichtige Vertreter die Cahn-Hilliard-Gleichung [5] zu nennen, die ursprünglich die Entmischung einer zweikomponentigen Legierung beschreibt, die unter eine kritische Temperatur hinweg abgekühlt wird; die Allen-Cahn-Gleichung [1], bei der die Masse der Komponenten keine Erhaltungsgröße ist, und die Phasenfeldgleichung [11], wo eine Allen-Cahn-Gleichung mit einer Wärmeleitungsgleichung gekoppelt wird zur Beschreibung von temperaturbeeinflußten Phasenänderungen. Anwendungen finden sich etwa in der Metallurgie oder der Werkstofforschung, z.B. bei der Beschreibung von Kristallwachstum (i.b. Siliziumkristalle für Sonnenkollektoren und zur Chipproduktion) und der Untersuchung von Supraleitern vom Typ II.

Alle diese Gleichungen waren und sind Gegenstand ausgiebiger theoretischer und numerischer Untersuchungen. Sie wurden auf Mehrphasensysteme erweitert und Anisotropien berücksichtigt. Ihnen gemein ist, daß sie mit Hilfe thermodynamischer Zustandsgrößen wie der Freien Energie eine makroskopische Beschreibung des Systemverhaltens liefern, ohne genaue Details auf der mikroskopischen Ebene zu erfordern. Außerdem beschreiben alle diese Gleichungen physikalische Systeme, die sich dynamisch im Ruhezustand befinden, d.h. bei denen keine Konvektion auftritt bzw. deren Auswirkung auf die thermodynamische Beschreibung vernachlässigt wird.

Auf der anderen Seite werden seit geraumer Zeit die Navier–Stokes–Gleichungen zur Beschreibung von strömenden Fluiden verwandt. Dies ist die allgemeinste Formulierung, sie beinhaltet auch die Eulergleichungen der Gasdynamik. Strömungen in porösen Medien wollen wir ausklammern. Erfaßt werden als relevante Parameter einer Strömung Größen wie Druck, Dichte, Temperatur und Geschwindigkeitsfeld. Auch hier ist die praktische Bedeutung außerordentlich groß. Anwendungen finden sich überall dort, wo Gas– oder Flüssigkeitsströmungen berechnet werden müssen, z.B. beim Entwurf neuer Flugzeuge, der computerunterstützten Entwicklung von Raketenmotoren oder der Wettervorhersage. Auch gekoppelt mit anderen Gleichungen z.B. zur Beschreibung von Sedimenttransport in Strömungen zeigen die Navier–Stokes–Gleichungen ihre Bedeutung.

In den Navier–Stokes–Gleichungen ist aber die Entstehung und die Veränderung von Phasengrenzen nicht enthalten, die in einer Reihe von praxisbezogenen Fällen relevant sind. Es ist wünschenswert und eine logische Weiterentwicklung der Theorie, daß man beide genannten Ansätze zusammenführen und Phasenentstehung und -wanderung in einem der Konvektion unterworfenen System beschreiben möchte. Zu diesem Ziel soll die vorliegende Arbeit für den Fall von zwei Phasen einen ersten Beitrag leisten. In [9] wurde bereits ein Ansatz beschrieben, der die inkompressiblen Navier–Stokes–Gleichungen mit der Cahn–Hilliard–Gleichung zusammenführt. In der Physik gibt es eine große Zahl von Fällen, in denen Zweiphasenphänomene in bewegten Systemen auftreten. Eine Systematisierung findet sich in [14]. Daher wird eine Auswahl und Einschränkung notwendig.

Beispiele für Phasenfluß sind der Schadstofftransport in porösen Medien oder ionisiertes Fluid. Die Bandbreite der Möglichkeiten zeigt der extreme Fall des Systems Feststoffphase–Gasphase bei einem wieder in die Erdatmosphäre eintretenden Raumschiff auf. Hier kommt es wegen der hohen Geschwindigkeit des Gases (in Bezug zur Rakete) zu einer starken Erwärmung des Feststoffes, der an seiner Oberfläche schmilzt und eine flüssige Grenzschicht ausbildet. Durch die Verdichtung des Gases bildet sich aber auch in der Nähe der Feststoffoberfläche eine Gasgrenzschicht aus.

Solch komplizierte Fälle wollen wir hier nicht behandeln. In dieser Arbeit beschäftigen wir uns ausschließlich mit Flüssigkeits-Gas-Systemen. Wir nehmen an, daß im System keine chemischen Reaktionen stattfinden und keine elektrostatischen oder magnetischen Kräfte wirken.

Eine mögliche Anwendung des hier vorgestellten Modells ist die Kavitation, die bei Maschinen mit hohen Strömungsgeschwindigkeiten wie Wasserturbinen oder Schiffsschrauben gefürchtet ist. An Stellen starker Strömung wird der Druck so klein, daß dort die Flüssigkeit verdampft. Die entstehenden Gasblasen werden von der Strömung umschlossen mitgetragen; sie zerfallen später unter hörbarem Knall. Mechanische Bauteile werden so starker Belastung ausgesetzt und auf Dauer beschädigt.

Der verwendete Algorithmus ist für zwei Raumdimensionen geschrieben. Als typischen Fall für die Anwendung betrachten wir im numerischen Teil einen Kanal, in dem eine Strömung von links (Einströmrand) nach rechts (Ausströmrand) fließt.



Abbildung 1.2: Betrachtete physikalische Situation

Der obere und untere Rand seien undurchlässig. Die Werte der physikalisch relevanten Größen am Einströmrand seien vorgegeben. Die Flüssigkeit soll mikroskopisch gelöst Gasmoleküle mitführen, die unter bestimmten Umständen, etwa Erwärmung des Fluids oder Druckänderung in der Strömung, Gasblasen bilden. Die Ausbildung der Phasen im Fluid, deren Transport sowie die Auswirkung der entstehenden Blasen auf die Strömung wollen wir beschreiben.

Unser Modell ist ein den kompressiblen Navier–Stokes–Gleichungen verwandtes System, bei dem die Beschreibung der vorherrschenden Phase durch einen Phasenparameter χ übernommen wird, dessen Änderung eine modifizierte Allen–Cahn–Gleichung steuert. Wir verwenden die kompressiblen Navier–Stokes–Gleichungen, dessen Dichte in unserem Modell eine gemittelte Größe darstellt. Dies wird im folgenden Kapitel klar werden.

Die Gliederung der Arbeit ist die folgende: In Kapitel 2 geben wir die mathematische Formulierung der Gleichungen an, erklären den Ansatz, bestimmen den Typ des Systems und geben eine Entdimensionalisierung an. Dort weisen wir auch die Gültigkeit des 2. Hauptsatzes der Thermodynamik für unser System nach.

In Kapitel 3 weisen wir die Existenz und Eindeutigkeit einer Lösung des von uns untersuchten Systems für kleine Zeiten und hinreichend glatte Daten nach.

In Kapitel 4 erklären wir prinzipiell die von uns verwendete Methode zur numerischen Lösung des untersuchten Systems. Dabei wurden wesentliche Teile von einem am Institut für Angewandte Mathematik der Universität Freiburg entwickelten numerischen Verfahren zur Lösung der kompressiblen Navier–Stokes–Gleichungen übernommen und für das untersuchte Gleichungssystem modifiziert.

Die Ergebnisse einiger numerischer Simulationen präsentieren wir in Kapitel 5. Im Anhang finden sich verwendete Beziehungen der Thermodynamik sowie ein Abschnitt mit einem Vergleich mit anderen Modellen zur Beschreibung von Zweistoffsystemen. Wir beschließen die Arbeit mit einem Ausblick und einer kritischen Würdigung der präsentierten Ergebnisse.

Kapitel 2

Theoretische Grundlagen

In diesem Kapitel leiten wir die Gleichungen her, welche wir zur Beschreibung der Entstehung und des Wandels von Phasen in einem dynamischen System unter Berücksichtigung von Dichte und Temperatur heranziehen wollen. Das Gleichungssystem bildet die Grundlage für alles Folgende.

Zunächst beginnen wir jedoch mit einer Einführung in die Idee des Ansatzes und die physikalischen Beziehungen. Es folgt ein Paragraph mit den verwendeten Notationen und einigen Definitionen.

Nach der Präsentation des Gleichungssystems geben wir eine Begründung für den im Spannungstensor neu auftretenden Term. Dann bestimmen wir im 6. Abschnitt den Typ des untersuchten Gleichungssystems. Das wesentliche Ergebnis des nachfolgenden Abschnitts sind mögliche Zustandsgleichungen des Systems, d.h. funktionale Beziehungen zwischen Druck p, Temperatur T und Dichte. Diese dienen einerseits der Berechnung von p und T aus den Unbekannten des Systems, andererseits der Festlegung der Nichtlinearität in der Gleichung des Phasenparameters.

Es folgt die für die Numerik wichtige Entdimensionalisierung der Gleichungen.

Im 9. Abschnitt fassen wir alle Annahmen bzw. gemachten physikalischen Voraussetzungen zusammen, die für die Korrektheit unserer Formulierung notwendig sind.

Im letzten Abschnitt beweisen wir die Existenz eines Lyapunov–Funktionals und zeigen so die thermodynamische Korrektheit des Ansatzes.

2.1 Einführung

Es sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, $1 \leq d \leq 3$ ein beschränktes Gebiet, d.E.h. polygonal berandet. Für die Endzeit D > 0 bezeichne Ω_D den Zylinder $\Omega \times (0, D)$.

Zur Beschreibung des Strömungsverhaltens eines Zweiphasenflusses modifizieren wir die Navier– Stokes–Gleichungen für ein kompressibles Fluid, da wir zunächst die gemittelte Dichte nicht als Konstante vorschreiben wollen. Das mathematische System, welches wir nachfolgend vorstellen wollen, besitzt nur *eine* Variable für Dichte, Energie und Geschwindigkeitsfeld:

$\varrho:\Omega_D\to I\!\!R^+$:	Dichte,
$v:\Omega_D\to I\!\!R^d$:	Geschwindigkeitsvektor,
$e:\Omega_D\to I\!\!R^+$:	Gesamtenergie des Systems.

 ϱ und e fassen wir dabei als gemittelte Größen auf. Die Berechnung der relevanten Größen der Teilsysteme wie etwa der Einzeldichten ϱ_1 und ϱ_2 aus den Variablen des Systems erklären wir im folgenden Abschnitt.

Teilweise erfordert diese Betrachtungsweise mit einer Systemvariablen einschränkende Annahmen, die wir in Abschnitt 2.9 zusammenstellen.

Daneben verwenden wir die Größen

 $\begin{array}{lll} T:\Omega_D \to I\!\!R^+ & : & \text{absolute Temperatur}, \\ p:\Omega_D \to I\!\!R^+ & : & \text{Druck}, \\ c_p:\Omega_D \to I\!\!R^+ & : & \text{Wärmekapazität bei konstantem Druck}, \\ c_V:\Omega_D \to I\!\!R^+ & : & \text{Wärmekapazität bei konstantem Volumen} \end{array}$

und nehmen an, daß sie bekannte Funktionen von ρ , e und der unten eingeführten Funktion χ sind (die genaue funktionale Abhängigkeit und die dazu angenommenen physikalischen Eigenschaften finden sich im 7. Abschnitt).

Neu zu den sich aus den Navier–Stokes–Gleichungen ergebenden Unbekannten führen wir als zusätzliche Systemgröße ein:

 $\chi: \Omega_D \to [0,1]$: Phasenparameter, bestimmt die vorherrschende Phase.

Innere Energiedichte E und Entropiedichte S des Gesamtsystems betrachten wir als Konvexkombination der Werte der einzelnen Phasen, also z.B.

$$E = \chi E_1 + (1 - \chi)E_2. \tag{2.1}$$

Den Phasenparameter χ steuert eine von der Allen–Cahn–Gleichung abgeleitete Beziehung. Für eine vorgegebene Anfangswertefunktion χ_0 und geg. $\delta > 0$ lautet sie ursprünglich:

$$\partial_t \chi = -J'(\chi) + \delta \Delta \chi \quad \text{in } \Omega,$$

$$\chi(\cdot, 0) = \chi_0 \quad \text{in } \Omega,$$

$$\partial_n \chi = 0 \quad \text{auf } \partial \Omega.$$

Dabei ist im einfachsten Fall

$$J(\chi) = \frac{1}{2} [\chi(1-\chi)]^2.$$

Später werden wir einen Transportterm und einen Vorfaktor hinzufügen, $J = J(\rho, \chi, T)$ setzen und den Oberflächendiffusionsterm $\delta \Delta \chi$ ersetzen durch $\frac{1}{\rho} \operatorname{div}(\delta \rho \nabla \chi)$.

Wir fassen kurz wesentliche bekannte Eigenschaften der Allen-Cahn-Gleichung zusammen:

Im Gegensatz zur Cahn-Hilliard-Gleichung ist χ kein erhaltener Ordnungsparameter (so können Phasen wachsen oder verschwinden). $\delta > 0$ ist eine kleine Konstante, $\sqrt{\delta}$ beschreibt die Dicke der Grenzschicht. Grenzschichten in der Natur haben typischerweise eine Dicke von einigen Amströng (1 \mathbb{R} A= 10⁻¹⁰m). Dieser Wert kann in den numerischen Berechnungen der Allen-Cahn-Gleichung aus Stabilitätsgründen nicht erreicht werden (der Term $\delta \Delta \chi$ regularisiert die Gleichung). Das Ergebnis ist aber dennoch qualitativ aussagekräftig, siehe [4].

Das Verhalten der Lösung der Allen–Cahn–Gleichung ist wohlbekannt: Zur Startzeit sei χ etwa gegeben als zufällige, kleine Störung eines konstanten Wertes. Da $\nabla \chi$ und δ klein sind, bestimmt also zunächst $-J'(\chi)$ den Wert von $\partial_t \chi$, und χ strebt gegen eines der Minima 1 oder 0 von J. Es bilden sich somit Phasen und Grenzschichten aus. Für die minimalen Werte 1 und 0 verschwindet $J'(\chi)$, während in der schmalen Grenzschicht $\nabla \chi$ groß wird, also $\delta \Delta \chi$ für die Änderung von $\partial_t \chi$ entscheidend wird. Die Grenzschicht ändert sich also langsam entsprechend dem Fluß $\delta \nabla \chi$, was als "surface diffusion" bezeichnet wird. Für $\delta \to 0$ gilt für die Geschwindigkeit der Grenzschicht $v = c\kappa$, wobei κ die mittlere Krümmung der Grenzschicht ist ("mean curvature flow"). Für die Allen–Cahn–Gleichung gilt ein parabolisches Maximumprinzip, siehe etwa [16, Kap.3, Theorem 12], so daß $0 \leq \chi \leq 1$ gilt, falls die Anfangs– und Randwerte dieser Bedingung auch genügen. Schließlich ist

$$\mathcal{E}(\chi) := \int_{\Omega} \left(J(\chi) + \frac{\delta}{2} |\nabla \chi|^2 \right)$$

ein Lyapunovfunktional der Gleichung:

$$\partial_{t} \mathcal{E}(\chi) = \int_{\Omega} \left(J'(\chi) \partial_{t} \chi + \delta \nabla \chi \cdot \nabla(\partial_{t} \chi) \right)$$
$$= \int_{\Omega} \left(J'(\chi) - \delta \Delta \chi \right) \partial_{t} \chi$$
$$= -\int_{\Omega} |\partial_{t} \chi|^{2} \leq 0.$$
(2.2)

Der bei der partiellen Integration entstehende Term verschwindet, da für χ Neumann–Randwerte vorausgesetzt wurden.

2.2 Notationen und Gewichtungsfunktionen

An dieser Stelle sei auf die Abschnitte A.1 bis A.3 im Anhang verwiesen. Dort sind alle in dieser Arbeit verwendeten Funktionenräume, Differentialoperatoren und thermodynamischen Notationen zusammengestellt. Die dort formulierten Beziehungen sind grundlegend und finden sich in vielen Büchern. Nachfolgend wird der Inhalt dieser Abschnitte als bekannt vorausgesetzt. Zur Notation der thermodynamischen Größen ist zu beachten, daß Großbuchstaben bei uns immer die Dichtewerte bezeichnen, Kleinbuchstaben den mit der Dichte multiplizierten Ausdruck, so etwa S die Entropiedichte, $s = \rho S$.

Es bezeichne \vec{n} die äußere Normale an $\partial \Omega$. Der Einströmrand R_I ist bei gegebenem Geschwindigkeitsfeld v durch

$$R_I := \{ x \in \partial \Omega \mid v(x) \cdot \vec{n}(x) < 0 \}$$

definiert und der Ausströmrand entsprechend durch

$$R_O := \{ x \in \partial \Omega \mid v(x) \cdot \vec{n}(x) > 0 \}.$$

Vorgegebene Parameter unseres Problems sind

$\mu > 0$:	Viskositätskoeffizient (hier konstant),
ν	:	Viskositätskoeffizient (hier konstant), $\nu \ge -\frac{2}{3} \mu$ für $d = 3, \nu > -\mu$ für $d = 2$,
L	:	Wärmeleitfähigkeit des Fluids (ein Wert für beide Phasen),
$\delta > 0$:	Diffusionskoeffizient, bestimmt die Grenzschichtdicke ($\delta \ll 1$),
$\varepsilon > 0$:	Skalierungsfaktor für die substantielle Ableitung der Allen–Cahn–Gleichung.

Weiter verwenden wir die Definitionen (δ_{ij} sei das Kroneckerdelta)

$\tau_{ij}(v) := \mu(\partial_i v_j + \partial_j v_i) + \nu \operatorname{div} v \delta_{ij}$:	Viskositäts–Spannungstensor,
$\Gamma_{ij} := \tau_{ij} - p \delta_{ij}$:	ursprünglicher Tensor der Impuls- und Energiegleichung,
$\zeta := \delta \varrho T \ \nabla \chi \otimes \nabla \chi$:	zusätzlicher Term im Spannungstensor,
$\tilde{\Gamma}_{ij} := \tau_{ij} - p \delta_{ij} - \zeta_{ij}$:	modifizierter Spannungstensor,
$c_{V,i}$:	spez. Wärmekapazität bei konstantem Volumen, $i = 1, 2,$
$c_{p,i}$:	spez. Wärmekapazität bei konstantem Druck, $i = 1, 2,$
$\gamma_i := \frac{c_{p,i}}{c_{V,i}}$:	Adiabaten exponent für Phase $i, i = 1, 2,$
$R = 8.13451 \pm 0.00007 [JK^{-1}mol^{-1}]$:	Gaskonstante.

Für d = 2 schließen wir $\nu = -\mu$ aus, da für den Beweis des lokalen Existenzsatzes $\lambda := \mu + \nu > 0$ benötigt wird. $\nu \ge -2/3 \mu$ ergibt sich aus thermodynamischen Überlegungen, siehe 2.10.

Neben den bereits in Abschnitt 1 angegebenen Variablen des Gleichungssystems benötigen wir außerdem Gewichtungsfunktionen, die festlegen, wie sich die Systemgrößen aus den entsprechenden der einzelnen Phasen zusammensetzen. Die Wahl dieser Gewichtungsfunktionen ist von entscheidender Bedeutung für das später vorgestellte Gleichungssystem (2.20).

Für ihre Definition betrachten wir ein Volumen V; ohne Einschränkung können wir annehmen, daß die Gesamtmasse in V den Wert Eins annimmt. V ist also das spezifische Volumen, es gilt $V = \frac{1}{\varrho}$. Für den Augenblick wollen wir mit M_i den Massenanteil der i-ten Phase in V bezeichnen. Wir definieren:

V	Spezifisches Volumen, d.h. die Gesamtmasse ist Eins in V ,
V_i	Spezifisches Volumen der i-ten Phase, d.h. es gilt $M_i = 1$ in V_i ,
ψ_i	Volumenanteil der i-ten Phase in V, es gilt $0 \le \psi_i \le 1$,
$\varrho_i := \psi_i / V_i$	Spezifische Dichte der i-ten Phase; es gilt $\rho_1 + \rho_2 = \rho = 1/V$,
	ϱ_i ist der Massenanteil der i-ten Phase pro V,
$\chi_i := \frac{\varrho_i}{\varrho}$	Dichtequotient, Massenanteil der i –ten Phase in ${\cal V}$ und Phasenparameter.

Tabelle 2.1: Definition der Gewichtungsfunktionen χ_i , ϱ_i und ψ_i

Wir verwenden χ und χ_1 synonym und schreiben oft $(1 - \chi)$ für χ_2 .



Abbildung 2.1: Spezifisches Volumen V

Abbildung 2.1 zeigt das spezifische Volumen V, in dem die beiden Phasen Volumina V_i einnehmen mögen. Sei meas das d-dimensionale Lebesgue-Maß. Beide Phasen seien inkompressibel. Daher

gilt $V_i = \frac{\tilde{V}_i}{M_i}$ und $\operatorname{meas}(\tilde{V}_i) \le \operatorname{meas}(V_i)$ we gen $M_i \le 1$. Außerdem ist $\psi_i = \frac{\tilde{V}_i}{V} = M_i \frac{V_i}{V}$, also $\varrho_i = \frac{M_i}{V}, \sum_i \varrho_i = \frac{1}{V} = \varrho$

wie in der Definition oben behauptet.

Ferner bemerken wir

$$\chi_i = \frac{\varrho_i}{\varrho} = \frac{M_i}{V} \frac{1}{\varrho} = M_i,$$

$$\sum_i \varrho_i V_i = \sum_i \psi_i = 1.$$
(2.3)

Aufgrund von (2.3) ist die Notation M_i überflüssig.

Wie inzwischen klar sein sollte, sind die Größen ρ_1 und ρ_2 keine Variablen des Gleichungssystems. Definitionsgemäß haben wir

$$\varrho_1 = \varrho\chi, \tag{2.4}$$

$$\varrho_2 = \varrho(1-\chi). \tag{2.5}$$

Für die Energiedichte des Systems machen wir entsprechend (2.1) den Ansatz

$$E = \chi_1 E_{\text{pot},1} + \chi_2 E_{\text{pot},2} + \frac{1}{2} |v|^2.$$
(2.6)

E setzt sich also zusammen aus der kinetischen Energie $\frac{1}{2}|v|^2$ und, gewichtet mit dem jeweiligen Massenanteil, der Summe aus den potentiellen Energien der beiden Phasen.

Die Wahl der Gewichtungsfunktionen und Aufspaltung (2.6) ergeben ferner ganz kanonisch

$$e_{\text{pot}} = \varrho E_{\text{pot}}$$

$$= \varrho (\chi_1 E_{\text{pot},1} + \chi_2 E_{\text{pot},2})$$

$$= \varrho_1 E_{\text{pot},1} + \varrho_2 E_{\text{pot},2}$$

$$= e_{\text{pot},1} + e_{\text{pot},2}.$$
(2.7)

Es sei aber schon hier darauf hingewiesen, daß $de_{\text{pot}} \neq T \, ds - p \, dV$. Wie (2.71) zeigt, ist

$$de_{\text{pot}} = T \ d(s+\tilde{s}) + \left[\chi G_1 + (1-\chi)G_2\right] \ d\varrho + \varrho(G_1 - G_2) \ d\chi$$

Für die Entropie ohne Mischungsentropieterme gilt genauso (vgl. mit (2.7)):

$$s = s_1 + s_2 = \varrho_1 S_1 + \varrho_2 S_2.$$
(2.8)

Die Größen ρ , ρ_i und χ_i bestimmen also wie gerade in (2.6), (2.7) und (2.8) dargelegt, wie sich aus den Werten S_i und E_i der einzelnen Phasen die Werte S bzw. E des Gesamtsystems berechnen. Daher bezeichnen wir sie im Text als Gewichtungsfunktionen.

Bei der Freien Energie f, der Gibbschen Energie g und den Dichten F und G tritt noch eine zusätzliche Mischungsentropie \tilde{s} auf. Daher berechnen wir deren Differentiale im nächsten Abschnitt 2.3.

Die Wahl der Gewichtungsfunktionen steht logisch in engem Zusammenhang mit der physikalischen Bedeutung von χ . Auch andere Interpretationen waren zunächst denkbar. Welche Wahl korrekt und physikalisch sinnvoll ist, ist letztlich nur über die thermodynamische Validierung in Abschnitt 2.10 zu entscheiden. Wir werden dort sowie in Abschnitt B.2 auf diesen Sachverhalt noch eingehen.

2.3 Mischungsentropie

Um die Bildung von Phasen zu gewährleisten, wird von der Entropiedichte der Term

$$\tilde{S} := W(\chi) + \frac{\delta}{2} |\nabla \chi|^2$$
(2.9)

abgezogen, mit

$$W(\chi) := \frac{1}{2} \left[\chi(1-\chi) \right]^2.$$
(2.10)

Das negative Vorzeichen von \tilde{S} in der Entropie wird klar, wenn man das Problem

$$S = \chi S_1 + (1 - \chi)S_2 - W(\chi) - \frac{\delta}{2} |\nabla \chi|^2 \to \max$$

betrachtet. Der Term $-W(\chi)$ wird maximal, wenn χ in die Minima von W wandert, also die Werte $\chi = 0$ oder $\chi = 1$ annimmt. $-\tilde{S}$ treibt daher die Phasenbildung an.

Wir vereinbaren $\tilde{s} = \rho \tilde{S}$. Gleichung (2.8) geht über in

$$s = s_1 + s_2 - \tilde{s}. \tag{2.11}$$

Wie aus der untenstehenden Definition von f analog (A.7) folgt, gilt auch für unser System die Beziehung

$$T\left[\partial_T\left(\frac{f}{T}\right)\right]_V = -\frac{e_{\rm pot}}{T}.$$
(2.12)

Wegen (2.12) und $f = e_{\text{pot}} - Ts$ tauchen die Mischungsentropieterme in e_{pot} nicht auf, wohl aber mit dem Faktor -T in der Freien Energie f. Eine identische Überlegung zeigt, daß $T\tilde{s}$ in der Gibbschen Energie g zusätzlich auftritt. Diese Überlegungen führen zu (2.7) sowie den Definitionen

$$F = \chi F_1 + (1 - \chi)F_2 + T\tilde{S}, G = \chi G_1 + (1 - \chi)G_2 + T\tilde{S}.$$

Es folgen kanonisch die Definitionen für f und g:

$$f = \varrho_1 F_1 + \varrho_2 F_2 + T\tilde{s}$$

$$= e_{\text{pot}} - Ts$$

$$g = \varrho_1 G_1 + \varrho_2 G_2 + T\tilde{s}$$

$$= e_{\text{pot}} - Ts + p.$$

Wir berechnen nun nachfolgend die Differentiale der gerade definierten Größen. Wir nehmen dabei $T_1 = T_2 = T$ und $p_1 = p_2 = p$ an. Mehr dazu im folgenden Abschnitt.

Für die Freie Energie gilt:

$$F_i = E_i - TS_i,$$

also
$$(dE_i = T \ dS_i - p \ dV_i)$$

$$dF_i = -p \ dV_i - S_i \ dT$$

Damit erhalten wir

$$dF = d(\chi F_1 + (1 - \chi)F_2) + d(TS) = \chi dF_1 + (1 - \chi) dF_2 + (F_1 - F_2) d\chi + d(TS)$$

= $(F_1 - F_2) d\chi - (\chi S_1 + (1 - \chi)S_2 - \tilde{S}) dT - p(\chi dV_1 + (1 - \chi) dV_2) + T d\tilde{S}$
= $-S dT - p dV + (F_1 - F_2 + T\partial_{\chi}\tilde{S}) d\chi.$ (2.13)

Entsprechend gilt

$$df = d(\varrho_1 F_1 + \varrho_2 F_2) + d(T\tilde{s})$$

$$= \sum_i (\varrho_i \, dF_i + F_i \, d\varrho_i) + T \, d\tilde{s} + \tilde{s} \, dT$$

$$= -(s_1 + s_2 - \tilde{s}) \, dT + T \, d\tilde{s} - p(\varrho_1 \, dV_1 + \varrho_2 \, dV_2) + \sum_i F_i \, d\varrho_i$$

$$= -s \, dT + T \, d\tilde{s} + \frac{p}{\varrho} \, d\varrho + \sum_i F_i \, d\varrho_i.$$

Wegen

$$d\chi = d\left(\frac{\varrho_1}{\varrho}\right) = -\frac{\varrho_1}{\varrho^2} \, d\varrho + \frac{1}{\varrho} \, d\varrho_1$$

und einer entsprechenden Beziehung für $d(1-\chi)$ gilt

$$d\varrho_1 = \varrho \, d\chi + \chi \, d\varrho,$$

$$d\varrho_2 = -\varrho \, d\chi + (1 - \chi) \, d\varrho$$

Damit erhalten wir für die Berechnung von df:

$$df = \left[\chi F_1 + (1-\chi)F_2 + \frac{p}{\varrho}\right] d\varrho - s \, dT + \left[\varrho(F_1 - F_2) + T\partial_{\chi}\tilde{s}\right] d\chi = \left[\chi G_1 + (1-\chi)G_2\right] d\varrho - s \, dT + \left[\varrho(F_1 - F_2) + T\partial_{\chi}\tilde{s}\right] d\chi.$$
(2.14)

Für die Gibbsche Energie ${\cal G}$ haben wir:

$$G_i = E_i - TS_i + pV_i,$$

also

$$dG_i = -S_i \ dT + V_i \ dp.$$

Daher ist

$$dG = d(\chi G_1 + (1 - \chi)G_2) + d(T\tilde{S})$$

= $-(\chi S_1 + (1 - \chi)S_2 - \tilde{S}) dT + (\chi V_1 + (1 - \chi)V_2) dp + (G_1 - G_2 + T\partial_{\chi}\tilde{S}) d\chi$
= $-S dT + V dp + (G_1 - G_2 + T\partial_{\chi}\tilde{S}) d\chi$, (2.15)

$$dg = d(\varrho_1 G_1 + \varrho_2 G_2) + d(T\tilde{s}) = -(s_1 + s_2 - \tilde{s}) dT + (\varrho_1 V_1 + \varrho_2 V_2) dp + T d\tilde{s} + \sum_i G_i d\varrho_i = -s dT + dp + \varrho(G_1 - G_2) d\chi + (\chi G_1 + (1 - \chi)G_2) d\varrho + T d\tilde{s} = (\chi G_1 + (1 - \chi)G_2) d\varrho - s dT + dp + [\varrho(G_1 - G_2) + T\partial_{\chi}\tilde{s}] d\chi.$$
(2.16)

Die Beziehung (2.15) ist der Grund für die Einführung von \tilde{s} , da $W(\chi)$ die Entstehung zweier Phasen (wie für die Cahn-Hilliard-Gleichung bekannt) fördert, während $\frac{\delta}{2} |\nabla \chi|^2$ eine Oberflächenenergie darstellt und für den Diffusionsterm in (2.19) sorgt.

Um dies zu präzisieren, definieren wir die substantielle Ableitung durch

$$D_t \chi = \partial_t \chi + v \cdot \nabla \chi \tag{2.17}$$

und betrachten die Gleichung

$$D_t \chi = -\partial_\chi \left(\frac{G}{T}\right),\,$$

aus der mit (2.15) folgt:

$$\int_{\Omega} D_t \chi = \int_{\Omega} \left(-\frac{1}{T} \left(G_1 - G_2 \right) - W'(\chi) + \delta \Delta \chi \right).$$

Das gerade Erklärte zusammen mit der Definition

$$J(\varrho, \chi, T) = W(\chi) + \frac{1}{T} \left[\chi G_1(\varrho, T) + (1 - \chi) G_2(\varrho, T) \right]$$
(2.18)

der Nichtlinearität führt auf die Gleichung

$$\varepsilon \,\partial_t \chi = -\frac{\partial J}{\partial \chi} + \delta \Delta \chi - \varepsilon v \cdot \nabla \chi. \tag{2.19}$$

Diese Beziehung ist nur korrekt, wenn die Dichte ϱ konstant ist. Wie die Entropieabschätzung in 2.10 zeigt, muß für variables ϱ der Oberflächenterm $\delta \Delta \chi$ ersetzt werden durch $\frac{1}{\varrho} \operatorname{div}(\delta \varrho \nabla \chi)$. Dies führt auf (2.20d). Der geänderte Oberflächenterm ist eine Konsequenz des Ausdrucks $\frac{\delta \varrho}{2} |\nabla \chi|^2$ in der Mischungsentropie (man könnte alternativ auch $\frac{\delta \varrho^2}{2} |\nabla \chi|^2$ betrachten).

Für das Polynom (2.10) sollte auch mit Blick auf die logarithmische Natur der Entropien besser ein logarithmischer Ausdruck stehen, der exaktere Ergebnisse liefert. Den angegebenen polynomiellen Ausdruck kann man bei passendem Term $(G_1 - G_2)/T$ aus einer Taylorentwicklung des logarithmischen gewinnen. Er ist für die Numerik einfacher zu handhaben, da man nicht Gefahr läuft, durch einen zu groß gewählten Zeitschritt aus dem Definitionsbereich des Logarithmus zu wandern. Allerdings sichert nur der logarithmische Ausdruck die Existenz eines Maximumprinzips für den Parameter χ , siehe Bemerkung 2.1 unten.

2.4 Formulierung des Gleichungssystems

Nachdem die Notationen eingeführt sind, präsentieren wir nun das Gleichungssystem. Finde in Ω die Lösung $U = (\varrho, \varrho v, e, \chi)^t$ des Systems

$$\partial_t \varrho = -\operatorname{div}(\varrho v),$$
 (2.20a)

$$\partial_t(\varrho v) = \operatorname{div}(-\varrho v \otimes v - \delta \varrho T \nabla \chi \otimes \nabla \chi) + \operatorname{div}(\tau(v)) - \nabla p, \qquad (2.20b)$$

$$\partial_t e = \operatorname{div}(L\nabla T - (e - \Gamma + \delta \varrho T \nabla \chi \otimes \nabla \chi)v), \qquad (2.20c)$$

$$\varepsilon \partial_t \chi = -\frac{\partial J}{\partial \chi} + \frac{1}{\varrho} \operatorname{div}(\delta \varrho \,\nabla \chi) - \varepsilon v \cdot \nabla \chi$$
 (2.20d)

mit den Anfangswerten

$$(\varrho, \varrho v, e, \chi)(\cdot, 0) = (\varrho_0, \varrho_0 v_0, e_0, \chi_0)$$
 in Ω

und den Randwerten auf $\partial \Omega$

$$\chi = \chi_s,$$

 $v = v_s,$
 $T = T_s$

sowie auf R_I

$$\varrho = \varrho_I.$$

Dabei sind ρ_0 , v_0 , e_0 und χ_0 vorgegebene Funktionen für die Anfangswerte; χ_s , v_s , T_s und ρ_I gegebene Randwertfunktionen. Statt Dirichletrandwerten kann man auch Neumann-Randwerte für χ vorschreiben. Grundsätzlich sei $\rho_0 > 0$, $e_0 > 0$ in Ω , $\rho_I > 0$ auf R_I sowie $\nabla \chi \cdot \vec{n} = 0$ auf $\partial \Omega$. Die letzte Bedingung wird für die Entropieabschätzung sowie den Beweis der Eindeutigkeit in Kapitel 3 benötigt.

Das Gleichungssystem (2.20) bedarf noch einiger Erläuterungen.

(2.20a), (2.20b) und (2.20c) entsprechen dem System der Navier–Stokes–Gleichungen, allerdings mit einer geänderten Energie, die sich abhängig von χ aus den Einzelenergien der beiden Phasen zusammensetzt, wie oben erläutert.

Die Beziehung (2.20a) bedeutet die Massenerhaltung, (2.20b) die Impulserhaltung. Die Viskositäten μ und ν in der Defintion von τ beschreiben Größen des Zweiphasenfluids, können also als Funktionen von ρ , T und χ angesetzt werden. In dieser Arbeit seien sie d.E.h. Konstanten.

Die Divergenzterme ergeben sich, indem man die Randströme eines ausgewählten Testvolumens betrachtet.

Der Transportterm, der die Allen–Cahn–Gleichung modifiziert, begründet sich wie folgt. Falls für die Einzeldichten die (2.20a) entsprechende Erhaltungsgleichung

$$\partial_t \varrho_i = -\operatorname{div}(\varrho_i v)$$

gilt (also wenn die Phasen durch keinen Quellterm oder Oberflächenterm verändert werden), so hat man für den Transportterm nach (2.4), und da div $(\rho v) = \rho \operatorname{div} v + v \cdot \nabla \rho$:

$$\partial_t \chi = \partial_t \left(\frac{\varrho_1}{\varrho}\right) = \frac{\partial_t \varrho_1}{\varrho} - \frac{\varrho_1}{\varrho^2} \partial_t \varrho$$
$$= -\frac{\operatorname{div}(\varrho \chi v)}{\varrho} + \frac{\chi}{\varrho} \operatorname{div}(\varrho v)$$
$$= -v \cdot \nabla \chi.$$

In der 4. Gleichung (2.20d) haben wir den Diffusionsterm $\delta \Delta \chi$ ersetzt durch $\frac{1}{\rho} \operatorname{div}(\delta \rho \nabla \chi)$. Dies ist notwendig, da bei uns die Mischungsentropie den Anteil $\rho \frac{\delta}{2} |\nabla \chi|^2$ hat und χ eine Dichte (d.h. pro Masse gerechnet) ist. Wenn (wie in den Anwendungen der Allen–Cahn–Gleichung üblich) die Dichte eine Konstante ist, so fallen beide Ausdrücke selbstverständlich zusammen.

Die unterste Gleichung (2.20d) kann in eine andere Form gebracht werden. Multiplizieren wir (2.20d) mit ρ und beachten

$$\partial_t(\varrho\chi) = \varrho \,\partial_t\chi - \chi(v \cdot \nabla \varrho + \varrho \operatorname{div} v)$$

unter Verwendung der Kontinuitätsgleichung (2.20a), so erhalten wir

$$\varepsilon \left[\partial_t(\varrho\chi) + \operatorname{div}(\varrho\chi v)\right] = -\varrho \,\frac{\partial J}{\partial\chi} + \operatorname{div}(\delta\varrho\,\nabla\chi). \tag{2.20e}$$

Diese Gleichung ist eine weitere Begründung für den Transportterm in (2.20d). Wird Gleichung (2.20e) anstatt (2.20d) verwendet, so lautet der gesuchte Lösungsvektor des Systems natürlich $U = (\varrho, \varrho v, e, \varrho \chi)^t$ und man gibt entsprechend früher Anfangs- und Randwerte für $\varrho \chi$ vor.

Mit Beziehung (2.20e) läßt sich das System in Erhaltungsform schreiben. Wir ziehen daher diese Formulierung für die Numerik heran.

Die Impuls- und Energiegleichung der Navier-Stokes-Gleichungen lassen sich schreiben als

$$\partial_t(\varrho v) = \operatorname{div}(-\varrho v \otimes v + \Gamma), \partial_t e = \operatorname{div}(L\nabla T - (e - \Gamma)v).$$
(2.21)

In der Impulsgleichung (2.20b) sowie der Energiegleichung (2.20c) wurde Γ ersetzt durch

$$\Gamma := \Gamma - \delta \varrho T \, \nabla \chi \otimes \nabla \chi. \tag{2.22}$$

Dies führt auf die dort angegebenen zusätzlichen Terme. Diese ergaben sich zunächst bei der Entropieabschätzung des Abschnitts 2.10, die zunächst mit dem ursprünglichen Γ durchgeführt wurde. Die übrigbleibenden Terme legten dann eine Änderung von Γ in $\tilde{\Gamma}$ nahe.

Die neu eingeführten Terme sind aber auch physikalisch sinnvoll, wie wir in 2.5 zeigen werden.

Die angenommenen physikalischen Eigenschaften der Teilsysteme gehen bei der Wahl der Gibbschen Energiedichten G_1 und G_2 in der Definition von J in (2.18) ein. In Abschnitt 2.7 werden wir zwei Beispiele vorstellen. Wir geben schon hier die einfachste Möglichkeit für $\frac{\partial J}{\partial \chi}$ bei Wahl einer idealen Gasgleichung für beide Teilsysteme an:

$$\frac{\partial J}{\partial \chi} = \chi (1 - \chi)(1 - 2\chi) + (c_{V,1} - c_{V,2})(1 - \ln T) + S_{02} - S_{01}.$$
(2.23)

Wir haben $\partial_{\chi}J$ zur besseren Veranschaulichung als Funktion von T und nicht von e geschrieben.

In (2.20) sprechen wir von einem Wert p des Drucks. Zunächst jedoch besitzt das System für jede Phase eine Freie Energiedichte F_i und einen Partialdruck p_i , i = 1, 2, und es gilt die Beziehung

$$-p_i = \left(\frac{\partial F_i}{\partial \tilde{V}_i}\right)_T.$$
(2.24)

Für die sich ergebenden Phasendrücke fordern wir aber

$$p_1 = p_2 = p. (2.25)$$

Dies bedeutet, daß der Volumenausgleich zwischen den Phasen sofort erfolgt. (2.25) gilt zunächst, wenn beide Phasen in V vorhanden sind, d.h. $0 < \chi < 1$ gilt. Wie wir unten sehen werden, gilt die sich ergebende Beziehung dann aber auch für $\chi = 0$ und $\chi = 1$, was aus Stetigkeitsgründen klar ist.

Die Gleichheit der Partialdrücke benötigen wir in dieser Arbeit an zwei Stellen. Zwingend erforderlich wird (2.25) in Sektion 7, um eine Identität für p und T aus ρ , χ und e herzuleiten. In Abschnitt 2.10 werden wir sehen, daß das Vorhandensein zweier Druckfunktionen den Nachweis der Existenz eines Lyapunov–Funktionals unmöglich macht. Anschaulich bedeutet (2.25), daß die Grenzschicht zwischen den beiden Phasen lokal stabil ist.

Dieselben Annahmen wie beim Druck werden auch bei der Temperatur gemacht: allgemein könnten beide Phasen verschiedene Temperaturen T_i , i = 1, 2 annehmen. Wir fordern wieder, daß

$$T_1 = T_2 = T$$

gilt, also ein sofortiger Entropieausgleich zwischen den benachbarten Phasen stattfindet.

2.5 Physikalische Interpretation des Spannungstensors

Beziehung (2.22) zeigt, daß der Spanungstensor Γ der Navier–Stokes–Gleichungen in unserem Modell erweitert wird. Die formale mathematische Motivation hierfür liefert die Entropieabschätzung in Abschnitt 2.10. Hier führen wir den Nachweis, daß die Änderung physikalisch sinnvoll ist. Nach (2.13) gilt

$$p = \frac{d}{dV}[-F(V,T)]. \tag{2.26}$$

Der Druck ist der elastische Anteil des Spannungstensors Γ . Wir können daher auch sagen, daß durch Volumenänderungen der elastische Anteil von Γ festgelegt wird. Dies motiviert die Rechnungen dieses Abschnitts.

Wir zerlegen Γ und setzen

$$\Gamma = \Gamma_{\rm el} + \Gamma_{\rm inel}, \quad \Gamma_{\rm el} = -p \,\,\delta ij. \tag{2.27}$$

Wir betrachten das Funktional

$$\mathcal{F}(V,T,\chi) := \int_{\Omega} \varrho(x) \ F(\frac{1}{\varrho(x)}, T(x), \chi(x)) + \varrho(x)T(x) \ \frac{\delta}{2} |\nabla\chi(x)|^2 \ d\mathcal{L}^n(x).$$
(2.28)

Sei $\Phi : \Omega_0 \to \Omega$ die Transformation von Lagrange- zu Euler-Koordinaten, ϱ_0 sei die Dichte in Ω_0 . Für ein C^1 -Vektorfeld ξ bezeichne $\psi : \mathbb{R}^d \times [0,1] \to \mathbb{R}^d$ die Deformation in Richtung von ξ , d.h. $\psi(x,0) = x$ und $\partial_s \psi = \xi \circ \psi$, $0 \le s \le 1$. Um die Methode zu erklären beginnen wir mit dem zweiten Term in (2.28), bilden ihn auf Ω_0 ab und schreiben ihn um in der Form

$$\mathcal{F}_2 := \int_{\Omega_0} \left[\tilde{\varrho}_0 \tilde{T}_0 \ \frac{\delta}{2} |\nabla \tilde{\chi}|^2 \right] \circ \tilde{\Phi},$$

wobei $\tilde{\chi} = \chi \circ \psi^{-1}$, $\tilde{\varrho}_0 = \varrho_0 \circ \psi^{-1}$, $\tilde{T}_0 = T_0 \circ \psi^{-1}$ und $\tilde{\Phi} = \psi \circ \Phi$. Wegen $\partial_j \tilde{\chi} = \sum_{i=1}^d (\partial_i \chi) \circ \psi^{-1} \partial_j (\psi^{-1})_i$ gilt

$$\mathcal{F}_{2} = \int_{\Omega_{0}} \left[\tilde{\varrho_{0}} \tilde{T_{0}} \, \frac{\delta}{2} \sum_{i,j,k} \partial_{i} \chi \circ \psi^{-1} \partial_{j} (\psi^{-1})_{i} \, \partial_{k} \chi \circ \psi^{-1} \partial_{j} (\psi^{-1})_{k} \right] \circ \tilde{\Phi}$$

$$= \int_{\Omega_{0}} \left[\varrho_{0} T_{0} \, \frac{\delta}{2} \sum_{i,j,k} \partial_{i} \chi \, \partial_{j} (\psi^{-1})_{i} \circ \psi \, \partial_{j} (\psi^{-1})_{k} \circ \psi \, \partial_{k} \chi \right] \circ \Phi.$$

Von diesem Resultat erhalten wir als eine Anwendung der Produktregel

$$\partial_{s}\mathcal{F}_{2}\Big|_{s=0} = \int_{\Omega_{0}} \Big\{ \varrho_{0}T_{0} \frac{\delta}{2} \sum_{i,j,k} \partial_{i}\chi \partial_{k}\chi \Big[\partial_{s}(\partial_{j}(\psi^{-1})_{i} \circ \psi) \partial_{j}(\psi^{-1})_{k} \circ \psi \\ + \partial_{j}(\psi^{-1})_{i} \circ \psi \partial_{s}(\partial_{j}(\psi^{-1})_{k} \circ \psi) \Big] \Big\} \circ \Phi.$$

Eine kurze Rechnung zeigt $\partial_s [\partial_j(\psi^{-1})_i \circ \psi] \partial_j(\psi^{-1})_k \circ \psi = -\partial_i \xi_k$ und wir erhalten

$$\partial_{s} \mathcal{F}_{2}\Big|_{s=0} = -\int_{\Omega_{0}} \left[\varrho_{0} T_{0} \frac{\delta}{2} \sum_{i,k} \partial_{i} \chi(\partial_{i} \xi_{k} + \partial_{k} \xi_{i}) \right] \circ \Phi$$
$$= -\int_{\Omega_{0}} \rho_{0} T_{0} \, \delta \nabla \chi \otimes \nabla \chi : \nabla \xi \circ \Phi.$$

Auf die gleiche Weise behandeln wir den ersten Term in (2.28). Wegen (2.26) und (2.27) folgt (div ξ kommt von $\partial_s \det(D\psi)$):

$$\partial_s \mathcal{F}_1\Big|_{s=0} = -\int_{\Omega_0} \varrho_0 \ p \operatorname{div} \xi \circ \Phi = \int_{\Omega_0} \varrho_0 \ \Gamma_{el} : \nabla \xi \circ \Phi.$$

Indem wir die Ergebnisse kombinieren, erhalten wir $(\mathrm{Id}_{ij} = \delta_{ij})$

$$\partial_s \mathcal{F}\Big|_{s=0} = -\int_{\Omega_0} \varrho_0[p \operatorname{Id} + \delta T_0 \nabla \chi \otimes \nabla \chi] : \nabla \xi \circ \Phi.$$

Wir sehen also, daß die Änderung des Spannungstensors eine Konsequenz ist aus dem Abziehen des Termes $\frac{\delta}{2} |\nabla \chi|^2$ von der Entropiedichte S.

2.6 Typ des Gleichungssystems

Wir bestimmen den mathematischen Typ des gerade eingeführten Gleichungssystems. Dazu schreiben wir (2.20) in ein System 1. Ordnung um und orientieren uns an [10].

Wir beginnen zunächst mit dem System, welches sich aus (2.20) durch Wegfall der 2. Ableitungsterme ergibt, d.h. es handelt sich um die Eulergleichungen zuzüglich der modifizierten Allen– Cahn–Gleichung ohne den Oberflächenterm div $(\delta \rho \nabla \chi)$. Der Grund für die Betrachtung dieses Systems ist der folgende: das von uns verwendete numerische Verfahren, welches es analog auch für die Navier–Stokes–Gleichungen gibt, schreibt die Terme der 2. Ableitungen als Quellterm auf die rechte Seite des Gleichungssystems und bestimmt die numerischen Flüsse aus dem verbleibenden System 1. Ordnung (für die Navier–Stokes–Gleichungen sind dies die Euler–Gleichungen der Gasdynamik). Dies geschieht vor dem Hintergrund, daß für große Reynoldszahlen die viskosen Anteile einen verschwindenden Beitrag liefern. Dies wird in Kapitel 4 genauer erläutert.

Nachfolgend gehen wir davon aus, daß der Druck der Beziehung

$$p = (\gamma - 1)e_{\text{pot}} \tag{2.29}$$

genügt, siehe dazu Abschnitt 2.7. Ohne Einschränkung sei in diesem Abschnitt $\varepsilon=1$ und γ konstant.

In 2 Raumdimensionen läßt sich das angesprochene System als

$$\partial_t \begin{pmatrix} \varrho \\ \varrho v_1 \\ \varrho v_2 \\ e \\ \varrho \chi \end{pmatrix} + \partial_x \begin{pmatrix} \varrho v_1 \\ \varrho v_1^2 + (\gamma - 1)e_{\text{pot}} \\ \varrho v_1 v_2 \\ \gamma e v_1 - (\gamma - 1)\frac{\varrho}{2} (v_1^3 + v_1 v_2^2) \\ \varrho \chi v_1 \end{pmatrix} + \partial_y \begin{pmatrix} \varrho v_2 \\ \varrho v_1 v_2 \\ \varrho v_2^2 + (\gamma - 1)e_{\text{pot}} \\ \gamma e v_2 - (\gamma - 1)\frac{\varrho}{2} (v_1^2 v_2 + v_2^3) \\ \varrho \chi v_2 \end{pmatrix} = Q$$

schreiben mit

$$Q = (0, 0, 0, 0, -\varrho \frac{\partial J}{\partial \chi})^T.$$

Dies läßt sich in Matrixform umschreiben zu

$$A_1 \partial_t U + A_2 \partial_x U + A_3 \partial_y U = Q, \qquad (2.30)$$

wobei

$$U = (\varrho, \varrho v_1, \varrho v_2, e, \varrho \chi)^T$$

und (siehe (4.12) und (4.13))

$$A_1 = Id,$$

$$A_{2} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ -v_{1}^{2} + (\gamma - 1)\frac{|v|^{2}}{2} & (3 - \gamma)v_{1} & -(\gamma - 1)v_{2} & \gamma - 1 & 0 \\ -v_{1}v_{2} & v_{2} & v_{1} & 0 & 0 \\ -\gamma\frac{v_{1}e}{\varrho} + (\gamma - 1)(v_{1}^{3} + v_{1}v_{2}^{2}) & \gamma\frac{e}{\varrho} - (\gamma - 1)\frac{3v_{1}^{2} + v_{2}^{2}}{2} & -(\gamma - 1)v_{1}v_{2} & \gamma v_{1} & 0 \\ -v_{1}\chi & \chi & 0 & 0 & v_{1} \end{pmatrix},$$

$$A_{3} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ -v_{1}v_{2} & v_{2} & v_{1} & 0 & 0 \\ -v_{2}^{2} + (\gamma - 1)\frac{|v|^{2}}{2} & -(\gamma - 1)v_{1} & (3 - \gamma)v_{2} & \gamma - 1 & 0 \\ -\gamma\frac{v_{2}e}{\varrho} + (\gamma - 1)(v_{2}^{3} + v_{1}^{2}v_{2}) & -(\gamma - 1)v_{1}v_{2} & \gamma\frac{e}{\varrho} - (\gamma - 1)\frac{3v_{2}^{2} + v_{1}^{2}}{2} & \gamma v_{2} & 0 \\ -v_{2}\chi & 0 & \chi & 0 & v_{2} \end{pmatrix}.$$

Zur Motivation der folgenden Bedingung betrachten wir eine einfache Wellenfront, die sich in der Raum-Zeit-Ebene in Richtung des Vektors $\vec{n} = (n_1, n_2, n_3)^T$ bewegt. Diese ist von der Form

$$U = \hat{U}e^{i(n_1t + n_2x + n_3y)}.$$
(2.31)

Dabei ist $i^2 = -1$. Der Vektor \vec{n} ist gleichzeitig Normalenvektor der Wellenfrontoberfläche. Wir betrachten den algebraischen Kegel

$$C(\vec{n}) := \det \left(n_1 A_1 + n_2 A_2 + n_3 A_3 \right)$$

(2.30) hat Lösungen der Form (2.31), falls $C(\vec{n}) = 0$ gilt. Das System ist hyperbolisch, falls $C(\vec{n}) = 0$ genauso viele reelle Lösungen \vec{n} besitzt wie Unbekannte im System vorliegen, hier also 5, und wenn die zugehörigen Lösungen des homogenen Systems

$$PU := (n_1A_1 + n_2A_2 + n_3A_3)U = 0$$

eine linear unabhängige Menge bilden. Sind einige Lösungen reell, andere komplex, so handelt es sich um ein *hybrides* System. Sind alle Wurzeln komplex, d.h. gibt es keine einfachen Wellenfronten, so nennen wir das System *elliptisch*. Besitzt die Matrix P keinen vollen Rang, so heißt das System *parabolisch*. In diesem Fall zeigen einige Wellenfronten in dieselbe Richtung.

Die Hyperbolizität der reduzierten Gleichungen fällt bei anderer Zielsetzung in Kapitel 4 als Nebenprodukt mit ab. Wegen $A_1 = \text{Id}$ hat das reduzierte System nämlich eine zeitartige Variable und die Lösung von det P = 0 ist äquivalent zur Bestimmung des Eigenwertproblems $(n_1 = -\lambda)$

$$\det (K - \lambda Id) = 0, \ K = n_2 A_2 + n_3 A_3.$$

Zur Notation in Kapitel 4 sei bemerkt, daß $\partial_x f_1(U) = Df_1(U) \partial_x U$ die Beziehung $A_2 = Df_1(U)$ und analog $A_3 = Df_2(U)$ bedingt. In Kapitel 4 wird gezeigt, daß sich mit $c^2 = \frac{\gamma p}{\varrho}$ für das Quadrat der Schallgeschwindigkeit 5 reelle charakteristische Normalen ergeben, die den Bedingungen $n_1 = -(n_2v_1 + n_3v_2)$ (3 fache Charakteristik), $n_1 = -n_2v_1 - n_3v_2 - c$ und $n_1 = -n_2v_1 - n_3v_2 + c$ genügen. In Kapitel 4 werden auch die zugehörigen Eigenvektoren berechnet, die das System diagonalisieren, siehe (4.15), so daß auf diesem Wege das reduzierte System als hyperbolisch nachgewiesen ist.

Wir bestimmen nun den Typ des vollen Gleichungssystems. Dazu schreiben wir es in primitiven Variablen und untersuchen es in einer Raumdimension. Andernfalls macht die Zahl der auftretenden Variablen im umgeschriebenen System 1. Ordnung eine exakte Analyse äußerst langwierig. Wir nehmen an, daß $c_V := c_{V,1} = c_{V,2}$, $c_p := c_{p,1} = c_{p,2}$ und *L* Konstanten sind, für den Druck (2.29) gelte und für die Temperatur (siehe (2.58))

$$T = \frac{e_{\rm pot}}{c_V \varrho}.$$

Das System 1. Ordnung besitzt die 8 Unbekannten ρ , v, e, χ , $A := \partial_x \rho$, $B := \partial_x v$, $C := \partial_x e$, $D := \partial_x \chi$.

Das (2.20) entsprechende System 1. Ordnung lautet dann:

$$\begin{split} \partial_t \varrho + v \, \partial_x \varrho + \varrho \, \partial_x v &= 0, \\ \partial_t v + \left[\frac{v^2}{2\varrho} \left(1 - \gamma - \delta c_V D^2 \right) \right] \, \partial_x \varrho + \left[\left((2 - \gamma) - \delta c_V D^2 \right) v \right] \, \partial_x v + \frac{\gamma - 1 + \delta c_V D^2}{\varrho} \, \partial_x e \\ &- \frac{2\mu + \nu}{\varrho} \, \partial_x B + \frac{2c_V \delta}{\varrho} \, e_{\text{pot}} D \, \partial_x D = 0, \\ \partial_t e + \left[\frac{2L}{c_V \varrho^2} C - \frac{2Le}{c_V \varrho^3} A + (1 - \gamma) \frac{v^3}{2} \right] \, \partial_x \varrho + \left[\left(\frac{L}{c_V} - (2\mu + \nu) \right) B + \gamma e + (1 - \gamma) \frac{3}{2} \varrho v^2 \right] \, \partial_x v \\ &+ \gamma v \, \partial_x e + \left[c_V \delta D (e_{\text{pot}} B + v \partial_x e_{\text{pot}}) \right] \, \partial_x \chi + \frac{L}{c_V} \frac{e}{\varrho^2} \, \partial_x A + \left[\frac{L}{c_V} v - (2\mu + \nu) v \right] \, \partial_x B - \frac{L}{c_V \varrho} \, \partial_x C \\ &+ 2c_V \delta v e_{\text{pot}} D \, \partial_x D = 0, \\ \partial_t \chi + \left[v - \frac{\delta}{\varrho} A \right] \, \partial_x \chi - \delta \, \partial_x D = -\frac{\partial J}{\partial \chi}, \\ \partial_t A + B \, \partial_x \varrho + A \, \partial_x v + v \, \partial_x A + \varrho \, \partial_x B = 0, \\ \partial_x v = B, \\ \partial_x e = C, \\ \partial_x \chi = D. \end{split}$$

Wie oben schreiben wir dieses System in der quasilinearen Form $(A_1, A_2 \text{ und } Q \text{ hängen nur von } x, t \text{ und den Einträgen von } U \text{ ab, nicht aber von Ableitungen von } U)$

$$A_1 \,\partial_t U + A_2 \,\partial_x U = Q,$$

mit dem 8-komponentigen Lösungsvektor

$$U = (\varrho, v, e, \chi, A, B, C, D)^T$$

und dem Quellterm

$$Q = (0, 0, 0, -\frac{\partial J}{\partial \chi}, 0, B, C, D)^T.$$

Die zugehörigen 8 x 8–Matrizen A_1 und A_2 geben wir wegen ihrer enormen Größe nicht an. Sie ergeben sich aber kanonisch aus den oben angegebenen Beziehungen.

Wie im ersten Teil dieses Abschnitts bestimmt sich der Typ des untersuchten Gleichungssystems aus der Analyse der Charakteristiken, d.h. der Untersuchung der Bedingung

$$\det P := \det (n_1 A_1 + n_2 A_2) = 0.$$

Hier ist die Situation ziemlich klar. Die Matrix P hat keinen vollen Rang, wie schon das obige Gleichungssystem erkennen läßt, da B, C und D keine Ableitungen nach t besitzen. (2.20) stellt somit in einer Raumdimension ein parabolisches System dar.

2.7 Zustandsgleichungen

Für die Navier–Stokes–Gleichungen gibt es zwei unabhängige thermodynamische Größen, z.B. *p* und *T*. Aus der Gibbschen Phasenregel folgt, daß das spezielle System Wasser und Dampf *im Gleichgewicht* sogar nur den Freiheitsgrad $\mathcal{F} = 1$, also eine unabhängige thermodynamische Größe, besitzt. Dies hängt von der Zahl der Komponenten der beiden Phasen ab (Phasen aus einer Komponente haben fast immer $\mathcal{F} = 2$). Nachfolgend gelte für das Gesamtsystem $\mathcal{F} \leq 2$. Dann gibt es eine Beziehung zwischen *p*, *T* und *e*, die nachfolgend hergeleitet wird.

Zunächst leiten wir eine fundamentale Beziehung zwischen Druck und Energie her, die innerhalb der Phasen gilt. Da wir annehmen, daß χ nur die Umwandlung bzw. die Massenanteile der Teilsysteme steuert und diese im übrigen unabhängig von χ sind, gilt $dE_i = T dS_i - p dV_i$. Es folgt dann:

$$dS_i = \left(\frac{\partial S_i}{\partial T}\right)_{V_i} dT + \left(\frac{\partial S_i}{\partial V_i}\right)_T dV_i$$

= $\frac{1}{T} \left[\left(\frac{\partial E_i}{\partial T}\right)_{V_i} dT + \left(\frac{\partial E_i}{\partial V_i}\right)_T dV_i + p dV_i \right].$

Ein Vergleich der Koeffizienten ergibt:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial S_i}{\partial T} \end{pmatrix}_{V_i} = \frac{1}{T} \begin{pmatrix} \frac{\partial E_i}{\partial T} \end{pmatrix}_{V_i}, \begin{pmatrix} \frac{\partial S_i}{\partial V_i} \end{pmatrix}_T = \frac{1}{T} \left[\begin{pmatrix} \frac{\partial E_i}{\partial V_i} \end{pmatrix}_T + p \right].$$
 (2.32)

Differenziert man (2.32) nach T, so erhält man

$$0 = \frac{1}{T} \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_{V_i} - \frac{1}{T^2} \left[\left(\frac{\partial E_i}{\partial V_i}\right)_T + p \right]$$
$$\left(\frac{\partial E_i}{\partial V_i}\right)_T = T^2 \left(\frac{\partial \left(\frac{p}{T}\right)}{\partial T}\right)_{V_i}.$$
(2.33)

bzw.

Setzt man (2.32) in (2.33) ein, so folgt noch

$$\left(\frac{\partial S_i}{\partial V_i}\right)_T = \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_{V_i}$$

Aus dem 1. Hauptsatz der Thermodynamik ergibt sich:

$$\begin{split} \delta Q_i &= dE_i + p \ dV_i \\ &= \underbrace{\left(\frac{\partial E_i}{\partial T}\right)_{V_i}}_{=c_{V,i}} dT + \left[\left(\frac{\partial E_i}{\partial V_i}\right)_T + p\right] \ dV_i. \end{split}$$

Wegen

$$dV_i = \left(\frac{\partial V_i}{\partial T}\right)_p \, dT$$

folgt

$$c_{p,i} = \left(\frac{\delta Q_i}{dT}\right)_p = c_{V,i} + \left[\left(\frac{\partial E_i}{\partial V_i}\right)_T + p\right] \left(\frac{\partial V_i}{\partial T}\right)_p.$$
(2.34)

Nach diesen Vorbereitungen leiten wir nun in Kürze Beziehungen für ein ideales Gas und Vander-Waals-Gase her. Die gewonnenen Aussagen verwenden wir als mögliche Charakterisierungen der beiden Phasen unseres Systems.

Neben diesen beiden Ansätzen wird zur Beschreibung von Fluiden in der Literatur auch die Beziehung von Dieterici

$$p(V_i - n_i\beta_i) \exp\left(\frac{n_i\alpha_i}{RTV_i}\right) = n_iRT$$

oder die Redlich-Kwong-Gleichung

$$p(V_{i} - n_{i}b_{i}) + \left(\frac{n_{i}a_{i}(V_{i} - n_{i}b_{i})}{T^{\frac{1}{2}}V_{i}(V_{i} + n_{i}b_{i})}\right) = n_{i}RT$$

verwendet (α_i , β_i bzw. a_i , b_i bezeichnen vorgegebene Konstanten). Diese beiden Ansätze sind komplizierter als die Gleichung von van-der-Waals oder die ideale Gasgleichung, leisten aber in der Praxis wesentlich genauere Vorhersagen der gemessenen Werte.

2.7.1 Ideales Gas

Die Aussagen dieses und des folgenden Unterabschnitts finden sich in vielen Lehrbüchern. In beiden Sektionen betrachten wir n_i Mol der i-ten Phase in einem Volumen V_i . Bezeichnet wie schon früher V_i das spezifische Volumen, so ist $n_i = 1$.

Wir beginnen mit dem idealen Gas. Mit der Gaskonstante R genügt es der Zustandsgleichung

$$pV_i = n_i RT. (2.35)$$

In der Natur gibt es keine idealen Gase. So müßte für $T = 0^{0}$ K das Volumen des Gases Null sein. Gleichung (2.35) gilt aber in guter Näherung für Gase (Ausnahme H_{2}) in einem "normalen" Temperaturbereich.

Die Bezeichnung "ideales Gas" ist historisch bedingt. (2.35) wird als Näherung nicht nur für Gase, sondern auch für Flüssigkeiten und selten sogar (mit Einschränkungen) für Feststoffe verwendet. Beziehung (2.35) wurde zunächst bei Gasen beobachtet und liefert dort die genauesten Vorhersagen, daher die Namensgebung.

Gleiches gilt für Van-der-Waals-Gase (siehe den nächsten Abschnitt). Die Beziehung (2.42) hat für gegebene p und T eine bis drei verschiedene Lösungen V_i , die sich in ihrem Aggregatzustand unterscheiden.

Setzt man die Zustandsgleichung (2.35) in (2.33) ein, so erhält man für ideale Gase die Unabhängigkeit der inneren Energie von der Dichte:

$$\left(\frac{\partial E_i}{\partial V_i}\right)_T = 0. \tag{2.36}$$

Dieses Ergebnis ist klar, da bei einem idealen Gas die Abstände zwischen den Molekülen als gleich angenommen werden.

Mit (2.36) und der Definition von $c_{V,i}$ gilt für ein ideales Gas

$$dE_i = \left(\frac{\partial E_i}{\partial V_i}\right)_T \, dV_i + \left(\frac{\partial E_i}{\partial T}\right)_{V_i} \, dT = c_{V,i} \, dT.$$
(2.37)

Gehen wir davon aus, daß $c_{V,i}$ nicht von T abhängt, was für $T < 1000^{0}$ K praktisch immer der Fall ist, so folgt eine explizite Darstellung für die innere Energie im Falle des idealen Gases: (aus der statistischen Gasdynamik folgt, daß die Integrationskonstante Null ist)

$$E_i = c_{V,i}T. (2.38)$$

Für ein ideales Gas vereinfacht sich (2.34) wegen (2.36) und $\frac{\partial V_i}{\partial T} = \frac{n_i R}{p}$ nach (2.35) zu

$$c_{p,i} - c_{V,i} = n_i R. (2.39)$$

Damit ergibt sich als noch fehlende Beziehung

$$p = \frac{n_i RT}{V_i} = \frac{n_i R}{c_{V,i}} \frac{E_i}{V_i} = \frac{n_i R}{c_{V,i}} e_{\text{pot,i}}.$$

Mit (2.39) erhalten wir somit die bei Euler– und Navier–Stokes–Gleichungen häufig gebrauchten Beziehungen

$$p = (\gamma - 1)e_{\text{pot,i}},$$

$$T = \frac{pV_i}{(\gamma - 1)c_{V,i}}.$$

Für die Entropie haben wir nach (2.35) und (2.37):

$$T dS_i = dE_i + p dV_i$$

= $c_{V,i} dT + \frac{n_i RT}{V_i} dV_i,$

also

$$dS_i = c_{V,i} \frac{dT}{T} + n_i R \frac{dV_i}{V_i}.$$

Durch Aufintegrieren über den Temperaturbereich T_0 bis T und einen Volumenbereich $V_{0,i}$ bis V_i folgt:

$$S_i = S_{0,i} + c_{V,i} \ln T + n_i R \ln V_i.$$

Die Additionskonstante $S_{0,i}$ bezeichnet dabei die Entropie des Referenzsystems mit Temperatur T_0 und Volumen $V_{0,i}$ zu Beginn der Integration.

Damit und mit (2.38) ergibt sich unmittelbar:

$$F_i = E_i - TS_i = c_{V,i}T(1 - \ln T) - n_i RT \ln V_i - TS_{0,i}, \qquad (2.40)$$

$$G_i = F_i + pV_i = F_i + n_i RT = c_{V,i} T \left(1 - \ln T\right) + n_i RT (1 - \ln V_i) - TS_{0,i}.$$
 (2.41)

2.7.2 Van-der-Waals-Gase

Die ideale Gasgleichung ergibt für kleine Temperaturen unsinnige Werte, da $V_i = 0$ aus T = 0 folgt. Bei Van-der-Waals-Gasen wird (2.35) ersetzt durch die die tatsächlichen Verhältnisse besser beschreibende Gleichung

$$\left(p + \frac{n_i^2 a_i}{V_i^2}\right) \left(V_i - n_i b_i\right) = n_i RT.$$
(2.42)

 a_i und b_i sind kleine, von Phase *i* abhängende Konstanten. Der Term $\frac{n_i^2 a_i}{V_i^2}$ ist also gegenüber (2.35) ein Druckkorrekturterm, $-n_i b_i$ entsprechend eine Volumenkorrektur. Für das Volumen V_i gilt $V_i \ge n_i b_i$, $V_i = n_i b_i$ nur für T = 0.

Auf die gleiche Weise wie im Falle des idealen Gases zeigt man die Energiegleichung. Es gilt unter Verwendung von (2.33):

$$\left(\frac{\partial E_i}{\partial V_i}\right)_T = \frac{n_i^2 a_i}{V_i^2}$$

und Aufintegrieren liefert wie oben

$$E_i = c_{V,i}T - \frac{n_i^2 a_i}{V_i}.$$

Aus (2.42) ergibt sich unmittelbar für den Druck

$$p = \frac{n_i RT}{V_i - n_i b_i} - \frac{n_i^2 a_i}{V_i^2}.$$

Schließlich gilt nach (2.34):

$$c_{p,i} - c_{V,i} = \frac{n_i RT}{V_i - n_i b_i} \left(\frac{\partial V_i}{\partial T}\right)_p.$$

Zur Berechnung von $\left(\frac{\partial V_i}{\partial T}\right)_p$ differenzieren wir (2.42) nach T. Wir erhalten

$$\left(\frac{\partial V_i}{\partial T}\right)_p = \frac{n_i R}{\frac{-2n_i^2 a_i}{V_i^3} (V_i - n_i b_i) + \frac{n_i RT}{V_i - n_i b_i}}$$

und daher

$$c_{p,i} - c_{V,i} = \frac{n_i R}{1 - \frac{2n_i a_i}{RTV^3} (V_i - n_i b_i)^2}.$$
(2.43)

Für die thermodynamischen Potentiale haben wir

$$T dS_i = \left(\frac{\partial E_i}{\partial V_i}\right)_T dV_i + \left(\frac{\partial E_i}{\partial T}\right)_{V_i} dT + p dV_i$$
$$= \frac{n_i RT}{V_i - n_i b_i} dV + c_{V,i} dT,$$

also, mit einer Integrationskonstante $S_{0,i}$:

$$S_i = S_{0,i} + c_{V,i} \ln T + n_i R \ln(V_i - n_i b_i)$$

Für die abgeleiteten Potentiale gilt:

$$F_{i} = E_{i} - TS_{i} = c_{V,i}T(1 - \ln T) - \frac{n_{i}^{2}a_{i}}{V_{i}} - n_{i}RT \ln(V_{i} - n_{i}b_{i}) - TS_{0_{i}}, \qquad (2.44)$$

$$G_{i} = F_{i} + pV_{i}$$

$$= c_{V,i}T(1-\ln T) + n_i RT \left(\frac{V_i}{V_i - n_i b_i} - \ln(V_i - n_i b_i)\right) - \frac{2n_i^2 a_i}{V_i} - TS_{0,i}.$$
 (2.45)

2.7.3 Auswertung der Druckbedingung

Bevor wir Darstellungen für T und p herleiten können, müssen wir \tilde{V}_1 , \tilde{V}_2 bestimmen, die wie in Abschnitt 2.2 das tatsächlich von der i-ten Phase in V eingenommene Volumen bezeichnen, im Unterschied zum spezifischen Volumen V_i . Die Berechnung erfolgt mit (2.24) und (2.25). Zunächst sei $0 < \chi < 1$, d.h. beide Phasen seien in V vertreten. \tilde{V}_1 , \tilde{V}_2 sind dann Lösung des Gleichungssystems

$$\frac{\partial F_1}{\partial \tilde{V}_1}(\tilde{V}_1, T) = \frac{\partial F_2}{\partial \tilde{V}_2}(\tilde{V}_2, T), \qquad (2.46)$$

$$\tilde{V}_1 + \tilde{V}_2 = V = \frac{1}{\varrho}.$$
(2.47)

 F_1 und F_2 müssen vorher entsprechend den angenommenen physikalischen Eigenschaften ausgewählt werden. Sie sind also bekannt.

Die Lösung des Gleichungssystems (2.46), (2.47) ist i.a. nicht eindeutig.

Als ersten naheliegenden und natürlichen Fall betrachten wir die Situation, daß beide Phasen durch eine ideale Gasgleichung beschrieben werden. Wir ersetzen den Massenanteil n_i der i-ten Phase durch χ_i . Beziehung (2.46) geht nun über in

$$\frac{\chi}{\tilde{V}_1} = \frac{1-\chi}{\tilde{V}_2}$$

mit dem eindeutigen Lösungspaar

$$\tilde{V}_1 = \frac{\chi}{\varrho}, \quad \tilde{V}_2 = \frac{1-\chi}{\varrho}.$$
(2.48)

A posteriori können wir uns von der Voraussetzung $0 < \chi < 1$ befreien: für $\chi = 0$ ist nur die 2. Phase in V vertreten, also $\tilde{V}_1 = 0$ und $\tilde{V}_2 = V_2 = V = \frac{1}{\varrho}$. Entsprechendes gilt für $\chi = 1$. Beziehung (2.48) gilt also für $0 \le \chi \le 1$. Wir hätten sie auch weniger präzise direkt aus

$$\chi \frac{\partial F_1}{\partial V_1} = (1 - \chi) \frac{\partial F_2}{V_2}$$

herleiten können.

Als nächstallgemeineren Fall untersuchen wir nun die Situation, in der die Gasphase durch eine Van-der-Waals-Beziehung (mit a = 0 und $b \neq 0$) und die flüssige Phase wie bisher durch eine ideale Gasgleichung festgelegt wird.

(2.46) und (2.47) ergeben dann:

$$\chi \ \frac{RT}{\tilde{V}_1} = (1-\chi) \ \frac{RT\varrho}{1-\varrho\tilde{V}_1 - (1-\chi)b\varrho},$$

woraus sich die Lösungen

$$\tilde{V}_1 = \frac{\chi}{\varrho} (1 - b\varrho(1 - \chi)), \quad \tilde{V}_2 = \frac{1 - \chi}{\varrho} (1 + b\varrho\chi)$$
(2.49)

ergeben, wieder gültig für $0 \le \chi \le 1$.

Noch allgemeinere Fälle werden in dieser Arbeit nicht untersucht. Die realistischsten Ergebnisse würden wir mit Freien Energietermen erhalten, die aus physikalischen Meßreihen abhängig vom untersuchten Problem gewonnen wurden. Bei zwei Van-der-Waals-Systemen, bei denen jeweils $a_i = 0$ und $b_i \neq 0$ gesetzt ist, ist die Situation nicht wirklich allgemeiner als bei der gerade oben beschriebenen. Es wird lediglich b durch die Differenz $b_1 - b_2$ ersetzt. Wählt man $a_i \neq 0$, so ist ein quadratisches Gleichungssystem zu lösen, das i.a. mehrere Lösungen besitzt. Hier muß dann eine Lösung, z.B. über den Aggregatzustand, ausgewählt werden.

2.7.4 Folgerungen für das Gesamtsystem

Nun ist alles bereit für mögliche Zustandsgleichungen für unser System (2.20). Das allgemeine Vorgehen wurde in Unterabschnitt 3 erklärt, hier wählen wir nun die konkreten Beziehungen aus.

1. Fall: Ideale Gasgleichung für beide Phasensysteme:

In

$$e_{\text{pot}} = \varrho_1 E_{\text{pot}}^1 + \varrho_2 E_{\text{pot}}^2$$
$$= \chi \varrho E_{\text{pot}}^1 + (1 - \chi) \varrho E_{\text{pot}}^2$$

setzen wir (2.38) ein. Mit der Abkürzung

$$c_{V,\chi} := \chi \ c_{V,1} + (1 - \chi) \ c_{V,2} \tag{2.50}$$

liefert dies:

$$e_{\rm pot} = \rho \left(\chi \ c_{V,1}T + (1 - \chi) \ c_{V,2}T \right) = c_{V,\chi} \ \rho T.$$
(2.51)

Für den Druck gilt:

$$p = \frac{\chi RT}{\tilde{V}_1} = \frac{(1-\chi)RT}{\tilde{V}_2} = \varrho RT = \frac{R}{c_{V,\chi}} e_{\text{pot}}$$

Wir setzen noch (nach (2.39))

$$\gamma_i := \frac{R}{c_{V,i}} + 1, \quad i = 1, 2.$$
 (2.52)

Wir erhalten als gesuchte Zustandsgleichungen:

$$p = \frac{(\gamma_1 - 1)(\gamma_2 - 1)}{\chi \gamma_2 + (1 - \chi) \gamma_1 - 1} e_{\text{pot}}, \qquad (2.53)$$

$$T = \frac{e_{\text{pot}}}{\varrho \, c_{V,\chi}}.\tag{2.54}$$

An einigen Stellen wie bei der Bestimmung des Typs des Gleichungssystems, wo eine solche Vereinfachung ohne Nachteil möglich ist, nehmen wir vereinfachend an, daß die Wärmekapazität beider Phasen gleich ist:

$$c_{V,1} = c_{V,2} =: c_V, \tag{2.55}$$

woraus sich kanonisch ergibt:

$$e_{\rm pot} = c_V \varrho T, \tag{2.56}$$

$$p = (\gamma - 1)e_{\text{pot}}, \qquad (2.57)$$

$$T = \frac{e_{\text{pot}}}{c_V \rho}.$$
 (2.58)

Hier sehen wir auch einen entscheidenden Vorteil, der aus dieser Vereinfachung und der Wahl einer idealen Gasgleichung für beide Phasen resultiert. Beziehung (2.57) ist dieselbe wie für die Navier–Stokes–Gleichungen und sichert die Konsistenz des von uns verwendeten numerischen Verfahrens.

Zur Illustration berechnen wir die Änderung der Entropie *s* unter den Annahmen $\tilde{s} = 0$, (2.55), (2.56) und für $v \equiv 0$. Für $S_{01} = S_{02} = 0$ gilt dann:

$$s = \rho S = \rho \left(\chi S_1 + (1 - \chi) S_2\right)$$
$$= \rho c_V \ln T - R \ln \rho.$$

Wegen v = 0 ist $\partial_t \rho = 0$ und wir erhalten für konstantes L und $\nabla T = 0$ auf $\partial \Omega$:

$$\int_{\Omega} \partial_t s = \int_{\Omega} c_V \varrho \frac{1}{T} \partial_t T = \int_{\Omega} \frac{1}{T} \partial_t e = \int_{\Omega} \frac{1}{T} \operatorname{div}(L\nabla T)$$
$$= \int_{\Omega} L \frac{|\nabla T|^2}{|T|^2} \ge 0.$$
(2.59)

Dies ist ein Spezialfall der später hergeleiteten Beziehung (2.81) (hier tritt kein Term $(\partial_t \chi)^2$ auf, da wir den unphysikalischen Fall $G_1 = G_2$ betrachtet haben). Mehr zur Abschätzung der Entropieänderung in Abschnitt 2.10.

Nunmehr sind wir auch in der Lage, die noch ausstehende Berechnung des Potentials J (siehe Formel (2.23)) nachzureichen.

Wir gehen von Beziehung (2.18) aus. J setzt sich also zusammen aus dem Polynom ("Mischungsentropie") $W(\chi)$ (siehe (2.10)), und einem Term mit der Gibbschen Energie des Gesamtsystems, d.h.

$$J(\varrho, \chi, T) = \frac{1}{2} (\chi(1-\chi))^2 + \frac{1}{T} (\chi G_1(\varrho, T) + (1-\chi)G_2(\varrho, T)).$$

Die Beziehungen aus 2.7.1 liefern die angegebene Gleichung (2.23), wobei S_{0i} , i = 1, 2 wie oben Integrationskonstanten bezeichnen:

$$\frac{\partial J}{\partial \chi} = \chi (1 - \chi)(1 - 2\chi) + (c_{V,1} - c_{V,2})(1 - \ln T) + [S_{02} - S_{01}].$$

Bemerkung 2.1:

Für die Gleichung des Phasenparameters χ gilt ein Maximumprinzip, genauer $0 < \chi(x,t) < 1$ für $x \in \Omega$ und t > 0 beliebig, falls für die Mischungsentropie der logarithmische Ausdruck

$$\tilde{W}(\chi) := \chi \ln \chi + (1 - \chi) \ln(1 - \chi) - \frac{1}{2}\chi^2$$
(2.60)

verwendet wird. Bei Verwendung des Polynoms (2.10) ist das Maximumprinzip jedoch nicht gültig.

Beweis: Wir verwenden Ergebnisse aus [16], Theorem 12, Kapitel 3. Wir definieren den Operator

$$L[\chi] := -\varepsilon \left(\partial_t \chi + v \cdot \nabla \chi\right) + \frac{1}{\varrho} \operatorname{div}(\delta \varrho \, \nabla \chi) - \frac{\partial J}{\partial \chi},$$

mit dem sich (2.20d) schreiben läßt als $L[\chi] = 0$.

Damit das Maximumprinzip erfüllt ist, muß $L[1] \leq 0 \leq L[0]$ gelten. Für den logarithmischen Ausdruck gilt (zu lesen als Beziehung im Grenzwert):

$$L[1] = -\ln\left(\frac{\chi}{1-\chi}\right)\Big|_{\chi=1} + 1 + \left[(c_{V,2} - c_{V,1})\left(1 - \ln T\right) + S_{01} - S_{02}\right] = -\infty,$$

$$L[0] = -\ln\left(\frac{\chi}{1-\chi}\right)\Big|_{\chi=0} + \left[(c_{V,2} - c_{V,1})\left(1 - \ln T\right) + S_{01} - S_{02}\right] = +\infty.$$

Daher ist das Maximumprinzip für χ bei logarithmischer Mischungsentropie erfüllt. Für polynomielles W gilt aber:

$$L[1] = [(c_{V,2} - c_{V,1})(1 - \ln T) + S_{01} - S_{02}] = L[0].$$

Ist der Ausdruck in eckigen Klammern positiv, so ist möglicherweise $\chi > 1$. Wird umgekehrt der Ausdruck in eckigen Klammern negativ, so ist eventuell $\chi < 0$. \Box

Für die meisten numerischen Rechnungen setzen wir deshalb:

$$\frac{\partial J}{\partial \chi} = \ln\left(\frac{\chi}{1-\chi}\right) - \chi + (c_{V,1} - c_{V,2})\left(1 - \ln T\right) + S_{0,2} - S_{0,1}.$$
(2.61)

2. Fall: Ideale Gasgleichung mit Van-der-Waals-Beziehung:

Abschließend behandeln wir entsprechend die Situation, daß eine ideale Gasgleichung für das Flüssigkeitssystem mit einer Van-der-Waals-Gleichung (mit a = 0 und $b \neq 0$) für das Gassystem kombiniert wird. Dies ist der einfachste vorstellbare Fall, bei dem beide Phasen unterschiedlichen physikalischen Gesetzen gehorchen.

Mit (2.49) für die Volumina \tilde{V}_1 , \tilde{V}_2 erhalten wir für die potentielle Energie des Systems, da a = 0 ist (zu $c_{V,\chi}$ siehe (2.50)):

$$e_{\rm pot} = c_{V,\chi} \,\varrho T \tag{2.62}$$

und für den Druck und der Definition $\gamma_i := \frac{R}{c_{V,i}} + 1$ aus (2.52):

$$p = \frac{\chi RT}{\tilde{V}_1} = \frac{R}{c_{V,\chi}} \frac{e_{\text{pot}}}{1 - b\varrho (1 - \chi)}$$
$$= \frac{(\gamma_1 - 1)(\gamma_2 - 1)}{(\chi \gamma_2 + (1 - \chi) \gamma_1 - 1)(1 - b\varrho (1 - \chi))} e_{\text{pot}}.$$
(2.63)

Ausgehend von Ansatz (2.18), den Gleichungen (2.41) bzw. (2.45) für die Gibbschen Energien der Teilsysteme erhalten wir:

$$\frac{\partial J}{\partial \chi} = W'(\chi) + R \left(1 - \frac{1}{1 - \varrho b} + \ln(1 - \varrho b) \right) + (c_{V,1} - c_{V,2})(1 - \ln T) + [S_{02} - S_{01}]
= W'(\chi) + (\gamma_1 - 1)c_{V,1} \left(\ln(1 - \varrho b) - \frac{\varrho b}{1 - \varrho b} \right)
+ (c_{V,1} - c_{V,2})(1 - \ln T) + [S_{02} - S_{01}].$$
(2.64)

Wie für den spezielleren Fall b = 0 oben läßt sich ein Maximumprinzip nur für eine logarithmische Nichtlinearität zeigen. Bemerkung 2.1 gilt sinngemäß.

2.8 Entdimensionalisierung der Gleichungen

Wir beschreiben nachfolgend die Umrechnung von physikalischen Größen in die einheitenlose Formulierung. Diese läßt sich elementar vornehmen. Wir führen die Entdimensionalisierung für zwei Raumdimensionen durch, die Verallgemeinerung auf drei Raumdimensionen ist trivial.

Man bezieht alle physikalischen Größen (nachfolgend mit ' markiert) auf einen Referenzwert (mit Index 0 versehen) und erhält die dimensionslose Größe. Für die Ortskoordinate x etwa

$$x = \frac{x'}{x_0}.$$

Der dimensionslose Wert x ist also auf die Skala x_0 bezogen (hier der Referenzwert), die charakteristische Länge der Geometrie.

Konkret setzen wir

$$\begin{array}{ll} x = \frac{x'}{x_0}, & y = \frac{y'}{x_0}, & t = \frac{t'}{t_0}, & v_i = \frac{v'_i}{v_0}, \\ \varrho = \frac{\varrho'}{\varrho_0}, & e = \frac{e'}{e_0}, & p = \frac{p'}{p_0}, & T = \frac{T'}{T_0}, \\ \mu = \frac{\mu'}{\mu_0}, & \nu = \frac{\nu'}{\mu_0}, & L = \frac{L'}{L_0}, & \delta = \frac{\delta'}{\delta_0}, & c_V = \frac{c_V'}{c_{V_0}} \end{array}$$

Zwischen den Referenzgrößen gelten die Beziehungen

$$p_0 = e_0 = \varrho_0 v_0^2, \tag{2.65}$$

$$T_0 = \frac{v_0^2}{c_{V_0}}. (2.66)$$

Diese folgen aus $e = e_{\text{pot}} + \frac{\varrho}{2}(v_1^2 + v_2^2)$, $E_{\text{pot}} = c_V T$ und $p = (\gamma - 1)e_{\text{pot}}$, vgl. (2.57) und (2.58) (o.E. kann zur Bestimmung der Dimension $c_{V,1} = c_{V,2}$ und $c_{p,1} = c_{p,2}$ gesetzt werden).

Nach der physikalischen Definition der Geschwindigkeit gilt $t_0 = \frac{x_0}{v_0},$ also

$$t = \frac{v_0}{x_0} t'.$$

Wegen $\partial_{t'} \varrho(t') = \frac{1}{t_0} \partial_t \varrho(t)$ gilt

$$\partial_{t'}\varrho'(x',y',t') = \frac{\varrho_0 v_0}{x_0} \partial_t \varrho(x,y,t),$$

$$\partial_{x'}\varrho'(x',y',t') = \frac{\varrho_0}{x_0} \partial_x \varrho(x,y,t),$$

$$\partial_{y'}\varrho'(x',y',t') = \frac{\varrho_0}{x_0} \partial_y \varrho(x,y,t).$$

Analoge Beziehungen gelten für die 1. Ableitungen von p', e', v'_1 , v'_2 und T'.

Für die 2. Ableitungen von T gilt entsprechend

$$\partial_{x'}^2 T'(x', y', t') = \frac{T_0}{x_0^2} \, \partial_x^2 T(x, y, t),$$

und elementar lassen sich auf dieselbe Weise alle 2. Ableitungen aus dem Spannungstensor umformen.

Wir setzen nun die hergeleiteten Beziehungen in (2.20) ein. Für die Massenerhaltungsgleichung $\partial_{t'} \varrho' + \partial_{x'} (\varrho' v'_1) + \partial_{y'} (\varrho' v'_2) = 0$ unter Berücksichtigung von

$$\partial_{x'}(\varrho'v_1') = (\partial_{x'}\varrho')v_1' + \varrho'(\partial_{x'}v_1')$$

= $\frac{\varrho_0v_0}{x_0} (v_1 \ \partial_x \varrho + \varrho \ \partial_x v_1)$
= $\frac{\varrho_0v_0}{x_0} \partial_x(\varrho v_0)$

und der entsprechenden Gleichung für $\partial_{y'}(\varrho'v_2')$ erhalten wir

$$\frac{\varrho_0 v_0}{x_0} \left[\partial_t \varrho + \partial_x (\varrho v_1) + \partial_y (\varrho v_2) \right] = 0.$$
(2.67a)

Als nächstes behandeln wir die Gleichung für den Phasenparameter χ .

 χ bestimmt die Gewichtung der beiden Phasen, es muß immer $0 \le \chi \le 1$ gelten. Daher fordern wir $\chi_0 = 1$ bzw. $\chi = \chi'$. Wir sehen:

$$\partial_{t'}\chi + v' \cdot \nabla'\chi = \partial_{t'}\chi(x',y',t') + v'_1 \partial_{x'}\chi(x',y',t') + v'_2 \partial_{y'}\chi(x',y',t')$$
$$= \frac{1}{t_0} \partial_t\chi(x,y,t) + \frac{v_0}{x_0} \left[v_1\partial_x\chi(x,y,t) + v_2\partial_y\chi(x,y,t)\right]$$
$$= \frac{v_0}{x_0} \left[\partial_t\chi + v \cdot \nabla\chi\right].$$

In der modifizierten Allen–Cahn–Gleichung hat der Term $DW(\chi)$ genau wie $-\frac{1}{T} (G_1 - G_2) = \sum_i [S_i - \frac{1}{T}(E_i + pV_i)]$ die Dimension einer Entropie, da W Bestandteil der Mischungsentropie ist (vgl. Definition (2.9)). Wegen $\frac{E'_i}{T'} = c_V' = c_{V_0}c_V$ ist die Entropie auf die Skala c_{V_0} bezogen. Außerdem gilt

$$\frac{\delta'}{2} |\nabla'\chi|^2 = \delta_0 \frac{\delta}{2} \left((\partial_{x'}\chi)^2 + (\partial_{y'}\chi)^2 \right) = \frac{\delta_0}{x_0^2} \left[\frac{\delta}{2} |\nabla\chi|^2 \right].$$

Ein Dimensionsvergleich ergibt $\frac{\delta_0}{x_0^2} = c_{V_0}$ bzw.

$$\delta_0 = c_{V_0} x_0^2. \tag{2.68}$$

Unter Verwendung von (2.68) gilt:

$$\frac{1}{\varrho'} \operatorname{div}'(\delta' \varrho' \nabla' \chi) = \delta' \left(\partial_{x'} \chi(x', y', t') + \partial_{y'} \chi(x', y', t') \right)^2 + \frac{\delta'}{\varrho'} \nabla' \varrho' \cdot \nabla' \chi$$

$$= \frac{\delta_0}{x_0^2} \left[\delta \bigtriangleup \chi + \frac{\delta}{\varrho} \nabla \varrho \cdot \nabla \chi \right]$$

$$= c_{V_0} \frac{1}{\varrho} \operatorname{div}(\delta \varrho \nabla \chi).$$

Die Phasengleichung schreibt sich daher als

$$\varepsilon \frac{v_0}{x_0} \left[\partial_t \chi + v \cdot \nabla \chi \right] = c_{V_0} \left[-DW(\chi) - \frac{1}{T} (G_1 - G_2) + \frac{1}{\varrho} \operatorname{div}(\delta \varrho \, \nabla \chi) \right].$$
(2.67e)

Daher wählen wir

$$\varepsilon := \frac{c_{V_0} x_0}{v_0} = c_{V_0} t_0. \tag{2.69}$$

Für die Impulsgleichungen bemerken wir

$$\partial_{x'} \tau'_{11} = \frac{\mu_0 v_0}{x_0^2} \, \partial_x \tau_{11}, \partial_{y'} \tau'_{12} = \frac{\mu_0 v_0}{x_0^2} \, \partial_y \tau_{12},$$

und für div $(\delta \rho T \nabla \chi \otimes \nabla \chi)$ ist exemplarisch

$$-\delta'\partial_{x'}(\varrho'T'(\partial_{x'}\chi)^2) = \frac{\delta_0\varrho_0T_0}{x_0^2} \left[-\delta \ \partial_x(\varrho T(\partial_x\chi)^2)\right]$$
$$= c_{V_0}\varrho_0T_0 \left[-\delta \ \partial_x(\varrho T(\partial_x\chi)^2)\right]$$

und wegen (2.66) und (2.68) gilt daher

$$-\operatorname{div}'(\delta'\varrho'T'\,\nabla'\chi\otimes\nabla'\chi)=\varrho_0v_0^2\,[-\operatorname{div}(\delta\varrho T\,\nabla\chi\otimes\nabla\chi)].$$

Mit demselben Vorgehen wie bisher erhalten wir daher für die 1. Impulsgleichung

$$0 = \partial_{t'}(\varrho'v'_{1}) + \partial_{x'}(\varrho'v'_{1}^{2} + p') + \partial_{y'}(\varrho'v'_{1}v'_{2}) - \partial_{x'}\tau'_{11} - \partial_{y'}\tau'_{12} + \partial_{x'}(\delta'\varrho'T'(\partial_{x'}\chi)^{2}) + \partial_{y'}(\delta'\varrho'T'(\partial_{x'}\chi)(\partial_{y'}\chi)) = \frac{v_{0}^{2}\varrho_{0}}{x_{0}} \left[\partial_{t}(\varrho v_{1}) + \partial_{x}(\varrho v_{1}^{2} + p) + \partial_{y}(\varrho v_{1}v_{2}) + x_{0}\left(\partial_{x}(\delta\varrho T(\partial_{x}\chi)^{2}) + \partial_{y}(\delta\varrho T(\partial_{x}\chi)(\partial_{y}\chi))\right)\right] - \frac{\mu_{0}v_{0}}{x_{0}^{2}}\left(\partial_{x}\tau_{11} + \partial_{y}\tau_{12}\right) = \frac{v_{0}^{2}\varrho_{0}}{x_{0}} \left[\partial_{t}(\varrho v_{1}) + \partial_{x}(\varrho v_{1}^{2} + p) + \partial_{y}(\varrho v_{1}v_{2}) + x_{0}\left(\partial_{x}(\delta\varrho T(\partial_{x}\chi)^{2}) + \partial_{y}(\delta\varrho T(\partial_{x}\chi)(\partial_{y}\chi))\right) - \frac{1}{\mathrm{Re}}\left(\partial_{x}\tau_{11} + \partial_{y}\tau_{12}\right)\right],$$
(2.67b)

wobei die Reynolds–Zahl Re := $\frac{\varrho_0 v_0 x_0}{\mu_0}$ den Einfluß der Zähigkeit des Fluids angibt. Re $\rightarrow \infty$ entspricht $\mu \rightarrow 0$. Bei der 2. Gleichheitsrelation wurde (2.65) verwendet.

Für die 2. Impulsgleichung ergibt sich entsprechend

$$0 = \frac{v_0^2 \varrho_0}{x_0} \left[\partial_t (\varrho v_2) + \partial_x (\varrho v_1 v_2) + \partial_y (\varrho v_2^2 + p) + x_0 \left(\partial_x (\delta \varrho T (\partial_x \chi) (\partial_y \chi)) + \partial_y (\delta \varrho T (\partial_y \chi)^2) \right) \right] - \frac{1}{\text{Re}} \left(\partial_x \tau_{21} + \partial_y \tau_{22} \right) \right].$$

$$(2.67c)$$

Die Energiegleichung wird wie folgt umgeformt:

$$0 = \partial_{t'}e' + \partial_{x'}(v_{1}'(e'+p')) + \partial_{y'}(v_{2}'(e'+p')) - \partial_{x'}(L'\partial_{x'}T) - \partial_{y'}(L'\partial_{y'}T) - \partial_{x'}(v_{1}'\tau_{11}' + v_{2}'\tau_{22}') - \partial_{y'}(v_{1}'\tau_{21}'v_{2}'\tau_{22}') + \delta'\partial_{x'}(\varrho'T'((\partial_{x'}\chi)^{2}v_{1}' + (\partial_{x'}\chi)(\partial_{y'}\chi)v_{2}')) + \delta'\partial_{y'}(\varrho'T'((\partial_{x'}\chi)(\partial_{y'}\chi)v_{1}' + (\partial_{y'}\chi)^{2})) = \frac{\varrho_{0}v_{0}^{3}}{x_{0}} \Big[\partial_{t}e + \partial_{x}((e+p)v_{1}) + \partial_{y}((e+p)v_{2})\Big] - L_{0}\frac{v_{0}^{2}}{c_{V_{0}}x_{0}^{2}} (\partial_{x}(L\partial_{x}T) + \partial_{y}(L\partial_{y}T)) - \frac{\mu_{0}v_{0}^{2}}{x_{0}^{2}} (\partial_{x}(v_{1}\tau_{11} + v_{2}\tau_{12}) + \partial_{y}(v_{1}\tau_{21} + v_{2}\tau_{22})) + \frac{\delta_{0}\varrho_{0}T_{0}}{x_{0}^{3}} \Big[\delta\partial_{x}(\varrho T((\partial_{x}\chi)^{2}v_{1} + (\partial_{x}\chi)(\partial_{y}\chi)v_{2})) + \delta\partial_{y}(\varrho T((\partial_{x}\chi)(\partial_{y}\chi)v_{1} + (\partial_{y}\chi)^{2}))\Big] = \frac{\varrho_{0}v_{0}^{3}}{x_{0}} \Big[\partial_{t}e + \partial_{x}((e+p)v_{1}) + \partial_{y}((e+p)v_{2}) + \delta\partial_{x}(\varrho T((\partial_{x}\chi)^{2}v_{1} + (\partial_{x}\chi)(\partial_{y}\chi)v_{2})) + \delta\partial_{y}(\varrho T((\partial_{x}\chi)(\partial_{y}\chi)v_{1} + (\partial_{y}\chi)^{2})) + \frac{1}{\mathrm{Re}}\Big(-\frac{1}{\mathrm{Pr}}(\partial_{x}(L\partial_{x}T) + \partial_{y}(L\partial_{y}T)) - \partial_{x}(v_{1}\tau_{11} + v_{2}\tau_{12}) - \partial_{y}(v_{1}\tau_{21} + v_{2}\tau_{22})\Big)\Big].$$

$$(2.67d)$$

Hier bezeichnet $\Pr := \frac{\mu_0 c_{V_0}}{L_0}$ die Prandtlzahl, eine materialabhängige Konstante, die ein Maß für den Wärmedurchsatz im System ist. Das Produkt Prandtlzahl mit Reynoldszahl wird mitunter auch als Pécletzahl bezeichnet.

Die Gleichungen (2.20) gehen über in (2.67)(a-e), die Massenerhaltungsgleichung sowie die Gleichung für den Phasenparameter bleiben unverändert, bei der Impuls– und Energiegleichung treten zusätzliche Vorfaktoren wie $\frac{1}{\text{Re}}$ auf. In der Impulsgleichung gibt es den zusätzlichen Vorfaktor x_0 bei den neuen Spannungstermen. Alle Vorfaktoren gehen bei den numerischen Rechnungen ein und dienen der Umrechnung zu den in der Anwendung auftretenden physikalischen Werten.

Es versteht sich, daß berechnete Ergebnisse für alle Fälle gelten, in denen die Vorfaktoren identische Werte annehmen, allerdings hängt die physikalische Interpretation der Ergebnisse von diesen Vorfaktoren ab.

2.9 Modellannahmen

Es folgt kurz eine zusammenfassende Auflistung aller für das System (2.20) gemachten Annahmen.

- Das Gebiet Ω sowie der Einström- und Ausströmrand sollen in der Zeit invariant sein.
- Es finden keine chemischen Reaktionen statt. In der thermodynamischen Betrachtung der beiden Phasen treten keine chemischen Potentiale auf. Magnetische und elektrische Kräfte werden vernachlässigt.
- Beide Phasen seien inkompressibel.
- $T_1 = T_2$: Beide Phasen (Gas und Flüssigkeit) sollen dieselbe Temperatur besitzen (augenblicklicher Entropieausgleich).
- p₁ = p₂:
 Zwei benachbarte Phasen besitzen denselben Druck (sofortiger Volumenausgleich).
- Im Modell ist keine Oberflächenspannung berücksichtigt. Wärme, die durch Scherung der Grenzflächen entsteht, wird vernachlässigt.
- Beide Phasen sollen sich mit demselben Geschwindigkeitsvektor v bewegen.
- Die Dichte der inneren Energie des Systems sei eine Konvexkombination aus den Energiedichten der einzelnen Phasen: $E = \chi E_1 + (1 - \chi)E_2$. Entsprechende Aussagen gelten dann für die anderen thermodynamischen Größen wie Entropie oder Gibbsche Freie Energie.
- Das Volumen einer Mischung zweier Phasen sei das Volumen der einzelnen Phasen gewichtet mit ihrem Massenanteil: $V = \chi V_1 + (1 \chi)V_2$.
- Die Wärmeleitfähigkeit L sowie die Wärmekapazitäten $c_{V,i}$, $c_{p,i}$ werden als für jede Phase konstant angenommen. Die Wärmeleitfähigkeit L habe für Gas und Flüssigkeit denselben Wert.
- Die Viskositätskoeffizienten μ und ν in der Definition von τ , die im allgemeinen Funktionen von ϱ , T und χ sind, werden in dieser Arbeit konstant gehalten. Damit werden auch numerische Probleme vermieden.

Wollte man zwei verschiedene Geschwindigkeitsfelder in das Modell einbauen, so müßte man die Geschwindigkeitsverteilung ähnlich der Hagen–Pousseuille–Strömung in der Nähe einer Grenzschicht in Abhängigkeit vom Durchmesser der Gasphase studieren. Es ist klar, daß die Geschwindigkeiten in der Nähe der Phasengrenzen klein sind und von den Rändern weg zunehmen. Diese Verteilungsfunktion in Abhängigkeit der Phasengröße müßte dann in das Modell integriert werden.

Unabhängig hiervon kann ein Auftriebsterm in (2.20d) integriert werden, der das Aufsteigen der Gasblasen berücksichtigt.

Im Anhang B.1 werden wir kurz einen alternativen Ansatz aus [23] vorstellen, der unterschiedliche Geschwindigkeiten und verschiedene Drücke beinhaltet. Allerdings zeigt sich, daß dieses Modell nicht physikalisch korrekt ist, da zum Beispiel die Impulserhaltung verletzt wird. Das gerade angesprochene Problem der Geschwindigkeitsverteilung wird ebenfalls vernachlässigt.

2.10 Entropieabschätzung

Nachfolgend beweisen wir die Gültigkeit des 2. Hauptsatzes der Thermodynamik für das oben angegebene System (2.20), was direkt mit der Existenz eines Lyapunov–Funktionals korrespondiert.

Dieser Abschnitt ist der wichtigste der gesamten Arbeit. Zusammen mit der Begründung des Termes $-\delta \rho T \nabla \chi \otimes \nabla \chi$ im Spannungstensor (Abschnitt 2.5) stellt er die physikalische Korrektheit des Ansatzes (2.20) sicher.

Es sei auch auf den Abschnitt A.4 verwiesen, wo wir mit ähnlichen Methoden wie in diesem Abschnitt die Gültigkeit des 2. Hauptsatzes für die Navier–Stokes–Gleichungen verifizieren.

Wir beginnen mit der Berechnung von ds_i , dem totalen Differential der Phase *i* für i = 1, 2.

$$ds_i = d(\varrho_i S_i)$$

= $S_i d\varrho_i + \varrho_i dS_i.$

Unter Verwendung von (2.25) gilt

$$dS_i = \frac{1}{T} dE_i + \frac{p}{T} dV_i.$$

Es folgt:

$$ds_i = S_i \, d\varrho_i + \frac{\varrho_i}{T} \, dE_i + \frac{\varrho_i p}{T} \, dV_i$$

$$= \left(S_i - \frac{pV_i}{T}\right) \, d\varrho_i + \frac{\varrho_i}{T} \, dE_i + \frac{p}{T} \, d(\varrho_i V_i)$$

$$= \left(S_i - \frac{pV_i}{T} - \frac{E_i}{T}\right) \, d\varrho_i + \frac{1}{T} \, d(\varrho_i E_i) + \frac{p}{T} \, d\psi_i$$

$$= -\frac{1}{T} G_i \, d\varrho_i + \frac{1}{T} \, de_i + \frac{p}{T} \, d\psi_i.$$

Wir schreiben (2.11) als

$$ds + d\tilde{s} = \sum_{i} ds_i,$$

mit den zusätzlichen Entropietermen (vgl. Abschnitt 2.3)

$$\tilde{s} := \varrho \left[\frac{1}{2} \chi^2 (1 - \chi)^2 + \frac{\delta}{2} |\nabla \chi|^2 \right].$$

Durch Aufsummieren der gerade hergeleiteten Beziehung für ds_i erhalten wir:

$$ds + d\tilde{s} = \sum_{i} ds_{i}$$
$$= -\frac{1}{T} \sum_{i} G_{i} d\varrho_{i} + \frac{1}{T} de + \frac{p}{T} \underbrace{d(\sum_{i} \psi_{i})}_{=0}.$$
(2.70)

Jetzt nutzen wir die Beziehung

$$d\varrho_i = \frac{\varrho_i}{\varrho} d\varrho + \varrho d(\frac{\varrho_i}{\varrho}) = \chi_i d\varrho + \varrho d\chi_i$$
aus und beachten $d\chi_1 = -d\chi_2$. Es folgt:

$$ds + d\tilde{s} = -\frac{1}{T} \sum_{i} \chi_{i} G_{i} \, d\varrho + \frac{1}{T} \, de - \frac{\varrho}{T} \left(G_{1} - G_{2} \right) \, d\chi.$$
(2.71)

Wir nehmen nun an, daß die für thermodynamische Prozesse verfügbare Energie nicht von v abhängt. Für v = 0 geht de in (2.71) über in de_{pot} .

Fassen wir die entstehende Gleichung der totalen Differentiale als Beziehung im Phasenraum auf, in welchem wir die ∂_t -Terme getrennt vergleichen können, so erhalten wir nach Aufintegrieren:

$$\int_{\Omega} \partial_t s = \int_{\Omega} \left[\frac{1}{T} \,\partial_t e_{\text{pot}} - \frac{1}{T} \,\sum_i \chi_i G_i \,\partial_t \varrho - \frac{\varrho}{T} (G_1 - G_2) \,\partial_t \chi - \partial_t \tilde{s} \right]. \tag{2.72}$$

Wir leiten nun nachfolgend eine Beziehung für $\frac{1}{T} \partial_t e_{\text{pot}}$ aus (2.20) her. Wegen

$$\partial_t e = \partial_t \left(e_{\text{pot}} + \frac{\varrho}{2} |v|^2 \right) = \partial_t e_{\text{pot}} + v \cdot \partial_t (\varrho v) - \frac{|v|^2}{2} \partial_t \varrho$$
(2.73)

und (2.21) gilt:

$$\int_{\Omega} \frac{1}{T} \partial_t e_{\text{pot}} = \int_{\Omega} \left[-\frac{v}{T} \cdot \partial_t(\varrho v) + \frac{|v|^2}{2T} \partial_t \varrho + \frac{1}{T} \operatorname{div}(L\nabla T - (e - \tilde{\Gamma})v) \right]$$
$$= \int_{\Omega} \left[-\frac{v}{T} \cdot \operatorname{div}(-\varrho v \otimes v + \tilde{\Gamma}) - \frac{|v|^2}{2T} \operatorname{div}(\varrho v) + \frac{1}{T} \operatorname{div}(L\nabla T - (e_{\text{pot}} + \frac{\varrho}{2} |v|^2 - \tilde{\Gamma})v) \right].$$

Integrieren wir dies partiell, so folgt:

$$\int_{\Omega} \frac{1}{T} \partial_t e_{\text{pot}} = \int_{\Omega} \left[-\varrho v \otimes v : \nabla \left(\frac{v}{T}\right) + \tilde{\Gamma} : \nabla \left(\frac{v}{T}\right) + \nabla \left(\frac{|v|^2}{2T}\right) \cdot \varrho v \right] \\
+ \int_{\Omega} \left[-L\nabla T \cdot \nabla \left(\frac{1}{T}\right) + e_{\text{pot}} v \cdot \nabla \left(\frac{1}{T}\right) + \frac{\varrho}{2} |v|^2 v \cdot \nabla \left(\frac{1}{T}\right) - \tilde{\Gamma} : v \cdot \nabla \left(\frac{1}{T}\right) \right] \\
+ \int_{\partial\Omega} \left[\varrho v \otimes v : \frac{v}{T} \cdot \vec{n} - \tilde{\Gamma} : \frac{v}{T} \cdot \vec{n} - \frac{|v|^2}{2T} \varrho v \cdot \vec{n} \right] \\
+ \int_{\partial\Omega} \left[\frac{1}{T} L \nabla T \cdot \vec{n} - (e_{\text{pot}} + \frac{\varrho}{2} |v|^2 - \tilde{\Gamma}) \frac{v}{T} \cdot \vec{n} \right] \\
= \int_{\Omega} \left[L \frac{|\nabla T|^2}{T^2} + \frac{\tilde{\Gamma}}{T} : \nabla v + e_{\text{pot}} v \cdot \nabla \left(\frac{1}{T}\right) \right] + \int_{\partial\Omega} \left[-e_{\text{pot}} \frac{v}{T} + L \frac{\nabla T}{T} \right] \cdot \vec{n}. \quad (2.74)$$

Diese Beziehung ist dieselbe wie für die Navier–Stokes–Gleichungen, nur wurde Γ durch $\tilde{\Gamma}$ ersetzt. Wir formen nun den Term $-\frac{1}{T} \sum_{i} \chi_i G_i \partial_t \varrho$ aus (2.72) um. Es gilt:

$$\int_{\Omega} -\frac{1}{T} \sum_{i} \chi_{i} G_{i} \partial_{t} \varrho = \int_{\Omega} \frac{1}{T} \sum_{i} \chi_{i} G_{i} \operatorname{div}(\varrho v)$$
$$= \int_{\Omega} -\nabla \Big(\frac{1}{T} \sum_{i} \chi_{i} G_{i} \Big) \cdot (\varrho v) + \int_{\partial \Omega} \frac{1}{T} \sum_{i} \varrho_{i} G_{i} v \cdot \vec{n}$$

$$= \int_{\Omega} \left[-\sum_{i} \varrho_{i} G_{i} v \cdot \nabla \left(\frac{1}{T}\right) - \frac{1}{T} (\varrho v) \cdot \sum_{i} G_{i} \nabla \chi_{i} - \frac{v}{T} \cdot \sum_{i} \varrho_{i} \partial G_{i} \right] \\ + \int_{\partial \Omega} \frac{1}{T} \sum_{i} \varrho_{i} G_{i} v \cdot \vec{n}.$$
(2.75)

Wir vereinfachen dies weiter. Für den ersten Integranden in (2.75) gilt:

$$\int_{\Omega} -\sum_{i} \varrho_{i} G_{i} v \cdot \nabla \left(\frac{1}{T}\right) = \int_{\Omega} \left[-e_{\text{pot}} v \cdot \nabla \left(\frac{1}{T}\right) - \frac{v}{T} \left(s + \tilde{s}\right) \cdot \nabla T - pv \cdot \nabla \left(\frac{1}{T}\right) \right].$$

Der dritte Integrand in (2.75) ergibt:

$$\int_{\Omega} -\frac{v}{T} \cdot \sum_{i} \varrho_i \ \partial G_i = \int_{\Omega} -\frac{v}{T} \cdot (\nabla p - (s + \tilde{s}) \nabla T).$$

Dies ergibt sich aus $dG_i = -S_i dT + V_i dp$ und $\sum_i \varrho_i V_i = 1$. Wir erhalten also

$$\begin{split} \int_{\Omega} & -\frac{1}{T} \sum_{i} \chi_{i} G_{i} \ \partial_{t} \varrho &= \int_{\Omega} \left[-e_{\text{pot}} v \cdot \nabla \left(\frac{1}{T}\right) - \frac{1}{T} (\varrho v) \cdot \sum_{i} G_{i} \nabla \chi_{i} - p v \cdot \nabla \left(\frac{1}{T}\right) - \frac{v}{T} \cdot \nabla p \right] \\ &+ \int_{\partial \Omega} \frac{1}{T} \sum_{i} \varrho_{i} G_{i} v \cdot \vec{n}. \end{split}$$

Setzen wir dies in (2.72) ein und nutzen die Gleichung (2.74) für die zeitliche Änderung der potentiellen Energie aus, so erhalten wir:

$$\int_{\Omega} \partial_t s = \int_{\Omega} \left[L \frac{|\nabla T|^2}{T^2} + \frac{\tau}{T} : \nabla v - \frac{p}{T} \operatorname{div} v - pv \cdot \nabla \left(\frac{1}{T}\right) - \frac{v}{T} \cdot \nabla p - \partial_t \tilde{s} \right] \\
+ \int_{\Omega} \left[-\frac{\varrho}{T} (G_1 - G_2) (v \cdot \nabla \chi + \partial_t \chi) - \delta \varrho \nabla \chi \otimes \nabla \chi : \nabla v \right] \\
+ \int_{\partial\Omega} \left[\sum_i \varrho_i G_i - e_{\text{pot}} \right] \frac{v}{T} \cdot \vec{n} + \int_{\partial\Omega} \frac{L \nabla T}{T} \cdot \vec{n}.$$
(2.76)

In (2.76) bemerken wir sofort, daß

$$\int_{\Omega} \left[-\frac{p}{T} \operatorname{div} v - pv \cdot \nabla \left(\frac{1}{T} \right) - \frac{v}{T} \cdot \nabla p \right] = \int_{\Omega} -\operatorname{div}(p \ \frac{v}{T}) = \int_{\partial \Omega} -p \ \frac{v}{T} \cdot \vec{n}.$$

Für die Randintegrale erhalten wir:

$$\int_{\partial\Omega} \Big[\sum_{i} \varrho_i G_i - e_{\text{pot}} \Big] \frac{v}{T} \cdot \vec{n} - \int_{\partial\Omega} p \, \frac{v}{T} \cdot \vec{n} = -\int_{\partial\Omega} (s + \tilde{s}) v \cdot \vec{n}.$$

Wir schreiben nun Beziehung (2.20d) als

$$\frac{1}{T}(G_1 - G_2) = -\varepsilon \left(\partial_t \chi + v \cdot \nabla \chi\right) - W'(\chi) + \frac{1}{\varrho} \operatorname{div}(\delta \varrho \, \nabla \chi).$$

Einsetzen in (2.76) liefert:

$$\int_{\Omega} \partial_{t} s = \int_{\Omega} \left[L \frac{|\nabla T|^{2}}{T^{2}} + \frac{\tau}{T} : \nabla v + \varepsilon \varrho \; (\partial_{t} \chi + v \cdot \nabla \chi)^{2} - \partial_{t} \tilde{s} \right] \\
+ \int_{\Omega} \left[(\varrho W'(\chi) - \operatorname{div}(\delta \varrho \; \nabla \chi))(\partial_{t} \chi + v \cdot \nabla \chi) - \delta \varrho \nabla \chi \otimes \nabla \chi : \nabla v \right] \\
- \int_{\partial \Omega} (s + \tilde{s}) v \cdot \vec{n} + \int_{\partial \Omega} \frac{L \; \nabla T}{T} \cdot \vec{n}.$$
(2.77)

Wir formen nachfolgend den Ausdruck $(\varrho W'(\chi) - \operatorname{div}(\delta \rho \nabla \chi))(\partial_t \chi + v \cdot \nabla \chi)$ aus (2.77) systematisch um. Wir beginnen mit den $\partial_t \chi$ -Termen. Wir bemerken die Identitäten

$$\int_{\Omega} \varrho W'(\chi) \ \partial_t \chi = \int_{\Omega} \varrho \ \partial_t W(\chi) = \int_{\Omega} \left[\partial_t (\varrho W(\chi)) - W(\chi) \ \partial_t \varrho \right]$$

und für den Divergenzterm

$$\begin{split} \int_{\Omega} -\partial_t \Big(\frac{\delta}{2} \varrho \, |\nabla \chi|^2 \Big) &= \int_{\Omega} \Big[-\frac{\delta}{2} |\nabla \chi|^2 \, \partial_t \varrho - \delta \varrho \, \nabla \chi \cdot \nabla \partial_t \chi \Big] \\ &= \int_{\Omega} \Big[-\frac{\delta}{2} |\nabla \chi|^2 \, \partial_t \varrho + \delta \varrho \Delta \chi \, \partial_t \chi + \delta \partial_t \chi \nabla \varrho \cdot \nabla \chi \Big] - \int_{\partial \Omega} \delta \varrho \, \partial_t \chi \, \nabla \chi \cdot \vec{n} \\ &= \int_{\Omega} \Big[-\frac{\delta}{2} |\nabla \chi|^2 \, \partial_t \varrho + \partial_t \chi \, \mathrm{div}(\delta \varrho \, \nabla \chi) \Big] - \int_{\partial \Omega} \delta \varrho \, \partial_t \chi \, \nabla \chi \cdot \vec{n}. \end{split}$$

Aus diesen beiden Identitäten ergibt sich:

$$\int_{\Omega} \left[\varrho W'(\chi) - \operatorname{div}(\delta \varrho \,\nabla \chi) \right] \partial_t \chi = \int_{\Omega} \left[-\tilde{S} \,\partial_t \varrho + \partial_t \tilde{s} \right] - \int_{\partial\Omega} \delta \varrho \,\partial_t \chi \,\nabla \chi \cdot \vec{n}.$$
(2.78)

Einsetzen von (2.78) in (2.77) ergibt die Beziehung

$$\int_{\Omega} \partial_{t} s = \int_{\Omega} \left[L \frac{|\nabla T|^{2}}{T^{2}} + \frac{\tau}{T} : \nabla v + \varepsilon \varrho \; (\partial_{t} \chi + v \cdot \nabla \chi)^{2} \right] \\
+ \int_{\Omega} \left[(\varrho W'(\chi) - \operatorname{div}(\delta \varrho \; \nabla \chi)) v \cdot \nabla \chi - \delta \varrho \nabla \chi \otimes \nabla \chi : \nabla v - \tilde{S} \; \partial_{t} \varrho - v \cdot \nabla \tilde{s} - \tilde{s} \; \operatorname{div} v \right] \\
- \int_{\partial\Omega} s v \cdot \vec{n} + \int_{\partial\Omega} \left[-\delta \varrho \; \partial_{t} \chi \; \nabla \chi + \frac{L \; \nabla T}{T} \right] \cdot \vec{n}.$$
(2.79)

Hier wurde

$$\int_{\partial\Omega} -\tilde{s}v \cdot \vec{n} = \int_{\Omega} -\operatorname{div}(\tilde{s}v) = \int_{\Omega} -v \cdot \nabla \tilde{s} - \tilde{s} \operatorname{div}v$$

verwendet.

Nun formen wir $(\varrho W'(\chi) - \operatorname{div}(\delta \rho \nabla \chi))v \cdot \nabla \chi$ aus (2.79) um. Dazu bemerken wir:

$$\int_{\Omega} \varrho W'(\chi) \nabla \chi \cdot v = \int_{\Omega} \left[\nabla(\varrho W(\chi)) \cdot v - W(\chi) \nabla \varrho \cdot v \right]$$

und

$$\begin{split} \int_{\Omega} -v \cdot \nabla \left(\frac{\delta}{2} \varrho \, |\nabla \chi|^2 \right) &= \int_{\Omega} \left[-\frac{\delta}{2} |\nabla \chi|^2 \, \nabla \varrho \cdot v - \sum_i \delta \varrho v_i \, \nabla \chi \cdot \nabla \partial_i \chi \right] \\ &= \int_{\Omega} \left[-\frac{\delta}{2} |\nabla \chi|^2 \, \nabla \varrho \cdot v + \sum_i \delta \partial_i \chi \, \nabla (\varrho v_i) \cdot \nabla \chi + \sum_i \delta \varrho v_i \, \partial_i \chi \Delta \chi \right] \\ &- \int_{\partial \Omega} \sum_i \delta \varrho v_i \, \partial_i \chi \, \nabla \chi \cdot \vec{n}. \end{split}$$

Außerdem gilt

$$\int_{\Omega} \left[\sum_{i} \delta \partial_{i} \chi \, \nabla(\varrho v_{i}) \cdot \nabla \chi + \sum_{i} \delta \varrho v_{i} \, \partial_{i} \chi \Delta \chi \right] = \int_{\Omega} \left[\delta \varrho \nabla \chi \otimes \nabla \chi : \nabla v + v \cdot \nabla \chi \, \operatorname{div}(\delta \varrho \, \nabla \chi) \right].$$

Daher erhalten wir

$$\int_{\Omega} \left[\varrho W'(\chi) - \operatorname{div}(\delta \varrho \, \nabla \chi) \right] v \cdot \nabla \chi = \int_{\Omega} \left[\delta \varrho \nabla \chi \otimes \nabla \chi : \nabla v - \tilde{S} \, \nabla \varrho \cdot v + v \cdot \nabla \tilde{s} \right] \\ - \int_{\partial \Omega} \delta \varrho (\nabla \chi \cdot \vec{n}) (\nabla \chi \cdot v).$$
(2.80)

Setzen wir (2.80) in (2.79) ein und beachten

$$\int_{\Omega} \left[-\tilde{S} \,\partial_t \varrho - \tilde{s} \operatorname{div} v - \tilde{S} \,\nabla \varrho \cdot v \right] = 0,$$

so erhalten wir das Ergebnis:

$$\int_{\Omega} \partial_t s + \int_{\partial\Omega} sv \cdot \vec{n} = \int_{\Omega} \left[L \frac{|\nabla T|^2}{T^2} + \frac{\tau}{T} : \nabla v + \varepsilon \varrho \; (\partial_t \chi + v \cdot \nabla \chi)^2 \right] \\
- \int_{\partial\Omega} \varrho \; (\partial_t \chi + v \cdot \nabla \chi) \; \delta \nabla \chi \cdot \vec{n} + \int_{\partial\Omega} \frac{L \; \nabla T}{T} \cdot \vec{n}.$$
(2.81)

Dies ist die gesuchte Abschätzung.

Zunächst halten wir fest, daß ρ und T immer positiv sind, falls dies für die Anfangs- und Randwerte gilt. Dies ist ein Ergebnis des lokalen Existenzsatzes in Kapitel 3. Existiert sogar eine globale Lösung, so überträgt sich die Positivität von ρ und T auf die globale Lösung.

Der 2. Hauptsatz ist erfüllt, falls $\partial_t s \geq 0$ für ein geschlossenes System gilt. Wir sehen: $L \frac{|\nabla T|^2}{T^2}$ beschreibt die Entropieproduktion in Folge der Wärmediffusion, genau wie der Produktionsterm $\varepsilon \rho \ (\partial_t \chi + v \cdot \nabla \chi)^2$ in Folge der Änderung der substantiellen Ableitung von χ ist er immer positiv. Der Term $\tau : \nabla v$ beschreibt die in Wärme dissipierte Bewegungsenergie. Auch dieser Term ist immer positiv. Definieren wir den Tensor

$$f_{ij} := \frac{1}{2} \left(\partial_i v_j + \partial_j v_i \right),$$

so folgt für den Dissipationsterm:

$$\tau : \nabla v = \mu \sum_{i,j} (\partial_i v_j + \partial_j v_i) \partial_j v_i + \nu (\operatorname{div} v) \sum_{i,j} \partial_j v_i \,\delta_{ij}$$
$$= \mu \sum_{i,j} 2(f_{ij})^2 + \nu \sum_k f_{kk} \sum_{i,j} f_{ij} \delta_{ij})$$
$$= 2\mu \sum_{i,j} (f_{ij})^2 + \nu (\sum_i f_{ii})^2.$$
(2.82)

Durch Hauptachsentransformation läßt sich der symmetrische Tensor f_{ij} auf Diagonalgestalt bringen und wir sehen wie behauptet $\tau : \nabla v \ge 0$ für die in der Definition von τ angegebenen Bedingungen $\nu \ge -\mu$ für d = 2 bzw. $\nu \ge -\frac{2}{3} \mu$ für d = 3. Für $f_{ij} = \delta_{ij}$ und $\nu = -\frac{2}{3}$ wird der Ausdruck in 3 Raumdimensionen genau Null.

Für ein geschlossenes System verschwinden in (2.81) sv und $L\nabla T$ auf $\partial\Omega$. Wählt man für χ Neumann–Randwerte oder $\chi = \text{const}$ auf $\partial\Omega$, so sind auch die übrigen Randintegrale in (2.81) Null.

Ferner bemerken wir eine Übereinstimmung mit (2.2): im bewegten System verändert sich der Ausdruck $\int_{\Omega} (\partial_t \chi)^2 \operatorname{zu} \int_{\Omega} (\partial_t \chi + v \cdot \nabla \chi)^2$, da das Inertialsystem sich nun mit der Strömung bewegt.

Die Abschätzung (2.59) zeigt exemplarisch, wie man durch Einsetzen festgelegter Zustandsgleichungen die Entropieabschätzung unmittelbar gewinnen kann.

Wir halten fest, daß mit (2.81) die Gültigkeit des 2. Hauptsatzes der Thermodynamik für unser System (2.20) bewiesen ist. Der Beweis verwendet nicht die spezielle Definition von W, so daß die Entropieabschätzung auch gilt, wenn wir W durch \tilde{W} aus (2.60) ersetzen.

Bemerkung 2.2:

Die Impulsgleichung geht bei der Entropieabschätzung nur in Formel (2.73) ein zur Gewinnung einer Gleichung für $\partial_t e_{\text{pot}}$. Ist $v \equiv 0$ in Ω , so folgt direkt $\partial_t e = \partial_t e_{\text{pot}}$, und ohne die neuen Terme im Spannungstensor erhalten wir

$$\int_{\Omega} \partial_t s = \int_{\Omega} \left[L \frac{|\nabla T|^2}{T^2} + \varepsilon \varrho \; (\partial_t \chi)^2 \right] + \int_{\partial \Omega} \left[-\delta \varrho \; \partial_t \chi \; \nabla \chi + \frac{L \; \nabla T}{T} \right] \cdot \vec{n}.$$

Der 2. Hauptsatz der Thermodynamik ist also für ein geschlossenes System und $v \equiv 0$ ohne Hinzufügen neuer Terme zum Spannungstensor erfüllt.

Bemerkung 2.3:

Wie die obige Entropie
abschätzung zeigt, gilt der 2. Hauptsatz für ein System mit
 $l \ge 2$ Phasen, falls jede der l Phasen identischen Druck
 p und Temperatur T besitzt. Der Ansatz (2.20) ließe
 sich also naheliegend in dieser Form verallgemeinern. Man müßte lediglich eine entsprechende vektorwertige Version der Allen–Cahn–Gleichung einsetzen.

Bemerkung 2.4:

Gleichung (2.81) liefert eine a-priori–Abschätzung für die Lösung U von (2.20), die aber erheblich verbessert werden kann.

Kapitel 3

Lokale Existenz und Eindeutigkeit der Lösung

In diesem Kapitel wollen wir für das System (2.20) einen lokalen Existenzsatz herleiten. Die wesentliche Aussage ist Satz 3.1. Der Beweis verwendet den Schauderschen Fixpunktsatz. Die Eindeutigkeit der Lösung folgt aus einem Energieargument, indem man das Lemma von Gronwall auf die Differenz zweier Lösungen anwendet, siehe Abschnitt 3.6.

Die verwendeten Techniken finden sich in [20], wo ein ähnlich lautender Satz für die Navier– Stokes–Gleichungen bewiesen wird.

Es ist wichtig zu bemerken, daß die Frage nach der globalen Existenz einer Lösung für die Navier–Stokes–Gleichungen im allgemeinen Fall (i.b. bei vorhandenem Einströmrand und nichtbarotropem Fall (d.h. p hängt auch von T ab)) nicht endgültig beantwortet ist.

3.1 Neuformulierung der Gleichungen

Um die Methoden aus [20] unmittelbar anwenden zu können, formulieren wir die Gleichungen (2.20) um.

In diesem Kapitel verwenden wir andere Bezeichnungen als im übrigen Teil der Arbeit. Tiefgestellte Indizes bezeichnen immer die partielle Ableitung nach der subskribierten Variable.

Sei Ω ein beschränktes Gebiet wie oben, T > 0 eine Endzeit, $\Omega_T := \Omega \times (0, T), \Sigma_T := \partial \Omega \times (0, T).$ θ sei die Temperatur, u das Geschwindigkeitsfeld.

Es bezeichne κ die Wärmeleitfähigkeit, μ und λ seien Viskositätskoeffizienten. D.E.h. seien κ , c_V , μ und λ Konstanten. Wir definieren

$$-Au := \mu \triangle u + \lambda \nabla \operatorname{div} u.$$

Wir schreiben dann System (2.20) als ($\zeta = \delta \varrho \theta \nabla \chi \otimes \nabla \chi$)

Finde in Ω die Lösung $U = (\varrho, u, \theta, \chi)^t$ des Systems

$$\varrho_t + u \cdot \nabla \varrho + \varrho \operatorname{div} u = 0, \tag{3.1a}$$

$$\varrho(u_t + u \cdot \nabla u) = -\nabla p - Au - \operatorname{div}\zeta, \qquad (3.1b)$$

$$c_V \varrho(\theta_t + u \cdot \nabla \theta) + p \operatorname{div} u = \kappa \triangle \theta + \frac{\mu}{2} \sum_{i,j} (\partial_i u_j + \partial_j u_i)^2 + (\lambda - \mu) \operatorname{(div} u)^2 - \zeta : \nabla u, (3.1c)$$

$$\varepsilon (\chi_t + u \cdot \nabla \chi) = -\frac{\partial J}{\partial \chi} + \frac{1}{\varrho} \operatorname{div}(\delta \varrho \nabla \chi)$$
 (3.1d)

mit den Anfangswerten

$$(\varrho, u, \theta, \chi)(\cdot, 0) = (\varrho_0, u_0, \theta_0, \chi_0) \qquad \text{in } \Omega$$

und den Randwerten auf Σ_T

$$u = \overline{u},$$

$$\theta = \overline{\theta},$$

$$\chi = \overline{\chi}$$

sowie auf R_I

$$\varrho = \varrho_I.$$

Ferner gelten auf $\partial \Omega$ die Verträglichkeitsbedingungen

$$\overline{u}(\cdot, 0) = u_0, \overline{\theta}(\cdot, 0) = \theta_0, \overline{\chi}(\cdot, 0) = \chi_0.$$

Wir vereinbaren:

$$\overline{\varrho} := \oint_{\Omega} \varrho_0,$$

$$m := \min_{\overline{\Omega}} \varrho_0, \quad M := \max_{\overline{\Omega}} \varrho_0,$$

$$\theta_3 := \min_{\overline{\Omega}} \theta_0, \quad \theta_4 := \max_{\overline{\Omega}} \theta_0,$$

$$X_1 := \min_{\overline{\Omega}} \chi_0, \quad X_2 := \max_{\overline{\Omega}} \chi_0.$$

Zuerst zeigen wir die Äquivalenz von (3.1) mit der ursprünglichen Formulierung (2.20).

Die Äquivalenz der Kontinuitätsgleichungen folgt direkt aus $\operatorname{div}(\varrho v) = v \cdot \nabla \varrho + \varrho \operatorname{div} v$. Zur Umformulierung der Impulsgleichung schreiben wir den Spannungstensor wie in Kapitel 2 in der Form

$$\tau_{ij} = \mu \left(\partial_i u_j + \partial_j u_i \right) + \nu \operatorname{div} u \,\delta_{ij}.$$

Eine elementare Rechnung zeigt, daß

$$\operatorname{div} \tau = \mu \bigtriangleup u + (\nu + \mu) \nabla \operatorname{div} u = -Au.$$

Dies erklärt die Defition des Koeffizienten

$$\lambda := \nu + \mu,$$

der nach den Definitionen in Kapitel 2 ($\nu \ge -\frac{2}{3}$ für d = 3 und $\nu > -\mu$ für d = 2) positiv ist. Gehen wir von Gleichung (2.20b) aus, so ergibt sich (3.1b):

$$0 = \partial_t(\varrho u) + \operatorname{div}(\varrho u \otimes u) - \operatorname{div}\tau + \nabla p + \operatorname{div}\zeta$$
$$= \varrho u_t + \varrho u \cdot \nabla u + Au + \nabla p + \operatorname{div}\zeta.$$

Einsetzen der Beziehung $e = \rho c_V \theta + \frac{\rho}{2} |u|^2$ in die Energiegleichung (2.20c) liefert zunächst

$$-\left(c_V\theta + \frac{|u|^2}{2}\right)\operatorname{div}(\varrho u) + c_V\varrho \ \theta_t + \varrho u \cdot u_t = \kappa \triangle \theta + \operatorname{div}(\tau u) - \operatorname{div}(\zeta u) - u \cdot \nabla p - u \cdot \theta c_V \nabla \varrho \\ -p \operatorname{div} u - u \cdot \varrho c_V \nabla \theta - \varrho c_V \theta \operatorname{div} u - \operatorname{div}(\frac{\varrho}{2} |u|^2 u).$$

Löst man auf der linken Seite $\operatorname{div}(\varrho u)$ auf und beachtet

$$\operatorname{div}(\frac{\varrho}{2}|u|^2 u) = \varrho |u|^2 \,\nabla u + \frac{|u|^2}{2} \operatorname{div}(\varrho u),$$

so vereinfacht sich die Gleichung zu

$$c_V \varrho \left(\theta_t + u \cdot \nabla \theta\right) + p \operatorname{div} u = \kappa \triangle \theta - \varrho u \cdot u_t + \operatorname{div}(\tau u) - u \cdot \nabla p - \varrho |u|^2 \nabla u - \operatorname{div}(\zeta u).$$

Setzen wir die gerade hergeleitete Impulsgleichung (3.1b) ein, so folgt

$$c_V \rho \left(\theta_t + u \cdot \nabla \theta\right) + p \operatorname{div} u = \kappa \triangle \theta + \operatorname{div}(\tau u) + u \cdot Au + u \cdot \operatorname{div} \zeta - \operatorname{div}(\zeta u).$$
(3.2)

Mittels Transformation wie in (2.82) gilt:

$$\begin{aligned} u \cdot Au + \operatorname{div}(\tau u) &= -\operatorname{div}(\tau) \cdot u + \operatorname{div}(\tau u) = \sum_{i,j} \tau_{ij} \,\partial_j u_i \\ &= \mu \sum_{ij} (\partial_i u_j + \partial_j u_i) \,\partial_j u_i + \nu \,\operatorname{div} u \,\sum_{ij} \partial_j u_i \,\delta_{ij} \\ &= \frac{\mu}{2} \,\sum_{ij} (\partial_i u_j + \partial_j u_i)^2 + (\lambda - \mu) \,(\operatorname{div} u)^2. \end{aligned}$$

Setzt man dieses Ergebnis in (3.2) ein und beachtet noch $\operatorname{div}(\zeta u) = u \cdot \operatorname{div}\zeta + \zeta : \nabla u$, so gilt

$$c_V \varrho \left(\theta_t + u \cdot \nabla \theta\right) + p \operatorname{div} u = \kappa \, \bigtriangleup \theta + \frac{\mu}{2} \, \sum_{ij} (\partial_i u_j + \partial_j u_i)^2 + (\lambda - \mu) \, (\operatorname{div} u)^2 - \zeta : \nabla u,$$

also Gleichung (3.1c).

3.2 Transformation des Problems

Um die Randterme leichter handhaben zu können und um Sätze über Funktionen mit Mittelwert Null oder Randwert Null anwenden zu können, ist es zweckmäßig, das Problem (3.1) zu transformieren.

Als neue Variablen führen wir ein:

$$\begin{array}{lll} \sigma & := & \varrho - \overline{\varrho}, \\ v & := & u - \overline{u}, \\ \omega & := & \theta - \overline{\theta}, \\ \xi & := & \chi - \overline{\chi}. \end{array}$$

Man erhält dann das System:

Finde die Lösung (σ, v, ω, ξ) von

$$0 = \sigma_t + (v + \overline{u}) \cdot \nabla \sigma + (\sigma + \overline{\varrho}) \operatorname{div}(v + \overline{u}), \qquad (3.3a)$$

$$(\sigma + \overline{\varrho}) v_t + Av = -\nabla p - A\overline{u} - (\sigma + \overline{\varrho})[\overline{u}_t + (v + \overline{u}) \cdot \nabla(v + \overline{u})] -\operatorname{div}(\delta(\sigma + \overline{\varrho})(\omega + \overline{\theta}) \nabla(\xi + \overline{\chi}) \otimes \nabla(\xi + \overline{\chi})), \quad (3.3b)$$

$$(\sigma + \overline{\varrho})c_V\omega_t - \kappa \Delta \omega = \frac{\mu}{2} \sum_{i,j} (\partial_i (v + \overline{u})^j + \partial_j (v + \overline{u})^i)^2 -p \operatorname{div}(v + \overline{u}) - (\sigma + \overline{\varrho})c_V [\overline{\theta}_t + (v + \overline{u}) \cdot \nabla(\omega + \overline{\theta})] -\delta(\sigma + \overline{\varrho})(\omega + \overline{\theta}) \nabla(\xi + \overline{\chi}) \otimes \nabla(\xi + \overline{\chi}) : \nabla(v + \overline{u}) + (\lambda - \mu) (\operatorname{div}(v + \overline{u}))^2 + \kappa \Delta \overline{\theta},$$
(3.3c)

$$\varepsilon\xi_{t} - \frac{1}{\sigma + \overline{\varrho}} \operatorname{div}(\delta(\sigma + \overline{\varrho}) \nabla\xi) = -\frac{1}{\omega + \overline{\theta}} (G_{1} - G_{2})(\sigma + \overline{\varrho}, \omega + \overline{\theta}) - W'(\xi + \overline{\chi}) -\varepsilon \left[\overline{\chi}_{t} + (v + \overline{u}) \cdot \nabla(\xi + \overline{\chi})\right] + \frac{1}{\sigma + \overline{\varrho}} \operatorname{div}(\delta(\sigma + \overline{\varrho}) \nabla\overline{\chi})$$
(3.3d)

mit den Anfangs- und Randwerten

$$v = 0 \text{ auf } \Sigma_T,$$

$$\omega = 0 \text{ auf } \Sigma_T,$$

$$\xi = 0 \text{ auf } \Sigma_T,$$

$$v(t=0) = v_0 \equiv u_0 - \overline{u}(0) \text{ in } \Omega,$$

$$\omega(t=0) = \omega_0 \equiv \theta_0 - \overline{\theta}(0) \text{ in } \Omega,$$

$$\sigma(t=0) = \sigma_0 \equiv \varrho_0 - \overline{\varrho} \text{ in } \Omega,$$

$$\xi(t=0) = \xi_0 \equiv \chi_0 - \overline{\chi}(0) \text{ in } \Omega,$$

$$\sigma = \sigma_1 \equiv \varrho_1 - \overline{\varrho} \text{ auf } R_I \times (0,T)$$

3.3 Abschätzung der linearen Gleichungen

In diesem Abschnitt zeigen wir Abschätzungen für die linearen Fassungen der Gleichungen (3.3). Die in diesem Abschnitt als gegeben angenommenen Funktionen F, G und H werden im folgenden Abschnitt definiert und bestimmen sich aus den rechten Seiten von (3.3).

Wir beginnen mit dem linearen Problem

Finde zu $0 < T \leq \infty$ und gegebenen $\tilde{\varrho}$, F und v_0 die Lösung v von

$$\tilde{\varrho}v_t + Av = F \quad \text{in } \Omega_T, \tag{3.4a}$$

$$v = 0 \quad \text{auf } \Sigma_T, \tag{3.4b}$$

$$v(\cdot, 0) = v_0 \quad \text{in } \Omega. \tag{3.4c}$$

Die folgenden Lemmata 3.1, 3.2, 3.3 und 3.5 mit Beweis sind aus [20] entnommen.

Im ganzen Abschnitt bezeichnen wir mit $c, c_i, C_i, i \in \mathbb{N}$ Konstanten, die maximal von $\Omega, \mu, \lambda, \kappa, \overline{\varrho}, m, M, \theta_3, \theta_4, X_1, X_2, \varepsilon$ und δ abhängen, aber nicht von T.

$$\begin{split} & \text{Lemma 3.1:} \\ & Sei \ \partial\Omega \in C^3, \ \tilde{\varrho} \in L^{\infty}(\Omega_T), \quad 0 < \frac{m}{2} \leq \tilde{\varrho}(x,t) \leq 2M \ fast \ \ddot{u}berall \ in \ \Omega_T, \\ & \tilde{\varrho}(\cdot,0) \in L^{\infty}(\Omega), \ 0 < m \leq \tilde{\varrho}(\cdot,0) \leq M \ fast \ \ddot{u}berall \ in \ \Omega, \ \nabla \tilde{\varrho} \in L^2(0,T; \ L^3(\Omega)), \\ & \tilde{\varrho}_t \in L^2(0,T; \ L^3(\Omega)), \ F \in L^2(0,T; \ H^1(\Omega)) \cap L^{\infty}(0,T; \ L^2(\Omega)), \\ & F_t \in L^2(0,T; \ L^2(\Omega)) \ und \ v_0 \in H_0^1(\Omega), \ [F(0) - Av_0]/\tilde{\varrho}(0) \in H_0^1(\Omega). \\ & Dann \ gilt \ f\ddot{u}r \ die \ L\ddot{o}sung \ v \ von \ (3.4): \ v \in L^2(0,T; \ H^3(\Omega)) \cap C^0([0,T]; \ H^2(\Omega)), \\ & v_t \in L^2(0,T; \ H^2(\Omega)) \cap C^0([0,T]; \ H^1(\Omega)), \ v_{tt} \in L^2(0,T; \ L^2(\Omega)) \ und \\ & \|v\|_{L^{\infty}(0,T; \ H^2)}^2 + \ \|v\|_{L^2(0,T; \ H^3)}^2 + \|v_t\|_{L^{\infty}(0,T; \ L^1)}^2 + \|v_t\|_{L^2(0,T; \ L^2)}^2 \\ & \leq \ c_1 \left[\ \|F\|_{L^2(0,T; \ H^1)}^2 + \ \|F\|_{L^{\infty}(0,T; \ L^2)}^2 + \left(\ \|F_t\|_{L^2(0,T; \ L^2)}^2 + \left\|\frac{F(0) - Av_0}{z(\Omega)}\right\|^2 \ \right) \end{split}$$

$$\cdot (1 + \|\tilde{\varrho}_t\|_{L^2(0,T; L^3)}^2 + \|\nabla\tilde{\varrho}\|_{L^2(0,T; L^3)}^2) \exp(c_1 \|\tilde{\varrho}_t\|_{L^2(0,T; L^3)}^2)].$$
(3.5)

Beweis:

Differenziert man (3.4) nach t, so gilt mit $V := \partial_t v$:

$$\tilde{\varrho}V_t + AV + \tilde{\varrho}_t V = F_t \quad \text{in } \Omega_T, \quad (3.6a)$$

$$V = 0 \qquad \text{auf } \Sigma_T, \qquad (3.6b)$$

$$V(0) = \frac{F(0) - Av_0}{\tilde{\varrho}(0)} \quad \text{in } \Omega.$$
(3.6c)

Multipliziert man (3.6a) mit $V_t + \varepsilon_0 A V$ für $\varepsilon_0 \in \mathbb{R}^+$ geeignet und integriert auf, so erhält man

$$\int_{\Omega} (\tilde{\varrho}_t V + \tilde{\varrho} V_t + AV)(V_t + \varepsilon_0 AV) = \int_{\Omega} F_t (V_t + \varepsilon_0 AV).$$

Multipliziert man die linke Seite aus und wirft alle Terme mit dem Faktor $\tilde{\varrho}_t V$ nach rechts, so gilt

$$\int_{\Omega} (\tilde{\varrho} |V_t|^2 + \varepsilon_0 \tilde{\varrho} V_t \cdot AV + AV \cdot V_t + \varepsilon_0 |AV|^2) \le \int_{\Omega} F_t (V_t + \varepsilon_0 AV) + \Big| \int_{\Omega} \tilde{\varrho}_t V(V_t + \varepsilon_0 AV) \Big|.$$

Der Term $\varepsilon_0 \tilde{\varrho} V_t \cdot AV$ wird ebenfalls auf die rechte Seite gebracht.

Eine elementare Rechnung unter Verwendung des Satzes von Gauß ergibt, da V = 0 auf $\partial \Omega$ ist:

$$\begin{split} \int_{\Omega} AV \cdot V_t &= \int_{\Omega} (-\mu \triangle V - \lambda \nabla \operatorname{div} V) \cdot V_t \\ &= \int_{\Omega} (\mu \ \nabla V \cdot \nabla V_t + \lambda \ (\operatorname{div} V)(\operatorname{div} V_t)) \\ &= \frac{\mu}{2} \int_{\Omega} \partial_t |\nabla V|^2 + \frac{\lambda}{2} \int_{\Omega} \partial_t |\operatorname{div} V|^2. \end{split}$$

Man erhält dann:

$$\frac{m}{2} \int_{\Omega} |V_t|^2 + \frac{\mu}{2} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} |\nabla V|^2 + \frac{\lambda}{2} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} |\operatorname{div} V|^2 + \varepsilon_0 \int_{\Omega} |AV|^2 \\
\leq \|F_t\|_{L^2(\Omega)} \|V_t\|_{L^2(\Omega)} + \varepsilon_0 \|F_t\|_{L^2(\Omega)} \|AV\|_{L^2(\Omega)} \\
+ 2\varepsilon_0 M \|V_t\|_{L^2(\Omega)} \|AV\|_{L^2(\Omega)} + \left|\int_{\Omega} \tilde{\varrho}_t V(V_t + \varepsilon_0 AV)\right|$$

Für ε_0 hinreichend klein, z.B. $\varepsilon_0 := \frac{m}{32M^2}$, können wir mit der Youngschen Ungleichung $\|V_t\|_{L^2(\Omega)}^2$ und $\|AV\|_{L^2(\Omega)}^2$ links absorbieren. Das Ergebnis lautet:

$$c \frac{d}{dt} \|\nabla V\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + c \frac{d}{dt} \|\operatorname{div} V\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + \|V_{t}\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + \|AV\|_{L^{2}(\Omega)}^{2}$$

$$\leq c \|F_{t}\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + \Big| \int_{\Omega} \tilde{\varrho}_{t} V(V_{t} + \varepsilon_{0} AV) \Big|.$$

Mit der Einbettung von $H^{1,2}(\Omega) \hookrightarrow L^6(\Omega)$ und der Poincaré–Ungleichung mit Mittelwert Null (vgl. [8][S.164] oder [2][S.151]) können wir das letzte Integral abschätzen:

$$\begin{aligned} \left| \int_{\Omega} \tilde{\varrho}_{t} V(V_{t} + \varepsilon_{0} \ AV) \right| &\leq \|\nabla V\|_{L^{2}(\Omega)} \ \|\tilde{\varrho}_{t}\|_{L^{3}(\Omega)} \ (\|V_{t}\|_{L^{2}(\Omega)} + \|AV\|_{L^{2}(\Omega)}) \\ &\leq c \|\nabla V\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} \ \|\tilde{\varrho}_{t}\|_{L^{3}(\Omega)}^{2} + \frac{1}{2} \|V_{t}\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + \frac{1}{2} \|AV\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} \end{aligned}$$

Wir erhalten also:

$$c \frac{d}{dt} \|\nabla V\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + \|V_{t}\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + \|AV\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} \le c \left[\|F_{t}\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + \|\nabla V\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} \|\tilde{\varrho}_{t}\|_{L^{3}(\Omega)}^{2}\right].$$
(3.7)

Im besonderen folgt daraus

$$\frac{d}{dt} \|\nabla V\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} \leq c \left[\|F_{t}\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + \|\nabla V\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} \|\tilde{\varrho}_{t}\|_{L^{3}(\Omega)}^{2} \right].$$

+

Durch Aufintegrieren in der Zeit folgt:

$$\begin{aligned} \|\nabla V(t)\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} &\leq \|\nabla V(0)\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + c \int_{0}^{t} \left(\|F_{t}\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + \|\nabla V\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} \|\tilde{\varrho}_{t}\|_{L^{3}(\Omega)}^{2}\right) ds \\ &\leq c \left(\|V(0)\|_{H^{1}(\Omega)}^{2} + \int_{0}^{T} \|F_{t}\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} ds + \int_{0}^{T} \|\nabla V\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} \|\tilde{\varrho}_{t}\|_{L^{3}(\Omega)}^{2} ds \right). \end{aligned}$$

Mit dem Lemma von Gronwall (siehe z.B. [22]) ergibt sich:

$$\|\nabla V(t)\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} \leq c \left(\|V(0)\|_{H^{1}(\Omega)}^{2} + \|F_{t}\|_{L^{2}(0,T;L^{2})}^{2} \right) \exp\left(c \int_{0}^{T} \|\tilde{\varrho}_{t}(s)\|_{L^{3}(\Omega)}^{2} ds\right).$$

Wegen $V(0) = [F(0) - Av_0]/\tilde{\varrho}(0)$ erhalten wir

$$\|V\|_{L^{\infty}(0,T;\,H^{1})}^{2} \leq c \left(\|F_{t}\|_{L^{2}(0,T;\,L^{2})}^{2} + \left\|\frac{F(0) - Av_{0}}{\tilde{\varrho}(0)}\right\|_{H^{1}}^{2} \right) \exp\left(c \|\tilde{\varrho}_{t}\|_{L^{2}(0,T;\,L^{3})}^{2}\right).$$
(3.8)

Da A ein strikt elliptischer Operator ist, gilt $||AV||^2_{L^2(\Omega)} \simeq ||V||^2_{H^2(\Omega)}$ und $||AV||^2_{H^1(\Omega)} \simeq ||V||^2_{H^3(\Omega)}$, siehe [8], Theoreme 9.17 und 9.19. Aus (3.7) ergibt sich daher nach Aufintegrieren:

$$c \left(\|V(T)\|_{H^{1}(\Omega)}^{2} - \|V(0)\|_{H^{1}(\Omega)}^{2} \right) + c \int_{0}^{T} \left(\|V_{t}(s)\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + \|V(s)\|_{H^{2}(\Omega)}^{2} \right) ds$$

$$\leq c \int_{0}^{T} \left(\|F_{t}\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + \|\nabla V\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} \|\tilde{\varrho}_{t}\|_{L^{3}(\Omega)}^{2} \right) ds$$

Es folgt:

$$\begin{aligned} \|V_t\|_{L^2(0,T;\,L^2)}^2 + \|V\|_{L^2(0,T;\,H^2)}^2 &\leq c \ \left(\|V(0)\|_{H^1(\Omega)}^2 + \|F_t\|_{L^2(0,T;\,L^2)}^2 \right) \\ &+ c \int_0^T \|\tilde{\varrho}_t(s)\|_{L^3(\Omega)}^2 \|\nabla V(s)\|_{L^2(\Omega)}^2 \ ds. \end{aligned}$$

Mit dem Lemma von Gronwall folgt:

$$\|V_t\|_{L^2(0,T; L^2)}^2 + \|V\|_{L^2(0,T; H^2)}^2 \le c \Big(\left\|\frac{F(0) - Av_0}{\tilde{\varrho}(0)}\right\|_{H^1}^2 + \|F_t\|_{L^2(0,T; L^2)}^2 \Big) \exp(c \|\tilde{\varrho}_t\|_{L^2(0,T; L^3)}^2).$$
(3.9)

Nach (3.4a) gilt:

$$\begin{split} \|Av\|_{L^{\infty}(0,T;\,L^{2})}^{2} &\leq c \left(\|F\|_{L^{\infty}(0,T;\,L^{2})}^{2} + \|V\|_{L^{\infty}(0,T;\,L^{2})}^{2} \right) \\ &\leq c \left[\|F\|_{L^{\infty}(0,T;\,L^{2})}^{2} + \left(\|F_{t}\|_{L^{2}(0,T;\,L^{2})}^{2} + \left\| \frac{F(0) - Av_{0}}{\tilde{\varrho}(0)} \right\|_{H^{1}}^{2} \right) \exp(c \|\tilde{\varrho}_{t}\|_{L^{2}(0,T;\,L^{3})}^{2}) \right], (3.10) \end{split}$$

$$\begin{aligned} \|Av\|_{L^{2}(0,T; H^{1})} &\leq c \left[\|F\|_{L^{2}(0,T; H^{1})} + \|\nabla\tilde{\varrho} \cdot V\|_{L^{2}(0,T; L^{2})}^{2} \\ &+ \left(\left\| \frac{F(0) - Av_{0}}{\tilde{\varrho}(0)} \right\|_{H^{1}}^{2} + \|F_{t}\|_{L^{2}(0,T; L^{2})}^{2} \right) \exp(c \|\tilde{\varrho}_{t}\|_{L^{2}(0,T; L^{3})}) \right]. (3.11) \end{aligned}$$

Bei diesen beiden Abschätzungen gehen (3.8) und (3.9) ein. Zur Vereinfachung von (3.11) bemerken wir

$$\begin{aligned} \|\nabla \tilde{\varrho} \cdot V\|_{L^{2}(0,T; L^{2})}^{2} &\leq c \int_{0}^{T} \|\nabla \tilde{\varrho}(s)\|_{L^{3}(\Omega)}^{2} \|V(s)\|_{H^{1}(\Omega)}^{2} ds \\ &\leq c \|\nabla \tilde{\varrho}\|_{L^{2}(0,T; L^{3})}^{2} \left(\|F_{t}\|_{L^{2}(0,T; L^{2})}^{2} + \left\|\frac{F(0) - Av_{0}}{\tilde{\varrho}(0)}\right\|_{H^{1}}^{2}\right) \\ &\quad \cdot \exp(c \|\tilde{\varrho}_{t}\|_{L^{2}(0,T; L^{3})}^{2}). \end{aligned}$$
(3.12)

Aus (3.8), (3.9), (3.10), (3.11) und (3.12) folgt Behauptung (3.5). \Box

Als nächstes betrachten wir das lineare Problem

Finde zu $0 < T \leq \infty$ und gegebenen $\tilde{\varrho}, c_V, \kappa, G$ und ω_0 die Lösung ω von

$$c_V \tilde{\varrho} \omega_t - \kappa \Delta \omega = G \quad \text{in } \Omega_T, \tag{3.13a}$$

$$\omega = 0 \quad \text{auf } \Sigma_T, \tag{3.13b}$$

$$\omega(\cdot, 0) = \omega_0 \quad \text{in } \Omega. \tag{3.13c}$$

Indem man wie in Lemma 3.1 vorgeht und statt Av den Term $-\kappa \triangle \omega$ betrachtet, erhält man:

Lemma 3.2: Sei $\partial \Omega \in C^3$, $\tilde{\varrho} \in L^{\infty}(\Omega_T)$, $0 < \frac{m}{2} \leq \tilde{\varrho}(x,t) \leq 2M$ fast überall in Ω_T , $\tilde{\varrho}(\cdot,0) \in L^{\infty}(\Omega)$, $0 < m \leq \tilde{\varrho}(\cdot,0) \leq M$ fast überall in Ω_T , $\nabla \tilde{\varrho} \in L^2(0,T; L^3(\Omega))$, $\tilde{\varrho}_t \in L^2(0,T; L^3(\Omega))$, $G \in L^2(0,T; H^1(\Omega)) \cap L^{\infty}(0,T; L^2(\Omega))$, $G_t \in L^2(0,T; L^2(\Omega))$ und $\omega_0 \in H_0^1(\Omega)$, $[G(0) + \kappa \Delta \omega_0]/\tilde{\varrho}(0) \in H_0^1(\Omega)$. Dann gilt für die Lösung ω von (3.13): $\omega \in L^2(0,T; H^3(\Omega)) \cap C^0([0,T]; H^2(\Omega))$, $\omega_t \in L^2(0,T; H^2(\Omega)) \cap C^0([0,T]; H^1(\Omega))$, $\omega_{tt} \in L^2(0,T; L^2(\Omega))$ und

$$\begin{aligned} \|\omega\|_{L^{\infty}(0,T;\,H^{2})}^{2} &+ \|\omega\|_{L^{2}(0,T;\,H^{3})}^{2} + \|\omega_{t}\|_{L^{\infty}(0,T;\,H^{1})}^{2} + \|\omega_{t}\|_{L^{2}(0,T;\,H^{2})}^{2} + \|\omega_{tt}\|_{L^{2}(0,T;\,L^{2})}^{2} \\ &\leq c_{2} \Big[\|G\|_{L^{2}(0,T;\,H^{1})}^{2} + \|G\|_{L^{\infty}(0,T;\,L^{2})}^{2} + \Big(\|G_{t}\|_{L^{2}(0,T;\,L^{2})}^{2} + \left\|\frac{G(0) + \kappa \Delta \omega_{0}}{c_{V}\tilde{\varrho}(0)}\right\|_{H^{1}}^{2} \Big) \\ &\cdot (1 + \|\nabla\tilde{\varrho}\|_{L^{2}(0,T;\,L^{3})}^{2} + \|\tilde{\varrho}_{t}\|_{L^{2}(0,T;\,L^{3})}^{2}) \exp(c_{2} \|\tilde{\varrho}_{t}\|_{L^{2}(0,T;\,L^{3})}^{2}) \Big]. \end{aligned}$$
(3.14)

Nun betrachten wir das lineare Problem

Finde zu $0 < T \leq \infty$ und gegebenen ϱ_0, σ_0 und \tilde{u} die Lösung σ von

$$\sigma_t + \tilde{u} \cdot \nabla \sigma + \sigma \operatorname{div} \tilde{u} + \overline{\varrho} \operatorname{div} \tilde{u} = 0 \quad \text{in } \Omega_T, \qquad (3.15a)$$

$$\sigma(\cdot, 0) = \sigma_0 \quad \text{in } \Omega. \qquad (3.15b)$$

Dabei ist $\overline{\varrho} = \oint \varrho_0 > 0$ eine Konstante.

Für den Fall, daß kein Einströmrand vorhanden ist, gilt folgendes

Lemma 3.3:

Sei $\partial \Omega \in C^1$, $\tilde{u} \in L^1(0,T; H^3(\Omega))$, $\tilde{u} \cdot n \ge 0$ auf Σ_T und $\sigma_0 \in H^2(\Omega)$. Dann existiert eine eindeutige Lösung $\sigma \in C^0([0,T]; H^2(\Omega))$ von (3.15) und

$$\|\sigma\|_{L^{\infty}(0,T;\,H^2)} \leq (\|\sigma_0\|_{H^2(\Omega)} + c_3 \|\tilde{u}\|_{L^1(0,T;\,H^3)}) \exp(c_3 \|\tilde{u}\|_{L^1(0,T;\,H^3)}).$$
(3.16)

Falls ferner $\tilde{u} \in C^0([0,T]; H^2(\Omega))$, dann gilt noch $\sigma_t \in C^0([0,T]; H^1(\Omega))$ und

$$\begin{aligned} \|\sigma_t\|_{L^{\infty}(0,T; H^1)} &\leq c_4 \|\tilde{u}\|_{L^{\infty}(0,T; H^2)} \left[\left(\|\sigma_0\|_{H^2(\Omega)} + c_3 \|\tilde{u}\|_{L^1(0,T; H^3)} \right) \\ & \exp(c_3 \|\tilde{u}\|_{L^1(0,T; H^3)}) + 1 \right]. \end{aligned}$$
(3.17)

Zusatz: Falls noch $\tilde{u} \cdot n = 0$ auf Σ_T und $\oint \sigma_0 = 0$, so $\oint \sigma = 0$ für alle $t \in [0, T]$.

Beweis:

Zusatz: Aus (3.15a) folgt:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \sigma = -\int_{\Omega} \operatorname{div}(\sigma \tilde{u} + \overline{\varrho} \tilde{u}) = \int_{\partial \Omega} (\sigma + \overline{\varrho}) \ \tilde{u} \cdot n = 0,$$

also

$$\int_{\Omega} \sigma(t) = \int_{\Omega} \sigma_0 = 0 \quad \text{für alle } t \in [0,T]$$

Die Existenz einer Lösung folgt mit der Methode der Charakteristiken. Wir müssen vor allem zeigen, daß $\sigma \in C^0([0,T]; H^2(\Omega))$ und nicht nur $\sigma \in L^{\infty}(0,T; H^2(\Omega))$. Betrachte die gewöhnliche Differentialgleichung

$$\begin{array}{rcl} \displaystyle \frac{d}{dt} \; U(t,s,x) & = & \displaystyle \tilde{u}(t,\; U(t,s,x)), \quad s,\; t\in [0,T], \quad x\in\overline{\Omega}, \\ \displaystyle U(s,s,x) & = & \displaystyle x \quad \mbox{für alle } s\in [0,T],\; x\in\Omega. \end{array}$$

Die Lösung U ist in $C^0([0,T] \times [0,T]; H^2(\Omega))$, siehe [3].

Wir beweisen nun (3.16). Multipliziert man (3.15a) mit σ und integriert auf, so gilt:

$$\int_{\Omega} (\sigma_t + \tilde{u} \cdot \nabla \sigma + \sigma \operatorname{div} \tilde{u} + \overline{\varrho} \operatorname{div} \tilde{u}) \sigma = 0.$$

Es folgt

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} |\sigma|^2 = -\int_{\Omega} (\sigma^2 \operatorname{div} \tilde{u} + \overline{\varrho} \sigma \operatorname{div} \tilde{u}) - \frac{1}{2} \int_{\Omega} \tilde{u} \cdot \nabla(\sigma^2).$$

Da nach Voraussetzung Ω keinen Einströmrand besitzt, gilt für das letzte Integral:

$$-\frac{1}{2} \int_{\Omega} \tilde{u} \cdot \nabla(\sigma^2) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} (\operatorname{div} \tilde{u}) \sigma^2 - \frac{1}{2} \int_{\partial\Omega} \tilde{u} \cdot n \ \sigma^2 \le \frac{1}{2} \int_{\Omega} (\operatorname{div} \tilde{u}) \sigma^2,$$

also

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} |\sigma|^2 \le \frac{1}{2} \int_{\Omega} |\operatorname{div} \tilde{u}| \ \sigma^2 + \overline{\varrho} \int_{\Omega} |\sigma| \ |\operatorname{div} \tilde{u}|.$$

Mit den 1. Ableitungen verfahren wir genauso:

$$\int_{\Omega} \nabla(\sigma_t + \tilde{u} \cdot \nabla\sigma + \sigma \operatorname{div} \tilde{u} + \overline{\varrho} \operatorname{div} \tilde{u}) \cdot \nabla\sigma = 0;$$

und da es keinen Einströmrand gibt, folgt wieder:

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} |\nabla \sigma|^2 \leq \int_{\Omega} |\nabla \sigma|^2 (|\nabla \tilde{u}| + |\operatorname{div} \tilde{u}|) + \overline{\varrho} |\nabla \operatorname{div} \tilde{u}| |\nabla \sigma| \\
\leq c \|\tilde{u}\|_{H^2(\Omega)} (\|\sigma\|_{H^1(\Omega)}^2 + \overline{\varrho} \|\sigma\|_{H^1(\Omega)}).$$

Auch die 2. Ableitungen behandeln wir auf dieselbe Weise. Wir erhalten dann:

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|\sigma\|_{H^2(\Omega)}^2 \leq c \|\tilde{u}\|_{H^3(\Omega)} \left(\|\sigma\|_{H^2(\Omega)}^2 + \overline{\varrho} \|\sigma\|_{H^2(\Omega)} \right).$$

Dies liefert

$$\frac{a}{dt} \|\sigma\|_{H^2(\Omega)} \leq c(\overline{\varrho}) \|\tilde{u}\|_{H^3(\Omega)} + c \|\tilde{u}\|_{H^3(\Omega)} \|\sigma\|_{H^2(\Omega)}.$$

Aufintegrieren in der Zeit ergibt für $t \in [0, T]$:

$$\|\sigma(t)\|_{H^{2}(\Omega)} \leq \|\sigma(0)\|_{H^{2}(\Omega)} + c \int_{0}^{T} \|\tilde{u}(s)\|_{H^{3}(\Omega)} ds + c \int_{0}^{T} \|\tilde{u}(s)\|_{H^{3}(\Omega)} \|\sigma(s)\|_{H^{2}(\Omega)} ds$$

Mit dem Lemma von Gronwall folgt hieraus unmittelbar Beziehung (3.16).

Zum Beweis von (3.17) bemerken wir, daß nach (3.15a) gilt:

$$\begin{aligned} \|\sigma_t\|_{H^1(\Omega)} &\leq & \|\tilde{u}\|_{H^1(\Omega)} \|\sigma\|_{H^2(\Omega)} + \|\sigma\|_{H^1(\Omega)} \|\tilde{u}\|_{H^2(\Omega)} + \overline{\varrho} \|\tilde{u}\|_{H^2(\Omega)} \\ &\leq & \|\tilde{u}\|_{H^2(\Omega)} (2 \|\sigma\|_{H^2(\Omega)} + \overline{\varrho}) \\ &\leq & c \|\tilde{u}\|_{H^2(\Omega)} (\|\sigma\|_{H^2(\Omega)} + 1). \end{aligned}$$

Daraus ergibt sich (3.17). \Box

Nach Zerlegung von $\frac{1}{\varrho} \operatorname{div}(\delta \varrho \nabla \xi)$ betrachten wir schließlich das Problem $(B\xi := -\delta \Delta \xi)$ Finde zu $0 < T \leq \infty$ und gegebenen ε , δ , $\tilde{\varrho}$, H und ξ_0 die Lösung ξ von

$$\varepsilon \xi_t + B \xi = H + \delta \nabla (\ln \tilde{\varrho}) \cdot \nabla \xi \quad \text{in } \Omega_T, \tag{3.18a}$$

$$\xi = 0 \qquad \text{auf } \Sigma_T, \qquad (3.18b)$$

$$\xi(\cdot, 0) = \xi_0 \qquad \text{in } \Omega. \qquad (3.18c)$$

Lemma 3.4:

 $\begin{array}{l} Sei \ \partial\Omega \in C^3, \ \nabla(\ln\tilde{\varrho}) \in L^{\infty}(0,T; \ L^2(\Omega)) \cap L^2(0,T; \ H^1(\Omega)), \ \nabla(\ln\tilde{\varrho})_t \in L^2(0,T; L^2(\Omega)).\\ Sei \ H \in L^2(0,T; \ H^1(\Omega)) \cap L^{\infty}(0,T; \ L^2(\Omega)),\\ H_t \in L^2(0,T; \ L^2(\Omega)) \ und \ \xi_0 \in H^1_0(\Omega), \ [H(0) + \delta\nabla(\ln\tilde{\varrho}(0)) \cdot \nabla\xi_0 - B(0)\xi_0] \in H^1_0(\Omega).\\ Dann \ gilt \ für \ die \ L\"{osung} \ \xi \ von \ (3.18): \ \xi \in L^2(0,T; \ H^3(\Omega)) \cap C^0([0,T]; \ H^2(\Omega)),\\ \xi_t \in L^2(0,T; \ H^2(\Omega)) \cap C^0([0,T]; \ H^1(\Omega)), \ \xi_{tt} \in L^2(0,T; \ L^2(\Omega)) \ und \end{array}$

$$\begin{aligned} \|\xi\|_{L^{\infty}(0,T;\,H^{2})}^{2} &+ \|\xi\|_{L^{2}(0,T;\,H^{3})}^{2} + \|\xi_{t}\|_{L^{\infty}(0,T;\,H^{1})}^{2} + \|\xi_{t}\|_{L^{2}(0,T;\,H^{2})}^{2} + \|\xi_{t}\|_{L^{2}(0,T;\,L^{2})}^{2} \\ &\leq c_{5} \Big\{ \|H\|_{L^{2}(0,T;\,H^{1})}^{2} + \|H\|_{L^{\infty}(0,T;\,L^{2})}^{2} + \Big[\Big\|\frac{H(0) + \delta\nabla(\ln\tilde{\varrho}(0)) \cdot \nabla\xi_{0} - B\xi_{0}}{\varepsilon} \Big\|_{H^{1}(\Omega)}^{2} \\ &+ \|H_{t}\|_{L^{2}(0,T;\,L^{2})}^{2} + (\|\nabla(\ln\tilde{\varrho})\|_{L^{\infty}(0,T;\,L^{2})}^{2} + \|\nabla(\ln\tilde{\varrho})_{t}\|_{L^{2}(0,T;\,L^{2})}^{2} \\ &+ \|\nabla(\ln\tilde{\varrho})\|_{L^{2}(0,T;\,H^{1})}^{2}) (\|\xi_{0}\|_{H^{1}(\Omega)}^{2} + \|H\|_{L^{2}(0,T;\,L^{2})}^{2}) \Big] \\ &\cdot \exp\left(c \|\nabla(\ln\tilde{\varrho})\|_{L^{2}(0,T;\,L^{2})}^{2}\right) \Big\}. \end{aligned}$$
(3.19)

Beweis:

Wir müssen den Beweis der früheren Lemmata modifizieren, da die rechte Seite erweitert wurde. Zunächst leiten wir eine a-priori–Abschätzung her.

Multiplizieren wir (3.18a) mit $\xi_t + \varepsilon_0 B\xi$, $\varepsilon_0 \in \mathbb{R}^+$ ge
eignet und integrieren auf, so folgt

$$\int_{\Omega} (\varepsilon |\xi_t|^2 + (\varepsilon \varepsilon_0 + 1) \, \xi_t B \xi + \varepsilon_0 \, |B\xi|^2) = \int_{\Omega} (H + \delta \nabla (\ln \tilde{\varrho}) \cdot \nabla \xi) \, (\xi_t + \varepsilon_0 B \xi).$$

Mit dem Satz von Gauß ergibt sich

$$\begin{split} \int_{\Omega} (B\xi)\xi_t &= \int_{\Omega} -\delta \triangle \xi \; \xi_t = \int_{\Omega} \delta \nabla \xi \cdot \nabla \xi_t \\ &= \int_{\Omega} \frac{\delta}{2} \; \partial_t |\nabla \xi|^2. \end{split}$$

Daher gilt:

$$\int_{\Omega} (\varepsilon |\xi_t|^2 + \frac{\delta}{2} (\varepsilon \varepsilon_0 + 1) \partial_t |\nabla \xi|^2 + \varepsilon_0 |B\xi|^2) \leq \|H\|_{L^2(\Omega)} \|\xi_t\|_{L^2(\Omega)} + \varepsilon_0 \|H\|_{L^2(\Omega)} \|B\xi\|_{L^2(\Omega)} + \delta \|\nabla (\ln \tilde{\varrho})\|_{L^2(\Omega)} \|\nabla \xi\|_{L^2(\Omega)} (\|\xi_t\|_{L^2(\Omega)} + \varepsilon_0 \|B\xi\|_{L^2(\Omega)}).$$

Mit der Youngschen Ungleichung absorbieren wir die Terme $\|\xi_t\|_{L^2(\Omega)}^2$ und $\|B\xi\|_{L^2(\Omega)}^2$ links und erhalten:

$$c \frac{d}{dt} \|\nabla \xi\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + \|\xi_{t}\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + \|B\xi\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} \le c \left(\|H\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + \|\nabla(\ln\tilde{\varrho})\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} \|\nabla\xi\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} \right).$$
(3.20)

Im besonderen folgt daraus:

$$\frac{d}{dt} \|\nabla\xi(t)\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} \leq c \left(\|H\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + \|\nabla(\ln\tilde{\varrho})\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} \|\nabla\xi\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} \right)$$

und nach Integration in der Zeit:

.

$$\|\xi\|_{L^{\infty}(0,T;\,H^{1})}^{2} \leq c \left(\|\xi_{0}\|_{H^{1}(\Omega)}^{2} + \|H\|_{L^{2}(0,T;\,L^{2})}^{2} \right) \exp\left(c \|\nabla(\ln\tilde{\varrho})\|_{L^{2}(0,T;\,L^{2})}^{2} \right).$$
(3.21)

Aus (3.20) ergibt sich noch:

$$c \left(\|\nabla\xi(T)\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} - \|\nabla\xi_{0}\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} \right) + \int_{0}^{T} \|\xi_{t}(s)\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + \|B\xi(s)\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} ds$$

$$\leq c \|H\|_{L^{2}(0,T; L^{2})}^{2} + c \int_{0}^{T} \|\nabla(\ln\tilde{\varrho}(s))\|_{L^{2}(\Omega)} \|\nabla\xi(s)\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} ds.$$

Wegen der strikten Elliptizität von Berhalten wir mit dem Lemma von Gronwall die a-priori-Abschätzung

$$\|\xi_t\|_{L^2(0,T;\,L^2)}^2 + \|\xi\|_{L^2(0,T;\,H^2)}^2 \le c \left(\|\xi_0\|_{H^1(\Omega)}^2 + \|H\|_{L^2(0,T;\,L^2)}^2\right) \exp(c \|\nabla(\ln \tilde{\varrho})\|_{L^2(0,T;\,L^2)}^2).$$
(3.22)

Wir vereinbaren für das folgende die Abkürzung $X := \xi_t$.

Um stärkere Abschätzungen herzuleiten, differenzieren wir (3.18a) nach t, multiplizieren mit $(X_t + \varepsilon_0 BX)$ und integrieren über Ω . Dann gilt:

$$\int_{\Omega} (\varepsilon |X_{t}|^{2} + (\varepsilon \varepsilon_{0} + 1) X_{t} BX + \varepsilon_{0} |BX|^{2}) \leq \|H_{t}\|_{L^{2}(\Omega)} \|X_{t}\|_{L^{2}(\Omega)} + \varepsilon_{0} \|H_{t}\|_{L^{2}(\Omega)} \|BX\|_{L^{2}(\Omega)} + \delta \|\nabla(\ln\tilde{\varrho})_{t}\|_{L^{2}(\Omega)} \|\nabla\xi\|_{L^{2}(\Omega)} \|X_{t}\|_{L^{2}(\Omega)} + \delta\varepsilon_{0} \|\nabla(\ln\tilde{\varrho})_{t}\|_{L^{2}(\Omega)} \|\nabla\xi\|_{L^{2}(\Omega)} \|BX\|_{L^{2}(\Omega)} + \delta \|\nabla(\ln\tilde{\varrho})\|_{L^{2}(\Omega)} \|\nabla X\|_{L^{2}(\Omega)} \|X_{t}\|_{L^{2}(\Omega)} + \delta\varepsilon_{0} \|\nabla(\ln\tilde{\varrho})\|_{L^{2}(\Omega)} \|\nabla X\|_{L^{2}(\Omega)} \|BX\|_{L^{2}(\Omega)}$$

Nach partieller Integration von $X_t B X$ wie oben, Verwendung der Youngschen Ungleichung und für $\varepsilon_0 := \frac{\varepsilon}{2}$ ist

$$\begin{aligned} \|X_t\|_{L^2(\Omega)}^2 &+ c \frac{d}{dt} \|\nabla X\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|BX\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq c \left(\|H_t\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\nabla(\ln\tilde{\varrho})\|_{L^2(\Omega)}^2 \|\nabla X\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ &+ \|\nabla(\ln\tilde{\varrho})_t\|_{L^2(\Omega)}^2 \|\nabla \xi\|_{L^2(\Omega)}^2 \right). \end{aligned}$$
(3.23)

Im besonderen folgt daraus nach Integration in der Zeit:

$$\begin{aligned} \|\nabla X(t)\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} &\leq \|\nabla X(0)\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + c\left(\|H_{t}\|_{L^{2}(0,T;\,L^{2})}^{2} + \|\nabla(\ln\tilde{\varrho})_{t}\|_{L^{2}(0,T;\,L^{2})}^{2} \|\nabla\xi\|_{L^{2}(0,T;\,L^{2})}^{2} \\ &+ \|\nabla(\ln\tilde{\varrho})\|_{L^{2}(0,T;\,L^{2})}^{2} \|\nabla X\|_{L^{2}(0,T;\,L^{2})}^{2} \right). \end{aligned}$$

also mit Hilfe der Abschätzung (3.22) und dem Lemma von Gronwall:

$$\begin{aligned} \|X\|_{L^{\infty}(0,T;\,H^{1})}^{2} &\leq c \left[\|X(0)\|_{H^{1}(\Omega)}^{2} + \|H_{t}\|_{L^{2}(0,T;\,L^{2})}^{2} + \|\nabla(\ln\tilde{\varrho})_{t}\|_{L^{2}(0,T;\,L^{2})}^{2} \\ &\cdot (\|H\|_{L^{2}(0,T;\,L^{2})}^{2} + \|\xi_{0}\|_{H^{1}(\Omega)}^{2}) \right] \exp\left(c \|\nabla(\ln\tilde{\varrho})\|_{L^{2}(0,T;\,L^{2})}^{2}\right) (3.24) \end{aligned}$$

Aus (3.23) ergibt sich noch

$$\begin{aligned} \|\nabla X(T)\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} &- \|\nabla X(0)\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + \int_{0}^{T} \|X_{t}(s)\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + \|BX(s)\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} ds \\ &\leq c \left[\|H_{t}\|_{L^{2}(0,T; L^{2})}^{2} + \|\nabla(\ln\tilde{\varrho})\|_{L^{2}(0,T; L^{2})}^{2} (\|H\|_{L^{2}(0,T; L^{2})}^{2} + \|\xi_{0}\|_{H^{1}(\Omega)}^{2}) \right. \\ &\left. \cdot \exp\left(c \|\nabla(\ln\tilde{\varrho})\|_{L^{2}(0,T; L^{2})}^{2} \right) + \|\nabla(\ln\tilde{\varrho})\|_{L^{2}(0,T; L^{2})}^{2} \|\nabla X\|_{L^{2}(0,T; L^{2})}^{2} \right]. \end{aligned}$$

Mit der strikten Elliptizität von ${\cal B}$ und dem Lemma von Gronwall folgt

$$\begin{aligned} \|X_t\|_{L^2(0,T;\,L^2)}^2 &+ \|X\|_{L^2(0,T;\,H^2)}^2 \leq c \left[\|X(0)\|_{H^1(\Omega)}^2 + \|H_t\|_{L^2(0,T;\,L^2)}^2 \\ &+ \|\nabla(\ln\tilde{\varrho})\|_{L^2(0,T;\,L^2)}^2 \left(\|H\|_{L^2(0,T;\,L^2)}^2 + \|\xi_0\|_{H^1(\Omega)}^2 \right) \right] \exp\left(c \|\nabla(\ln\tilde{\varrho})\|_{L^2(0,T;\,L^2)}^2 \right). (3.25) \end{aligned}$$

Wegen

$$X = \xi_t = \frac{H + \delta \nabla (\ln \tilde{\varrho}) \cdot \nabla \xi - B\xi}{\varepsilon}$$

gilt

$$\begin{split} \|B\xi\|_{L^{\infty}(0,T;\,L^{2})}^{2} &\leq c \left(\|H\|_{L^{\infty}(0,T;\,L^{2})}^{2} + \|X\|_{L^{\infty}(0,T;\,L^{2})}^{2} \\ &+ \|\nabla(\ln\tilde{\varrho})\|_{L^{\infty}(0,T;\,L^{2})}^{2} \|\nabla\xi\|_{L^{\infty}(0,T;\,L^{2})}^{2} \right), \end{split}$$

und unter Verwendung von (3.21) und (3.24):

$$\begin{aligned} \|\xi\|_{L^{\infty}(0,T;\,H^{2})}^{2} &\leq c \left(\|H\|_{L^{\infty}(0,T;\,L^{2})}^{2} + [\|X(0)\|_{H^{1}(\Omega)}^{2} + \|H_{t}\|_{L^{2}(0,T;\,L^{2})}^{2} \right. \\ &+ \left(\|\nabla(\ln\tilde{\varrho})\|_{L^{\infty}(0,T;\,L^{2})}^{2} + \|\nabla(\ln\tilde{\varrho})_{t}\|_{L^{2}(0,T;\,L^{2})}^{2} \right) \left(\|\xi_{0}\|_{H^{1}(\Omega)}^{2} + \|H\|_{L^{2}(0,T;\,L^{2})}^{2} \right) \right] \\ &\cdot \exp\left(c \|\nabla(\ln\tilde{\varrho})\|_{L^{2}(0,T;\,L^{2})}^{2} \right) \right). \end{aligned}$$
(3.26)

Genauso erhalten wir

$$\|B\xi\|_{L^2(0,T;\,H^1)}^2 \le c \left(\|H\|_{L^2(0,T;\,H^1)}^2 + \|X\|_{L^2(0,T;\,H^1)}^2 + \|\nabla(\ln\tilde{\varrho})\|_{L^2(0,T;\,H^1)}^2 \|\nabla\xi\|_{L^2(0,T;\,H^1)}^2 \right)$$

und mit (3.22) und (3.25)

$$\begin{aligned} \|\xi\|_{L^{2}(0,T;\,H^{3})}^{2} &\leq c \left\{ \|H\|_{L^{2}(0,T;\,H^{1})}^{2} + [\,\|X(0)\|_{H^{1}(\Omega)}^{2} + \|H_{t}\|_{L^{2}(0,T;\,L^{2})}^{2} + \|\nabla(\ln\tilde{\varrho})\|_{L^{2}(0,T;\,H^{1})}^{2} \\ &\cdot (\,\|H\|_{L^{2}(0,T;\,L^{2})}^{2} + \|\xi_{0}\|_{H^{1}(\Omega)}^{2} \,)]\exp\left(c\,\|\nabla\ln\tilde{\varrho}\right)\|_{L^{2}(0,T;\,L^{2})}^{2} \,\right\}. \end{aligned}$$
(3.27)

Die Abschätzungen (3.24) bis (3.27) liefern den Beweis für (3.19). \Box

3.4 Formulierung der Fixpunktiteration

Um den Schauderschen Fixpunktsatz anwenden zu können, definieren wir für Konstanten B_1 und B_2 , die später spezifiziert werden, die Menge

$$\begin{aligned} R_{T} &:= \left\{ \begin{array}{l} \left(\tilde{v}, \tilde{\sigma}, \tilde{\omega}, \tilde{\xi} \right) \mid \tilde{v} \in C^{0}([0,T]; \ H^{2}(\Omega)) \cap L^{2}(0,T; \ H^{3}(\Omega)), \\ \tilde{v}_{t} \in L^{\infty}(0,T; \ H^{1}(\Omega)) \cap L^{2}(0,T; \ H^{2}(\Omega)), \\ \tilde{\sigma} \in L^{\infty}(0,T; \ H^{2}(\Omega)), \ \tilde{\sigma}_{t} \in L^{\infty}(0,T; \ H^{1}(\Omega)), \\ \tilde{\omega} \in C^{0}([0,T]; \ H^{2}(\Omega)) \cap L^{2}(0,T; \ H^{3}(\Omega)), \\ \tilde{\omega}_{t} \in L^{\infty}(0,T; \ H^{1}(\Omega)) \cap L^{2}(0,T; \ H^{2}(\Omega)), \\ \tilde{\xi} \in C^{0}([0,T]; \ H^{2}(\Omega)) \cap L^{2}(0,T; \ H^{3}(\Omega)), \\ \tilde{\xi}_{t} \in L^{2}(0,T; \ H^{2}(\Omega)) \cap C^{0}([0,T]; \ H^{1}(\Omega)), \\ \|\tilde{v}\|_{L^{\infty}(0,T; \ H^{2})}^{2} + \|\tilde{v}\|_{L^{2}(0,T; \ H^{3})}^{2} + \|\tilde{v}_{t}\|_{L^{\infty}(0,T; \ H^{1})}^{2} + \|\tilde{v}_{t}\|_{L^{2}(0,T; \ H^{2})}^{2} \leq B_{1}, \\ \tilde{v}(0) = u_{0} - \bar{u}(0) \text{ in } \Omega, \ \tilde{v} = 0 \text{ auf } \Sigma_{T}, \ \|\tilde{\sigma}\|_{L^{\infty}(0,T; \ H^{1})} + \|\tilde{\omega}_{t}\|_{L^{\infty}(0,T; \ H^{2})}^{2} \leq B_{1}, \\ \tilde{\sigma}(0) = \varrho_{0} - \bar{\varrho}, \ 0 < \frac{m}{2} \leq \tilde{\sigma}(x,t) + \bar{\varrho} \leq 2M \text{ fast überall in } \Omega_{T}, \\ \|\tilde{\omega}\|_{L^{\infty}(0,T; \ H^{2})}^{2} + \|\tilde{\omega}\|_{L^{2}(0,T; \ H^{3})}^{2} + \|\tilde{\omega}_{t}\|_{L^{\infty}(0,T; \ H^{1})}^{2} + \|\tilde{\omega}_{t}\|_{L^{2}(0,T; \ H^{2})}^{2} \leq B_{1}, \\ \tilde{\omega}(0) = \theta_{0} - \bar{\theta}(0) \text{ in } \Omega, \ \tilde{\omega} = 0 \text{ auf } \Sigma_{T}, \ 0 < \frac{\theta_{3}}{2} \leq \tilde{\omega}(x,t) + \bar{\theta}(x,t) \leq 2\theta_{4} \text{ in } \overline{\Omega}_{T}, \\ \|\tilde{\xi}\|_{L^{\infty}(0,T; \ H^{2})}^{2} + \|\tilde{\xi}\|_{L^{2}(0,T; \ H^{3})}^{2} + \|\tilde{\xi}_{t}\|_{L^{\infty}(0,T; \ H^{1})}^{2} + \|\tilde{\xi}_{t}\|_{L^{2}(0,T; \ H^{2})}^{2} \leq B_{1}, \\ \tilde{\xi}(0) = \chi_{0} - \overline{\chi}(0) \text{ in } \Omega, \ \tilde{\xi} = 0 \text{ auf } \Sigma_{T}, \ 0 < \frac{\theta_{3}}{2} \leq \tilde{\omega}(x,t) + \overline{\theta}(x,t) \leq 2\theta_{4} \text{ in } \overline{\Omega}_{T}, \\ 0 < \frac{\chi_{1}}{2} \leq \tilde{\xi}(x,t) + \overline{\chi}(x,t) \leq 2X_{2} \text{ in } \overline{\Omega}_{T} \right\} \end{aligned}$$

und definieren eine Abbildung auf R_T durch $L : (\tilde{v}, \tilde{\sigma}, \tilde{\omega}, \tilde{\xi}) \to (v, \sigma, \omega, \xi)$, wobei v, σ, ω, ξ die Lösung von (3.4), (3.13), (3.15) respektive (3.18) sind.

In Ergänzung des letzten Abschnitts ist

$$\varrho \equiv \sigma + \overline{\varrho},
F \equiv -(\tilde{\sigma} + \overline{\varrho}) \left[\overline{u}_t + (\tilde{v} + \overline{u}) \cdot \nabla(\tilde{v} + \overline{u}) \right] - A\overline{u} - \nabla p(\tilde{\sigma} + \overline{\varrho}, \tilde{\omega} + \overline{\theta}, \tilde{\xi} + \overline{\chi})
- \operatorname{div}(\delta(\tilde{\sigma} + \overline{\varrho})(\tilde{\omega} + \overline{\theta})\nabla(\tilde{\xi} + \overline{\chi}) \otimes \nabla(\tilde{\xi} + \overline{\chi})),$$

$$G \equiv (\tilde{\sigma} + \overline{\varrho})c_V \left[\overline{\theta}_t + (\tilde{v} + \overline{u}) \cdot \nabla(\tilde{\omega} + \overline{\theta}) \right] - p(\tilde{\sigma} + \overline{\varrho}, \tilde{\omega} + \overline{\theta}, \tilde{\xi} + \overline{\chi}) \operatorname{div}(\tilde{v} + \overline{u})
+ \kappa \Delta \overline{\theta} + \frac{\mu}{2} \sum_{i,k} (\partial_k \tilde{v}_i + \partial_k \overline{u}_i + \partial_i \tilde{v}_k + \partial_i \overline{u}_k)^2 + (\lambda - \mu) \left[\operatorname{div}(\tilde{v} + \overline{u}) \right]^2
- \delta(\tilde{\sigma} + \overline{\varrho})(\tilde{\omega} + \overline{\theta}) \nabla(\tilde{\xi} + \overline{\chi}) \otimes \nabla(\tilde{\xi} + \overline{\chi}) : \nabla(\tilde{v} + \overline{u}),$$

$$H = - \epsilon \left[\overline{v} + (\tilde{v} + \overline{u}) \cdot \nabla(\tilde{\xi} + \overline{\chi}) \right]^2$$

$$(3.30)$$

$$H \equiv -\varepsilon \left[\overline{\chi}_t + (\tilde{v} + \overline{u}) \cdot \nabla(\tilde{\xi} + \overline{\chi})\right] - \frac{1}{\tilde{\omega} + \overline{\theta}} (G_1 - G_2)(\tilde{\sigma} + \overline{\varrho}, \tilde{\omega} + \overline{\theta}) -W'(\tilde{\xi} + \overline{\chi}) + \frac{1}{\tilde{\sigma} + \overline{\varrho}} \operatorname{div}(\delta(\tilde{\sigma} + \overline{\varrho})\nabla\overline{\chi}).$$
(3.31)

Die Funktionen F, G und H ergeben sich also aus den rechten Seiten der Formulierung (3.3). Als nächstes bemerken wir, daß für B_1 , B_2 hinreichend groß und T hinreichend klein $R_T \neq \emptyset$ ist. Das folgt mit denselben Argumenten wie in [20].

Dazu se
i v^\ast die Lösung von

$$v_t^* - \triangle v^* = K_1 \quad \text{in } \Omega_{\infty},$$

$$v^* = 0 \quad \text{auf } \Sigma_{\infty},$$

$$v^*(0) = u_0 - \overline{u}(0) \quad \text{in } \Omega,$$

wobei $K_1(0) = -\Delta(u_0 - \overline{u}(0))$ (so daß $v_t^*(0) = 0$), und ω^* die Lösung von

$$\omega_t^* - \Delta \omega^* = K_2 \quad \text{in } \Omega_{\infty},$$

$$\omega^* = 0 \quad \text{auf } \Sigma_{\infty},$$

$$\omega^*(0) = \theta_0 - \overline{\theta}(0) \quad \text{in } \Omega,$$

wobei $K_2(0) = -\triangle(\theta_0 - \overline{\theta}(0))$ (so daß $\omega_t^*(0) = 0$). Schließlich sei ξ^* die Lösung von

$$\begin{aligned} \xi_t^* - \Delta \xi^* &= K_3 & \text{in } \Omega_\infty, \\ \xi^* &= 0 & \text{auf } \Sigma_\infty, \\ \xi^*(0) &= \chi_0 - \overline{\chi}(0) & \text{in } \Omega, \end{aligned}$$

mit $K_3(0) = -\Delta(\chi_0 - \overline{\chi}(0))$ (damit $\xi_t^*(0) = 0$). Für die rechten Seiten K_i , i = 1, 2, 3 gelte $K_i \in L^2(\mathbb{R}^+; H^1(\Omega)), (K_i)_t \in L^2(\mathbb{R}^+; L^2(\Omega)).$

Für die Lösungen (v^*, ω^*, ξ^*) gelten die Abschätzungen

$$\begin{split} \|v^*\|_{L^{\infty}(\mathbb{R}^+; H^2(\Omega))}^2 + \|v^*\|_{L^2(\mathbb{R}^+; H^3(\Omega))}^2 + \|v^*_t\|_{L^{\infty}(\mathbb{R}^+; H^1(\Omega))}^2 \\ &+ \|v^*_t\|_{L^2(\mathbb{R}^+; H^2(\Omega))}^2 \le c_6 \|u_0 - \overline{u}(0)\|_{H^{5/2}(\Omega)}^2 , \\ \|\omega^*\|_{L^{\infty}(\mathbb{R}^+; H^2(\Omega))}^2 + \|\omega^*\|_{L^2(\mathbb{R}^+; H^3(\Omega))}^2 + \|\omega^*_t\|_{L^{\infty}(\mathbb{R}^+; H^1(\Omega))}^2 \\ &+ \|\omega^*_t\|_{L^2(\mathbb{R}^+; H^2(\Omega))}^2 \le c_6 \|\theta_0 - \overline{\theta}(0)\|_{H^{5/2}(\Omega)}^2 , \\ \|\xi^*\|_{L^{\infty}(\mathbb{R}^+; H^2(\Omega))}^2 + \|\xi^*\|_{L^2(\mathbb{R}^+; H^3(\Omega))}^2 + \|\xi^*_t\|_{L^{\infty}(\mathbb{R}^+; H^1(\Omega))}^2 \\ &+ \|\xi^*_t\|_{L^2(\mathbb{R}^+; H^2(\Omega))}^2 \le c_6 \|\chi_0 - \overline{\chi}(0)\|_{H^{5/2}(\Omega)}^2 . \end{split}$$

Wählen wir also

$$B_{1} > \max \{ c_{6} \| u_{0} - \overline{u}(0) \|_{H^{5/2}(\Omega)}^{2}, c_{6} \| \theta_{0} - \overline{\theta}(0) \|_{H^{5/2}(\Omega)}^{2}, \| \varrho_{0} - \overline{\varrho} \|_{H^{2}(\Omega)}, c_{6} \| \chi_{0} - \overline{\chi}(0) \|_{H^{5/2}(\Omega)}^{2} \},$$
(3.32a)
$$B_{2} \geq 0,$$
(3.32b)

so erfüllen $(\varrho_0 - \overline{\varrho}, v^*, \omega^*, \xi^*)$ alle geforderten Eigenschaften der Menge R_T , mit Ausnahme von

$$0 < \frac{\theta_3}{2} \le \omega^*(x,t) + \overline{\theta}(x,t) \le 2\theta_4 \text{ in } \Omega_T,$$

$$0 < \frac{X_1}{2} \le \xi^*(x,t) + \overline{\chi}(x,t) \le 2X_2 \text{ in } \Omega_T.$$

Durch Interpolation folgt aber:

$$\begin{split} \|\omega^{*} + \overline{\theta} - \theta_{0}\|_{C^{0}(\overline{\Omega}_{T})} &\leq c \|\omega^{*} + \overline{\theta} - \theta_{0}\|_{L^{\infty}(0,T; H^{1}(\Omega))}^{\frac{1}{3}} \|\omega^{*} + \overline{\theta} - \theta_{0}\|_{L^{\infty}(0,T; H^{2}(\Omega))}^{\frac{2}{3}} \\ &\leq c T^{\frac{1}{3}} \left(\|\omega_{t}^{*}\|_{L^{\infty}(0,T; H^{1})} + \|\overline{\theta}_{t}\|_{L^{\infty}(0,T; H^{1})} \right)^{\frac{1}{3}} \\ &\quad \cdot \left(\|\omega^{*}\|_{L^{\infty}(0,T; H^{2})} + \|\overline{\theta}\|_{L^{\infty}(0,T; H^{2})} + \|\theta_{0}\|_{H^{2}(\Omega)} \right)^{\frac{2}{3}}, \quad (3.33a) \\ \|\xi^{*} + \overline{\chi} - \chi_{0}\|_{C^{0}(\overline{\Omega}_{T})} &\leq c \|\xi^{*} + \overline{\chi} - \chi_{0}\|_{L^{\infty}(0,T; H^{1}(\Omega))}^{\frac{1}{3}} \|\xi^{*} + \overline{\chi} - \chi_{0}\|_{L^{\infty}(0,T; H^{2}(\Omega))}^{\frac{2}{3}} \\ &\leq c T^{\frac{1}{3}} \left(\|\xi^{*}_{t}\|_{L^{\infty}(0,T; H^{1})} + \|\overline{\chi}_{t}\|_{L^{\infty}(0,T; H^{1})} \right)^{\frac{1}{3}} \\ &\quad \cdot \left(\|\xi^{*}\|_{L^{\infty}(0,T; H^{2})} + \|\overline{\chi}\|_{L^{\infty}(0,T; H^{2})} + \|\chi_{0}\|_{H^{2}(\Omega)} \right)^{\frac{2}{3}}. \quad (3.33b) \end{split}$$

D.h. es gibt hinreichend große Konstanten B_1 und B_2 und ein T_1 , so daß $R_T \neq \emptyset$ für $T \leq T_1$ gilt. Ab jetzt sei immer $T \leq T_1$ und B_1 , B_2 erfüllen (3.32).

Zum Abschluß berechnen wir die in den Lemmata 3.1 bis 3.4 verwendeten Normen der Funktionen F, G und H. Dazu benötigen wir die Abschätzung $(k \in \mathbb{N}, v \in H^k(\Omega), v_t \in L^2(0,T; H^k(\Omega)))$

$$\|v(t)\|_{H^{k}(\Omega)}^{2} \leq c \left(\|v(0)\|_{H^{k}(\Omega)}^{2} + t \int_{0}^{t} \|v_{t}(s)\|_{H^{k}(\Omega)}^{2} ds \right), \quad 0 \leq t \leq T.$$
(3.34)

Der Beweis von (3.34) findet sich z.B. in [12], Kapitel 3.

Nach langen, aber elementaren Rechnungen erhalten wir nun die folgenden Abschätzungen:

$$\|F\|_{L^{2}(0,T; H^{1})}^{2} \leq C_{1}(B_{1}, \overline{u}, \overline{\theta}, \overline{\chi}, p) \left(\|\overline{u}\|_{L^{2}(0,T; H^{3})}^{2} + \|\overline{u}_{t}\|_{L^{2}(0,T; H^{1})}^{2} + \|\overline{\chi}\|_{L^{2}(0,T; H^{3})}^{2} + T \right), \quad (3.35a)$$

$$\|F\|_{L^{\infty}(0,T; L^{2})}^{2} \leq C_{2}(\overline{u}, \overline{\theta}, \overline{\chi}, p) \left(1 + \|u_{0} - \overline{u}(0)\|_{H^{1}(\Omega)}^{4} + \|\theta_{0} - \overline{\theta}(0)\|_{H^{1}(\Omega)}^{2} + \|\sigma_{0}\|_{H^{1}(\Omega)}^{2} + \|\chi_{0} - \overline{\chi}(0)\|_{H^{1}(\Omega)}^{2} + c(B_{1}, B_{2}) T^{2} \right), \quad (3.35b)$$

$$\|F_t\|_{L^2(0,T; L^2)} \leq C_3(B_1, B_2, \overline{u}, \overline{\theta}, \overline{\chi}, p) \left(\|\overline{u}_{tt}\|_{L^2(0,T; L^2)}^2 + \|\overline{u}_t\|_{L^2(0,T; H^2)}^2 + \|\overline{u}\|_{L^2(0,T; H^1)}^2 + \|\overline{\theta}\|_{L^2(0,T; H^1)}^2 + \|\overline{\chi}\|_{L^2(0,T; H^2)}^2 + \|\overline{\chi}_t\|_{L^2(0,T; H^2)}^2 + T \right), (3.35c)$$

$$\|G\|_{L^{2}(0,T; H^{1})}^{2} \leq C_{4}(B_{1}, \overline{u}, \overline{\theta}, \overline{\chi}, p) \left(\|\overline{\theta}_{t}\|_{L^{2}(0,T; H^{1})}^{2} + \|\overline{\theta}\|_{L^{2}(0,T; H^{3})}^{2} + \|\overline{u}\|_{L^{2}(0,T; H^{3})}^{2} + \|\overline{\chi}\|_{L^{2}(0,T; H^{3})}^{2} + T + T^{\frac{1}{2}} \right),$$

$$(3.35d)$$

$$\|G\|_{L^{\infty}(0,T; L^{2})}^{2} \leq C_{5}(\overline{u}, \overline{\theta}, \overline{\chi}, p) \left(1 + \|u_{0} - \overline{u}(0)\|_{H^{1}(\Omega)}^{4} + \|\theta_{0} - \overline{\theta}(0)\|_{H^{2}(\Omega)}^{2} + \|\chi_{0} - \overline{\chi}(0)\|_{H^{1}(\Omega)}^{4} + c(B_{1}, B_{2}) T\right),$$

$$(3.35e)$$

$$\|G_t\|_{L^2(0,T; L^2)}^2 \leq C_6(B_1, B_2, \overline{u}, \overline{\theta}, \overline{\chi}, p) \left(\|\overline{\theta}_t\|_{L^2(0,T; H^2)}^2 + \|\overline{\theta}_{tt}\|_{L^2(0,T; L^2)}^2 + T + T^{\frac{1}{2}} \right),$$

$$(3.35f)$$

$$\|H\|_{L^{2}(0,T; H^{1})}^{2} \leq C_{7}(B_{1}, \overline{u}) \left(\|\overline{\chi}\|_{L^{2}(0,T; H^{3})}^{2} + \|\overline{\chi}_{t}\|_{L^{2}(0,T; H^{1})}^{2} + T \right),$$

$$\|H\|_{L^{2}(0,T; H^{1})}^{2} \leq C_{7}(\overline{u}, \overline{u}) \left(1 + \|u_{t} - \overline{u}(0)\|_{L^{2}(0,T; H^{3})}^{2} + \|u_{t} - \overline{u}(0)\|_{L^{2}(0,T; H^{3})}^{2} + C_{7}(0)\|_{L^{2}(0,T; H^{3})}^{2} \right)$$

$$\|H\|_{L^{2}(0,T; H^{1})}^{2} \leq C_{7}(\overline{u}, \overline{u}) \left(1 + \|u_{t} - \overline{u}(0)\|_{L^{2}(0,T; H^{3})}^{2} + \|u_{t} - \overline{u}(0)\|_{L^{2}(0,T; H^{3})}^{2} + C_{7}(0)\|_{L^{2}(0,T; H^{3})}^{2} \right)$$

$$\|H\|_{L^{2}(0,T; H^{1})}^{2} \leq C_{7}(\overline{u}, \overline{u}) \left(1 + \|u_{t} - \overline{u}(0)\|_{L^{2}(0,T; H^{3})}^{2} + \|u_{t} - \overline{u}(0)\|_{L^{2}(0,T; H^{3})}^{2} + C_{7}(0)\|_{L^{2}(0,T; H^{3})}^{2} \right)$$

$$\|H\|_{L^{2}(0,T; H^{3})}^{2} \leq C_{7}(\overline{u}, \overline{u}) \left(1 + \|u_{t} - \overline{u}(0)\|_{L^{2}(0,T; H^{3})}^{2} + \|u_{t} - \overline{u}(0)\|_{L^{2}(0,T; H^{3})}^{2} + C_{7}(\overline{u}, \overline{u}) \right)$$

$$\|H\|_{L^{2}(0,T; H^{3})}^{2} \leq C_{7}(\overline{u}, \overline{u}) \left(1 + \|u_{t} - \overline{u}(0)\|_{L^{2}(0,T; H^{3})}^{2} + \|u_{t} - \overline{u}(0)\|_{L^{2}(0,T; H^{3})}^{2} + C_{7}(\overline{u}, \overline{u}) \right)$$

$$\|H\|_{L^{\infty}(0,T; L^{2})}^{2} \leq C_{8}(\overline{u}, \overline{\chi}) \left(1 + \|u_{0} - \overline{u}(0)\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} + \|\chi_{0} - \overline{\chi}(0)\|_{H^{1}(\Omega)}^{2} + \|\sigma_{0}\|_{H^{1}(\Omega)}^{2} + c(B_{1}, B_{2}) T\right),$$

$$(3.35h)$$

$$\|H_t\|_{L^2(0,T;L^2)}^2 \leq C_9(B_1, B_2, \overline{u}, J_{\chi}) \left(\|\overline{\chi}\|_{L^2(0,T;H^2)}^2 + \|\overline{\chi}_t\|_{L^2(0,T;H^2)}^2 + \|\overline{\theta}_t\|_{L^2(0,T;L^2)}^2 + T \right).$$
(3.35i)

Dabei bestimmen sich die von p und J_{χ} abhängenden Konstanten aus den Normen $\|p\|_{C^2(\Lambda_1)}$ und $\|J_{\chi}\|_{C^1(\Lambda_1)}$ (J definiert wie in (2.18)) bezüglich der kompakten Menge

$$\Lambda_1 := \Big\{ (\varrho, \theta, \chi) \in \mathbb{R}^3 \ \Big| \ \frac{m}{2} \le \varrho \le 2M, \ \frac{\theta_3}{2} \le \theta \le 2\theta_4, \ \frac{X_1}{2} \le \chi \le 2X_2 \Big\}.$$

Die oben erwähnte Abschätzung (3.34) wurde in (3.35) (b), (e) und (h) verwendet.

3.5 Beweis des lokalen Existenzsatzes

Als nächstes zeigen wir, daß für hinreichend kleine Zeiten T die in Abschnitt 3.4 definierte Abbildung L eine Selbstabbildung auf R_T ist, daß also $L(R_T) \subset R_T$.

Dazu bemerken wir zu den rechten Seiten der Lemmata 3.1, 3.2 und 3.4:

$$\|\nabla \tilde{\varrho}\|_{L^{2}(0,T; L^{3})}^{2} + \|\tilde{\varrho}_{t}\|_{L^{2}(0,T; L^{3})}^{2} \leq C_{10}(B_{1}, B_{2}) T_{2}$$

$$\|\nabla(\ln \tilde{\varrho})\|_{L^{\infty}(0,T; L^{2})}^{2} + \|\nabla(\ln \tilde{\varrho})_{t}\|_{L^{2}(0,T; L^{2})}^{2} + \|\nabla(\ln \tilde{\varrho})\|_{L^{2}(0,T; H^{1})}^{2} \leq C_{10}(B_{1}, B_{2}) T_{2}$$

Diese Abschätzungen folgen mit Hilfe der Sobolev–Einbettungssätze und der Hölderungleichung elementar. Für Lemma 3.3 gilt als Konsequenz aus (3.16) und (3.17):

$$\begin{aligned} \|\sigma\|_{L^{\infty}(0,T; H^{2})} &\leq (\|\sigma_{0}\|_{H^{2}(\Omega)} + C_{11}(B_{1}, \overline{u}) T^{\frac{1}{2}}) \exp(C_{11}(B_{1}, \overline{u}) T^{\frac{1}{2}}), \\ \|\sigma_{t}\|_{L^{\infty}(0,T; H^{1})} &\leq c_{4}(\|\sigma_{0}\|_{H^{2}(\Omega)} + 1) C_{12}(B_{1}, \overline{u}) \exp(C_{11}(B_{1}, \overline{u}) T^{\frac{1}{2}}). \end{aligned}$$

Aus (3.35) sowie den rechten Seiten der Lemmata 3.1, 3.2, 3.3 und 3.4 ergibt sich also:

$$B_{1} > \max \{ c_{1}[C_{2}(\overline{u},\overline{\theta},\overline{\chi},p) (1+\|u_{0}-\overline{u}(0)\|_{H^{1}(\Omega)}^{4}+\|\theta_{0}-\overline{\theta}(0)\|_{H^{1}(\Omega)}^{2}+\|\sigma_{0}\|_{H^{1}(\Omega)}^{2} \\ +\|\chi_{0}-\overline{\chi}(0)\|_{H^{1}(\Omega)}^{2}) +\|v_{t}(0)\|_{H^{1}(\Omega)}^{2}], c_{2}[C_{5}(\overline{u},\overline{\theta},\overline{\chi},c_{V},p) (1+\\ \|u_{0}-\overline{u}(0)\|_{H^{1}(\Omega)}^{4}+\|\theta_{0}-\overline{\theta}(0)\|_{H^{2}(\Omega)}^{2}+\|\chi_{0}-\overline{\chi}(0)\|_{H^{1}(\Omega)}^{4}) +\|\omega_{t}(0)\|_{H^{1}(\Omega)}^{2}], \\ c_{5}[C_{8}(\overline{u},\overline{\chi}) (1+\|u_{0}-\overline{u}(0)\|_{L^{2}(\Omega)}^{2}+\|\chi_{0}-\overline{\chi}(0)\|_{H^{1}(\Omega)}^{2}+\|\sigma_{0}\|_{H^{1}(\Omega)}^{2}) \\ +\|\chi_{t}(0)\|_{H^{1}(\Omega)}^{2}], \|\sigma_{0}\|_{H^{2}(\Omega)}^{2} \},$$

$$(3.36a)$$

$$B_2 > c_4 (\|\sigma_0\|_{H^2(\Omega)} + 1) C_{12}(B_1, \overline{u}).$$

Für solche B_1 , B_2 und hinreichend kleines T erfüllen v, σ , ω und χ die Abschätzungen in der Definition von R_T . Es gilt nämlich auch, analog zu (3.33):

$$\begin{aligned} \|\sigma - \sigma_0\|_{C^0(\overline{\Omega}_T)} &\leq c \|\sigma - \sigma_0\|_{L^{\infty}(0,T; H^1(\Omega))}^{\frac{1}{3}} \|\sigma - \sigma_0\|_{L^{\infty}(0,T; H^2(\Omega))}^{\frac{2}{3}} \\ &\leq c T^{\frac{1}{3}} \|\sigma_t\|_{L^{\infty}(0,T; H^1(\Omega))}^{\frac{1}{3}} (B_1 + \|\sigma_0\|_{H^2(\Omega)})^{\frac{2}{3}} \\ &\leq c T^{\frac{1}{3}} B_2^{\frac{1}{3}} (B_1 + \|\sigma_0\|_{H^2(\Omega)})^{\frac{2}{3}}. \end{aligned}$$

Für ein hinreichend kleines T gilt daher

$$\frac{m}{2} \le \sigma(x,t) + \overline{\varrho} \le 2M \text{ in } \overline{\Omega}_T.$$

Indem wir die Argumentation von (3.33) wiederholen, sehen wir, daß beide Aussagen auch für ω und χ gelten. Die in (3.36) verwendeten Größen $v_t(0)$, $\omega_t(0)$ und $\chi_t(0)$ hängen nur von den Daten des Problems ab.

Wir haben jetzt gezeigt, daß es ein T^* ($\leq T_1$) gibt, so daß für $T \leq T^*$ $L(R_T) \subset R_T$ gilt.

Es ist klar, daß R_T konvex ist und abgeschlossen in

$$\mathcal{X} := C^0([0, T^*]; H^1(\Omega))^3 \times C^0([0, T^*]; H^2(\Omega)).$$

Aus dem Satz von Arzela–Ascoli folgt wie für die Navier–Stokes–Gleichungen die Kompaktheit von R_{T^*} .

(3.36b)

Es bleibt zu zeigen, daß L stetig ist in \mathcal{X} . Das Beweisprinzip ist dasselbe, wie wir es im folgenden Abschnitt zum Nachweis der Eindeutigkeit verwenden werden. Gegeben sei eine Folge $(\tilde{\sigma}_n, \tilde{v}_n, \tilde{\omega}_n, \tilde{\xi}_n)_n \subset R_{T^*}$ mit $(\tilde{\sigma}_n, \tilde{v}_n, \tilde{\omega}_n, \tilde{\xi}_n) \to (\tilde{\sigma}, \tilde{v}, \tilde{\omega}, \tilde{\xi})$ in \mathcal{X} . Sei $(\sigma_n, v_n, \omega_n, \xi_n) :=$ $L(\tilde{\sigma}_n, \tilde{v}_n, \tilde{\omega}_n, \tilde{\xi}_n), (\sigma, v, \omega, \xi) := L(\tilde{\sigma}, \tilde{v}, \tilde{\omega}, \tilde{\xi})$. Wir zeigen $(\sigma_n, v_n, \omega_n, \xi_n) \to (\sigma, v, \omega, \xi)$ in $C^0([0, T^*]; L^2(\Omega))^3 \times C^0([0, T^*]; H^1(\Omega))$ für $n \to \infty$. Aus der Kompaktheit von R_{T^*} folgt dann auch die Konvergenz in \mathcal{X} .

Dazu ziehen wir die Bestimmungsgleichungen (3.13), (3.15), (3.4) und (3.18) (vorher noch mit $(\tilde{\sigma} + \overline{\varrho})$ multipliziert) für σ , v, ω und ξ von den entsprechenden für σ_n , v_n , ω_n und ξ_n ab (hier vorher (3.18) mit ($\sigma_n + \overline{\varrho}$) multiplizieren), multiplizieren die entstehenden Gleichungen mit ($\sigma_n - \sigma$), ($v_n - v$), ($\omega_n - \omega$) bzw. ($\xi_n - \xi$) – δ div(($\tilde{\sigma}_n - \tilde{\sigma}$) $\nabla \xi_n + (\tilde{\sigma} + \overline{\varrho}) \nabla (\xi_n - \xi)$) und integrieren über Ω . Die so gewonnenen Gleichungen schätzen wir mit Hilfe der Youngschen Ungleichung ab. So gilt z.B. für die Differenz der Kontinuitätsgleichungen:

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} |\sigma_n - \sigma|^2 \leq \left(\|\nabla \sigma_n(t)\|_{L^{\infty}(\Omega)}^2 + \|\operatorname{div}(\tilde{v} + \overline{u})(t)\|_{L^{\infty}(\Omega)}^2 + 2 \|\operatorname{div}(\tilde{v}_n + \overline{u})(t)\|_{L^{\infty}(\Omega)}^2 + 1 \right) \cdot \frac{1}{2} \int_{\Omega} \left(|\sigma_n - \sigma|^2 + |v_n - v|^2 \right) + 2M \int_{\Omega} |\operatorname{div}(\tilde{v}_n - \tilde{v})|^2.$$

Die rechte Seite läßt sich also disjunkt in 2 Teile zerlegen. Teil 1 entspricht mit einem Vorfaktor der linken Seite ohne Ableitung nach t, Teil 2 ist beschränkt glm. in n und geht gegen Null für $n \to \infty$. Bei den übrigen Gleichungen verfahren wir nach dem gleichen Prinzip, nur sind die auftretenden Terme wesentlich länger. Nach Addition der Abschätzungen erhalten wir schließlich:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} |\sigma_n - \sigma|^2 + \frac{m}{4} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} |v_n - v|^2 + c_V \frac{m}{4} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} |\omega_n - \omega|^2 + \frac{\varepsilon m}{4} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} |\xi_n - \xi|^2 \\ + \varepsilon \frac{m^2}{8} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} |\nabla(\xi_n - \xi)|^2 + \mu \int_{\Omega} |D(v_n - v)|^2 + \lambda \int_{\Omega} |\operatorname{div}(v_n - v)|^2 + \kappa \int_{\Omega} |\nabla(\omega_n - \omega)|^2 \\ + \frac{\delta m}{4} \int_{\Omega} |\nabla(\xi_n - \xi)|^2 + \frac{\delta^2 m^2}{4} \int_{\Omega} |\Delta(\xi_n - \xi)|^2 \\ &\leq \|h_1(t)\|_{L^{\infty}(\Omega)}^2 \left(\|\tilde{v}_n - \tilde{v}\|_{H^1(\Omega)}^2 + \|\tilde{\sigma}_n - \tilde{\sigma}\|_{H^1(\Omega)}^2 + \|\tilde{\omega}_n - \tilde{\omega}\|_{H^1(\Omega)}^2 + \|\tilde{\xi}_n - \tilde{\xi}\|_{H^2(\Omega)}^2 \right) \\ &+ \|h_2(t)\|_{L^{\infty}(\Omega)}^2 \int_{\Omega} (|\sigma_n - \sigma|^2 + |v_n - v|^2 + |\omega_n - \omega|^2 + |\xi_n - \xi|^2 + |\nabla(\xi_n - \xi)|^2). \end{aligned}$$

Hier sind h_1 und h_2 geeignete Funktionen, die sich aus der Rechnung ergeben. Für $n \to \infty$ verschwindet der erste Ausdruck im Grenzwert. Nach Integration in der Zeit folgt mit dem Lemma von Gronwall daher die behauptete Stetigkeit von L.

Wir haben nun alle Voraussetzungen des Schauderschen Fixpunktsatzes verifiziert. Es folgt, daß für T^* hinreichend klein, wie oben angegeben, die Abbildung L einen Fixpunkt besitzt. Dieser ist nach Konstruktion gleichzeitig Lösung des Gleichungssystems (3.1).

Wir haben also bewiesen:

Satz 3.1:

Set $\partial \Omega \in C^3$, $p = p(\varrho, \theta, \chi) \in C^2$ und c_V , κ , μ und λ positive Konstanten, $J_{\chi} = J_{\chi}(\varrho, \theta, \chi) \in C^1$, $[u_0 - \overline{u}(0)] \in H_0^1(\Omega)$, $v_t(0) \in H_0^1(\Omega)$, $\varrho_0 \in H^2(\Omega)$, $0 < m \le \varrho_0(x) \le M$ in $\overline{\Omega}$, $[\theta_0 - \overline{\theta}(0)] \in H_0^1(\Omega)$, $(\omega_0)_t \in H_0^1(\Omega)$, $0 < \theta_3 \le \theta_0(x) \le \theta_4$ in $\overline{\Omega}$, $[\chi_0 - \overline{\chi}(0)] \in H_0^1(\Omega)$, $(\chi_0)_t \in H_0^1$, $0 < X_1 \le \chi_0(x) \le X_2$ in $\overline{\Omega}$, $(\overline{u}, \overline{\theta}, \overline{\chi}) \in L_{\rm loc}^{\infty}(\mathbb{R}^+; H^3(\Omega))$,
$$\begin{split} &(\overline{u}_t,\overline{\theta}_t,\overline{\chi}_t)\in L^\infty_{\rm loc}(I\!\!R^+;\ H^2(\Omega)),\ (\overline{u}_{tt},\overline{\theta}_{tt},\overline{\chi}_{tt})\in L^\infty_{\rm loc}(I\!\!R^+;\ L^2(\Omega)),\ \overline{u}\cdot n\geq 0\ auf\ \Sigma_\infty.\\ &Dann\ existieren\ ein\ hinreichend\ kleines\ T^*>0,\ (u,\theta,\chi)\in L^2(0,T^*;\ H^3(\Omega)),\\ &(u_t,\theta_t,\chi_t)\in L^2(0,T^*;\ H^2(\Omega)),\ (u_{tt},\theta_{tt},\chi_{tt})\in L^2(0,T^*;\ L^2(\Omega)),\ \theta(x,t)>0\ in\ \overline{\Omega_{T^*}},\\ &\varrho\in C^0([0,T^*];\ H^2(\Omega)),\ \varrho_t\in C^0([0,T^*];H^1(\Omega)),\ \varrho(x,t)>0\ in\ \overline{\Omega_{T^*}},\ \chi(x,t)>0\ in\ \overline{\Omega_{T^*}},\ so\ da\beta\\ &(\varrho,u,\theta,\chi)\ eine\ L\"osung\ von\ (3.1)\ in\ \Omega_{T^*}\ ist. \end{split}$$

Dieser Satz gilt nur, falls kein Einströmrand an $\partial \Omega$ anliegt. Sonst geben wir die Dichte am Einströmrand vor:

$$\sigma_{|R_I} = \sigma_1 \text{ auf } (0,T) \times R_I$$

Wir nehmen an, daß R_I eine geschlossene Fläche ist, so daß es eine Konstante a_0 gibt mit $-\overline{u} \cdot n \ge a_0 > 0$. Für $R_I \neq \emptyset$ ersetzen wir Lemma 3.3 durch

Lemma 3.5:

Sei $\partial \Omega \in C^2$, $\tilde{u} \in L^2(0,T; H^3(\Omega))$, $\tilde{u}_t \in L^2(0,T; H^2(\Omega))$, $\sigma_0 \in H^2(\Omega)$ und $\sigma_1 \in L^{\infty}(0,T; H^2(R_I))$, $(\sigma_1)_t \in L^{\infty}(0,T; H^1(R_I))$, $(\sigma_1)_{tt} \in L^{\infty}(0,T; L^2(R_I))$. Außerdem mögen \tilde{u}, σ_0 und σ_1 den Kompatibilitätsbedingungen

$$\sigma_{1|t=0} = \sigma_{0|R_I}, \tag{3.37}$$

$$\partial_t \sigma_{1|t=0} = [-\tilde{u}(0) \cdot \nabla \sigma_0 - \sigma_0 \operatorname{div} \tilde{u}(0) - \overline{\varrho} \operatorname{div} \tilde{u}(0)]_{|R_I}$$
(3.38)

genügen. Dann existiert eine eindeutige Lösung $\sigma \in L^{\infty}(0,T; H^2(\Omega))$ von (3.15) mit $\sigma_{|R_I} = \sigma_1$ und eine Konstante $Z = Z(a_0, \tilde{u}, \sigma_1),$

$$Z \equiv c (1/a_0) (1 + \|\tilde{u}\|_{L^{\infty}(R_I)}^2) (1 + \sum_{i=0}^2 \|\partial_t^{2-i} \sigma_1(t)\|_{H^i(R_I)}^2) (1 + \|\tilde{u}\|_{H^2(\Omega)}^2 + \|\tilde{u}_t\|_{H^1(\Omega)}^2) \cdot (1 + \|\tilde{u}\|_{H^{5/2+\tilde{\varepsilon}}(\Omega)}^2 + \|\tilde{u}_t\|_{H^{3/2+\tilde{\varepsilon}}(\Omega)}^2),$$

so daß

$$\|\sigma\|_{L^{\infty}(0,T;\,H^2)}^2 \leq (\|\sigma_0\|_{H^2(\Omega)}^2 + cT^{1/2} \|\tilde{u}\|_{L^2(0,T;\,H^3)}^2 + \int_0^T Z) \exp(c \|\tilde{u}\|_{L^1(0,T;\,H^3)} + T^{1/2}).$$

Falls noch $\tilde{u} \in L^{\infty}(0,T; H^{2}(\Omega))$, so ist $\sigma_{t} \in L^{\infty}(0,T; H^{1}(\Omega))$ und $\|\sigma_{t}\|_{L^{\infty}(0,T; H^{1})} \leq c_{4} \|\tilde{u}\|_{L^{\infty}(0,T; H^{2})} (\|\sigma\|_{L^{\infty}(0,T; H^{2})} + 1).$

Beweis: Siehe [20], Lemma 2.9. \Box

Der Beweis des lokalen Existenzsatzes für den Fall, daß ein Einströmrand vorhanden ist, folgt nun wortwörtlich wie in [20] ausgeführt. Zunächst beachten wir (für $0 < \tilde{\varepsilon} < \frac{1}{2}$):

$$\begin{aligned} \|\tilde{u}\|_{L^{1/\tilde{\varepsilon}}(0,T;\,H^{5/2+\tilde{\varepsilon}})} &\leq c(\tilde{\varepsilon})\,(\,\|\tilde{u}\|_{L^{2}(0,T;\,H^{3})}^{2}\,+\,\|\tilde{u}_{t}\|_{L^{2}(0,T;\,H^{2})}^{2}\,+\,\|\tilde{u}(0)\|_{H^{5/2}(\Omega)}^{2}\,), \\ \|\tilde{u}_{t}\|_{L^{\frac{4}{1+2\tilde{\varepsilon}}}(0,T;\,H^{3/2+\tilde{\varepsilon}})}^{2} &\leq c(\tilde{\varepsilon})\,(\,\|\tilde{u}_{t}\|_{L^{2}(0,T;\,H^{2})}^{2}\,+\,\|\tilde{u}_{tt}\|_{L^{2}(0,T;\,L^{2})}^{2}\,+\,\|\tilde{u}_{t}(0)\|_{H^{1}(\Omega)}^{2}\,). \end{aligned}$$

Mit diesen Interpolationsargumenten läßt sich das Z-Integral aus Lemma 3.5 abschätzen:

$$\int_{0}^{T} Z \leq c(1/a_{0})(1+\|\tilde{u}\|_{L^{\infty}(\Sigma_{T})}^{2})(1+\sup_{t\in[0,T]}\sum_{i=0}^{2}\|\partial_{t}^{2-i}\sigma_{1}(t)\|_{H^{i}(R_{I})}^{2}) \\
\cdot \left(1+\|\tilde{u}\|_{L^{\infty}(0,T;\,H^{2})}^{2}+\|\tilde{u}_{t}\|_{L^{\infty}(0,T;\,H^{1})}^{2}\right) \\
\cdot \left[T+c(\tilde{\varepsilon})\,T^{1-2\tilde{\varepsilon}}(\|\tilde{u}\|_{L^{2}(0,T;\,H^{3})}^{2}+\|\tilde{u}_{t}\|_{L^{2}(0,T;\,H^{2})}^{2}+\|\tilde{u}(0)\|_{H^{5/2}(\Omega)}^{2}) \\
+c(\tilde{\varepsilon})\,T^{\frac{1}{2}-\tilde{\varepsilon}}(\|\tilde{u}_{t}\|_{L^{2}(0,T;\,H^{2})}^{2}+\|\tilde{u}_{tt}\|_{L^{2}(0,T;\,L^{2})}^{2}+\|\tilde{u}_{t}(0)\|_{H^{1}(\Omega)}^{2})\right].$$

Bei diesen Abschätzungen hängt $c(\tilde{\varepsilon})$ nicht von T ab.

Die Definition der Menge R_T ist so zu ändern, daß zusätzlich $v_{tt} \in L^2(0,T; L^2(\Omega))$ und $\|v_{tt}\|_{L^2(0,T; L^2)}^2 \leq B_1$. Man wählt $K_1 \in L^2(0,T; H^1(\Omega))$ mit $(K_1)_t \in L^2(\mathbb{R}^+; L^2(\Omega))$ und $K_1(0) = -\Delta(u_0 - \overline{u}(0)) + \partial_t v_0$. Für B_1 hinreichend groß und T hinreichend klein folgt wieder $R_T \neq \emptyset$.

Man erhält also dieselbe Aussage wie in Satz 3.1 unter den zusätzlichen Voraussetzungen $\sigma_1 \in L^{\infty}_{\text{loc}}(\mathbb{R}^+; H^2(\mathbb{R}_I)), (\sigma_1)_t \in L^{\infty}_{\text{loc}}(\mathbb{R}^+; H^1(\mathbb{R}_I)), (\sigma_1)_{tt} \in L^{\infty}_{\text{loc}}(\mathbb{R}^+; L^2(\mathbb{R}_I))$ und den Kompatibilitätsbedingungen (3.37) und (3.38) für σ_0, σ_1 und \tilde{u} .

3.6 Eindeutigkeit der Lösung

Aus dem Schauderschen Fixpunktsatz folgt die Existenz, aber noch nicht die Eindeutigkeit der Lösung. Die verwendete Methode wurde in [21] für barotrope Fluide (d.h. $p = p(\varrho)$) skizziert.

Seien $(\varrho_1^*, u_1^*, \theta_1^*, \chi_1^*)$ und $(\varrho_2^*, u_2^*, \theta_2^*, \chi_2^*)$ zwei Lösungen des Systems (3.1), die die in Satz 3.1 bewiesene Regularität besitzen mögen. Wir zeigen mit dem Lemma von Gronwall, daß sie identisch sind.

Nach Subtraktion der Gleichungen (3.1) für die beiden Lösungspaare sehen wir, daß die Differenzen $u := u_1^* - u_2^*$, $\eta := \varrho_1^* - \varrho_2^*$, $\gamma := \theta_1^* - \theta_2^*$ und $\pi := \chi_1^* - \chi_2^*$ die folgenden Gleichungen erfüllen:

$$0 = \eta_t + u_1^* \cdot \nabla \eta + u \cdot \nabla \varrho_2^* + \varrho_1^* \operatorname{div} u + \eta \operatorname{div} u_2^*, \qquad (3.39)$$

$$0 = \varrho_{1}^{*}[u_{t} + (u_{1}^{*} \cdot \nabla)u + (u \cdot \nabla)u_{2}^{*}] + \eta[u_{2t}^{*} + (u_{2}^{*} \cdot \nabla)u_{2}^{*}] + Au + p_{\varrho}(\varrho_{1}^{*}, \theta_{1}^{*}, \chi_{1}^{*})\nabla\eta + p_{\theta}(\varrho_{1}^{*}, \theta_{1}^{*}, \chi_{1}^{*})\nabla\gamma + p_{\chi}(\varrho_{1}^{*}, \theta_{1}^{*}, \chi_{1}^{*})\nabla\pi + [p_{\varrho}(\varrho_{1}^{*}, \theta_{1}^{*}, \chi_{1}^{*}) - p_{\varrho}(\varrho_{2}^{*}, \theta_{2}^{*}, \chi_{2}^{*})]\nabla\varrho_{2}^{*} + [p_{\theta}(\varrho_{1}^{*}, \theta_{1}^{*}, \chi_{1}^{*}) - p_{\theta}(\varrho_{2}^{*}, \theta_{2}^{*}, \chi_{2}^{*})]\nabla\theta_{2}^{*} + [p_{\chi}(\varrho_{1}^{*}, \theta_{1}^{*}, \chi_{1}^{*}) - p_{\chi}(\varrho_{2}^{*}, \theta_{2}^{*}, \chi_{2}^{*})]\nabla\chi_{2}^{*} + \delta \operatorname{div}(\varrho_{1}^{*}\theta_{1}^{*} \nabla\chi_{1}^{*} \otimes \nabla\chi_{1}^{*} - \varrho_{2}^{*}\theta_{2}^{*} \nabla\chi_{2}^{*} \otimes \nabla\chi_{2}^{*}),$$

$$(3.40)$$

$$0 = \varrho_1^* c_V [\gamma_t + u_1^* \cdot \nabla \gamma] + \eta c_V [\theta_{2t}^* + u_1^* \cdot \nabla \theta_2^*] + c_V \varrho_2^* u \cdot \nabla \theta_2^* - \kappa \bigtriangleup \gamma - (\lambda - \mu) \operatorname{div}(u_1^* + u_2^*) \cdot \operatorname{div}u - \frac{\mu}{2} \sum_{i,j} [\partial_i (u_1^* + u_2^*)^j + \partial_j (u_1^* + u_2^*)^i] [\partial_i u^j + \partial_j u^i] + p(\varrho_1^*, \theta_1^*, \chi_1^*) \operatorname{div}u + [p(\varrho_1^*, \theta_1^*, \chi_1^*) - p(\varrho_2^*, \theta_2^*, \chi_2^*)] \operatorname{div}u_2^* + \zeta(\varrho_1^*, \theta_1^*, \chi_1^*) : \nabla u + [\zeta(\varrho_1^*, \theta_1^*, \chi_1^*) - \zeta(\varrho_2^*, \theta_2^*, \chi_2^*)] : \nabla u_2^*,$$
(3.41)

$$0 = \varepsilon \left(\pi_t + u \cdot \nabla \chi_2^* + u_1^* \cdot \nabla \pi\right) + J_{\chi}(\varrho_1^*, \theta_1^*, \chi_1^*) - J_{\chi}(\varrho_2^*, \theta_2^*, \chi_2^*) - \delta \Delta \pi -\delta \left(\nabla (\ln \varrho_1^*) \cdot \nabla \chi_1^* - \nabla (\ln \varrho_2^*) \cdot \nabla \chi_2^*\right).$$
(3.42)

Wir multiplizieren (3.39) mit $\varrho_1^*\eta$ und integrieren auf. Wir beachten dabei

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \varrho_1^* \eta^2 = \int_{\Omega} \left(-\operatorname{div}(\varrho_1^* u_1^*) \frac{\eta^2}{2} + \varrho_1^* \eta \eta_t \right) = \int_{\Omega} \varrho_1^* \eta \ (u_1^* \cdot \nabla \eta + \eta_t).$$

Eine entsprechende Beziehung werden wir bei den verbleibenden 3 Gleichungen ebenfalls verwenden, ohne nochmals ausdrücklich darauf hinzuweisen.

Unter Verwendung dieser Beziehung sowie der Youngschen Ungleichung erhalten wir für eine (kleine) Zahl $\tilde{\varepsilon} \in \mathbb{R}$:

$$\frac{1}{2}\frac{d}{dt}\int_{\Omega}\varrho_1^*\eta^2 \leq \int_{\Omega}\varrho_1^*|\eta||u||\nabla\varrho_2^*| + \int_{\Omega}\varrho_1^{*2}|\eta||\mathrm{div}u| + \int_{\Omega}\varrho_1^*|\eta|^2|\mathrm{div}u_2^*|$$

$$\leq \|\nabla \varrho_{2}^{*}(t)\|_{L^{\infty}(\Omega)} \int_{\Omega} \varrho_{1}^{*} |\eta| |u| + (C_{\tilde{\varepsilon}} \|\varrho_{1}^{*}(t)\|_{L^{\infty}(\Omega)}^{3} + \|\operatorname{div} u_{2}^{*}(t)\|_{L^{\infty}(\Omega)}) \int_{\Omega} \varrho_{1}^{*} |\eta|^{2} + \tilde{\varepsilon} \int_{\Omega} |\operatorname{div} u|^{2}.$$

$$(3.43)$$

Multiplizieren wir (3.40) mit u und integrieren über Ω , so gilt:

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \varrho_{1}^{*} |u|^{2} + \mu \int_{\Omega} |Du|^{2} + \lambda \int_{\Omega} |\operatorname{div} u|^{2} \leq \int_{\Omega} \varrho_{1}^{*} |u|^{2} |Du_{2}^{*}| + \int_{\Omega} |\eta| |u| \left(|u_{2t}^{*}| + |u_{2}^{*}| |Du_{2}^{*}| \right) \\
- \int_{\Omega} \left(u \, p_{\varrho}(\varrho_{1}^{*}, \theta_{1}^{*}, \chi_{1}^{*}) \cdot \nabla \eta + u \, p_{\theta}(\varrho_{1}^{*}, \theta_{1}^{*}, \chi_{1}^{*}) \cdot \nabla \gamma + u \, p_{\chi}(\varrho_{1}^{*}, \theta_{1}^{*}, \chi_{1}^{*}) \cdot \nabla \pi \right) \\
- \int_{\Omega} \left(u [p_{\varrho}(\varrho_{1}^{*}, \theta_{1}^{*}, \chi_{1}^{*}) - p_{\varrho}(\varrho_{2}^{*}, \theta_{2}^{*}, \chi_{2}^{*})] \cdot \nabla \varrho_{2}^{*} + u [p_{\theta}(\varrho_{1}^{*}, \theta_{1}^{*}, \chi_{1}^{*}) - p_{\theta}(\varrho_{2}^{*}, \theta_{2}^{*}, \chi_{2}^{*})] \cdot \nabla \theta_{2}^{*} \right) \\
- \int_{\Omega} \left(u [p_{\chi}(\varrho_{1}^{*}, \theta_{1}^{*}, \chi_{1}^{*}) - p_{\chi}(\varrho_{2}^{*}, \theta_{2}^{*}, \chi_{2}^{*})] \cdot \nabla \chi_{2}^{*} \\
- \int_{\Omega} \delta u \cdot \operatorname{div}(\varrho_{1}^{*} \theta_{1}^{*} \, \nabla \chi_{1}^{*} \otimes \nabla \chi_{1}^{*} - \varrho_{2}^{*} \theta_{2}^{*} \, \nabla \chi_{2}^{*} \otimes \nabla \chi_{2}^{*}) \right). \quad (3.44)$$

Mit partieller Integration erhalten wir ($||p_{\varrho}||_{C^0} = ||p_{\varrho}||_{C^0(\Lambda_1)}$, etc.):

$$\begin{split} -\int_{\Omega} u \ p_{\varrho}(\varrho_{1}^{*}, \theta_{1}^{*}, \chi_{1}^{*}) \cdot \nabla \eta &\leq \|p_{\varrho}\|_{C^{1}} \int_{\Omega} \left(|\nabla \varrho_{1}^{*}| + |\nabla \theta_{1}^{*}| + |\nabla \chi_{1}^{*}|\right) |\eta| |u| + \|p_{\varrho}\|_{C^{0}} \int_{\Omega} |\eta| |\operatorname{div} u| \\ &\leq \|p_{\varrho}\|_{C^{1}} \int_{\Omega} \left(|\nabla \varrho_{1}^{*}| + |\nabla \theta_{1}^{*}| + |\nabla \chi_{1}^{*}|\right) |\eta| |u| \\ &+ C_{\tilde{\varepsilon}} \|p_{\varrho}\|_{C^{0}}^{2} \int_{\Omega} |\eta|^{2} + \tilde{\varepsilon} \int_{\Omega} |\operatorname{div} u|^{2}, \\ -\int_{\Omega} u \ p_{\theta}(\varrho_{1}^{*}, \theta_{1}^{*}, \chi_{1}^{*}) \cdot \nabla \gamma &\leq \|p_{\theta}\|_{C^{1}} \int_{\Omega} \left(|\nabla \varrho_{1}^{*}| + |\nabla \theta_{1}^{*}| + |\nabla \chi_{1}^{*}|\right) |\gamma| |u| \\ &+ C_{\tilde{\varepsilon}} \|p_{\theta}\|_{C^{0}}^{2} \int_{\Omega} |\gamma|^{2} + \tilde{\varepsilon} \int_{\Omega} |\operatorname{div} u|^{2}, \\ -\int_{\Omega} u \ p_{\chi}(\varrho_{1}^{*}, \theta_{1}^{*}, \chi_{1}^{*}) \cdot \nabla \pi &\leq \|p_{\chi}\|_{C^{1}} \int_{\Omega} \left(|\nabla \varrho_{1}^{*}| + |\nabla \theta_{1}^{*}| + |\nabla \chi_{1}^{*}|\right) |\pi| |u| \\ &+ C_{\tilde{\varepsilon}} \|p_{\chi}\|_{C^{0}}^{2} \int_{\Omega} |\pi|^{2} + \tilde{\varepsilon} \int_{\Omega} |\operatorname{div} u|^{2}. \end{split}$$

Außerdem verwenden wir noch

$$- \int_{\Omega} u[p_{\varrho}(\varrho_{1}^{*}, \theta_{1}^{*}, \chi_{1}^{*}) - p_{\varrho}(\varrho_{2}^{*}, \theta_{2}^{*}, \chi_{2}^{*})] \cdot \nabla \varrho_{2}^{*} \leq \|p_{\varrho}\|_{C^{1}} \|\nabla \varrho_{2}^{*}(t)\|_{L^{\infty}(\Omega)} \int_{\Omega} (|\eta| + |\gamma| + |\pi|) |u|,$$

$$- \int_{\Omega} u[p_{\theta}(\varrho_{1}^{*}, \theta_{1}^{*}, \chi_{1}^{*}) - p_{\theta}(\varrho_{2}^{*}, \theta_{2}^{*}, \chi_{2}^{*})] \cdot \nabla \theta_{2}^{*} \leq \|p_{\theta}\|_{C^{1}} \|\nabla \theta_{2}^{*}(t)\|_{L^{\infty}(\Omega)} \int_{\Omega} (|\eta| + |\gamma| + |\pi|) |u|,$$

$$- \int_{\Omega} u[p_{\chi}(\varrho_{1}^{*}, \theta_{1}^{*}, \chi_{1}^{*}) - p_{\chi}(\varrho_{2}^{*}, \theta_{2}^{*}, \chi_{2}^{*})] \cdot \nabla \chi_{2}^{*} \leq \|p_{\chi}\|_{C^{1}} \|\nabla \chi_{2}^{*}(t)\|_{L^{\infty}(\Omega)} \int_{\Omega} (|\eta| + |\gamma| + |\pi|) |u|.$$

Zur Abschätzung der rechten Seite von (3.44) fehlt noch der neu auftretende Term

$$\int_{\Omega} \delta u \cdot \operatorname{div}(\varrho_1^* \theta_1^* \nabla \chi_1^* \otimes \nabla \chi_1^* - \varrho_2^* \theta_2^* \nabla \chi_2^* \otimes \nabla \chi_2^*).$$

Die Abschätzung erfordert einige Sorgfalt. Es gilt:

$$\varrho_1^*\theta_1^* \nabla \chi_1^* \otimes \nabla \chi_1^* - \varrho_2^*\theta_2^* \nabla \chi_2^* \otimes \nabla \chi_2^* = (\eta \theta_1^* + \varrho_2^* \gamma) \nabla \chi_1^* \otimes \nabla \chi_1^* + \varrho_2^* \theta_2^* (\nabla \pi \otimes \nabla \chi_1^* + \nabla \chi_2^* \otimes \nabla \pi).$$

Wir schätzen die zwei Summanden der Reihe nach ab. Für den 1. Ausdruck bemerken wir:

$$\begin{split} \int_{\Omega} \delta u \cdot \operatorname{div}((\eta \theta_{1}^{*} + \varrho_{2}^{*} \gamma) \nabla \chi_{1}^{*} \otimes \nabla \chi_{1}^{*}) \\ &= \int_{\Omega} \delta \sum_{i,j} u_{i} [\eta \, \partial_{j}(\theta_{1}^{*} \, \partial_{i} \chi_{1}^{*} \, \partial_{j} \chi_{1}^{*}) + \gamma \, \partial_{j}(\varrho_{2}^{*} \, \partial_{i} \chi_{1}^{*} \partial_{j} \chi_{1}^{*})] \\ &+ \int_{\Omega} \delta \sum_{i,j} (\theta_{1}^{*} + \varrho_{2}^{*}) \, \partial_{i} \chi_{1}^{*} \, \partial_{j} \chi_{1}^{*} \, \partial_{j} (\eta + \gamma) u_{i} \\ &\leq \delta \int_{\Omega} |u| (|\eta| + |\gamma|) \, (|\nabla \theta_{1}^{*} + \nabla \varrho_{2}^{*}| |\nabla \chi_{1}^{*}|^{2} + 2|\theta_{1}^{*} + \varrho_{2}^{*}| \, |\nabla \chi_{1}^{*}| \, |\nabla^{2} \chi_{1}^{*}|) \\ &- \int_{\Omega} \delta(\eta + \gamma) \sum_{i,j} \partial_{j} (u_{i}(\theta_{1}^{*} + \varrho_{2}^{*}) \, \partial_{i} \chi_{1}^{*} \partial_{j} \chi_{1}^{*}) \\ &\leq \delta \left[\|\nabla (\theta_{1}^{*} + \varrho_{2}^{*})(t)\|_{L^{\infty}(\Omega)} \, \|\nabla \chi_{1}^{*}(t)\|_{L^{\infty}(\Omega)}^{2} \, \|\nabla^{2} \chi_{1}^{*}(t)\|_{L^{\infty}(\Omega)} \, \int_{\Omega} (|\gamma| + |\eta|)|u| \\ &+ \tilde{\varepsilon} \int_{\Omega} |\operatorname{div} u|^{2} + \delta \, C_{\tilde{\varepsilon}} \, \|(\theta_{1}^{*} + \varrho_{2}^{*})(t)\|_{L^{\infty}(\Omega)}^{2} \, \|\nabla \chi_{1}^{*}(t)\|_{L^{\infty}(\Omega)}^{4} \, \int_{\Omega} (|\eta|^{2} + |\gamma|^{2}). \end{split}$$

Für den 2. Term gilt:

$$\int_{\Omega} \delta u \cdot \operatorname{div}(\varrho_{2}^{*} \theta_{2}^{*} (\nabla \pi \otimes \nabla \chi_{1}^{*} + \nabla \chi_{2}^{*} \otimes \nabla \pi)) = \delta \int_{\Omega} \sum_{i,j} u_{i} \partial_{j}(\varrho_{2}^{*} \theta_{2}^{*} (\partial_{i} \pi \partial_{j} \chi_{1}^{*} + \partial_{j} \pi \partial_{i} \chi_{2}^{*}))$$

$$= \delta \int_{\Omega} \sum_{i,j} u_{i} [\partial_{i} \pi \partial_{j}(\varrho_{2}^{*} \theta_{2}^{*} \partial_{j} \chi_{1}^{*}) + \partial_{j} \pi \partial_{j}(\varrho_{2}^{*} \theta_{2}^{*} \partial_{i} \chi_{2}^{*}) + \varrho_{2}^{*} \theta_{2}^{*} (\partial_{j} \chi_{1}^{*} \partial_{j} \partial_{i} \pi + \partial_{i} \chi_{2}^{*} \partial_{j}^{2} \pi)]$$

$$\leq \delta C_{\tilde{\varepsilon}} \|\nabla(\varrho_{2}^{*} \theta_{2}^{*} (\nabla \chi_{1}^{*} + \nabla \chi_{2}^{*}))(t) + \varrho_{2}^{*} \theta_{2}^{*} (\nabla \chi_{1}^{*} + \nabla \chi_{2}^{*})(t)\|_{L^{\infty}(\Omega)}^{2} \int_{\Omega} |u|^{2}$$

$$+ \delta \tilde{\varepsilon} \int_{\Omega} |\nabla \pi|^{2} + \delta \tilde{\varepsilon} \int_{\Omega} |\Delta \pi|^{2}.$$
(3.45)

Wir schätzen jetzt die Energiegleichung ab. Wir multiplizieren (3.41) mit γ und integrieren:

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \varrho_{1}^{*} |\gamma|^{2} + \kappa \int_{\Omega} |\nabla\gamma|^{2} \leq \int_{\Omega} c_{V} |\gamma| |\eta| \left(|\theta_{2t}^{*}| + |u_{1}^{*}| |\nabla\theta_{2}^{*}| \right) + \int_{\Omega} c_{V} |\gamma| |\varrho_{2}^{*}| |u| |\nabla\theta_{2}^{*}| \\
+ (\lambda - \mu) \int_{\Omega} \gamma \operatorname{div}(u_{1}^{*} + u_{2}^{*}) \cdot \operatorname{div}u + \frac{\mu}{2} \int_{\Omega} \gamma \sum_{i,j} [\partial_{i}(u_{1}^{*} + u_{2}^{*})^{j} + \partial_{j}(u_{1}^{*} + u_{2}^{*})^{i}] (\partial_{i}u^{j} + \partial_{j}u^{i}) \\
- \int_{\Omega} \gamma p(\varrho_{1}^{*}, \theta_{1}^{*}, \chi_{1}^{*}) \operatorname{div}u - \int_{\Omega} \gamma [p(\varrho_{1}^{*}, \theta_{1}^{*}, \chi_{1}^{*}) - p(\varrho_{2}^{*}, \theta_{2}^{*}, \chi_{2}^{*})] \operatorname{div}u_{2}^{*} - \int_{\Omega} \gamma \zeta(\varrho_{1}^{*}, \theta_{1}^{*}, \chi_{1}^{*}) : \nabla u \\
- \int_{\Omega} \gamma [\zeta(\varrho_{1}^{*}, \theta_{1}^{*}, \chi_{1}^{*}) - \zeta(\varrho_{2}^{*}, \theta_{2}^{*}, \chi_{2}^{*})] : \nabla u_{2}^{*}.$$
(3.46)

Mit partieller Integration und Youngscher Ungleichung gilt wieder:

$$\begin{split} \int_{\Omega} \gamma \, \mathrm{div}(u_{1}^{*}+u_{2}^{*}) \cdot \mathrm{div}u &\leq \int_{\Omega} |\gamma||u| \, 3|D^{2}(u_{1}^{*}+u_{2}^{*})| + C_{\tilde{\varepsilon}} \int_{\Omega} |u|^{2} |\mathrm{div}(u_{1}^{*}+u_{2}^{*})|^{2} + \tilde{\varepsilon} \int_{\Omega} |\nabla\gamma|^{2}, \\ \frac{\mu}{2} \int_{\Omega} \gamma \sum_{i,j} \left[\partial_{i}(u_{1}^{*}+u_{2}^{*})^{j} + \partial_{j}(u_{1}^{*}+u_{2}^{*})^{i} \right] \left[\partial_{i}u^{j} + \partial_{j}u^{i} \right] &\leq \tilde{\varepsilon} \int_{\Omega} |\nabla\gamma|^{2} + C_{\tilde{\varepsilon}} \int_{\Omega} |D(u_{1}^{*}+u_{2}^{*})|^{2} |u|^{2} \\ &+ \int_{\Omega} |\gamma||u| \, 3\mu |D^{2}(u_{1}^{*}+u_{2}^{*})|. \end{split}$$

Außerdem ist

$$\begin{split} \int_{\Omega} \gamma \left[p(\varrho_{2}^{*}, \theta_{2}^{*}, \chi_{2}^{*}) - p(\varrho_{1}^{*}, \theta_{1}^{*}, \chi_{1}^{*}) \right] \operatorname{div} u_{2}^{*} &\leq \int_{\Omega} |\gamma| |\operatorname{div} u_{2}^{*}| \left(\|p_{\varrho}\|_{C^{1}} |\eta| + \|p_{\theta}\|_{C^{1}} |\gamma| + \|p_{\chi}\|_{C^{1}} |\pi| \right) \\ &\leq \left(\frac{1}{2} \|p_{\varrho}\|_{C^{1}}^{2} + \|p_{\theta}\|_{C^{1}} + \frac{1}{2} \|p_{\chi}\|_{C^{1}}^{2} \right) \\ &\cdot \|\operatorname{div} u_{2}^{*}(t)\|_{L^{\infty}(\Omega)}^{2} \int_{\Omega} (|\gamma|^{2} + |\eta|^{2} + |\pi|^{2}) \\ &\int_{\Omega} \gamma p(\varrho_{1}^{*}, \theta_{1}^{*}, \chi_{1}^{*}) \operatorname{div} u &\leq \tilde{\varepsilon} \int_{\Omega} |\operatorname{div} u|^{2} + C_{\tilde{\varepsilon}} \|p\|_{C^{0}}^{2} \int_{\Omega} |\gamma|^{2}. \end{split}$$

Die neuen elastischen Spannungsterme schätzen wir wie folgt ab:

$$\int_{\Omega} \gamma \zeta(\varrho_1^*, \theta_1^*, \chi_1^*) : \nabla u \le \tilde{\varepsilon} \int_{\Omega} |Du|^2 + C_{\tilde{\varepsilon}} \max_{i,j} \|\zeta_{ij}(\varrho_1^*, \theta_1^*, \chi_1^*)(t)\|_{L^{\infty}(\Omega)}^2 \int_{\Omega} |\gamma|^2,$$

und mit der oben angegebenen Zerlegung von $\zeta(\varrho_1^*, \theta_1^*, \chi_1^*) - \zeta(\varrho_2^*, \theta_2^*, \chi_2^*)$ gilt:

$$\begin{split} \int_{\Omega} \gamma[\zeta(\ \varrho_{1}^{*}\ ,\theta_{1}^{*},\chi_{1}^{*}) - \zeta(\varrho_{2}^{*},\theta_{2}^{*},\chi_{2}^{*})] &: \nabla u_{2}^{*} \\ &\leq \int_{\Omega} \delta |\nabla u_{2}^{*}||\gamma|\ (\theta_{1}^{*}\ |\eta| |\nabla \chi_{1}^{*}|^{2} + \varrho_{2}^{*}\ |\gamma|\ |\nabla \chi_{1}^{*}|^{2} + \varrho_{2}^{*}\theta_{2}^{*}\ |\nabla \pi|\ (|\nabla \chi_{1}^{*}| + |\nabla \chi_{2}^{*}|)) \\ &\leq \left(\frac{\delta^{2}}{2}\ \|\nabla u_{2}^{*}(t)\|_{L^{\infty}(\Omega)}^{2}\ (\ \|\theta_{1}^{*}(t)\|_{L^{\infty}(\Omega)}^{2}\ \|\nabla \chi_{1}^{*}(t)\|_{L^{\infty}(\Omega)}^{4} + \|\varrho_{2}^{*}(t)\|_{L^{\infty}(\Omega)}^{2}\ \|\nabla \chi_{1}^{*}(t)\|_{L^{\infty}(\Omega)}^{2}\) \\ &+ C_{\tilde{\varepsilon}}\right) \int_{\Omega} (|u|^{2} + |\eta|^{2} + |\gamma|^{2} + |\pi|^{2}) + \tilde{\varepsilon} \int_{\Omega} |\nabla \pi|^{2}. \end{split}$$

Schließlich folgt die Gleichung des Phasenparameters. Wir integrieren Gleichung (3.42) über Ω auf und integrieren $\nabla(\ln \rho_1^*) \cdot \nabla \chi_1^* - \nabla(\ln \rho_2^*) \cdot \nabla \chi_2^*$ partiell, da sonst später $|\nabla \eta|$ zu absorbieren wäre. Wir nehmen grundsätzlich an, daß $\nabla \chi_1^* \cdot n = \nabla \chi_2^* \cdot n = 0$ auf $\partial \Omega$ gilt, um Randterme zu vermeiden. Dieselbe Annahme benötigten wir auch schon bei der Herleitung der Entropie-abschätzung und ist keine wesentliche Einschränkung.

Da wir wegen Gleichung (3.45) sogar $|\Delta \pi|^2$ links absorbieren müssen, multiplizieren wir die erhaltene Gleichung unter dem Integral mit $\varrho_1^*\pi - \Delta \pi$. Wir erhalten:

$$\frac{\varepsilon}{2} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \varrho_1^* |\pi|^2 + \frac{\varepsilon}{2} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} |\nabla \pi|^2 + \frac{\delta m}{2} \int_{\Omega} |\nabla \pi|^2 + \delta \int_{\Omega} |\Delta \pi|^2 \\
\leq \int_{\Omega} (J_{\chi}(\varrho_2^*, \theta_2^*, \chi_2^*) - J_{\chi}(\varrho_1^*, \theta_1^*, \chi_1^*)) \varrho_1^* \pi - \delta \int_{\Omega} \varrho_1^* (\ln \varrho_1^* - \ln \varrho_2^*) \pi \Delta \chi_1^* - \varepsilon \int_{\Omega} \varrho_1^* u \cdot \nabla \chi_2^* \pi \\
+ \int_{\Omega} (J_{\chi}(\varrho_1^*, \theta_1^*, \chi_1^*) - J_{\chi}(\varrho_2^*, \theta_2^*, \chi_2^*)) \Delta \pi + \delta \int_{\Omega} (\ln \varrho_1^* - \ln \varrho_2^*) \Delta \chi_1^* \Delta \pi.$$

Die rechte Seite schätzen wir wie gewohnt ab. Wir verwenden die Abschätzungen

$$\begin{split} \int_{\Omega} \varrho_{1}^{*} u \cdot \nabla \chi_{2}^{*} \pi &\leq M \| \nabla \chi_{2}^{*}(t) \|_{L^{\infty}(\Omega)} \int_{\Omega} \varrho_{1}^{*} \left(|u|^{2} + |\pi|^{2} \right), \\ \int_{\Omega} \left(J_{\chi}(\varrho_{1}^{*}, \theta_{1}^{*}, \chi_{1}^{*}) - J_{\chi}(\varrho_{2}^{*}, \theta_{2}^{*}, \chi_{2}^{*}) \triangle \pi &\leq \tilde{\epsilon} \int_{\Omega} |\Delta \pi|^{2} + C_{\tilde{\epsilon}} \int_{\Omega} |J_{\chi}(\varrho_{1}^{*}, \theta_{1}^{*}, \chi_{1}^{*}) - J_{\chi}(\varrho_{2}^{*}, \theta_{2}^{*}, \chi_{2}^{*})|^{2}, \\ \int_{\Omega} \left(J_{\chi}(\varrho_{1}^{*}, \theta_{1}^{*}, \chi_{1}^{*}) - J_{\chi}(\varrho_{2}^{*}, \theta_{2}^{*}, \chi_{2}^{*}) \varrho_{1}^{*} \pi &\leq M \int_{\Omega} \varrho_{1}^{*} |\pi|^{2} + \frac{1}{2} \int_{\Omega} |J_{\chi}(\varrho_{1}^{*}, \theta_{1}^{*}, \chi_{1}^{*}) - J_{\chi}(\varrho_{2}^{*}, \theta_{2}^{*}, \chi_{2}^{*})|^{2}, \\ \int_{\Omega} |J_{\chi}(\varrho_{1}^{*}, \theta_{1}^{*}, \chi_{1}^{*}) - J_{\chi}(\varrho_{2}^{*}, \theta_{2}^{*}, \chi_{2}^{*})|^{2} &\leq \int_{\Omega} \left(\|J_{\chi\varrho}\|_{C^{0}(\Lambda_{1})}^{2} |\eta|^{2} + \|J_{\chi\theta}\|_{C^{0}(\Lambda_{1})}^{2} |\gamma|^{2} + \|J_{\chi\chi}\|_{C^{0}(\Lambda_{1})}^{2} |\pi|^{2}), \\ \int_{\Omega} \left(\ln \varrho_{1}^{*} - \ln \varrho_{2}^{*} \right) &\leq \int_{\Omega} \|(\ln \varrho)'\|_{C^{0}(\Lambda_{1})} |\eta|. \end{split}$$

Wir addieren nun die Gleichungen (3.43), (3.44), (3.46) und die Beziehung für die Allen–Cahn–Gleichung auf und beachten die angegebenen Abschätzungen der rechten Seiten. Alle Integrale mit Vorfaktor $\tilde{\varepsilon}$ werden links absorbiert, indem $\tilde{\varepsilon}$ hinreichend klein gewählt wird. Beachten wir noch, daß wegen $0 < \frac{m}{2} \le \rho_1^*$ für eine Funktion f

$$\int_{\Omega} f \leq \frac{1}{\|\varrho_1^*\|_{L^{\infty}(\Omega)}} \int_{\Omega} \varrho_1^* f = \frac{2}{m} \int_{\Omega} \varrho_1^* f$$

gilt, so erhalten wir für sich aus den obigen Abschätzungen ergebende Funktionen g und h:

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \left(\varrho_1^* (|\eta|^2 + |u|^2 + |\gamma|^2 + |\pi|^2) + \varepsilon |\nabla\pi|^2 \right) + \mu \int_{\Omega} |Du|^2 + \lambda \int_{\Omega} |\operatorname{div} u|^2 + \kappa \int_{\Omega} |\nabla\gamma|^2 \\
+ \frac{\delta m}{4} \int_{\Omega} |\nabla\pi|^2 + \frac{\delta}{2} \int_{\Omega} |\Delta\pi|^2 \leq \int_{\Omega} \varrho_1^* (|\eta| + |u| + |\gamma| + |\pi|) |u| |g| \\
+ \|h(t)\|_{L^{\infty}(\Omega)} \int_{\Omega} \left(\varrho_1^* (|\eta|^2 + |u|^2 + |\gamma|^2 + |\pi|^2) + \varepsilon |\nabla\pi|^2 \right). \quad (3.47)$$

Schließlich ist

$$\begin{split} \int_{\Omega} \left(|u| + |\eta| + |\gamma| + |\pi| \right) |u| |g| &\leq \left(\|u(t)\|_{L^{2}(\Omega)} + \|\eta(t)\|_{L^{2}(\Omega)} + \|\gamma(t)\|_{L^{2}(\Omega)} + \|\pi\|_{L^{2}(\Omega)} \right) \\ &\cdot \|u(t)\|_{L^{6}(\Omega)} \|g(t)\|_{L^{3}(\Omega)} \\ &\leq c \|g(t)\|_{L^{3}(\Omega)}^{2} \int_{\Omega} \left(\varrho_{1}^{*} \left(|\eta|^{2} + |u|^{2} + |\gamma|^{2} + |\pi|^{2} \right) + \varepsilon |\nabla \pi|^{2} \right) \\ &+ \tilde{\varepsilon} \int_{\Omega} |Du|^{2}. \end{split}$$

Definieren wir daher $\Phi(t) := \int_{\Omega} (\varrho_1^* (|\eta|^2 + |u|^2 + |\gamma|^2 + |\pi|^2) + \varepsilon |\nabla \pi|^2)$, integrieren in der Zeit und beachten $\Phi(0) = 0$, so folgt mit dem Lemma von Gronwall angewandt auf Φ die Eindeutigkeit der Lösung.

Kapitel 4

Numerisches Lösungsverfahren

In diesem Kapitel beschreiben wir ein explizites numerisches Verfahren zur approximativen Lösung des Systems (2.20) in zwei Raumdimensionen. Es sei darauf hingewiesen, daß der vorgestellte Ansatz nicht den Anspruch erhebt, der effizienteste oder schnellste zu sein. Vielmehr geht es darum, eine funktionierende Methode zu entwickeln, mit der die physikalische Relevanz der Gleichungen nachgewiesen und prinzipielle Eigenschaften der Lösung untersucht werden können.

Der erste Abschnitt vermittelt die grundsätzliche Idee des Verfahrens und dient als Einführung. Der folgende Abschnitt beschäftigt sich mit der Verifikation der Homogenität für das untersuchte System, welche eine notwendige Bedingung für die Verwendung des im ersten Abschnitt beschriebenen Verfahrens darstellt. Der dritte Abschnitt gibt die genaue Gestalt der numerischen Flüsse an, wofür zunächst die Eigenwerte und Charakteristiken des Systems bestimmt werden. Durch Analyse der möglichen Fälle kann die Berechnung der numerischen Flüsse noch beschleunigt werden, wie in Sektion 4 ausgeführt wird. Abschnitt 5 erklärt unser Vorgehen, wenn die Homogenitätsbedingung – in Folge der gewählten Zustandsgleichungen – verletzt wird. Die Abschnitte 6 und 7 vermitteln die noch fehlenden Details des Verfahrens, die Berechnung der Terme für die zweiten Ableitungen und die Behandlung der Randwerte. Wir beenden das Kapitel mit einem Abschnitt über die implementierte Zeitschrittweitensteuerung.

4.1 Motivation des Verfahrens

Ausgangspunkt ist das Gleichungssystem (2.20) mit den in Abschnitt 2.9 gemachten Annahmen. Das System (2.20) hat große Ähnlichkeit mit den Navier–Stokes–Gleichungen für kompressible Fluide. Daher orientieren wir uns an den existierenden Verfahren für diese Gleichungen. Es wurde ein vom mathematischen Institut der Universität Freiburg für die Navier–Stokes–Gleichungen entwickelter Finite–Volumen–Löser übernommen. Allerdings sind einige Modifikationen erforderlich. Durch die neu hinzukommende Gleichung des Phasenparameters ergibt sich ein teilweise anderes Systemverhalten und andere Forderungen an die Numerik. Die auftretenden Änderungen werden im einzelnen unten beschrieben.

Zunächst jedoch einige grundsätzliche Bemerkungen, die bei jedem numerischen Verfahren für Gleichungen dieses Typs zu beachten sind. Die Navier–Stokes–Gleichungen ergeben sich aus den Euler–Gleichungen der Gasdynamik, indem zusätzlich die Spannungstensoren für das Fluid mit berücksichtigt werden (umgekehrt kann man die Euler–Gleichungen als den Grenzfall Re $\rightarrow \infty$ der Navier–Stokes–Gleichungen auffassen, wo also die Reibungsterme verschwinden). Mathematisch treten also zusätzlich zweite Ableitungen auf, was den Charakter der Lösung verändert. Während die Euler–Gleichungen ein hyperbolisches System darstellen, sind

die Navier–Stokes–Gleichungen parabolisch. Die neu auftretenden zweiten Ableitungsterme regularisieren die Lösung. Allerdings sind die Beiträge der Terme so klein, daß sie mit den heute verfügbaren Computern nicht aufgelöst werden können. Dies wird sich auch in absehbarer Zeit nicht ändern. Der für die Diskretisierung erforderliche Speicherbedarf sowie die daraus resultierende zeitlich kleinschrittige Auflösung übersteigt das technisch mögliche. Daher werden die Verfahren für die Euler–Gleichungen übernommen und in den numerischen Lösungen Schocks errechnet, die es in der Natur nicht gibt. Die gerade angesprochene Problematik wird besonders deutlich, wenn man die in der Praxis gebräuchlichen Verfahren zur Beschreibung von Wirbeln betrachtet. Obwohl die mathematisch exakte Lösung der Navier–Stokes–Gleichungen auch Wirbel beschreibt, betrachtet ein numerisches Verfahren zusätzliche Gleichungen (etwa für die kinetische Energie), um Wirbel unterhalb der Gitterauflösung behandeln zu können.

Nach diesen grundsätzlichen Bemerkungen wenden wir uns nun dem Verfahren zu. Wir verwenden Gleichung (2.20e) an Stelle von (2.20d) und können somit das System (2.20) in der Erhaltungsform

$$\partial_t U + \partial_x f_1(U) + \partial_y f_2(U) + \partial_x h_1(U) + \partial_y h_2(U) = b(U)$$
(4.1)

schreiben mit dem Lösungsvektor

$$U = (\varrho, \varrho v_1, \varrho v_2, e, \varrho \chi)^t.$$
(4.2)

Im folgenden gehen wir davon aus, daß beide Phasensysteme durch eine ideale Gasgleichung beschrieben werden und $c_{V,1} = c_{V,2}$ gilt. Die andernfalls notwendige Vorgehensweise dokumentiert Abschnitt 4.5.

Für die Terme in (4.1) ergibt sich:

$$f_1(U) = \begin{pmatrix} \varrho v_1 \\ \varrho v_1^2 + p \\ \varrho v_1 v_2 \\ (e+p)v_1 \\ \varrho \chi v_1 \end{pmatrix}, \quad f_2(U) = \begin{pmatrix} \varrho v_2 \\ \varrho v_1 v_2 \\ \varrho v_2^2 + p \\ (e+p)v_2 \\ \varrho \chi v_2 \end{pmatrix}, \quad (4.3)$$

$$h_1(U) = \begin{pmatrix} 0 \\ \zeta_{11} - \tau_{11} \\ \zeta_{21} - \tau_{21} \\ -L \ \partial_x T + (\zeta_{11} - \tau_{11})v_1 + (\zeta_{12} - \tau_{12})v_2 \\ -\frac{\delta}{\epsilon} \ \varrho \ \partial_x \chi \end{pmatrix},$$
(4.4)

$$h_{2}(U) = \begin{pmatrix} 0 \\ \zeta_{12} - \tau_{12} \\ \zeta_{22} - \tau_{22} \\ -L \partial_{y}T + (\zeta_{21} - \tau_{21})v_{1} + (\zeta_{22} - \tau_{22})v_{2} \\ -\frac{\delta}{\epsilon} \varrho \, \partial_{y}\chi \end{pmatrix}, \quad (4.5)$$
$$b(U) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -\frac{\varrho}{\epsilon} \, \partial_{\gamma}J \end{pmatrix}.$$

Der Spannungstensor ist wie bekannt definiert durch $\tau_{ij} = \mu(\partial_i v_j + \partial_j v_i) + \nu \operatorname{div}(v) \delta_{ij}$, wie in Kapitel 2 eingeführt ist $\zeta_{ij} := \delta \rho T (\partial_i \chi) (\partial_j \chi)$.

Für die Zustandsgleichungen des Systems nehmen wir zunächst an, daß für beide Phasen eine ideale Gasgleichung gilt und $c_{V,1} = c_{V,2} =: c_V, \gamma_1 = \gamma_2 =: \gamma$ gilt, d.h. (vgl. (2.57), (2.58)):

$$\begin{split} e &=& \frac{p}{\gamma-1} + \frac{\varrho}{2} |v|^2 \quad \text{g.d.w.} \quad p = (\gamma-1)(e - \frac{\varrho}{2} |v|^2), \\ T &=& \frac{p}{(\gamma-1) \ \varrho c_V}. \end{split}$$

Sei \mathcal{T}^{h} eine zulässige Triangulierung von Ω (siehe [6]). Wir nehmen an, daß das Gebiet polygonal berandet ist, so daß es vollständig durch \mathcal{T}^{h} überdeckt wird und keine Probleme am Rand entstehen.

Sei $T_i \in \mathcal{T}^h$ ein Dreieck. Durch Aufintegrieren folgt aus (4.1) mit $f = (f_1, f_2)^t$, $h = (h_1, h_2)^t$ und dem Satz von Gauß in 2 Raumdimensionen:

$$\begin{aligned} \oint_{T_i} \partial_t U &= - \oint_{T_i} \left(\partial_x f_1(U) + \partial_y f_2(U) \right) - \oint_{T_i} \left(\partial_x h_1(U) + \partial_y h_2(U) \right) + \oint_{T_i} b(U) \\ &= - \frac{1}{|T_i|} \Big(\int_{\partial T_i} f(U) \cdot n + \int_{\partial T_i} h(U) \cdot n - \int_{T_i} b(U) \Big). \end{aligned}$$

n bezeichnet hier die äußere Normale (an T_i).

Wir wählen als Approximation für $\partial_t U$ einen Vorwärts–Differenzen–Quotienten mit der Zeitschrittweite Δt und erhalten ein *explizites* Verfahren:

$$\oint_{T_i} U_i^{n+1} = \oint_{T_i} U_i^n - \frac{\Delta t}{|T_i|} \left(\sum_{j=0}^2 \int_{\Gamma_{ij}} f(U^n) \cdot n_{ij} + \sum_{j=0}^2 \int_{\Gamma_{ij}} h(U^n) \cdot n_{ij} - \int_{T_i} b(U^n) \right).$$
(4.6)

Wir verwenden ein Finite Volumen Verfahren und definieren daher als Mittelwert auf einer Zelle

$$U_i^m := \oint_{T_i} U^m(x) \, dx.$$

Der auf T_i konstante Vektor U_i^m dient als Approximation der Lösung.

Zur näherungsweisen Berechnung des 1. Integrals in (4.6) sei ein numerischer Fluß g gegeben mit

$$g_{ij}(U_i, U_{ij}) \approx \int_{\Gamma_{ij}} f(U^n(x)) \cdot n_{ij} \, dx.$$
(4.7)

Dabei sei U_{ij} die Lösung auf einem Dreieck T_{ij} (lokale Bezeichnung um Dreieck T_i) mit $\overline{T_{ij}} \cap \overline{T_i} = \Gamma_{ij}$, siehe Abbildung 4.1 unten.

Durch Auswertung des 2. Integrals in (4.6) und des Integrals mit dem Quellterm b mit einer Schwerpunktformel folgt:

$$U_i^{n+1} \approx U_i^n - \frac{\Delta t}{|T_i|} \left(\sum_{j=0}^2 g_{ij}(U_i^n, U_{ij}^n) + \sum_{j=0}^2 \sum_{k=1}^2 h_k(U^n(z_{ij})) n_{ij}^k |\Gamma_{ij}| - |T_i| b(U^n(w_i)) \right).$$
(4.8)

Die Vorschrift (4.8) definiert das von uns verwendete Verfahren. Die Berechnung der Terme $h_k(U^n(z_{ij}))$ wird in Abschnitt 4.6 angegeben, die der *g*-Terme nachfolgend.



Abbildung 4.1: Dreieck T_i mit Nachbardreiecken

Berechnung von g mit Flux-Vector-Splitting:

Definiere für Γ_{ij} , den Normalenvektor $n_{ij} = (n_{ij}^1, n_{ij}^2) \in \mathbb{R}^2$ und einen Vektor W die Matrix $C = (C_{ij})_{1 \le i,j \le 2}$ durch

$$C_{ij}(W) := n_{ij}^1 D f_1(W) + n_{ij}^2 D f_2(W).$$

Wie wir in Abschnitt 4.3 zeigen werden, existiert eine orthogonale invertierbare Matrix $Q = Q_{ij}$ mit

$$Q_{ij}^{-1}(W) C_{ij}(W) Q_{ij}(W) = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4, \lambda_5) =: D_{ij}(W).$$
(4.9)

Die Existenz von Q steht in engem Zusammenhang mit der Hyperbolizität des Gleichungssystems ohne 2. Ableitungen, siehe Abschnitt 2.6. Setze $C_{ij}(W)^{\pm} := Q_{ij}(W) D_{ij}^{\pm}(W) Q_{ij}^{-1}(W)$. Dabei gilt $D_{ij}^{\pm} := \text{diag}(\lambda_i^{\pm}), \ \lambda_i^{\pm} := \max \{\lambda_i, 0\}, \ \lambda_i^{-} := \min \{\lambda_i, 0\}.$

Definiere nun (Verfahren von Steger&Warming):

$$g_{ij}(U_i, U_{ij}) := |\Gamma_{ij}| \left(C_{ij}^+(U_i) \ U_i + C_{ij}^-(U_{ij}) \ U_{ij} \right).$$
(4.10)

Der so definierte numerische Fluß erfüllt die folgenden Gleichungen:

• Erhaltungseigenschaft:

$$g_{ij}(U_i, U_{ij}) = -g_{ji}(U_{ij}, U_i).$$
(4.11)

• Konsistenz:

$$g_{ij}(U,U) = |\Gamma_{ij}| n_{ij} \cdot f(U).$$

Die Konsistenz ist wesentlich für (4.7). Die Erhaltungseigenschaft ergibt sich unmittelbar aus der Definition (4.10), die Konsistenz des numerischen Flußes g aus der Homogenität (vom Grad Eins) der Abbildungen f_1 und f_2 (d.h. es gilt $f_i(U) = Df_i(U)U$ für i = 1, 2). Unter dieser Annahme gilt für das oben verwendete Verfahren von Steger&Warming:

$$g_{ij}(U,U) = |\Gamma_{ij}| \left(C^+_{ij}(U)U + C^-_{ij}(U)U \right)$$
$$= |\Gamma_{ij}| \left(n^1_{ij}Df_1(U)U + n^2_{ij}Df_2(U)U \right)$$
$$= |\Gamma_{ij}| f(U) \cdot n.$$

Wir sehen also, daß die entscheidende Eigenschaft für das gesamte Verfahren die Homogenität der numerischen Flüsse ist, mit der wir uns jetzt beschäftigen.

4.2 Homogenität der numerischen Flüsse

Schreibt man ausgehend von der Formulierung (4.1) alle sich aus 1. Ableitungen ergebenden Terme in f_1 und f_2 und die 2. Ableitungsterme in h_1 und h_2 , so ist die geforderte Homogenitätsbedingung für die sich ergebenden Funktionen f_i erfüllt, wenn man eine ideale Gasgleichung für beide Phasensysteme zugrunde legt und wie oben beschrieben $\gamma_1 = \gamma_2$ sowie $c_{V,1} = c_{V,2}$ fordert. Als Zustandsgleichungen ergeben sich dieselben wie für die Navier–Stokes– oder Euler– Gleichungen (siehe (2.57) und (2.58)), also sind die numerischen Flüsse in den ersten vier Zeilen identisch. Der Nachweis der Homogenität ist nun leicht, wir führen ihn der Vollständigkeit halber nachfolgend.

Zur Vereinfachung der Terme schreiben wir (nur für diesen Abschnitt) den Lösungsvektor U aus (4.2) um zu

$$U = (\varrho, \varrho v_1, \varrho v_2, e, \varrho \chi)^t =: (a, b, c, e, f)^t.$$

 f_1 und f_2 aus (4.3) schreiben sich mit dieser Notation als

$$f_1(U) = \begin{pmatrix} b \\ \frac{b^2}{a} + (\gamma - 1)(e - \frac{b^2 + c^2}{2a}) \\ \frac{bc}{a} \\ \frac{\gamma be}{a} - (\gamma - 1)\frac{b^3 + bc^2}{2a^2} \\ \frac{bf}{a} \end{pmatrix}, \quad f_2(U) = \begin{pmatrix} c \\ \frac{bc}{a} \\ \frac{c^2}{a} + (\gamma - 1)(e - \frac{b^2 + c^2}{2a}) \\ \gamma \frac{ce}{a} - (\gamma - 1)\frac{c^3 + b^2c}{2a^2} \\ \frac{cf}{a} \end{pmatrix}.$$

Für die Ableitungen ergibt sich damit:

$$Df_1(U) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{b^2}{a^2} + (\gamma - 1)\frac{b^2 + c^2}{2a^2} & (3 - \gamma)\frac{b}{a} & -(\gamma - 1)\frac{c}{a} & \gamma - 1 & 0 \\ -\frac{bc}{a^2} & \frac{c}{a} & \frac{b}{a} & 0 & 0 \\ -\gamma\frac{be}{a^2} + (\gamma - 1)\frac{b^3 + bc^2}{a^3} & \gamma\frac{e}{a} - (\gamma - 1)\frac{3b^2 + c^2}{2a^2} & -(\gamma - 1)\frac{bc}{a^2} & \gamma\frac{b}{a} & 0 \\ -\frac{bf}{a^2} & \frac{f}{a} & 0 & 0 & \frac{b}{a} \end{pmatrix}, \quad (4.12)$$

$$Df_2(U) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ -\frac{bc}{a^2} & \frac{c}{a} & \frac{b}{a} & 0 & 0 \\ -\frac{c^2}{a^2} + (\gamma - 1)\frac{b^2 + c^2}{2a^2} & -(\gamma - 1)\frac{b}{a} & (3 - \gamma)\frac{c}{a} & \gamma - 1 & 0 \\ -\gamma\frac{ce}{a^2} + (\gamma - 1)\frac{c^3 + b^2c}{a^3} & -(\gamma - 1)\frac{bc}{a^2} & \gamma\frac{e}{a} - (\gamma - 1)\frac{3c^2 + b^2}{2a^2} & \gamma\frac{c}{a} & 0 \\ & -\frac{cf}{a^2} & 0 & \frac{f}{a} & 0 & \frac{c}{a} \end{pmatrix}.$$
 (4.13)

Man rechnet nun mühelos nach, daß die Homogenität erfüllt ist: $Df_i(U)U = f_i(U)$, i = 1, 2. Allgemeinere Fälle, in denen die Homogenitätsbedingung verletzt wird, werden in Abschnitt 4.5 behandelt.

4.3 Koordinatentransformation, Eigenwerte des Systems

Bei dem Verfahren (4.10) von Steger und Warming handelt es sich um ein Charakteristikenverfahren. Nachfolgend geben wir die Transformationen Q bzw. Q^{-1} aus (4.9) auf Diagonalgestalt an. Dabei fallen die Eigenwerte mit ab, so daß am Ende auch C_{ii}^+ und C_{ii}^- bekannt sind.

Gegeben sei das Koordinatensystem U aus (4.2) und das System aus den primitiven Variablen

$$V = (\varrho, v_1, v_2, p, \chi)^t.$$

Will man direkt die Eigenwerte der Matrix $n^1 D f_1(U) + n^2 D f_2(U)$ bestimmen, so stößt man auf technische Schwierigkeiten, da es sich um eine 5 x 5–Matrix handelt und das charakteristische Polynom sehr unübersichtlich wird.

Daher nehmen wir für die Matrizen $Df_1(U)$ und $Df_2(U)$ aus (4.12), (4.13) eine Koordinatentransformation T vor, so daß ihre Struktur wesentlich überschaubarer wird. T ist der Basiswechsel von U nach V und kann bestimmt werden durch $\frac{\partial U}{\partial V}$.

Für die Transformationsmatrizen gilt also:

$$T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ v_1 & \varrho & 0 & 0 & 0 \\ v_2 & 0 & \varrho & 0 & 0 \\ \frac{|v|^2}{2} & \varrho v_1 & \varrho v_2 & \frac{1}{\gamma - 1} & 0 \\ \chi & 0 & 0 & 0 & \varrho \end{pmatrix}$$

und entsprechend für die Inverse

$$T^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{v_1}{\varrho} & \frac{1}{\varrho} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{v_2}{\varrho} & 0 & \frac{1}{\varrho} & 0 & 0 \\ (\gamma - 1) \frac{|v|^2}{2} & (1 - \gamma)v_1 & (1 - \gamma)v_2 & \gamma - 1 & 0 \\ -\frac{\chi}{\varrho} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\varrho} \end{pmatrix}$$

Mit der Definition

$$c^2 = \frac{\gamma p}{\varrho} \tag{4.14}$$

für das Quadrat der Schallgeschwindigkeit haben wir

$$P(U) = n_1 T^{-1} D f_1(U) T + n_2 T^{-1} D f_2(U) T$$
$$= \begin{pmatrix} n \cdot v & n_1 \rho & n_2 \rho & 0 & 0\\ 0 & n \cdot v & 0 & \frac{n_1}{\rho} & 0\\ 0 & 0 & n \cdot v & \frac{n_2}{\rho} & 0\\ 0 & n_1 \rho c^2 & n_2 \rho c^2 & n \cdot v & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & n \cdot v \end{pmatrix}$$

von der die Eigenwerte und Eigenvektoren zu bestimmen sind.

Aus der Gestalt von P ergibt sich nun unmittelbar:

 $\begin{array}{lll} (0,\ n_2,\ -n_1,\ 0,\ 0)^t & \text{ist Eigenvektor zum Eigenwert } n\cdot v, \\ (1,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0)^t & \text{ist Eigenvektor zum Eigenwert } n\cdot v, \\ (0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 1)^t & \text{ist Eigenvektor zum Eigenwert } n\cdot v, \\ (\frac{\varrho}{2c},\ \frac{n_1}{2},\ \frac{n_2}{2},\ \frac{\varrho c}{2},\ 0)^t & \text{ist Eigenvektor zum Eigenwert } n\cdot v+c, \\ (\frac{\varrho}{2c},\ -\frac{n_1}{2},\ -\frac{n_2}{2},\ \frac{\varrho c}{2},\ 0)^t & \text{ist Eigenvektor zum Eigenwert } n\cdot v-c. \end{array}$

Die angegebenen Eigenvektoren bilden als Spaltenvektoren die reguläre Matrix E, d.h. wir haben

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \frac{\varrho}{2c} & \frac{\varrho}{2c} & 0\\ 0 & n_2 & \frac{n_1}{2} & -\frac{n_1}{2} & 0\\ 0 & -n_1 & \frac{n_2}{2} & -\frac{n_2}{2} & 0\\ 0 & 0 & \frac{\varrho c}{2} & \frac{\varrho c}{2} & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad E^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -\frac{1}{c^2} & 0\\ 0 & n_2 & -n_1 & 0 & 0\\ 0 & n_1 & n_2 & \frac{1}{\rho c} & 0\\ 0 & -n_1 & -n_2 & \frac{1}{\rho c} & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$
(4.15)

Daraus ergibt sich nun die Matrix Q = TE, die zur Berechnung der Matrizen C^{\pm} noch fehlt, zu

$$Q = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \frac{\varrho}{2c} & \frac{\varrho}{2c} & 0\\ v_1 & n_2 \varrho & \frac{\varrho}{2c} (v_1 + n_1 c) & \frac{\varrho}{2c} (v_1 - n_1 c) & 0\\ v_2 & -n_1 \varrho & \frac{\varrho}{2c} (v_2 + n_2 c) & \frac{\varrho}{2c} (v_2 - n_2 c) & 0\\ \frac{|v|^2}{2} & \varrho (n_2 v_1 - n_1 v_2) & \frac{\varrho}{2c} (H + c(v \cdot n)) & \frac{\varrho}{2c} (H - c(n \cdot v)) & 0\\ \chi & 0 & \frac{\varrho \chi}{2c} & \frac{\varrho \chi}{2c} & \varrho \end{pmatrix},$$

und die Inverse $Q^{-1} = E^{-1}T^{-1}$ zu

$$Q^{-1} = \begin{pmatrix} 1 - \frac{\gamma - 1}{2} \frac{|v|^2}{c^2} & (\gamma - 1)\frac{v_1}{c^2} & (\gamma - 1)\frac{v_2}{c} & -\frac{\gamma - 1}{c^2} & 0\\ \frac{1}{\varrho} \left(n_1 v_2 - n_2 v_1\right) & \frac{n_2}{\varrho} & -\frac{n_1}{\varrho} & 0 & 0\\ \frac{c}{\varrho} \left(\frac{\gamma - 1}{2} \frac{|v|^2}{c^2} - \frac{n \cdot v}{c}\right) & \frac{1}{\varrho} \left(n_1 - (\gamma - 1)\frac{v_1}{c}\right) & \frac{1}{\varrho} \left(n_2 - (\gamma - 1)\frac{v_2}{c}\right) & \frac{\gamma - 1}{\varrho c} & 0\\ \frac{c}{\varrho} \left(\frac{\gamma - 1}{2} \frac{|v|^2}{c^2} + \frac{n \cdot v}{c}\right) & -\frac{1}{\varrho} \left(n_1 + (\gamma - 1)\frac{v_1}{c}\right) & -\frac{1}{\varrho} \left(n_2 + (\gamma - 1)\frac{v_2}{c}\right) & \frac{\gamma - 1}{\varrho c} & 0\\ & -\frac{\chi}{\varrho} & 0 & 0 & \frac{1}{\varrho} \end{pmatrix},$$

wobei $H := \frac{e+p}{\varrho}$ die Enthalpie bezeichnet.

4.4 Berechnung der numerischen Flüsse im Programm

Mit der Berechnung von Q und Q^{-1} können wir nun den numerischen Fluß g bestimmen.

Wir fassen zusammen: Der numerische Fluß für das Verfahren von Steger&Warming lautet für ein Dreieck T_i , sein Nachbardreieck T_{ij} und den zugehörigen approximativen Lösungen U_i , U_{ij} :

$$g_{ij}(U_i, U_{ij}) := |\Gamma_{ij}| \left(C_{ij}^+(U_i) \ U_i + C_{ij}^-(U_{ij}) \ U_{ij} \right);$$

die Matrizen $C_{ij}^{\pm}(W)$ sind gegeben durch

$$C_{ij}(W)^{\pm} := Q_{ij}(W) D_{ij}^{\pm}(W) Q_{ij}^{-1}(W).$$

Die Eigenwerte von C_{ij} sind mit der Schallgeschwindigkeit c aus (4.14):

$$\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_5 = n \cdot v, \ \lambda_3 = n \cdot v + c, \ \lambda_4 = n \cdot v - c.$$

Die Berechnung von g_{ij} muß für jede Kante Γ_{ij} der Triangulierung und jeden Zeitschritt im Programm genau einmal vorgenommen werden, wenn man die Erhaltungseigenschaft (4.11) berücksichtigt. Die sich bei direkter Anwendung der Definition ergebenden Matrizenmultiplikationen bedeuten daher bei der Berechnung von C_{ij}^{\pm} einen hohen Zeitaufwand. Man kann das gesamte Verfahren um ca. 30 Prozent beschleunigen, indem man nach der Zahl der verschiedenen positiven Eigenwerte unterscheidet und in vielen Fällen Matrixmultiplikationen einspart:

1. Fall: 3 verschiedene positive Eigenwerte:

Hier gilt $C^+(U)U = C(U)U = f(U) \cdot n$, $C^-(U) \equiv 0$.

2. Fall: 2 verschiedene positive Eigenwerte, d.h. $\lambda_4 < 0$:

Man nutzt die Symmetriebeziehung $C^+(U)U = f(U) \cdot n - C^-(U)U$ aus.

Sei Z_1 der Vektor aus der 4. Spalte von Q, Z_2 der Vektor gebildet aus der 4. Zeile von Q^{-1} . Dann gilt:

$$C^{-}(U)U = \lambda_{4} Z_{1}Z_{2}^{t}U$$

$$= \frac{\lambda_{4}}{2c} \begin{pmatrix} 1 \\ v_{1} - n_{1}c \\ v_{2} - n_{2}c \\ (e+p)/\varrho - c(n \cdot v) \\ \chi \end{pmatrix} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{\gamma - 1}{2} \frac{|v|^{2}}{c} + n \cdot v \\ -n_{1} - (\gamma - 1)\frac{v_{1}}{c} \\ -n_{2} - (\gamma - 1)\frac{v_{2}}{c} \\ \frac{\gamma - 1}{c} \\ 0 \end{pmatrix}}_{=:Z_{3}} \cdot U.$$

Weiter gilt:

$$Z_3^t U = \rho \left(\frac{\gamma - 1}{2} \frac{|v|^2}{c} - (\gamma - 1) \frac{|v|^2}{c} \right) + \frac{(\gamma - 1)}{c} e$$

= $\frac{\gamma - 1}{c} e_{\text{pot}} = \frac{p}{c},$

also insgesamt:

$$C^{-}(U)U = \frac{1}{2\gamma} \lambda_4 \begin{pmatrix} \varrho \\ \varrho v_1 - n_1 \varrho c \\ \varrho v_2 - n_2 \varrho c \\ e + p - \varrho c \ (n \cdot v) \\ \varrho \chi \end{pmatrix}.$$

3. Fall: Genau ein positiver Eigenwert, d.h. $\lambda_3 > 0$:

Entsprechend Fall 2 verwendet man $C^{-}(U)U = f(U) \cdot n - C^{+}(U)U$ und erhält:

$$C^{+}(U)U = \frac{1}{2\gamma} \lambda_{3} \begin{pmatrix} \varrho \\ \varrho v_{1} + n_{1}\varrho c \\ \varrho v_{2} + n_{2}\varrho c \\ e + p + \varrho c (n \cdot v) \\ \varrho \chi \end{pmatrix}.$$

4. Fall: Kein positiver Eigenwert:

Dann ist $C^+(U)U \equiv 0$, $C^-(U)U = C(U)U = f(U) \cdot n$.

Zur Berechnung der C_{ij}^{\pm} fehlt nur noch der Term $f(U) \cdot n$. Mit $\alpha := n \cdot v$ ergibt sich:

$$f(U) \cdot n = n_1 f_1(U) + n_2 f_2(U)$$
$$= \begin{pmatrix} \alpha \varrho \\ \alpha \varrho v_1 + p n_1 \\ \alpha \varrho v_2 + p n_2 \\ (e+p)\alpha \\ \alpha \varrho \chi \end{pmatrix}.$$
4.5 Gestörte Homogenitätsbedingung

Bisher haben wir nur einen Sonderfall behandelt, bei dem die Homogenitätsbedingung erfüllt war. Betrachten wir nun die Situation, daß $c_{V,1} \neq c_{V,2}$ und für beide Teilsysteme noch immer eine ideale Gasgleichung gilt. Mit der Abkürzung $c_{V,\chi}$ aus (2.50) und der Definition

$$\gamma_{\chi} := \frac{(\gamma_1 - 1)(\gamma_2 - 1)}{\chi \, \gamma_2 + (1 - \chi) \, \gamma_1 - 1}$$

gelten die Zustandsgleichungen

$$p = \gamma_{\chi} e_{\text{pot}},$$
$$e = c_{V,\chi} \rho T.$$

Wir rechnen direkt nach, daß die Homogenität verletzt wird: für die (i+1)-te und 4. Komponente gilt $Df_i(U)U \neq f_i(U)$, i = 1, 2. Damit sind wir in einer Situation, in der das numerische Verfahren keine exakten Ergebnisse mehr liefert.

Zur Lösung dieser Schwierigkeit bemerken wir zunächst, daß die Beziehung zwischen Druck und Energie entscheidend ist für die Erfüllung der Homogenitätsbedingung. Die Zustandsgleichung für T ist nicht entscheidend, da die Temperaturterme als Differentialausdrücke 2. Ordnung in h_1, h_2 stehen. Daher bietet sich folgendes Verfahren an: Man wählt zur Erhaltungsgröße e einen "homogenisierenden Druck" p_h , der durch Beziehung (2.57) definiert wird. Diesen schreibt man dann statt p in f_1, f_2 . Die gemachten Fehler der Form $p - p_h$ und $(p - p_h)v_i$ (vgl. (4.3) und (4.4)) werden dann zu h_1, h_2 addiert.

Genauso verfahren wir, wenn wir für das 2. Stoffsystem die Van-der-Waals-Gleichung mit a = 0 und $b \neq 0$ ansetzen.

Letztlich vermag dieses Vorgehen theoretisch nicht zu überzeugen, da die Charakteristiken des Verfahrens gestört sind. Allerdings sollte man beachten, daß die Beziehung zwischen Druck und Energie linear bleibt, die lineare Konstante jetzt zusätzlich von χ abhängt, so daß die einzig möglichen Fehler des Programms auf der ungenauen Anpassung des Drucks an Änderungen von χ beruhen.

Eine Alternative zum beschriebenen Vorgehen gibt es mit dem hier verwendeten numerischen Verfahren nicht. Die Ausarbeitung eines Flux–Difference–Splitting stellt eine Pionierarbeit dar, da die Ergebnisse der Navier–Stokes–Gleichungen nicht übernommen werden können. Dieses Verfahren könnte die beschriebenen Probleme jedoch vermeiden.

4.6 Berechnung der 2. Ableitungen

Die in diesem Abschnitt vorgestellten Methoden basieren ausnahmslos auf Arbeiten des mathematischen Institutes der Universität Freiburg. Die verwendeten Verfahren sind aber integraler Bestandteil des verwendeten Algorithmus und werden daher für eine vollständige Beschreibung hier nachfolgend aufgeführt.

Es wurden zwei recht verschiedene Ansätze zur Berechnung der 2. Ableitungen entworfen, wobei die im 1. Unterabschnitt präsentierte stützstellenbasierte Methode die historisch ältere ist, die sich aber in Tests i.a. als unzureichend erwies. Für Reynoldszahlen kleiner als 10^4 kommt es mit dieser Methode häufig zu Oszillationen. Neben den beiden hier vorgestellten Verfahren findet sich in einer aktuellen Arbeit eine Finite–Elemente–Methode (in Verbindung mit einem Operator–Splitting). Für große Reynoldszahlen ist es für die Behandlung der Navier–Stokes–Gleichungen ziemlich egal, welches Verfahren man verwendet, da in der dimensionslosen Formulierung der Faktor $\frac{1}{\text{Re}}$ auftritt.

4.6.1 Stützstellenbasierte Berechnung der 2. Ableitungen

Mit Hilfe des Satzes von Gauß und Übergang auf Randintegrale wurde die Ordnung der Differentialoperatoren um Eins vermindert.

Nachfolgend erklären wir die approximative Berechnung der Terme $h_k(U^n)$ aus (4.8) auf den Kantenmittelpunkten z_{ij} . Wir erklären die im Programm verwendete Berechnung der 1. partiellen Ableitungen am Beispiel von

$$r(x) := \begin{pmatrix} v_1(x) \\ v_2(x) \\ T(x) \\ \chi(x) \end{pmatrix}.$$

Die Einträge r_j des Vektors r sind auf den Elementmittelpunkten gegeben. Zunächst verschafft man sich mit dem Verfahren von Frink genäherte Werte \tilde{r}_m von r auf den Eckpunkten x_m :

$$\tilde{r}_m := \sum_{j:x_m \in T_j} \frac{r_j}{h_j} / \sum_{j:x_m \in T_j} \frac{1}{h_j}$$

$$(4.16)$$

mit $h_j := \text{dist}(w_j, x_m)$ und dem Schwerpunkt w_j von T_j . Das Verfahren von Frink ist exakt für lineare Funktionen.



Abbildung 4.2: Verwendete Bezeichnungen am Dreieck T_i

Sei φ_{il} die lineare Funktion, welche auf dem l-ten lokalen Knoten von T_i den Wert 1 annimmt und auf den anderen Knoten 0 ist. Nachdem wir nun über genäherte Werte in den Dreieckseckpunkten verfügen, ersetzen wir r durch die lineare Funktion

$$r(x) := \sum_{l=0}^{2} \tilde{r}_{il} \varphi_{il}(x), \ x \in T_i.$$
(4.17)

Zur Berechnung von $\frac{\partial}{\partial k}r$ benötigen wir also die Auswertung des Ausdrucks $\frac{\partial}{\partial k}\varphi_{il}$. Zunächst bemerken wir für ein Dreieck $T_i \in \mathcal{T}_h$, $n = \begin{pmatrix} n^1 \\ n^2 \end{pmatrix}$ und $\gamma_{im}^l := |\Gamma_{im}| n_{im}^l$:

$$\sum_{m=0}^{2} \gamma_{im}^{1} = \sum_{m=0}^{2} \int_{\Gamma_{im}} n_{im}^{1} = \int_{\partial T_{i}} n^{1} = \int_{T_{i}} \operatorname{div} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

also

$$\sum_{m=0}^{2} \gamma_{im}^{l} = 0, \ l = 1, 2.$$
(4.18)

Nun gilt unter Verwendung des Satzes von Gauß:

$$\frac{\partial}{\partial k}\varphi_{il}(z_{ij}) = \frac{\partial}{\partial k}\varphi_{il}(w_{ij}) = \int_{T_i} \frac{\partial}{\partial k}\varphi_{il}(x) dx$$

$$= \frac{1}{|T_i|} \int_{\partial T_i} \varphi_{il}(x)n^k dx$$

$$= \frac{1}{|T_i|} \sum_{m=0}^2 \int_{\Gamma_{im}} \varphi_{il}(x)n^k_{im} dx$$

$$= \frac{1}{|T_i|} \sum_{m=0}^2 \varphi_{il}(z_{im}) \gamma^k_{im}$$

$$= -\frac{1}{2|T_i|} \gamma^k_{il}.$$
(4.19)

Dabei wurde beim Übergang zur letzten Gleichung die Beziehung (4.18) und $\varphi_{il}(z_{im}) \in \{0, \frac{1}{2}\}$ verwendet.

Setzt man (4.19) in den linearen Ansatz (4.17) ein, so erhält man eine erste Möglichkeit zur Berechnung der 1. partiellen Ableitungen:

$$\frac{\partial}{\partial_k} r(z_{ij}) \approx -\frac{1}{2|T_i|} \sum_{l=0}^2 \tilde{r}_{il} \gamma_{il}^k.$$
(4.20)

Man kann die Approximationsformel verbessern, indem man für eine Kante Γ_{ij} die gerade hergeleitete Vorschrift (4.20) auf den anliegenden Dreiecken T_i und T_{ij} verwendet und die erhaltenen Werte mittelt:

$$\frac{\partial}{\partial_k} r(z_{ij}) \approx \frac{1}{2} \left(\sum_{l=0}^2 \tilde{r}_{il} \frac{\partial}{\partial_k} \varphi_{il}(z_{ij}) + \sum_{l=0}^2 \tilde{r}_{(ij)l} \frac{\partial}{\partial_k} \varphi_{(ij)l}(z_{ij}) \right) \\
= -\frac{1}{4|T_i|} \left(\sum_{l=0}^2 \tilde{r}_{il} \cdot \gamma_{il}^k + \sum_{l=0}^2 \tilde{r}_{(ij)l} \tilde{r}_{(ij)l} \gamma_{(ij)l}^k \right).$$
(4.21)

Falls stützstellenbasierte Verfahren für die 2. Ableitungen benutzt wurden, so haben wir im Programm die zweite Möglichkeit (4.21) verwendet.

4.6.2 Elementbasierte Berechnung der 2. Ableitungen

Wie früher suchen wir eine Näherung für den Ausdruck

$$d_{ij}^k(U^n) := \frac{\partial}{\partial k} r(z_{ij}), \quad k = 1, 2.$$

Für die folgenden Varianten wird die Approximation d_{ij}^k der Ableitung im Kantenmittelpunkt z_{ij} als Mittelwert entsprechender Ausdrücke auf zwei benachbarten Dreiecken definiert. Dabei

sei ϕ_{ij}^k der entsprechende Ausdruck für Dreieck T_i und ϕ_{ji}^k der für das Nachbardreieck T_{ij} . Wir definieren also

$$d_{ij}^k(U^n) := \frac{1}{2}(\phi_{ij}^k + \phi_{ji}^k),$$

woraus sofort eine Erhaltungseigenschaft analog (4.11) folgt.

Bei allen folgenden Verfahren werden 3 Punkte auf anliegenden Dreiecken ausgewählt. Die Funktionswerte in diesen Punkten bestimmen eindeutig eine Ebenengleichung, deren Steigung in xbzw. y-Richtung die gesuchten Näherungen der partiellen Ableitungen sind.

Variante 1

Zunächst verwenden wir zur Berechnung der partiellen Ableitungen des Vektors d_{ij}^k nur Werte auf Dreieck T_i und Nachbardreieck T_{ij} . Als Stützpunkte werden in dieser Variante der Schwerpunkt w_i des Dreiecks T_i gewählt sowie zwei weitere Punkte P_{i1_1} und P_{i1_2} im anliegenden Dreieck T_{ij} , die auf einer Parallele zur Kante Γ_{ij} liegen, siehe Abbildung 4.3.



Abbildung 4.3: Approximation der Ableitung in z_{i1} mit Variante eI

Sei $(\phi_{ij}^k)_t$, $1 \le t \le 3$, die t-te Komponente des Vektors ϕ_{ij}^k . Ferner gelte

$$w_i := \begin{pmatrix} x_i \\ y_i \end{pmatrix}$$
 und $P_{ij_l} := \begin{pmatrix} x_{ij_l} \\ y_{ij_l} \end{pmatrix}$ für $l \in \{1, 2\}$.

Zur Notation sei gesagt, daß *ij ein* lokaler Index ist und das *j*-te Nachbardreieck von T_i bezeichnet. Für jede Komponente des Vektors $r_t(x)$, $1 \le t \le 3$ definieren wir die lineare Funktion

$$L_{ij}(x) := r_t(w_i) + D_{ij}(x - w_i).$$

Es gilt also $L_{ij}(w_i) = r_t(w_i)$. Mit den weiteren Bedingungen $L_{ij}(x_{ij_l}) = r_t(P_{ij_l}), \ l = 1, 2$ folgt für die gesuchte Ableitung

$$D_{ij} = \begin{pmatrix} (\phi_{ij}^1)_t \\ (\phi_{ij}^2)_t \end{pmatrix}$$

= $\frac{1}{\det K_{ij_1,ij_2,i}} \begin{pmatrix} y_{ij_1} - y_i & -(y_{ij_2} - y_i) \\ -(x_{ij_1} - x_i) & x_{ij_2} - x_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_t(w_{ij}) - r_t(w_i) \\ r_t(w_{ij}) - r_t(w_i) \end{pmatrix}.$

Die Matrix $K_{j,k,i}$ sei dabei für beliebige Indizes i, j, k definiert durch

$$K_{j,k,i} := \left(\begin{array}{cc} x_j - x_i & y_j - y_i \\ x_k - x_i & y_k - y_i \end{array}\right).$$

Variante II

Hier werden zwei Nachbardreiecke von T_i zur Berechnung herangezogen. Für den Kantenmittelpunkt z_{ij} wählt man als Stützstellen für die oben definierte lineare Funktion L_{ij} die beiden Schwerpunkte w_i und w_{ij} sowie den Schwerpunkt eines der beiden anderen an T_i angrenzenden Dreiecke, siehe Abbildung 4.4. Bei der Auswahl des zu verwendenden angrenzenden Dreiecks wird dasjenige gewählt, für das $|\det K_{j,k,i}|$ maximal wird. Bei adaptiver Gitterverfeinerung können nämlich unter bestimmten Umständen sehr entartete langgestreckte Dreiecke entstehen, für die die bei der Berechnung des Gradienten benötigte Determinante fast verschwindet, was zu numerischen Problemen führt.



Abbildung 4.4: Approximation der Ableitung in z_{i1} mit Varianten II und III

Wir definieren wie oben

$$w_{ij} := \left(egin{array}{c} x_{ij} \ y_{ij} \end{array}
ight) ext{ und } w_{ik} := \left(egin{array}{c} x_{ik} \ y_{ik} \end{array}
ight).$$

Mit den Bedingungen $L_{ij}(w_{ij}) = r_t(w_{ij})$ und $L_{ij}(w_{ik}) = q_t(w_{ik})$ erhalten wir für $t \in \{1, 2, 3\}$ und $K_{j,k,i}$ wie oben:

$$\begin{pmatrix} (\phi_{ij}^1)_t \\ (\phi_{ij}^2)_t \end{pmatrix} = \frac{1}{\det K_{j,k,i}} \begin{pmatrix} y_{ij} - y_i & -(y_{ik} - y_i) \\ -(x_{ij} - x_i) & x_{ik} - x_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_t(w_{ik}) - r_t(w_i) \\ r_t(w_{ij}) - r_t(w_i) \end{pmatrix}.$$
(4.22)

Dabei ist $k \in \{1, 2, 3\} \setminus \{j\}$ so gewählt, daß $|\det K_{j,k,i}| = \max_{\substack{l \in \{1, 2, 3\} \\ l \neq j}} |\det K_{j,l,i}|.$

Variante III

Diese Variante ist die einzige, für die theoretische Resultate vorliegen. Dabei wird für die Triangulierung gefordert, daß die Innenwinkel der Dreiecke kleiner als 90° sind und für alle i und j gilt:

$$\frac{\omega_{ij} \cdot n_{ij}}{\det K_{j,k,i}} > 0 \quad \text{mit } \omega_{ij} := \left(\begin{array}{c} y_j - y_i \\ x_i - x_j \end{array}\right).$$

Das Verfahren definiert sich wie bei Variante II durch Beziehung (4.22), k wird wie folgt gewählt:

$$\bar{k} := \begin{cases} j+1 & : & \omega_{ij} \cdot n_{ij} \ge 0, \\ j+2 & : & \omega_{ij} \cdot n_{ij} < 0, \end{cases}$$
$$k := \begin{cases} \bar{k} & : & \bar{k} \le 3, \\ \bar{k}-3 & : & \bar{k} > 3. \end{cases}$$

Bei dieser Wahl kann bewiesen werden, daß die numerische Lösung ein Maximumprinzip erfüllt. Aus diesem Grund wurde bei den numerischen Rechnungen des folgenden Kapitels immer dieses Verfahren verwendet.

Variante IV

In dieser Variante wird für jedes der beiden möglichen Nachbardreiecke das Verfahren II durchgeführt und die beiden sich ergebenden Approximationen für die partielle Ableitung gemittelt.

In Formeln ausgedrückt heißt dies:

$$\bar{k} := j+1, \quad k := \begin{cases} \bar{k} : \bar{k} \le 3, \\ \bar{k}-3 : \bar{k} > 3, \end{cases}$$
$$\bar{l} := l+2, \quad l := \begin{cases} \bar{l} : \bar{l} \le 3, \\ \bar{l}-3 : \bar{l} > 3. \end{cases}$$

Die Mittelung definiert sich dann kanonisch für $t \in \{1, 2, 3\}$ durch

$$\begin{pmatrix} (\phi_{ij}^1)_t \\ (\phi_{ij}^2)_t \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \frac{1}{\det K_{j,k,i}} \begin{pmatrix} y_{ij} - y_i & -(y_{ik} - y_i) \\ -(x_{ij} - x_i) & x_{ik} - x_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_t(w_{ik}) - r_t(w_i) \\ r_t(w_{ij}) - r_t(w_i) \end{pmatrix} \\ + \frac{1}{\det K_{j,l,i}} \begin{pmatrix} y_{ij} - y_i & -(y_{il} - y_i) \\ -(x_{ij} - x_i) & x_{il} - x_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_t(w_{il}) - r_t(w_i) \\ r_t(w_{ij}) - r_t(w_i) \end{pmatrix} \end{bmatrix}.$$

4.7 Behandlung der Randwerte

Neben dem bereits in 2.2 definierten Einströmrand R_I und dem Ausströmrand R_O wollen wir noch no-slip-Randwerte ("feste Wand") zulassen. An diesem Rand ist die Geschwindigkeit Null, für die Temperatur (und damit für die Energie) wird ein Randwert vorgeschrieben. Die Dichte bleibt unverändert.

Wie bereits in Abschnitt 2.9 betont, nehmen wir an, daß das Verhalten der Ränder invariant sei in der Zeit. Das heißt konkret, daß für alle Zeiten die bei t = 0 getroffene Einteilung in R_I , R_O , reflektierende Ränder und Inneres von Ω beibehalten wird.

Für den Einströmrand nehmen wir an, daß Dichte, Geschwindigkeit und Druck p_I des einschießenden Fluids bekannt seien. Dies ist etwas anschaulicher als die Vorgabe der Energie. An den festen Wänden sei die Temperatur T_s der Wand vorgegeben.

Bei dem oben vorgestellten expliziten Verfahren werden an drei Stellen die Randwerte berücksichtigt:



Abbildung 4.5: Randdreieck T_i mit fiktivem Nachbardreieck T_{ij} an festem Rand

• Unabhängig von der Wahl der Anfangswerte werden auch für die Startzeit die vorgeschriebenen Randwerte explizit gesetzt, d.h. es werden die folgenden Kompatibilitätsbedingungen angenommen:

$$\begin{aligned} v_s(\cdot,0) &= v_{0|\partial\Omega}, \\ T_s(\cdot,0) &= T_{0|\partial\Omega}, \\ \varrho_I(\cdot,0) &= \varrho_{0|R_I}. \end{aligned}$$

Statt die Temperatur am Rand vorzuschreiben, kann man genausogut Werte für die Energie vorschreiben, wie in 2.4 geschehen.

- Bei der stützstellenbasierten Berechnung der 2. Ableitungen werden zunächst wie oben erklärt mit dem Verfahren von Frink in den Knoten genäherte Werte für Dichte, Geschwindigkeit, Energie und Phasenparameter bestimmt. Für einen Knoten auf R_I werden diese Werte durch die durch die Randwerte festgelegten ersetzt. Für einen Knoten auf einem reflektierenden Rand wird die Geschwindigkeit auf Null gesetzt und für die Energie der durch den Randwert der Temperatur bestimmte Wert eingesetzt. Auf dem Ausströmrand werden die Werte nicht verändert.
- Die Berechnung des numerischen Flußes erfolgt elementweise. Für gewöhnlich werden alle Nachbarn T_{ij} eines Dreiecks T_i sukzessive betrachtet und der Fluß aufgrund der vorgefundenen Werte des Lösungsvektors errechnet. Liegt bei T_i eine Kante auf einem Rand, so wird ein (fiktives) Nachbardreieck T_{ij} angenommen und Werte auf T_{ij} passend festgelegt.

Handelt es sich um den Einströmrand, so werden Dichte und Geschwindigkeit wie gefordert gesetzt und die Energie durch Beziehung (2.53) und p_I errechnet.

Handelt es sich um den Ausströmrand, so erhält das fiktive Dreieck dieselben Werte wie T_i . Nur für Temperatur und Phasenparameter werden passende Werte durch lineare Interpolation am fiktiven Nachbardreieck so vorgegeben, daß die vorgeschriebenen Randwerte angenommen werden.

Handelt es sich um den reflektierenden Rand, so werden Dichte und Energie von T_i für T_{ij} übernommen, da diese durch den Rand nicht beeinflußt werden. Die Impulseinträge

 ρv_1 und ρv_2 werden mit negativem Vorzeichen als Einträge für T_{ij} eingesetzt, so daß die resultierende Geschwindigkeit am festen Rand Null ist.

4.8 Zeitschrittweitensteuerung

Wir gehen zunächst auf die Steuerung der Zeitschrittweite für die Navier–Stokes–Gleichungen ein. Sei $m \in \mathbb{N}$ eine vorgegebene Konstante, beispielsweise m = 100. Für jeden m-ten Zeitschritt wird die verwendete Zeitschrittweite adaptiv neu für die nächsten m Schritte berechnet mit Hilfe der Formel

$$\Delta t = \tau \min_{1 \le i \le N} \left\{ |T_i| \max_{1 \le j \le 3} \left(\frac{1}{|\lambda_{ij}| \Gamma_{ij}} \right) \right\}.$$
(4.23)

Dabei bezeichnet N die Zahl der Elemente der Triangulierung von Ω , $|T_i|$ das Volumen des i-ten Elements, $\Gamma_{ij} = \partial T_i \cap \partial T_j$ wie oben, $\lambda_{ij} := n_{ij} \cdot v_j + c$ den betragsmäßig größten Eigenwert $(n_{ij}$ ist die äußere Normale an Γ_{ij} , $c^2 = \frac{\gamma p}{\rho}$). Der Faktor $\tau \in (0, 1]$ ist ein Sicherheitsfaktor, die sog. CFL-Zahl. Bedingung (4.23) ist eine Stabilitätsbedingung nach Courant, Friedrichs und Levy, die das Verhältnis zwischen Güte der Ortsdiskretisierung (hier $|T_i|$) und Zeitschrittweite Δt festlegt. Die gängigen CFL-Kriterien wurden an linearen Systemen untersucht. Für nichtlineare Systeme finden sich in der Literatur unterschiedliche Kriterien, die meist auf heuristischen Überlegungen beruhen.

Betrachten wir nun die Steuerung der Zeitschrittweite für das Gesamtsystem. Hier sind zwei disjunkte Fälle zu unterscheiden mit grundlegend anderem Verhalten.

(A) Verwendung von W_{pol} oder $\chi \neq \{0,1\}$ bei Verwendung von W_{log} :

Dieser Fall ist für die Numerik problemlos. Das polynomielle W' besitzt keine Polstellen und ist für beliebige χ definiert. In Kapitel 5 wird beschrieben, wann χ hinreichend weit von den Polstellen entfernt ist. In diesem Fall ist bei Verwendung von W_{\log} aus (2.60) das Programmverhalten dasselbe. Daher sind dann fast dieselben Zeitschrittweiten verwendbar, unabhängig davon, ob W_{\log} oder W_{pol} verwendet wird.

Das Kriterium (4.23) erlaubt große Zeitschrittweiten, falls Druck und Geschwindigkeit klein werden. Für Δt wurde daher (abhängig von der Verfeinerungsstufe) eine obere Schranke eingeführt, um die korrekte Lösung der modifizierten Allen–Cahn–Gleichung zu gewährleisten. Damit treten dann aber keine weiteren Probleme auf. Die Verwendung des polynomiellen W ist aber nur für $G_1 = G_2$ sinnvoll, da sonst i.a. $\chi \notin [0, 1]$ ist.

(B) Verwendung von W_{\log} , χ wandert in die Nähe der Polstellen 0 und 1 von W_{\log} : Dieser Fall ist deutlich komplizierter. Wie in Abschnitt 5.4 ausgeführt muß Δt sehr klein gewählt werden, falls durch $(G_1 - G_2)/T$ und W_{\log} gesteuert χ sehr nah an die Polstellen 0 oder 1 von W'_{\log} wandert. Wie klein Δt genau sein muß, ist sehr schwierig vorherzusagen. Das Programm speichert daher den Lösungsvektor des letzten Zeitschrittes und wiederholt die Rechnung mit drastisch kleinerem Δt , falls bei der Berechnung des neuen Zeitschritts der Logarithmusterm undefiniert ist. Notfalls wird dieser Prozeß mehrmals durchgeführt, bis für einen hinreichend kleinen Zeitschritt die Lösung des neuen Zeitschrittes $\chi \in (0, 1)$ liegt.

In extremen Fällen, wenn χ gegen einen Phasenwert $\beta > 0.999$ oder $\beta < 0.001$ strebt, kann selbst bei äußerst kleinen Zeitschrittweiten in Folge von Rundungsfehlern im Programm der Fall $\chi \notin$ (0,1) auftreten. Hier zeigen sich die Grenzen der expliziten Zeitdiskretisierung. Unterschreitet daher bei der oben geschilderten Iteration Δt den Wert 10^{-7} , so wird der numerisch ermittelte Lösungvektor auf 0.999 oder 0.001 abgeschnitten und $\Delta t = 10^{-7}$ gesetzt.

Eine Untersuchung der maximalen Zeitschrittweiten für beide Fälle (A) und (B) findet sich in den Abschnitten 5.2 und 5.4.

Kapitel 5

Simulationsergebnisse

Es folgt die Beschreibung einiger bezeichnender numerischer Simulationsläufe, bei denen interessante Aspekte der Lösung von (2.20) vorgestellt werden. Wir beginnen dabei mit Spezialfällen, die wir schrittweise erweitern, und untersuchen so methodisch die Konsequenzen von Parameteränderungen und das vielschichtige Verhalten des Systems. Dabei wird auch die Auswirkung einer Änderung von Dichte, Temperatur und Geschwindigkeitsfeld auf die Ausbildung der Phasen untersucht. Die erforderlichen Zeitschrittweiten der logarithmischen Mischungsentropie für die Phasengleichung im Unterschied zur polynomiellen werden herausgearbeitet.

5.1 Programmvalidierung und Spezialfälle

Zum Test des numerischen Verfahrens kann man durch Weglassen einiger Terme bzw. durch Betrachtung von Spezialfällen Situationen schaffen, in denen das System (2.20) entkoppelt und in schon länger bekannte, gut untersuchte Spezialfälle übergeht.

Zum einen ist dies der Fall einer Strömung ohne Phasenausbildung. Indem wir die polynomielle Mischungsentropie (2.10) wählen, $\chi_0 = \chi_s \equiv 0$ in Ω und $G_1 = G_2$ setzen, sind (ϱ, v, e) eine Lösung der kompressiblen Navier–Stokes–Gleichungen (und es ist $\chi \equiv 0$ in Ω_T). Bei der Programmentwicklung wurde dieser Fall vom mathematischen Institut der Universität Freiburg ausgiebig getestet und die Korrektheit des Algorithmus nachgewiesen, siehe [17]. Hier sei nur bemerkt, daß man durch passende Wahl der rechten Seite der Navier–Stokes–Gleichungen eine vorgegebene Lösung erzwingt. Diese theoretische Lösung und die numerisch erhaltene werden dann verglichen, sowie die Fehlerentwicklung in Abhängigkeit von der Ortsschrittweitendiskretisierung untersucht.

Der zweite Spezialfall führt auf bekannte thermodynamische Situationen ohne Konvektion: für verschwindendes Geschwindigkeitsfeld v, konstante Dichte und konstante Energie, $G_1 = G_2$, sowie ohne den zusätzlichen elastischen Spannungstensor $\delta \rho T \nabla \chi \otimes \nabla \chi$ fällt das System (2.20) mit der Allen–Cahn–Gleichung zusammen.

Der Illustration dient die in Abbildung 5.1 dargestellte Rechnung. Die bei jeder Rechnung verwendeten Parameter sind immer in einem Block darüber angegeben, das angegebene Δt bezeichnet die Startzeitschrittweite. Wie bereits erwähnt ist $G_1 = G_2$, d.h. in den Notationen des Kapitels 2:

$$\frac{\partial}{\partial \chi} J(\chi) = W'(\chi).$$

Abbildung 5.1 zeigt als Ergebnis der Rechnung das typische Verhalten der Allen–Cahn–Gleichung. Dargestellt ist der Verlauf der Phasen. Liegt χ im Intervall [0.45, 0.55], so wurde

der Punkt keiner Phase zugeordnet und Weiß gefärbt, sonst entsprechend seinem Wert entweder Schwarz (für $\chi > 0.55$) oder Grau ($\chi < 0.45$). Auf Schattierungseffekte zur Verdeutlichung der Phasenausbildung wurde verzichtet, da diese mit heutigen Reproduktionsverfahren bei Schwarzweißbildern nicht zufriedenstellend dupliziert werden können. Es sei daher betont, daß selbst die grau oder schwarz eingefärbten Flächen bei t = 0 Werte von χ im Intervall (0.4; 0.6) repräsentieren, während zu großen Zeiten die ebenso grau oder schwarz gezeichneten Phasen voll ausgebildet sind und näherungsweise die Werte 0 oder 1 annehmen.

Parameter zu Abbildung 5.1:

Ideale Gasgleichung für beide Phasen, keine Spannungsterme $\delta \varrho T \nabla \chi \otimes \nabla \chi$, polynomielle Mischungsentropie, $G_1 = G_2$, $\gamma_1 = \gamma_2 = 1.4$, $c_{V,1} = c_{V,2} = 1$, Re = 1000, Prandtl = 1, $\varepsilon = 10$, $\delta = 10^{-3}$, $\mu = 1$, $\nu = -2/3$, $v_{xI} = v_{yI} \equiv 0$, $\varrho_I \equiv 1$, $\Omega = [-1, +1] \times [0, 1]$, 1661 Knoten, 3200 Dreiecke, nicht adaptiv, $\Delta t = 10^{-3}$, $\varrho_0 \equiv 1$, $v_{x0} = v_{y0} \equiv 0$, $e_0 \equiv 2.5$, Zufallswerte für χ_0 , $(\varrho\chi)_s \equiv 0.5$, $T_s \equiv 2.5$.



Abbildung 5.1: Ausbildung der Phasen ohne Strömung

Die Abbildung zeigt das typische Verhalten der Allen–Cahn–Gleichung. Die Anfangswerte werden zunächst in Folge des parabolischen Charakters der Gleichung geglättet, daher nimmt die weiße Fläche von t = 0 auf t = 0.1 zu. Dann beobachten wir die Ausbildung der Phasen mit scharfen Grenzflächen und die langsame Wanderung der Phasengrenzen, bis schließlich nur noch eine Phase im Gebiet vorhanden ist (hier ohne Abbildung $\chi \equiv 0$).

5.2 Polynomielle und logarithmische Mischungsentropie

Der nächstallgemeinere Fall ist nun die Einbeziehung eines nichtverschwindenden Geschwindigkeitsfeldes.

Zunächst geben wir für den Phasenparameter χ eine kreisförmige Phase als Anfangswert vor. Die anderen Parameter sind so gewählt, daß $\rho \equiv 1$ und $T \equiv 2.5$ in Ω_T ist mit zeitinvarianter, konstanter Strömung nach rechts. Beide Systeme werden durch die ideale Gasgleichung beschrieben. Um bei polynomieller Mischungsentropie (2.10) den Fall $\chi \notin [0, 1]$ zu verhindern, setzen wir $G_1 = G_2$. Abbildung 5.2 zeigt die zeitliche Entwicklung des Graphen von χ für polynomielles J.

Parameter zu Abbildung 5.2:

Ideale Gasgleichung für beide Phasen, keine Spannungsterme $\delta \varrho T \nabla \chi \otimes \nabla \chi$, polynomielle Mischungsentropie, $G_1 = G_2$, $\gamma_1 = \gamma_2 = 1.4$, $c_{V,1} = c_{V,2} = 1$, Re = 1000, Prandtl = 1, $\varepsilon = 1$, $\delta = 10^{-4}$, $\mu = 1$, $\nu = -2/3$, $v_{xI} \equiv 0.4$, $v_{yI} \equiv 0$, $\varrho_I \equiv 1$, $\Omega = [-1, +1] \times [0, 1]$, 946 Knoten, 1800 Dreiecke, nicht adaptiv, $\Delta t = 0.005$, $\varrho_0 \equiv 1$, $v_{x0} \equiv 0.4$, $v_{y0} \equiv 0$, $e_0 \equiv 2.5$, $(\varrho\chi)_s \equiv 0$, $T_s \equiv 2.5$, $\chi_0(x, y) = 1$ für $(x, y) \in B_{0.2}(-0.5, 0.5)$, $\chi_0(x, y) = 0$ sonst.



Abbildung 5.2: Abbau und Transport einer kreisförmigen Gasphase für v = (0.2, 0)

Wir beobachten, daß die Anfangswerte zunächst (in Folge des parabolischen Charakters der Phasengleichung) geglättet werden. Im weiteren Verlauf schrumpft die kreisförmige Gasphase kontinuierlich, bis schließlich $\chi \equiv 0$ in Ω gilt (ohne Abbildung). Zeitgleich wird diese mit der Strömung Richtung Ausströmrand transportiert. Der Phasenparameter zeigt also ein für die Allen–Cahn–Gleichung typisches Verhalten, wobei aber der Transport durch die Navier–Stokes–Gleichungen bedingt wird.

Die von der Strömung transportierte Gasphase ist nicht vollkommen kreisförmig, sondern wird etwas oval verformt. Den Grad der Verformung bestimmt die Geschwindigkeit der Strömung. In der Situation von Abbildung 5.2 ist dies kaum zu erkennen, die Geschwindigkeitsbeträge sind hierfür zu klein.

Zur Verdeutlichung des Effekts setzen wir in der folgenden Abbildung 5.3 $v_{xI} \equiv v_{x0} \equiv 2.5$. Dargestellt wird der Verlauf der transportierten Phase, ein Punkt wird eingefärbt, wenn $\chi > 0$. Deutlich ist hier die längliche Deformation der Phase durch die Strömung zu erkennen.

Parameter zu Abbildung 5.3:

Ideale Gasgleichung für beide Phasen, keine Spannungsterme $\delta \varrho T \nabla \chi \otimes \nabla \chi$, polynomielle Mischungsentropie, $G_1 = G_2$, $\gamma_1 = \gamma_2 = 1.4$, $c_{V,1} = c_{V,2} = 1$, Re = 1000, Prandtl = 1, $\varepsilon = 1$, $\delta = 10^{-4}$, $\mu = 1$, $\nu = -2/3$, $v_{xI} \equiv 2.5$, $v_{yI} \equiv 0$, $\varrho_I \equiv 1$, $\Omega = [-1, +1] \times [0, 1]$, 946 Knoten, 1800 Dreiecke, nicht adaptiv, $\Delta t = 0.005$, $\varrho_0 \equiv 1$, $v_{x0} \equiv 2.5$, $v_{y0} \equiv 0$, $e_0 \equiv 2.5$, $(\varrho\chi)_s \equiv 0$, $T_s \equiv 2.5$, $\chi_0(x, y) = 1$ für $(x, y) \in B_{0.2}(-0.5, 0.5)$, $\chi_0(x, y) = 0$ sonst.



Abbildung 5.3: Deformation der transportierten Gasphase, exemplarisch für v = (2.5, 0)

In der Situation der Abbildung 5.2 ersetzen wir nun J durch (kein konkaver Anteil $-\frac{1}{2}\chi^2$!)

$$J(\varrho, T, \chi) := \chi \ln(\chi) + (1 - \chi) \ln(1 - \chi).$$

Extrema β nimmt χ nicht an, was wir z.B. der von allen Extrema β zu erfüllenden Beziehung

$$\partial_{\chi}J(\beta) = \ln\left(\frac{\beta}{1-\beta}\right) = 0$$

entnehmen, mit der einzigen Lösung $\beta = 0.5$. Daher müssen diesmal *beide* Phasen verschwinden. Für tatsächliche physikalische Anwendungen wird daher immer das vollständige W aus (2.60) verwendet. Die beschriebene Situation dient hier als numerischer Test zur Untersuchung der möglichen Zeitschrittweiten bei logarithmischem W und $\chi \neq \{0, 1\}$.

Die folgende Abbildung 5.4 wiederholt die Rechnung von Abbildung 5.2, diesmal mit logarithmischer Mischungsentropie und bestätigt diese Erwartung. Um illegale Anfangs– und Randwerte zu vermeiden, wurde innerhalb der Gasphase mit 0.999 und außerhalb mit 0.001 als Wert für χ gestartet. Entsprechend ist $0 \neq \chi \neq 1$ während der Rechnung.

Parameter zu Abbildung 5.4:

Ideale Gasgleichung für beide Phasen, keine Spannungsterme $\delta \varrho T \nabla \chi \otimes \nabla \chi$, logarithmische Mischungsentropie, $G_1 = G_2$, $\gamma_1 = \gamma_2 = 1.4$, $c_{V,1} = c_{V,2} = 1$, Re = 1000, Prandtl = 1, $\varepsilon = 1$, $\delta = 10^{-4}$, $\mu = 1$, $\nu = -2/3$, $v_{xI} \equiv 0.4$, $v_{yI} \equiv 0$, $\varrho_I \equiv 1$, $\Omega = [-1, +1] \times [0, 1]$, 946 Knoten, 1800 Dreiecke, nicht adaptiv, $\Delta t = 0.005$, $\varrho_0 \equiv 1$, $v_{x0} \equiv 0.4$, $v_{y0} \equiv 0$, $e_0 \equiv 2.5$, kreisförmige Phase für χ_0 mit Radius 0.2, $(\varrho\chi)_s \equiv 0.001$, $T_s \equiv 2.5$.



Abbildung 5.4: Auflösung beider Phasen, falls W_{\log} keine konkaven Anteile enthält

Wiederholen wir diese Rechnung mit W aus (2.60), so zeigt die Lösung des Systems bei geeigneter Wahl des in dieser Rechnung vernachlässigten Termes $-\frac{G_1-G_2}{T}$ dasselbe Verhalten wie das in Abbildung 5.2 dargestellte. Dies ist i.b. dann der Fall, wenn die (durch eine Taylorentwicklung gewonnene) polynomielle Approximation des logarithmischen W mit dem in Abbildung 5.2 verwendeten Term (2.10) übereinstimmt. Eine genauere Analyse, wie $-\frac{G_1-G_2}{T}$ die Entmischung beeinflußt, findet sich in Abschnitt 5.4.

Wir untersuchen nun die erlaubten Zeitschrittweiten für den bereits in Abschnitt 4.8 dargestellten Fall A, in dem entweder die polynomielle Mischungsentropie W verwendet wird oder, bei Verwendung der logarithmischen aus (2.60), wenn $\chi \neq \{0,1\}$. Als Studienobjekt dient die Situation aus Abbildung 5.4 für verschiedene Verfeinerungsstufen. Die Analyse des zweiten Falles B findet sich in Abschnitt 5.4.

Die untenstehende Tabelle 5.1 gibt scharfe Intervalle an, in denen die maximale Zeitschrittweite Δt_{\max} liegt. Wie sie verdeutlicht, sind die zulässigen Δt_{\max} praktisch identisch. Dies liegt daran, daß im hier untersuchten Fall χ hinreichend weit von den Polstellen des logarithmischen W' entfernt bleibt.

Maximal erlaubte Zeitschrittweiten (Fall A)				
Triangulierung	polynomielles W	logarithmisches W		
1	[0.065; 0.066)	[0.062; 0.063)		
2	[0.0147; 0.01471)	[0.0144; 0.0145)		
3	[0.0092; 0.0093)	[0.0092; 0.0093)		
4	[0.0068; 0.0069)	[0.0067; 0.0068)		

Tabelle 5.1: Größtmögliche Zeitschrittweiten (kein Einfluß ev. Polstellen von W)

Die folgende Tabelle 5.2 vermittelt Details der von uns verwendeten Triangulierungen. Es handelt sich um sog. Crisscrosstriangulierungen ohne Vorzugsrichtung. Abbildung 5.5 unten zeigt die einfachste verwendete Triangulierung.

Referenztriangulierungen					
Nummer	Knoten	Dreiecke	Geometrie		
1	77	128	8 x 4		
2	431	800	$20 \ge 10$		
3	946	1800	$30 \ge 15$		
4	1661	3200	$40 \ge 20$		

Tabelle 5.2: Referenztriangulierungen



Abbildung 5.5: Crisscross–Triangulierung der Geometrie "8 x 4"

5.3 Bedeutung von ε für die Phasenbildung

Der Parameter ε in (2.20d) bzw. (2.20e) skaliert die substantielle Ableitung von χ und bestimmt dadurch die Geschwindigkeit der Phasenbildung, siehe auch Beziehung (2.69). Wir veranschaulichen uns diesen Effekt, indem wir exemplarisch die Rechnungen der Abbildung 5.2 für verschiedene ε durchführen. Genauso gut kann man aber den Effekt bei allen anderen Rechnungen

beobachten, die in diesem Kapitel vorgestellt werden.

Wie erwartet ist ε ein Skalierungsparameter, der die Geschwindigkeit der Phasenbildung steuert. Gleichzeitig illustriert Abbildung 5.6 das Verhalten von χ am Ausströmrand, wo $\chi = 0$ vorgeschrieben ist.

Parameter zu Abbildung 5.6:

Ideale Gasgleichung für beide Phasen, keine Spannungsterme $\delta \varrho T \nabla \chi \otimes \nabla \chi$, polynomielle Mischungsentropie, $G_1 = G_2$, $\gamma_1 = \gamma_2 = 1.4$, $c_{V,1} = c_{V,2} = 1$, Re = 1000, Prandtl = 1, $\varepsilon = 1$, $\delta = 10^{-4}$, $\mu = 1$, $\nu = -2/3$, $v_{xI} \equiv 0.2$, $v_{yI} \equiv 0$, $\varrho_I \equiv 1$, $\Omega = [-1, +1] \times [0, 1]$, 431 Knoten, 800 Dreiecke, nicht adaptiv, $\Delta t = 0.01$, $\varrho_0 \equiv 1$, $v_{x0} \equiv 0.2$, $v_{y0} \equiv 0$, $e_0 \equiv 2.5$, kreisförmige Phase für χ_0 mit Radius 0.2, $(\varrho\chi)_s \equiv 0.5$, $T_s \equiv 2.5$.



Abbildung 5.6: Einfluß von ε . Obere Reihe: $\varepsilon = 2$, mittlere Reihe: $\varepsilon = 1$, unten: $\varepsilon = \frac{1}{3}$

5.4 Einfluß des Temperaturfeldes auf die Phasenbildung

Um uns darüber klar zu werden, wie die Temperatur die Ausbildung der Phasen beeinflußt, betrachten wir als Ausgangspunkt weiterer Überlegungen die von allen Extrema β des Phasenparameters χ zu erfüllende Gleichung

$$J_{\chi}(\varrho, T, \beta) = \ln\left(\frac{\beta}{1-\beta}\right) - \beta + \frac{1}{T} \left(G_1 - G_2\right)(\varrho, T) = 0.$$
(5.1)

Für $\beta = \frac{G_1 - G_2}{T}$ besitzt diese Gleichung wie oben dargestellt allein die Lösung $\beta = 0.5$, so daß sich *keine* Phasen bilden. Die Lösung β von (5.1) kann z.B. durch ein eindimensionales Newton–Verfahren ermittelt werden. Die Temperatur bestimmt also über $(G_1 - G_2)/T$ entscheidend, welche Phase (flüssig oder gasförmig) sich durchsetzt und gegen welchen Wert die Phase strebt.

$\tfrac{G_1-G_2}{T}$	eta	$\frac{G_1-G_2}{T}$	β
0	0.65905	-8	0.99988
-1	0.86599	+1	0.34095
-2	0.95028	+2	0.13401
-3	0.98169	+3	0.04972
-5	0.99752	+5	0.00674

Tabelle 5.3: Theoretisch vorhergesagte Extrema β von χ

Um diesen Zusammenhang bei einem Programmlauf zu überprüfen, setzen wir ohne weiteren physikalischen Bezug $(G_1 - G_2)/T \equiv -1$. Die folgende Abbildung 5.7 zeigt den Verlauf von χ in Ω und illustriert die Ausbildung der Phase.

Parameter zu Abbildung 5.7:

Ideale Gasgleichung für beide Phasen, mit Spannungstermen $\delta \varrho T \nabla \chi \otimes \nabla \chi$, logarithmische Mischungsentropie, $(G_1 - G_2)/T \equiv -1$, $\gamma_1 = \gamma_2 = 1.4$, $c_{V,1} = c_{V,2} = 1$, Re = 1000, Prandtl = 1, $\varepsilon = 1$, $\delta = 10^{-4}$, $\mu = 1$, $\nu = -2/3$, $v_{xI} = v_{yI} \equiv 0$, $\varrho_I \equiv 1$, $\Omega = [-1, +1] \times [0, 1]$, 431 Knoten, 800 Dreiecke, nicht adaptiv, $X_0 = 1$, $\Delta t = 0.01$, $\varrho_0 \equiv 1$, $v_{x0} \equiv 0$, $v_{y0} \equiv 0$, $e_0 \equiv 2.5$, Zufallswerte für χ_0 , $(\varrho\chi)_s \equiv 0.5$, $T_s \equiv 2.5$.



Abbildung 5.7: Prototyp einer temperaturgesteuerten Phasenbildung

Der sich im Programm einstellende Phasenwert war exakt der theoretisch durch Beziehung (5.1) vorhergesagte, stellte sich allerdings erst nach leichten Oszillationen (wo auch $\chi > 0.866$ war) für $t \ge 0.9$ ein. Nur das maximal auftretende β war abhängig von der Zeitschrittweite, die Dauer des Einschwingvorgangs dagegen nicht. Für Zeiten $t \ge 0.4$ gilt bereits $\chi \in (0.858, 0.869)$ in Ω , die Lösung ist dann mit bloßem Auge nicht mehr von dem in Abbildung 5.7 dargestellten Endzustand unterscheidbar.

Die beschriebene Situation ist ideal zum Studium der Zeitschrittweitenrestriktion. Liegen die gemäß Temperaturverteilung und $G_1 - G_2$ angestrebten Extrema β nahe bei 1 oder 0, so muß Δt bei logarithmischer Wahl der Mischungsentropie W sehr klein sein, da χ nicht monoton gegen

 β konvergiert (und ein Überschreiten von 1 bzw. ein Unterschreiten von 0 die Undefiniertheit des Logarithmusterms zur Folge hat). Für polynomielles W spielt dies keine Rolle. Allerdings stellen sich hier völlig unphysikalische Werte für χ ein, je nach Temperatur durchaus $\chi > 2$ oder $\chi < -1$. Die folgende Tabelle stellt maximal mögliche Δt für polynomielles und logarithmisches W für Referenztriangulierung 3 abhängig von verschiedenen β -Werten gegenüber.

$\bigtriangleup t_{\rm max}$ nahe den Polstellen von $W_{\rm log}$				
β	$\triangle t_{\max}$ polynomielles W	$\Delta t_{\rm max}$ logarithmisches W		
≤ 0.988	[0.0063; 0.0064)	[0.0063; 0.064)		
0.991	[0.0063; 0.0064)	[0.0052; 0.0053)		
0.992	[0.0063; 0.0064)	$[5 \cdot 10^{-5}; \ 7 \cdot 10^{-5})$		
0.9933	[0.0063; 0.0064)	$[4 \cdot 10^{-7}; 5 \cdot 10^{-7})$		

Tabelle 5.4: Größtmögliche Zeitschrittweiten bei Phasenwerten nahe 0 oder 1

Nach diesen programmspezifischen Überlegungen stellen wir nun einen praxisrelevanten Fall dar.

Zunächst bestimmen wir einige Konstanten. Der Literatur entnehmen wir den gemessenen Wert $\gamma_2 = 1.00838$ für den Adiabatenexponent von Wasser (bei $25^0 C$), wie früher setzen wir $\gamma_1 = 1.4$ für Luft. Ferner entnehmen wir $c_{V,1} = 20.95 J K^{-1} \text{mol}^{-1}$ und $c_{V,2} = 74.66 J K^{-1} \text{mol}^{-1}$. Für die Ortsskalierung X_0 , die wie in Abschnitt 2.8 ausgeführt als Faktor vor den neuen Termen im Spannungstensor auftritt, wählen wir d.E.h. $X_0 = 1$, andere Werte ändern die Ergebnisse aber nicht qualitativ.

Hier gilt $\frac{G_1-G_2}{T} = (c_{V,1} - c_{V,2})(1 - \ln T)$. Die Anfangswerte der Energie setzen wir derart, daß in einem kreisförmigen Teilgebiet $\Omega_1 \subset \subset \Omega$ die Temperatur so hoch ist, daß $(1 - \ln T)$ ein negatives Vorzeichen hat, also $\frac{G_1-G_2}{T} > 0$ gilt. Entsprechend setzen wir T in $\Omega \setminus \Omega_1$ so niedrig, daß $\frac{G_1-G_2}{T} < 0$, vgl. die folgende Abbildung 5.8 für die Anfangswerte der Temperatur.



Abbildung 5.8: Anfangswerte der Temperatur (zu Abbildung 5.9)

Abbildung 5.9 stellt die zeitliche Entwicklung von χ dar. Der Startwert $\chi \equiv 0.5$ ist nicht abgebildet. Man erkennt, daß sich in Ω wie durch Beziehung (5.1) vorhergesagt zwei Phasen ausbilden. Es gilt $\chi \nearrow 1$ in $\Omega \setminus \Omega_1$ und $\chi \searrow 0$ in Ω_1 . Dazwischen bildet sich wie gewohnt eine Grenzschicht aus.

Parameter zu Abbildung 5.9: Ideale Gasgleichung für beide Phasen, mit Spannungstermen $\delta \varrho T \nabla \chi \otimes \nabla \chi$, logarithmische Mischungsentropie, $\gamma_1 = 1.4$, $\gamma_2 = 1.00838$, $c_{V,1} = 20.95$, $c_{V,2} = 74.97$, Re = 1000, Prandtl = $\varepsilon = \mu = 1$, $\nu = -2/3$, $\delta = 10^{-4}$, $v_{xI} \equiv 1$, $v_{yI} \equiv 0$, $\Omega = [-1, +1] \times [0, 1]$, 1661 Knoten, 3200 Dreiecke, nicht adaptiv, $X_0 = 1$, $\Delta t = 0.001$, $\varrho_0 \equiv \varrho_I \equiv 1$, $v_{x0} \equiv 1$, $v_{y0} \equiv 0$, $\chi_0 \equiv 0.5$, $(\varrho \chi)_s \equiv 0.5$, $T_s \equiv 2.53$



Abbildung 5.9: Bildung zweier Phasen durch Temperatureffekte sowie deren Konvektion

Durch Wärmediffusion wächst Ω_1 im Laufe der Rechnung leicht, die Temperaturunterschiede nivellieren sich. Gleichzeitig findet ein Transport mit der Strömung nach rechts statt.



Abbildung 5.10: Verlauf der Phasen (zu Abbildung 5.9)

Das Diagramm 5.10 der Phasen verdeutlicht dies. Die Farbgebung ist dieselbe wie in Abbildung

5.1. Für $\chi \in [0.45, 0.55]$ bleibt der Punkt Weiß, ansonsten setzen wir Grau für $\chi < 0.45$ und Schwarz für $\chi > 0.55$. Die Fläche erscheint außen gezackt, da χ an den Rändern die geforderten Randwerte $\chi = 0.5$ annehmen muß (es ist $\varrho \equiv 1$). Der Transport der kreisförmigen Phase (und von Ω_1) ist noch zu erkennen, der Effekt ist allerdings nicht sehr stark, da die simulierte Zeitspanne kurz ist. Ein Vergleich der Zustände t = 0.02 und t = 0.08 läßt das Anwachsen der kreisförmigen hellgrau dargestellten Phase (in Folge des Wachsens von Ω_1) genau erkennen.

5.5 Einfluß des Geschwindigkeitsfeldes auf die Phasenbildung

Auch das Strömungsfeld v beeinflußt die Bildung bzw. die Veränderung von Phasen.

Das Geschwindigkeitsfeld kann mittels des Transportterms $-v \cdot \nabla \chi$ in Gleichung (2.20e) direkt auf $\partial_t \chi$ wirken. Dies ist kein thermodynamischer Effekt, sondern der konvektive Einfluß der Strömung.

Zur Veranschaulichung stellt die folgende Beispielrechnung eine Situation dar, wo durch Strömungseffekte die Auflösung einer Flüssigkeitsphase in der Gebietsmitte stark beschleunigt wird. Zur Zeit t = 0 sei $v_{y0} \equiv 0$ in Ω und $v_{x0} \equiv 1$ für $x \leq 0$ und $v_{x0} \equiv -1$ für x > 0. Die Anfangswerte für χ sind auf dem ersten Bild der Abbildung 5.11 zu sehen und stückweise linear. An den Rändern und für x = 0 ist die Funktion 0.001 (Null verbietet sich wegen logarithmischer Gibbscher Energie), für $x = \pm 0.5$ gilt $\chi = 1$. Die beiden Phasenspitzen bei $x = \pm 0.5$ werden durch die gegenläufige Strömung in die Gebietsmitte zusammengeschoben und lösen so die Phase in der Mitte auf.

Einen vergleichbaren Effekt können wir z.B. auch erzielen, indem wir den Ausströmrand rechts verschließen und zu einem festen Rand machen. Fließt dann die Strömung wie in den meisten unserer Rechnungen vom Einströmrand links nach rechts, so bildet sich in der Nähe des nunmehr festen Randes eine Grenzschicht aus mit starkem Sprung im Geschwindigkeitsfeld. Dadurch kann der Verlauf der Phasen stark beeinflußt werden.

Um zu belegen, daß die Auflösung der mittleren Phase in Abbildung 5.11 vor allem auf Strömungseffekten und weniger auf dem Oberflächenterm $\frac{1}{\varrho} \operatorname{div}(\delta \rho \nabla \chi)$ beruht, zeigt die folgende Abbildung 5.13 die identische Rechnung wie Abbildung 5.11, diesmal aber gilt $v_{x0} = v_{y0} \equiv 0$. Zwar wächst auch hier die in der Gebietsmitte angesiedelte Phase bedingt durch den Oberflächenterm an, dies erfolgt aber wesentlich langsamer. Außerdem zeigt ein Vergleich der Abbildungen 5.11 und 5.13 direkt, daß die beiden Spitzen in der ersten Rechnung gegeneinander bewegt werden, während sie bei der zweiten Rechnung in ihrer Position verharren.

Der beschriebene Effekt ist der Anschauung direkt zugänglich bei Betrachtung einer Mineralwasserflasche, bei der starkes Schütteln die Freisetzung der Kohlensäure zur Folge hat. Dies ist ein rein konvektiver Effekt.

Parameter zu Abbildung 5.11:

Ideale Gasgleichung für beide Phasen, mit Spannungstermen $\delta \varrho T \nabla \chi \otimes \nabla \chi$, logarithmische Mischungsentropie, $G_1 = G_2$, $\gamma_1 = 1.4$, $\gamma_2 = 1.00838$, $c_{V,1} = 20.95$, $c_{V,2} = 74.97$, Re = 1000, Prandtl = $\mu = 1$, $\nu = -2/3$; $\varepsilon = 0.005$, $\delta = 10^{-4}$, $v_{xI} = v_{yI} \equiv 0$, $\Omega = [-1, +1] \times [0, 1]$, 946 Knoten, 1800 Dreiecke, nicht adaptiv, $\Delta t = 0.005$, $X_0 = 1$, $\varrho_0 \equiv \varrho_I \equiv 1$, $v_{y0} \equiv 0$, $v_{x0} \equiv 1$ für $x \le 0$, $v_{x0} \equiv -1$ für x > 0, stückweise lineare Anfangswerte für χ_0 (siehe Erklärung im Text), $(\varrho\chi)_s \equiv 0.001$, $T_s \equiv 1.59$.



Abbildung 5.11: Auflösung einer Phase in der Gebietsmitte durch Konvektion



Abbildung 5.12: Geschwindigkeitsfeld zu Abbildung 5.11

Parameter zu Abbildung 5.13:

Ideale Gasgleichung für beide Phasen, mit Spannungstermen $\delta \varrho T \nabla \chi \otimes \nabla \chi$, logarithmische Mischungsentropie, $G_1 = G_2$, $\gamma_1 = 1.4$, $\gamma_2 = 1.00838$, $c_{V,1} = 20.95$, $c_{V,2} = 74.97$, Re = 1000, Prandtl = $\mu = 1$, $\nu = -2/3$, $\varepsilon = 0.005$, $\delta = 10^{-4}$, $v_{xI} = v_{yI} \equiv 0$, $\Omega = [-1, +1] \times [0, 1]$, 946 Knoten, 1800 Dreiecke, nicht adaptiv, $\Delta t = 0.005$, $X_0 = 1$, $\varrho_0 \equiv \varrho_I \equiv 1$, $v_{x0} = v_{y0} \equiv 0$, stückweise lineare Anfangswerte für χ_0 (siehe Erklärung im Text), $(\varrho \chi)_s \equiv 0.001$, $T_s \equiv 1.59$.



Abbildung 5.13: Situation der Abbildung 5.11 ohne Konvektion

Kapitel 6

Abschließende Bemerkungen und Ausblick

Wir beenden die Arbeit mit einer abschließenden Bewertung des Ansatzes und einer kritischen Würdigung auf der Grundlage der vorgestellten Ergebnisse.

Die wesentliche Idee der vorliegenden Arbeit ist eine Kombination der modifizierten Allen-Cahn-Gleichung (2.20d) mit den kompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen, wobei dem inneren Parameter χ die Rolle einer Gewichtungsfunktion für die gemittelten Größen zukommt, vgl. (2.1). Es handelt sich also um einen Ansatz, bei dem thermodynamische Prozesse mit Konvektion gekoppelt werden. Motiviert werden kann der Ansatz durch die Phasenfeldgleichung, wie in Kapitel 1 ausgeführt. Wir untersuchen den Zusammenhang beider Systeme näher. Für v = 0folgt aus der Kontinuitätsgleichung (2.20a) zunächst $\partial_t \rho = 0$. Wir nehmen daher d.E.h. an, daß das System inkompressibel ist und setzen $\rho \equiv 1$. Nach Bemerkung 2.2 vernachlässigen wir die neu auftretenden elastischen Terme im Spannungstensor.

Mit diesen Annahmen geht (2.20) für $\varepsilon = 1$ und $L \equiv \text{const}$ über in

$$\nabla p = 0, \tag{6.1a}$$

$$\partial_t e = L \triangle T,$$
 (6.1b)

$$\partial_t \chi = -J_\chi + \delta \Delta \chi. \tag{6.1c}$$

Gleichung (6.1a) erzwingt konstanten Druck und kann von den übrigen Gleichungen entkoppelt betrachtet werden. Setzen wir

$$E_{\text{pot},1} := T + 1, \ E_{\text{pot},2} := T,$$
(6.2)

so gilt $e = e_{\text{pot}} = T + \chi$. (6.1b) und (6.1c) gehen dann für geeignetes $J_{\chi} = J_{\chi}(T, \chi)$ in das System der Phasenfeldgleichungen über:

$$\partial_t (T + \chi) = L \triangle T,$$

$$\partial_t \chi = -J_\chi + \delta \triangle \chi.$$

Die Definitionen (6.2) deuten auf eine ideale Gasgleichung für die Teilsysteme hin (ev. mit Temperatursprung am Phasenübergang).

Eine exakte Rechtfertigung des in dieser Arbeit verwendeten Ansatzes ist die Verifikation des 2. Hauptsatzes der Thermodynamik, die wir am Ende von Kapitel 2 durchgeführt haben. Zusammen mit der physikalischen Interpretation des neu auftretenden Termes $-\delta \rho T \nabla \chi \otimes \nabla \chi$ im

Spannungstensor ist sie das Fundament der Arbeit. Das vorgestellte Gleichungssystem besitzt daher trotz der einschränkenden Annahmen des Abschnitts 2.9 physikalische Relevanz.

Unter Verwendung des in Kapitel 4 vorgestellten numerischen Verfahrens konnte in Kapitel 5 eine Reihe von interessanten und für die Eigenschaften des Gleichungssystems charakteristischen Beispielen berechnet werden. Notwendige Voraussetzung für die Korrektheit des numerischen Verfahrens ist allerdings die Homogenität der numerischen Flüsse, die für das untersuchte System oft nicht erfüllt ist. Daher kann die numerische Behandlung des Systems nicht als abgeschlossen gelten. Es wäre für eine genauere numerische Untersuchung sinnvoll, ein Flux–Difference– Splitting für das System (2.20) zu entwickeln, wie es sich für die kompressiblen Navier–Stokes– Gleichungen in [7] findet. Die Umsetzung dieses Verfahrens ist aber mit außerordentlich großem Arbeitsaufwand verbunden, da keine Resultate der Navier–Stokes–Gleichungen übernommen werden können.

Die Grenzen des in der Zeit explizit diskretisierten numerischen Verfahrens werden in den Untersuchungen des Abschnitts 5.4 deutlich, wenn die Phasen sehr nah gegen einen der Werte 0 oder 1 streben, siehe dazu auch Abschnitt 4.8. Ein Verfahren mit einer impliziten Zeitdiskretisierung, am besten mit Mehrgittermethoden zur Lösung der auftretenden Gleichungssysteme, würde die aufgezeigten Effizienzeinbußen und Grenzen vermeiden.

Von Bedeutung ist die räumliche Skala des Problems. Genau wie für die Cahn-Hilliard-Gleichung finden die betrachteten Prozesse auf einer sehr kleinen räumlichen Skala statt. Allerdings sind auch auf dieser kleinen Skala wichtige Aussagen möglich, etwa die Bestimmung der Wachstumsrate der Phasen, welche für Werkstofforscher von größtem Interesse ist. Dies erklärt auch, warum die geringe räumliche Abmessung in der Vergangenheit kein Hinderungsgrund war, bei Simulationen der Cahn-Hilliard-Gleichung (i.b. mit periodischen Randbedingungen) wichtige Ergebnisse zu erhalten.

Möglicherweise muß das vorgestellte Modell an einigen Stellen noch einmal überarbeitet und verbessert werden, um sich von den unnatürlichen Bedingungen $T_1 = T_2$ und $p_1 = p_2$ zu befreien. Abschließendes Ziel muß der Vergleich der Modellaussagen mit gemessenen Werten im Labor sein. Nur so ist zu entscheiden, wie schwer die getroffenen Einschränkungen und grundsätzlichen Annahmen (wie die Linearität der Energiebeziehung (2.1)) wiegen.

Anhang A

Grundlagen und Bezeichnungen

A.1 Funktionenräume

Es sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ offen, $1 \leq d \leq 3, \ 1 \leq p \leq \infty, \ m \in \mathbb{N}_0.$

Mit $C_0^{\infty}(\Omega)$ bezeichnen wir die Menge aller unendlich oft differenzierbaren Funktionen mit kompaktem Träger in Ω .

 $L^p(\Omega)$ ist der Raum aller Lebesgue–meßbaren und zur p
–ten Potenz integrierbaren Funktionen auf $\Omega,$ der wie üblich durch

$$\|f\|_{L^{p}(\Omega)} := \left(\int_{\Omega} |f(x)|^{p} dx\right)^{\frac{1}{p}}, \quad p < \infty,$$

$$\|f\|_{L^{\infty}(\Omega)} := \operatorname{ess\,sup}_{x \in \Omega} |f(x)|$$

normiert ist. Es bezeichnet $H^{m,p}(\Omega)$ den Sobolevraum aller Funktionen aus $L^p(\Omega)$, die (schwache) Ableitungen bis zur Ordnung m in $L^p(\Omega)$ besitzen. $H^{m,p}(\Omega)$ ist ein Banachraum mit

$$||f||_{H^{m,p}(\Omega)} := \Big(\sum_{k=0}^m ||D^k f||_{L^p(\Omega)}\Big)^{\frac{1}{p}},$$

wobei

$$\|D^k f\|_{L^p(\Omega)}^p := \sum_{|\alpha| \le k} \|D^\alpha f\|_{L^p(\Omega)}^p, \quad D^\alpha f := \frac{\partial^{|\alpha|} f}{\prod_{i=1}^d \partial_i^{\alpha_i}} \text{ für } \alpha \in I\!\!N_0^d.$$

Mit $H_0^{m,p}(\Omega)$, $1 \leq p < \infty$ bezeichnen wir desweiteren den Abschluß von $C_0^{\infty}(\Omega)$ in $H^{m,p}(\Omega)$ bzgl. $\|\cdot\|_{H^{m,p}}$. Häufig schreiben wir für $H^{m,2}(\Omega)$ auch $H^m(\Omega)$ und $H_0^m(\Omega)$ für $H_0^{m,2}(\Omega)$.

Für T > 0 und Funktionen $u : \Omega \times (0,T) \to \mathbb{R}$ definieren wir $L^p(0,T; H^q(\Omega))$ als die Menge aller Funktionen, für die der Ausdruck

$$\|u\|_{L^{p}(0,T; H^{q})} := \left(\int_{0}^{T} \|u(s)\|_{H^{q}(\Omega)}^{p} ds\right)^{1/p}, \quad 1 \le p < \infty,$$

$$\|u\|_{L^{\infty}(0,T; H^{q})} := \operatorname{ess\,sup}_{t \in (0,T)} \|u(t)\|_{H^{q}(\Omega)}.$$

endlich ist.

Schließlich definieren wir $C^k(\overline{\Omega})$ als den Raum der *k*-mal stetig differenzierbaren Funktionen auf Ω derart, daß $D^{\alpha}f$ für $|\alpha| \leq k$ stetig auf $\overline{\Omega}$ fortsetzbar ist. $C^k(\overline{\Omega})$ ist ein Banachraum mit der Norm

$$||f||_{C^k(\overline{\Omega})} := \sum_{|\alpha| \le k} \sup_{x \in \Omega} |D^{\alpha}f(x)|.$$

Weitergehende Definitionen und Hintergrundwissen finden sich z.B. in [2].

A.2 Vektor– und Tensornotationen

Seien a und b Vektoren. $a \otimes b$, das Tensorprodukt der Vektoren a und b, ist der Tensor definiert durch die Beziehung $(a \otimes b) : c = (b \cdot c)a$ für alle Vektoren c. Für eine Matrix A sei A^t das Transponierte von A.

Divergenz, Gradient und Laplace operator eines skalaren Feldes χ werden bezeichnet mit $\nabla \chi$, div χ und $\Delta \chi$. Mit $\partial_j := \frac{\partial}{\partial x_j}$ bezeichnen wir die *j*-te partielle Ableitung nach der Koordinate *j*. Für ein Vektorfeld u(x) sei $\nabla u(x)$ der Tensor mit den Einträgen $(\partial_i u_j)_{ij}$, *i* = Zeilenindex, *j* = Spaltenindex. Seien $A = A_{ij}$ und $B = B_{ij}$ zwei Tensorfelder. Die Divergenz von A sei der Vektor mit den Komponenten $\sum_j \partial_j A_{ij}$ und A:B die durch $\sum_{ij} A_{ij}B_{ji}$ erklärte skalare Funktion. Die Ableitung einer skalaren Funktion *f* wird bezeichnet mit *f'*, die Fréchet-Ableitung eines Feldes u(x) mit Du(x). In Kapitel 3 werden partielle Ableitungen einer Funktion u mit subskribierten Variablen angezeigt, etwa $u_t = \partial_t u = \frac{\partial u}{\partial t}$.

A.3 Thermodynamische Grundlagen

In diesem Abschnitt stellen wir Hintergrundwissen aus der Thermodynamik zusammen, das wir vor allem im 2. Kapitel vorausgesetzt haben. Dieser Abschnitt kann und will jedoch kein Lehrbuch ersetzen. Für diese Zwecke empfehlen wir z.B. [15].

Wir beginnen mit den verwendeten Notationen. Großbuchstaben repräsentieren wie schon früher erwähnt die Dichtewerte, Kleinbuchstaben den mit der Dichte multiplizierten Wert, z.B. S die Entropiedichte und $s = \rho S$. Indizes geben die Phase an, so ist etwa S_1 die Entropiedichte der 1. Phase. Statt E und F findet man in der Literatur häufig U und A (nach dem deutschen Wort Arbeit).

In diesem Abschnitt bezeiche E immer die innere Energiedichte ohne kinetische Anteile.

T: Temperatur des Systems,
V: Volumen des Systems,
$p: \mathrm{Druck},$
S: Entropiedichte,
E: Innere Energiedichte,
F: Helmholtzsche Freie Energie, $F = E - TS$,
G: Gibbssche Freie Energie, $G = E - TS + pV$,
H: Enthalpie, $H = E + pV$.

Tabelle A.1: Thermodynamische Notationen

Nachfolgend stellen wir klassische Beziehungen zusammen, die wir früher benutzt haben. Das folgende gilt für Systeme, in denen keine Phasenübergänge auftreten.

Der 1. Hauptsatz der Thermodynamik läßt sich schreiben als

$$\delta Q = dE + p \, dV. \tag{A.1}$$

Wir verwenden die Notation δQ , um anzudeuten, daß dies kein exaktes Differential ist, da der Wert von δQ wegabhängig ist.

Für eine Pfaffsche Form läßt sich bekanntlich immer ein integrierender Faktor finden, der ein gegebenes Differential exakt macht. Für δQ bemerken wir (die subskribierte Variable ist konstant zu halten):

$$\delta Q = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V dT + \left(\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_T + p\right) dV$$

=: $f(V,T) dT + g(V,T) dV.$

Mit dem integrierenden Faktor α muß also gelten:

$$\frac{\partial(\alpha f)}{\partial V} = \frac{\partial(\alpha g)}{\partial T}.$$

Im Falle von δQ gilt $\alpha = \frac{1}{T}$. Wir definieren also das exakte Differential dS, Entropie genannt, durch

$$dS = \frac{1}{T} (dE + p \, dV). \tag{A.2}$$

Mit der sich daraus ergebenden Beziehung für dE lassen sich direkt die für uns interessanten totalen Differentiale der Gibbsschen Freien Energie G = E - TS + pV und der Helmholtz Freien Energie F = E - TS berechnen (keine Phasenübergänge, keine chemischen Reaktionen):

$$dF = dE - T dS - S dT$$

$$= -S dT - p dV,$$
 (A.3)

$$dG = dE - T dS - S dT + p dV + V dp$$

$$= -S dT + V dp.$$
 (A.4)

Damit folgen Beziehungen wie

$$-p = \left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T,\tag{A.5}$$

$$-S = \left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V. \tag{A.6}$$

Aus (A.6) folgt

$$\left[\partial_T \left(\frac{F}{T}\right)\right]_V = -\frac{S}{T} - \frac{F}{T^2}$$
$$= -\frac{E}{T^2}.$$
(A.7)

Nach (A.3) gehören zu F als natürliche Variablen T und V (bzw. T und ρ mit der Beziehung $\rho = 1/V$), zu G entsprechend das Paar T, p.

Ein Wechsel der Variablen geschieht wie folgt: gegeben sei eine GrößeYals Funktion von T und $\varrho,$ d.h.

$$dY = \left(\frac{\partial Y}{\partial V}\right)_T \, dV + \left(\frac{\partial Y}{\partial T}\right)_V \, dT.$$

Die Umformung auf das Variablenpaar p und T geschieht nach der Regel

$$\left(\frac{\partial Y}{\partial T}\right)_p = \left(\frac{\partial Y}{\partial V}\right)_T \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p + \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_V. \tag{A.8}$$

A.4 Entropieabschätzung für Navier–Stokes–Gleichungen

In diesem Abschnitt weisen wir nach, daß der 2. Hauptsatz der Thermodynamik für die kompressiblen Navier–Stokes–Gleichungen gültig ist. Das genaue Verständnis der hier präsentierten Herleitung gibt nachträglich eine Begründung für den in Abschnitt 2.10 eingeschlagenen Weg. In der hier vorgestellten Form findet sich dieses Ergebnis nicht in der Literatur, wo durchweg die totalen Differentiale betrachtet werden und nicht zwischen Zeitableitungen und Randflüssen differenziert wird.

Wir schreiben die kompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen in der Form

$$\partial_t \varrho = -\operatorname{div}(\varrho v),$$
 (A.9)

$$\partial_t(\varrho v) = -\operatorname{div}(\varrho v \otimes v - \Gamma),$$
 (A.10)

$$\partial_t e = \Delta T - \operatorname{div}((e - \Gamma)v).$$
 (A.11)

Dabei bezeichnet

$$\Gamma := \Gamma_{ij} = \tau_{ij} - p \,\delta_{ij}$$

mit dem Scherspannungstensor (definiert wie in Kapitel 2)

$$\tau_{ij} = \mu \left(\partial_i v_j + \partial_j v_i - \frac{2}{3} \operatorname{div} v\right).$$

Ferner bezeichnen Großbuchstaben die Dichtewerte, etwa E die Energiedichte und wie schon früher V das spezifische Volumen, d.h.

$$V = \frac{1}{\varrho}.$$

Für die Rechnung benötigen wir außerdem:

$$-p = \frac{d(f/\varrho)}{d(1/\varrho)} = f + \frac{1}{\varrho} \frac{\partial f}{\partial \varrho} \frac{1}{\partial_{\varrho}(1/\varrho)} = f - \varrho \,\partial_{\varrho} f, \tag{A.12}$$

$$-e = T^2 \partial_T \left(\frac{f}{T}\right). \tag{A.13}$$

Gleichung (A.13) entspricht der früher gezeigten Beziehung (A.7).

Die Gibbsrelation (A.2) schreibt sich dann als

$$T d\left(\frac{s}{\varrho}\right) = d\left(\frac{e}{\varrho}\right) - \frac{p}{\varrho^2} d\varrho,$$

also

$$\begin{array}{rcl} \displaystyle \frac{T}{\varrho} \ ds & = & -Ts \ d\left(\frac{1}{\varrho}\right) + e \ d\left(\frac{1}{\varrho}\right) + \frac{1}{\varrho} \ de - \frac{p}{\varrho^2} \ d\varrho \\ \\ \displaystyle & = & f \ d\left(\frac{1}{\varrho}\right) + \frac{1}{\varrho} \ de - \frac{p}{\varrho^2} \ d\varrho. \end{array}$$

Wegen $d(1/\rho) = -\frac{1}{\rho^2} d\rho$ und Beziehung (A.12) ergibt sich:

$$ds = \left[-\frac{f}{\varrho T} - \frac{p}{\varrho T} \right] d\varrho + \frac{1}{T} de$$
$$= -\frac{\partial_{\varrho} f}{T} d\varrho + \frac{1}{T} de.$$

Wie in Kapitel 2 nehmen wir an, daß die innere Energie nicht von v abhängt, also $e = e_{pot}$ gilt. Betrachten wir die obere Beziehung wieder als Gleichung im Phasenraum, so gilt also

$$\partial_t s = -\frac{\partial_\varrho f}{T} \ \partial_t \varrho + \frac{1}{T} \ \partial_t e. \tag{A.14}$$

Wir benötigen wie früher eine Gleichung für $\partial_t e_{\text{pot}}$, die nachfolgend hergeleitet wird: Nach (A.11) gilt:

$$\partial_t e = \partial_t \left(e_{\text{pot}} + \frac{\varrho}{2} |v|^2 \right) = \operatorname{div} \left(\nabla T - (e_{\text{pot}} + \frac{\varrho}{2} |v|^2 - \Gamma) v \right) =: X$$
$$= \partial_t e_{\text{pot}} + \frac{|v|^2}{2} \partial_t \varrho + \varrho v \cdot \partial_t v$$
$$= \partial_t e_{\text{pot}} + v \cdot \partial_t (\varrho v) - \frac{|v|^2}{2} \partial_t \varrho.$$

Unter Verwendung der Impulsgleichung (A.10) folgt:

$$\partial_t e_{\text{pot}} = X + \operatorname{div}((-\varrho v \otimes v - \Gamma)v) + \operatorname{div}\left(\varrho v \frac{v \cdot v}{2}\right) + (\varrho v \otimes v + \Gamma) : \nabla v - \varrho v \cdot \nabla v \cdot v$$
$$= \operatorname{div}(\nabla T - e_{\text{pot}}v) + \Gamma : \nabla v.$$

Diese Beziehung in (A.14) eingesetzt liefert:

$$\partial_t s = \frac{1}{T} \operatorname{div}(\nabla T - e_{\mathrm{pot}}v) + \frac{\Gamma}{T} : \nabla v - \frac{\partial_{\varrho} f}{T} \partial_t \varrho.$$

Setzen wir die Kontinuitätsgleichung (A.9) ein und formen wie in Kapitel 2 die Randterme um, so folgt:

$$\partial_t s = \operatorname{div}\left(\frac{1}{T}\,\nabla T - e_{\operatorname{pot}}\,\frac{v}{T}\right) + \frac{|\nabla T|^2}{T^2} - \frac{\nabla T \cdot v e_{\operatorname{pot}}}{T^2} + \frac{\Gamma}{T} : \nabla v + \frac{\partial_{\varrho} f}{T}\operatorname{div}(\varrho v)$$
$$= \operatorname{div}\left(\frac{\nabla T}{T} - e_{\operatorname{pot}}\frac{v}{T}\right) + \frac{|\nabla T|^2}{T^2} + \tau : \frac{\nabla v}{T} + v \cdot \nabla T \partial_T\left(\frac{f}{T}\right) - \frac{p\operatorname{div} v}{T} + \frac{\partial_{\varrho} f}{T}\operatorname{div}(\varrho v).$$

Ferner haben wir

$$\partial_{\varrho}\left(\frac{f}{T}\right)\nabla\varrho\cdot v + \partial_{T}\left(\frac{f}{T}\right)\nabla T\cdot v + \frac{f}{T}\operatorname{div} v = d\left(\frac{f}{T}\right)\cdot v.$$

Insgesamt gilt daher

$$\partial_t s = \operatorname{div}\left(\frac{\nabla T}{T} - sv\right) + \frac{|\nabla T|^2}{T^2} + \tau : \frac{\nabla v}{T}$$
$$= \operatorname{div}(\nabla \ln T - sv) + |\nabla \ln T|^2 + \tau : \frac{\nabla v}{T}.$$

Für den Term $\tau: \nabla v$ gilt dasselbe wie in Kapitel 2: er beschreibt die in Wärme umgewandelte Bewegungsenergie und ist immer positiv, wie durch Hauptachsentransformation folgt.

Für ein geschlossenes System gilt am Rand des Gebiets

$$\operatorname{div}\left(\frac{\nabla T}{T} - sv\right) = 0,$$

somit ist der 2. Hauptsatz der Thermodynamik gültig für die Navier–Stokes–Gleichungen.

Anhang B

Vergleich mit anderen Modellen

B.1 Reaktionsmodell nach Woods

Nachfolgend stellen wir ein alternatives Modell zu (2.20) vor, das aus [23] entnommen wurde. Das Modell beschreibt das Strömungsverhalten einer Mischung, bei der eine Umwandlung der Komponenten durch chemische Reaktionen möglich ist. Obwohl die physikalische Situation nicht dieselbe ist, ist ein Vergleich sehr interessant.

Das System besitze N Komponenten, ϱ_i , v_i bezeichnen Dichte bzw. Geschwindigkeitsvektor der i-ten Spezies. Die Masse des Gesamtsystems und seine Geschwindigkeit v sind gegeben durch

$$\varrho = \sum_{i} \varrho_i, \quad \varrho v = \sum_{i} \varrho_i v_i.$$

Die Konzentration c_i und der Diffusionsstrom J_i sind gegeben durch

$$c_i := \frac{\varrho_i}{\varrho},$$

$$J_i := \varrho_i(v_i - v)$$

Es gilt also

$$\sum_{i} c_i = 1, \quad \sum_{i} J_i = 0.$$

In Analogie zu (2.17) definiert sich die materielle Ableitung der i-ten Spezies durch

$$D_i := \frac{\partial}{\partial t} + v_i \cdot \nabla.$$

Die Neubildung (Vernichtung bei negativem Vorzeichen) der i
–ten Spezies wird durch die Rate ϱ_i^+ beschrieben, wegen Massenerhaltung gelte

$$\sum_{i} \varrho_i^+ = 0$$

Man erhält wie gewohnt die N Erhaltungsgleichungen für die Masse:

$$\partial_t \varrho_i + \operatorname{div}(\varrho_i v_i) = \varrho_i^+, \ 1 \le i \le N$$

bzw.

$$\rho D_i c_i + \operatorname{div} J_i = \rho_i^+, \ 1 \le i \le N.$$

Für die Raten ϱ_i^+ führt Woods die Beziehungen

$$\varrho_i^+ = \sum_j (a_{ij} - a_{ji})$$
$$a_{ij} = \sum_r b_{ijr} \,\partial_t \zeta_r \tag{B.1}$$

gilt. $\partial_t \zeta_r$ gibt die Reaktionsrate der r-ten Reaktion an, die Koeffizienten b_{ijr} sind durch genaue Kenntnis der Reaktion zu bestimmen.

Die Impulsgleichungen sind gegeben durch

$$\partial_t(\varrho_i v_i) + \operatorname{div}(\varrho_i v_i v_i + p_i) = \varrho_i(F_i + R_i) + \sum_j (a_{ij} v_j - a_{ji} v_i),$$
(B.2)

wobei F_i die Gravitations- und elektrischen Kräfte und R_i die Reibungskräfte auf die i-te Komponente durch die Relativbewegung der anderen Komponenten angibt.

Das Modell von Woods beinhaltet also zwei Dichten und zwei Geschwindigkeitsvektoren. Damit entfällt das Problem unseres Ansatzes, das nur eine Geschwindigkeit zuläßt. Durch den Term R_i sind Schereffekte zwischen den Komponenten berücksichtigt.

Allerdings ist das Modell von Woods in zwei Punkten sehr fragwürdig.

Erstens ist in Gleichung (B.1) die exakte Bestimmung der b_{ijr} unmöglich, da die entsprechenden Werte der Reaktion in einer Strömung nicht bestimmt werden können. Die angegebene Definition verschleiert also die auftretenden Probleme und klärt nicht die physikalische Situation.

Befremdlich erscheinen die Impulsgleichungen (B.2). Durch die Umwandlung der einen Komponente in eine andere wird de facto der entsprechende Anteil des Impulses bei der einen Komponente vernichtet, bei der anderen einfach hinzugefügt, also Impulsvernichtung bzw. -erschaffung betrieben. Die Vorstellung, daß ein Teilchen bei seiner Umwandlung seine kinetische Energie behält, ist unzutreffend.

B.2 Variationsansatz für die innere Energie

Wir diskutieren nachfolgend einen Ansatz aus [19], in dem allgemein die Abhängigkeit der inneren Energie von einem inneren Parameter χ untersucht wird. Die physikalische Bedeutung von χ ist dabei zunächst unwesentlich. Die Variation der inneren Energie ergibt einen Hinweis auf die Impulsgleichung, und für das sich ergebende Modell ist auf natürliche Weise der 2. Hauptsatz der Thermodynamik erfüllt.

Zunächst definieren wir die substantielle Ableitung einer Größe f durch

$$\dot{f} := \partial_t f + v \cdot \nabla f \tag{B.3}$$

und die totale Variation nach ρ durch

$$\frac{\delta}{\delta\varrho} := \frac{\partial}{\partial\varrho} - \operatorname{div}\left(\frac{\partial}{\partial\nabla\varrho}\right). \tag{B.4}$$

Die Kontinuitätsgleichung wird vorausgesetzt, sie schreibt sich mit (B.4) als

$$\delta \varrho = -\varrho \operatorname{div} v.$$

ein, wobei

Wieder bezeichne e die innere Energie, E die innere Energiedichte, d.h.

$$e = \int_{\Omega} E\varrho. \tag{B.5}$$

Für ${\cal E}$ machen wir den Ansatz

$$E = E(\varrho, S, \chi, \nabla \varrho, \nabla \chi).$$
(B.6)

Aus den Definitionen folgt:

$$\delta e = \int_{\Omega} \left(\frac{\partial E}{\partial \varrho} \underbrace{\delta \varrho}_{=-\varrho \operatorname{div}v} + \underbrace{\frac{\partial E}{\partial \nabla \varrho}}_{=:-t/\varrho^2} \partial \nabla \varrho + \frac{\partial E}{\partial S} \delta S + \frac{\partial E}{\partial \chi} \delta \chi + \underbrace{\frac{\partial E}{\partial \nabla \chi}}_{=:r/\varrho} \delta \nabla \chi \right) \varrho.$$
(B.7)

r ist eine verallgemeinerte Oberflächenkraft, t ein couple-stress-Tensor.

Wir nehmen ab jetzt an, daß das System geschlossen ist, also alle Randterme, die sich aus der Entropie ergeben, verschwinden.

Mit dem Satz von Gauß rechnet man elementar (aber zeitraubend) nach, daß

$$\delta e = \int_{\Omega} (\varrho \mathcal{A} \, d\chi + \varrho T \dot{S} - \operatorname{div} P \cdot v) + \int_{\partial \Omega} (P : n \cdot v + (t \cdot n) \operatorname{div} v + r \cdot n \, d\chi)$$
(B.8)

gilt. Dabei ist

$$\begin{aligned} \mathcal{A} &:= \frac{\delta'}{\delta\chi}, \\ P &:= -\varrho^2 \frac{\delta' E}{\delta\varrho} \ \underline{1} - \varrho \ \frac{\partial E}{\partial\nabla\varrho} \otimes \nabla\varrho - \varrho \frac{\partial E}{\partial\nabla\chi} \otimes \nabla\chi \\ \frac{\delta'}{\delta\chi} &:= \frac{\partial}{\partial\chi} - \frac{1}{\varrho} \operatorname{div} \left(\varrho \frac{\partial}{\partial\nabla\chi}\right). \end{aligned}$$

Der 1. Hauptsatz der Thermodynamik lautet:

$$\dot{e} + k = A + Q. \tag{B.9}$$

In Worten: Die Änderung der Gesamtenergie des Systems ist gleich der am System verrichteten Arbeit plus der von außen zugefügten Wärme.

Die verrichtete Arbeit A ist der Randterm in (B.8), die kinetische Energie k und die Wärmequelle Q in (B.9) sind gegeben durch

$$k = \int_{\Omega} \frac{1}{2} \rho v^{2},$$
$$Q = -\int_{\partial \Omega} q \cdot n,$$

wobeiqden Wärmestrom bezeichnet.

Aus (B.8) und (B.9) folgt:

$$\int_{\Omega} \left(\varrho \underbrace{\frac{\partial E}{\partial S}}_{=T} \, \delta S + \varrho \mathcal{A} \dot{\chi} + (\varrho \dot{v} - \operatorname{div} P) \cdot v \right) + \int_{\partial \Omega} q \cdot n = 0.$$

Lokal heißt dies

$$\rho T \dot{S} = -\rho \mathcal{A} \dot{\chi} - (\rho \dot{v} - \operatorname{div} P) \cdot v - \operatorname{div} q.$$
(B.10)

Ausgehend von (B.10) werden nun verschiedene Fälle betrachtet. Für uns ist interessant:

$$q = 0 \text{ (isothermale Situation)},$$

$$0 = \varrho \dot{v} - \operatorname{div} P,$$

$$\mathcal{A} \neq 0.$$
(B.11)

(B.11) definiert die Impulsgleichung.

Aus (B.10) folgt mit diesen Vorgaben

$$\dot{S} = -\frac{\mathcal{A}}{T} \dot{\chi}. \tag{B.12}$$

Man wählt

$$\dot{\chi} = -\Gamma \mathcal{A} = -\Gamma \left(\frac{\partial E}{\partial \chi} - \frac{1}{\varrho} \operatorname{div} \left(\varrho \frac{\partial E}{\partial \nabla \chi} \right) \right),$$
(B.13)

wobe
i $\Gamma>0$ eine Materialkonstante ist. Γ spielt dieselbe Rolle wi
e ε in (2.20), was bald klar wird.

Aus (B.12) folgt

$$\dot{S} = \frac{\Gamma}{T} \mathcal{A}^2 \ge 0,$$

also die Gültigkeit des 2. Hauptsatzes. Ferner bemerken wir, daß der einzige dissipative Prozeß eine Relaxation des inneren Parameters χ ist.

Nehmen wir ferner an, daß ϱ konstant ist und es für die innere Energiedichte eine Entwicklung der Form

$$E = E_0(\chi, T_0) + \delta(T_0) |\nabla \chi|^2$$
(B.14)

gibt, so folgt:

$$\begin{aligned} \dot{\chi} &= -\Gamma\left(\frac{\partial E}{\partial\chi} - \operatorname{div}\left(\frac{\partial E}{\partial\nabla\chi}\right)\right) \\ &= -\Gamma\left(\frac{\partial E_0}{\partial\chi} - \operatorname{div}(2\delta\nabla\chi)\right) \\ &= -\Gamma\left(\frac{\partial E_0}{\partial\chi} - 2\delta \,\Delta\chi\right). \end{aligned}$$

Dies ist die mit dem Transportterm $v \cdot \nabla \chi$ (vgl. Def. (B.3)) erweiterte Allen–Cahn–Gleichung, da für den hier betrachteten isothermalen Fall die innere Energie der Freien Energie entspricht. Es handelt sich um dieselbe Gleichung wie (2.20d), wenn ρ festgehalten ist, nur wurde die Freie Energie bei unserem Ansatz der Situation angepaßt. Auch die Rolle von Γ ist jetzt klar.

Das gerade vorgestellte Vorgehen gibt interessante Einsichten. Leider läßt es sich auf unsere Situation nicht übertragen. Zum einen, weil ρ und T nicht konstant sind, zum anderen können wir bei uns keine Entwicklung der Form (B.14) annehmen. Ist konkret $E_1 = E_2$, so hängt E nicht von χ ab, d.h.

$$E \neq E(\chi).$$

Möglicherweise muß in der von uns betrachteten Situation E durch $\frac{F}{T}$ ersetzt werden. Die Mischungsentropieterme tauchen in E nicht auf, wohl aber in $\frac{F}{T}$, vgl. Abschnitt (2.3).

Literaturverzeichnis

- [1] S.M. Allen, J.W. Cahn, "A microscopic theory for antiphase boundary motion and its application to antiphase domain coarsening", Acta Metallurgica **27**, S. 1085-1095, 1979
- [2] H.W. Alt, "Lineare Funktionalanalysis", 1. Auflage, Springer 1985
- [3] J.P. Bourguignon, H. Brezis, "Remarks on the Euler equation", Journ. Funct. Anal. 15 (1974), S. 341-363
- [4] G. Caginalp, E.A. Socolovsky, "Computation of Sharp Phase Boundaries by Spreading: The planar and spherically Symmetric Case", Journal of Computational Physics 95, 1995
- [5] J.W. Cahn und J.E. Hilliard, "Free energy of a non-uniform system I. Interfacial free energy", J. Chem. Phys. 28 (1958), S. 258-267
- [6] P.G. Ciarlet, "The Finite Element Method for Elliptic Problems", North-Holland, 1978
- [7] E. Dick, J. Linden, "A multigrid method for steady incompressible navier-stokes equations based on flux difference splitting", Int. Journ. for num. methods in fluids, 14 (1992), S.1311-1323
- [8] D.Gilbarg und N. Trudinger, "Elliptic Partial Differential Equations of Second Order", 2. Auflage, Springer 1983
- M. E. Gurtin, D. Polignone, J. Viñals, "Two-Phase Binary Fluids and Immiscible Fluids described by an Order Parameter", Preprint Carnegie Mellon University, Pittsburgh, Nr. 95–Na–001, 1995
- [10] C. Hirsch, "Fluid Dynamics Mathematical models", Wiley&Sons, 1991
- [11] R. Kobayashi, "Modeling and numerical simulations of dendritic crystal growth", Physica D, 1993, S. 410-423
- [12] O.A. Ladyženskaja, V.A. Solonikov, N.N. Ural'ceva, "Linear and Quasi-Linear Equations of Parabolic Type", American Mathematical Society, 1968 (Übersetzung aus dem Russischen)
- [13] J. Rubinstein, P. Sternberg, J. Keller, "Fast reaction, slow diffusion, and curve shortening", SIAM J. Appl. Math. 49 (1989), S. 116-133
- [14] S. Pai, "Two-Phase Flows", 1. Auflage, Vieweg 1977
- [15] K.S. Pitzer, "Thermodynamics", 3. Auflage, Mc Graw Hill 1995
- [16] Protter, Weinberger, "Maximum Principle in Differential Equations", Prentice–Hall, 1. Auflage 1967

- [17] R. Schwörer, "Entwicklung und Parallelisierung von Finite-Volumen-Verfahren zur Lösung der kompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen in 2-D", Diplomarbeit, Freiburg i. Pr. 1997
- [18] Stör, Bulirsch, "Numerische Mathematik II", 3. Auflage, Springer-Verlag
- [19] L. Truskinovsky, "Shock induced Transitions and Phase Structures in General Media", IMA v. 52, S. 185-229, Springer 1992
- [20] A. Valli, W.M. Zajaczkowski, "Navier–Stokes Equations for compressible fluids: Global Existence and Qualitative Properties of the Solutions in the General Case", Commun. Math. Phys. 103, S. 259-296, 1986
- [21] A. Valli, "Periodic and stationary solutions for compressible Navier-Stokes equations via a stability method", Ann. Sc. Norm. Super. Pisa (IV) 10, S. 607-647, 1983
- [22] W. Walter, "Gewöhnliche Differentialgleichungen", 3.Auflage, Springer 1982
- [23] L.C. Woods, "The Thermodynamics of Fluid Systems", Oxford University Press 1985