

Diplomarbeit

**Finite-Volumen-Methoden
für degenerierte parabolische
Systeme**

–

**Ausbreitung eines Surfactant
auf einem dünnen Flüssigkeitsfilm**

vorgelegt von

Martin Lenz aus Cochem / Mosel

Bonn, im April 2002

Inhaltsverzeichnis

1	Beschreibung des Modells	4
1.1	Surfactant in der Anwendung	5
1.2	Herleitung der Lubrikationsapproximation	6
2	Die Dünne-Filme-Gleichung	9
2.1	Ein reduziertes Modell	9
2.2	Das Finite-Volumen-Verfahren	10
2.3	Existenz einer diskreten Lösung	14
3	Ein erstes Konvergenzresultat	16
3.1	Eine Energieabschätzung	16
3.2	Kompaktheit in der Zeit	18
3.3	Kompaktheit im Raum	21
3.4	Konvergenz einer Teilfolge	24
4	Ein schwacher Nichtnegativitätssatz	27
4.1	Eine Entropieungleichung	27
4.2	Diskrete Nichtnegativität	28
5	Gleichmäßige Konvergenz in 1D	30
5.1	Diskrete Hölderstetigkeit	31
5.2	Konvergenz gegen die schwache Lösung	37
6	Ein einfaches Operatorsplitting	41
6.1	Der Splitting-Ansatz	42
6.2	Diskretisierung des Transporttermes	43
6.3	Eine Lösung mit linearem Transport	46
7	Ein Verfahren für die Surfactant-Gleichung	48
7.1	Operatorsplitting in der Zeit	49
7.2	Ortsdiskretisierung	50
7.3	Die einzelnen Splitting-Schritte	50
7.4	Diskretisierung mit dualen Gittern	52
7.5	Numerische Ergebnisse	55
8	Schlussbemerkungen	60
	Literatur	60

1 Beschreibung des Modells

Ein Surfactant (SURface ACTive AgeNT, d.h. oberflächenaktiver Wirkstoff) ist eine Substanz die die Oberflächeneigenschaften einer Flüssigkeit verändert. Insbesondere setzt er als monomolekulare Schicht an der Oberfläche eines Flüssigkeitsfilmes dessen Oberflächenspannung herab. Dadurch wird das Ausbreitungsverhalten der Flüssigkeit beeinflusst.

Die Evolution eines dünnen Flüssigkeitsfilmes unter dem Einfluss eines Surfactant kann durch ein System degeneriert-parabolischer Gleichungen beschrieben werden. In dieser Arbeit soll ein numerisches Verfahren zur Lösung dieses Systems vorgestellt werden. Dabei wird ein neues, reines Finite-Volumen-Verfahren für die Dünne-Filme-Gleichung entwickelt und untersucht.

Zunächst werden wir nun das Modell und einige wichtige Anwendungsfälle vorstellen. Anschließend werden wir schrittweise ein Finite-Volumen-Verfahren für dieses Modell aufbauen.

Dazu beginnen wir zunächst mit dem einfacheren Fall der sogenannten Dünne-Filme-Gleichung, in der das Verhalten des Filmes alleine durch seine eigene Oberflächenspannung bestimmt wird. Für diese Gleichung präsentieren wir ein Finite-Volumen-Verfahren, das sich an Ideen aus [GR 00] orientiert.

Dieses Verfahren analysieren wir im Folgenden. Dabei gelingt es, zwei fundamentale Abschätzungen aus dem kontinuierlichen Setting auf das diskrete zu übertragen – die Energie- und die Entropie-Abschätzung. Daraus erhalten wir ein diskretes Nichtnegativitätsresultat sowie (wie in [MR 01] mittels des Kompaktheitsatzes von Fréchet–Riesz–Kolmogorov) die Konvergenz einer Teilfolge in $L^2(\Omega_T)$.

Um jedoch diesen Grenzwert mit einer schwachen Lösung des kontinuierlichen Problems zu identifizieren, müssen wir die Approximation durch die diskrete Mobilität kontrollieren. Das gelingt in dieser Arbeit nur im (räumlich) eindimensionalen Fall mit einem diskreten Hölderstetigkeits-Argumentes.

Danach erweitern wir das beschriebene Verfahren durch ein Operatorsplittings um einen zusätzlichen Transportterm. Den konvektiven Anteil behandeln wir mit einem expliziten upwind-Verfahren höherer Ordnung, wie es beispielsweise in [K 97] dargestellt wird. Anhand einer Ähnlichkeitslösung untersuchen wir die Effizienz des Splitting-Ansatzes.

Schließlich erweitern wir das Splitting auf die volle Surfactant-Gleichung und präsentieren zwei alternative Methoden, die einzelnen Terme im Ort zu diskretisieren. Für ein reduziertes Problem (das aber die wesentliche Koppelung zwischen Film und Surfactant beibehält) können wir auch hier Konvergenzexperimente durchführen.

Zum Abschluss präsentieren wir numerische Ergebnisse unserer Methode. Dabei wird eine Implementation des beschriebenen Verfahrens für eine Raumdimension verwendet, die duale Gitter für Filmhöhe und Surfactant einsetzt.

Die wesentlichen Ideen des betrachteten Verfahrens werden stets im Zweidimensionalen beschrieben. Lediglich die Identifikation des Grenzwertes mit einer schwachen Lösung der Dünne-Filme-Gleichung ist zur Zeit auf den eindimensionalen Fall beschränkt. Die Implementation des Verfahrens erfolgte für diese Arbeit ebenfalls nur im eindimensionalen Fall.

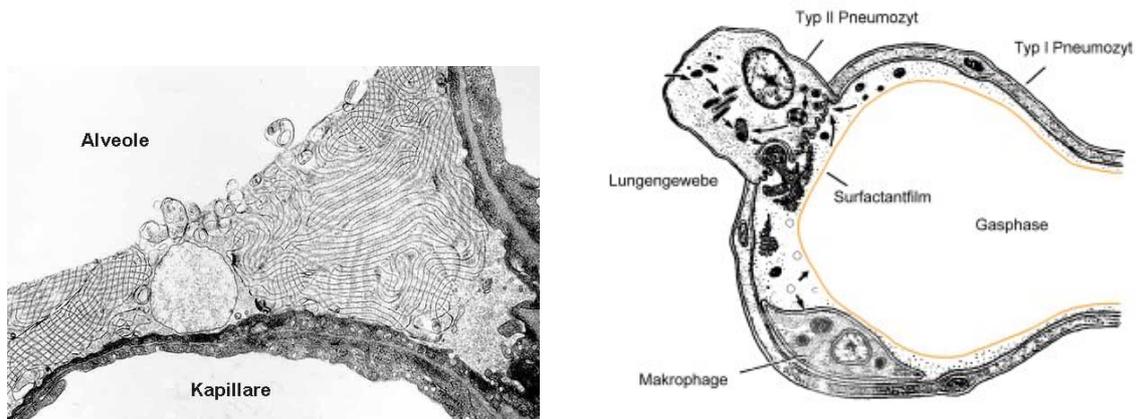


Abbildung 1.1: Surfactant in einer Alveole¹

1.1 Surfactant in der Anwendung

Dünne Flüssigkeitsfilme, deren Oberfläche einen Surfactant trägt, finden sich in zahlreichen Bereichen, von der Medizin bis zur Luftfahrttechnik. Wir wollen zwei dieser Anwendungsfälle kurz betrachten.

Surfactant in Medizin

Die Atemwege und Alveolen (Lungenbläschen) der menschlichen Lunge sind von innen mit einer Flüssigkeit bedeckt. Diese Lungenbläschen müssen beim Einatmen stark gedehnt werden. Die dazu nötige Arbeit, die gegen die Oberflächenspannung der Flüssigkeit verrichtet werden muss, wird durch einen Surfactant an der Oberfläche dieser Flüssigkeit (vgl. [G 94] und Abbildung 1.1) erleichtert.

Bei frühgeborenen Kindern ist die Lunge oft noch nicht dazu fähig, diesen Surfactant in genügender Menge selbst zu erzeugen. Dies kann zum sogenannten RDS (Respiratory Distress Syndrome, Atemnotsyndrom) führen.

Zur Behandlung setzt man unter Anderem die Surfactant-Therapie ein, wobei der Lunge künstlich Surfactant zugeführt wird. Dabei bringt man einen Surfactant in die Luftröhre ein. Die Ausbreitung über die gesamte Oberfläche der Lunge erfolgt dann aufgrund einer Kombination verschiedener physikalischer Effekte, insbesondere auch von Marangoni-Konvektion, die in unserem Fall modelliert wird (vgl. Abschnitt 1.2).

¹Links: Abbildung verwandt mit freundlicher Genehmigung von Priv.-Doz. Dr. Andreas Schmiedl aus der Abteilung für Mikroskopische Anatomie an der Medizinischen Hochschule Hannover.

Rechts: Abbildung verwandt mit freundlicher Genehmigung von Priv.-Doz. Dr. Manfred Sieber vom Institut für Biochemie an der Universität Münster, nach einer Abbildung in [B 84].



Abbildung 1.2: Enteisierung eines Flugzeuges²

Surfactant in der Technik

In der Luftfahrttechnik wird Enteisungsmitteln für Flugzeuge oft ebenfalls ein Surfactant zugesetzt (vgl. [LMS 96] und Abbildung 1.2). Diese Mittel werden mit hohen Temperaturen auf die Oberfläche des Flugzeuges aufgebracht, um dort auf thermischem oder chemischem Wege vorhandenes Eis zu entfernen und die Neubildung zu verhindern.

Dabei wird ein Surfactant hinzugefügt, um die Ausbreitung des Enteisungsmittels über die komplette Oberfläche zu erleichtern. Allerdings kann der Surfactant unter bestimmten Umständen auch zur Kraterbildung im Enteisungsfilm führen: Die Enteisungsflüssigkeit wird lokal durch geschmolzene Eispartikel verdünnt, und dort akkumulieren sich größere Surfactant-Konzentrationen an der Oberfläche des Films. Die entstehende Marangoni-Konvektion treibt den Film an dieser Stelle auseinander.

1.2 Herleitung der Lubrikationsapproximation

Die Evolution eines dünnen Filmes einer viskosen, inkompressiblen Flüssigkeit auf einer ebenen Oberfläche, versehen mit einem unlöslichen Surfactant-Monolayer auf der Oberfläche des Filmes, kann durch ein System von Konvektions-Diffusions-Gleichungen modelliert werden, die aus einer Lubrikationsapproximation (d.h. einer asymptotischen Entwicklung für verschwindende Filmhöhe, vgl. [GG 90], [JG 92], [ODB 97]) stammen.

²Abbildung verwandt mit freundlicher Genehmigung des National Center for Atmospheric Research / University Corporation for Atmospheric Research / National Science Foundation in Boulder, USA.

Zur Herleitung dieses Modells betrachten wir einen Flüssigkeitsfilm, dessen Oberfläche sich über einer Ebene als Funktion $h(t, x)$ darstellen lässt. An der Oberfläche befindet sich ein Surfactant-Monolayer der Konzentration $\Gamma(t, x)$, von der die Oberflächenspannung $\sigma(\Gamma(t, x))$ abhängt.

Die Flüssigkeit bewege sich mit der Geschwindigkeit $(v(t, x, y), w(t, x, y))$ und es herrsche der hydrodynamische Druck $p(t, x, y)$. Dabei seien $x, v \in \mathbb{R}^2$ Koordinaten bzw. Geschwindigkeiten in der Ebene und $y, w \in \mathbb{R}$ bezeichne die vertikale Komponente. Die Operatoren div , ∇ und Δ sind stets bezüglich x zu verstehen und werden bei der vektorwertigen Funktion v komponentenweise gebildet.

Zuerst skalieren wir zu dimensionslosen Größen. Sei dazu \tilde{H} die typische Höhe, \tilde{L} die Länge des Filmes und \tilde{V} die typische horizontale Geschwindigkeit. Um die Lubrikationsapproximation durchführen so können, sei $\varepsilon = \frac{\tilde{H}}{\tilde{L}} \ll 1$. Sei \tilde{S} der Ausbreitungskoeffizient des Surfactant, d.h. die maximale Differenz der Oberflächenspannungen an der Grenze eines gesättigten Surfactant-Monolayers, Γ_m diese gesättigte Konzentration und $\sigma_m = \sigma(\Gamma_m)$ die zugehörige (minimale) Oberflächenspannung. Dann skalieren wir wie folgt (wobei die unskalierten Größen mit $*$ markiert sind):

$$x = \frac{\varepsilon x^*}{\tilde{H}} \quad y = \frac{y^*}{\tilde{H}} \quad v = \frac{v^*}{\tilde{V}} \quad w = \frac{w^*}{\varepsilon \tilde{V}} \quad (1.1)$$

$$t = \frac{\varepsilon \tilde{V} t^*}{\tilde{H}} \quad p = \frac{\varepsilon \tilde{H} p^*}{\mu \tilde{V}} \quad \Gamma = \frac{\Gamma^*}{\Gamma_m} \quad \sigma = \frac{\sigma^* - \sigma_m}{\tilde{S}} \quad (1.2)$$

Nach einem Ansatz von [ODB 97] ergeben sich damit (unter Vernachlässigung von Termen höherer Ordnung in ε) die dimensionslosen Navier-Stokes- und Kontinuitäts-Gleichungen:

$$\nabla p = \partial_y^2 v \quad (1.3)$$

$$\partial_y p = 0 \quad (1.4)$$

$$\text{div} v + \partial_y w = 0. \quad (1.5)$$

Für $y = 0$ nehmen wir die *no-slip*-Randbedingung an, d.h. die Flüssigkeit „haftet“ am Substrat und bewegt sich am unteren Rand nicht:

$$v(t, x, 0) = 0 \quad \text{und} \quad w(t, x, 0) = 0 \quad (1.6)$$

Für $y = h$ berücksichtigen wir Spannungen in tangentialer Richtung aufgrund von Gradienten der Oberflächenspannung σ (den sog. *Marangoni*-Effekt, bei dem Gradienten in der Oberflächenspannung eine Konvektion in Richtung höherer Spannung induzieren)

$$\partial_y v(t, x, h(t, x)) = \nabla \sigma(\Gamma(t, x)) \quad (1.7)$$

und in normaler Richtung aufgrund des Betrags der Oberflächenspannung (des *Kapillar*-Effekts, der die Bildung runder, krümmungsminimierender Profile fördert)

$$p(t, x, h(t, x)) = -\mathcal{S} \Delta h(t, x), \quad (1.8)$$

wobei \mathcal{S} die skalierte Kapillaritätskonstante ist:

$$\mathcal{S} = \frac{\varepsilon^2 \sigma_m}{\tilde{\mathcal{S}}} \quad (1.9)$$

An der Oberfläche des Filmes rechnen wir (die sogenannte *kinematische* Randbedingung)

$$w(t, x, h(t, x)) = \frac{d}{dt}h(t, x(t)) = \partial_t h(t, x) + v(t, x, h(t, x)) \cdot \nabla h(t, x). \quad (1.10)$$

Integrieren wir nun (1.5) von 0 bis h unter Berücksichtigung der Randbedingungen (1.6) und (1.10), so erhalten wir

$$\partial_t h(t, x) + \operatorname{div} \int_0^{h(t, x)} v(t, x, y) dy. \quad (1.11)$$

Aufgrund von (1.4) ist $p(t, x, y) = p(t, x)$ in y -Richtung konstant, nach (1.3) ist v also bezüglich y ein Polynom zweiten Grades. Unter Berücksichtigung der Randbedingungen (1.6) und (1.7) sowie der Gleichung (1.3) ergibt sich damit die Form

$$v(t, x, y) = y \nabla \sigma(\Gamma(t, x)) + \nabla p(t, x) \left(\frac{1}{2} y^2 - h(t, x) y \right). \quad (1.12)$$

Setzen wir dies zusammen mit Gleichung (1.8) nun in das Integral (1.11) ein, so ergibt sich die erste Gleichung unseres Systems.

$$\partial_t h(t, x) + \frac{1}{3} \mathcal{S} \operatorname{div} (h(t, x)^3 \nabla \Delta h(t, x)) + \frac{1}{2} \operatorname{div} (h(t, x)^2 \nabla \sigma(\Gamma(t, x))) = 0 \quad (1.13)$$

Wie wir gesehen haben, modelliert der Term $\frac{1}{2} \operatorname{div} (h(t, x)^2 \nabla \sigma(\Gamma(t, x)))$ die Marangoni-Konvektion und $\frac{1}{3} \mathcal{S} \operatorname{div} (h(t, x)^3 \nabla \Delta h(t, x))$ den Kapillareffekt. Die Mobilität $h(t, x)^3$ ergibt sich dabei aus der no-slip Randbedingung.

Nun berechnen wir aus (1.12) die Horizontalgeschwindigkeit an der Oberfläche des Filmes:

$$\bar{v}(t, x) := v(t, x, h(t, x)) = \frac{1}{2} \mathcal{S} (h(t, x)^2 \nabla \Delta h(t, x)) + h(t, x) \nabla \sigma(\Gamma(t, x)) \quad (1.14)$$

Die Evolution der Surfactant-Konzentration wird beschrieben durch den Transport mit der Geschwindigkeit \bar{v} sowie durch Diffusion, wobei $\frac{1}{\mathcal{D}}$ die sogenannte Peclet-Zahl bezeichnet.

$$\partial_t \Gamma(t, x) + \operatorname{div}(\bar{v}(t, x) \Gamma(t, x)) - \mathcal{D} \Delta \Gamma(t, x) = 0 \quad (1.15)$$

Als letzter Bestandteil fehlt eine Zustandsgleichung, die die Oberflächenspannung in Abhängigkeit der Surfactant-Konzentration beschreibt. Dazu stellen wir fest, dass beide Größen auf $[0; 1]$ skaliert sind, bei einer gesättigten Surfactant-Schicht ($\Gamma = 1$) nimmt die Oberflächenspannung ihr Minimum $\sigma = 0$ an, in Abwesenheit von Surfactant ($\Gamma =$

0) erreicht die Oberflächenspannung ihren ungestörten Wert $\sigma = 1$. Wir wollen dies im Folgenden durch die lineare Relation $\sigma(\Gamma) = 1 - \Gamma$ modellieren.

Insgesamt ergeben sich also diese Gleichungen:

$$\partial_t h + \frac{1}{3} \mathcal{S} \operatorname{div} (h^3 \nabla \Delta h) - \frac{1}{2} \operatorname{div} (h^2 \nabla \Gamma) = 0 \quad (1.16)$$

$$\partial_t \Gamma + \frac{1}{2} \mathcal{S} \operatorname{div} (h^2 \Gamma \nabla \Delta h) - \operatorname{div} (h \Gamma \nabla \Gamma) - \mathcal{D} \Delta \Gamma = 0 \quad (1.17)$$

Aufgrund der in der Numerik üblichen Konnotation der Variablen h verwenden wir im Rest dieser Arbeit eine Formulierung dieser Gleichung, in der Film und Surfactant durch die Variablen u und w beschrieben werden.

Problem 1.1 *Dünner Flüssigkeitsfilm mit Surfactant*

$$\partial_t u + \frac{1}{3} \mathcal{S} \operatorname{div} (u^3 \nabla \Delta u) - \frac{1}{2} \operatorname{div} (u^2 \nabla w) = 0 \quad \text{in } \Omega \quad (1.18)$$

$$\partial_t w + \frac{1}{2} \mathcal{S} \operatorname{div} (u^2 w \nabla \Delta u) - \operatorname{div} (u w \nabla w) - \mathcal{D} \Delta w = 0 \quad \text{in } \Omega \quad (1.19)$$

$$\partial_\nu u = \partial_\nu \Delta u = \partial_\nu w = 0 \quad \text{auf } \partial \Omega \quad (1.20)$$

$$u(0, \cdot) = u_0 \quad \text{in } \Omega \quad (1.21)$$

$$w(0, \cdot) = w_0 \quad \text{in } \Omega \quad (1.22)$$

Dabei steht u für die Höhe des Filmes, w für die Surfactant-Konzentration und ν sei die äußere Normale an das Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^d$.

2 Die Dünne-Filme-Gleichung

Zunächst wollen wir nun eine reduzierte Variante von Problem 1.1 betrachten, in der die Evolution des Flüssigkeitsfilmes allein von seiner eigenen Oberflächenspannung getrieben wird.

2.1 Ein reduziertes Modell

Also nehmen wir $w = 0$ an und führen eine allgemeinere Mobilität $\mathcal{M}(u)$ ein, die in der obigen Gleichung die Form $\mathcal{M}(u) = \frac{\mathcal{S}}{3} u^3$ hat. Weiterhin bezeichnen wir mit $p = -\Delta u$ den hydrodynamischen Druck, und erhalten die sogenannte Dünne-Filme-Gleichung:

Problem 2.1 (Dünne-Filme-Gleichung)

$$\partial_t u - \operatorname{div} (\mathcal{M}(u) \nabla p) = 0 \quad \text{in } \Omega \quad (2.1)$$

$$p = -\Delta u \quad \text{in } \Omega \quad (2.2)$$

$$\partial_\nu u = \partial_\nu p = 0 \quad \text{auf } \partial \Omega \quad (2.3)$$

$$u(0, \cdot) = u_0 \quad \text{in } \Omega \quad (2.4)$$

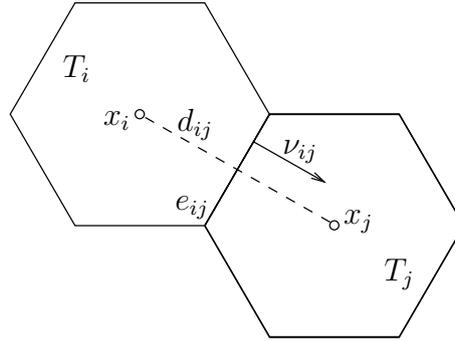


Abbildung 2.1: Diskretisierung in 2D

Dabei ist u wie oben die Höhe des Flüssigkeitsfilmes und ν die äußere Normale an das Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^d$.

Die Mobilität sei $\mathcal{M}(u)$ nichtnegativ und stetig. Sie verschwinde bei 0 und wachse nur polynomial; ihren Wachstumsexponenten bei Null wollen wir mit

$$n := \sup\{s \in \mathbb{R}^+ \mid \lim_{u \rightarrow 0} \frac{\mathcal{M}(u)}{u^s} < \infty\} \quad (2.5)$$

bezeichnen.

Im Gegensatz zu der in [GR 00] vorgestellten und [G 02] analysierten gemischten Finite-Volumen- und Finite-Elemente-Methode wird im Folgenden ein rein Finite-Volumen-basiertes Verfahren vorgestellt. Insbesondere müssen wir nicht auf die Darstellung des Druckes in einem affinen Finite-Elemente-Raum bezüglich eines dualen Gitters zurückgreifen.

2.2 Das Finite-Volumen-Verfahren

Zunächst werden wir dazu die Gleichungen (2.1) und (2.2) in Erhaltungsform schreiben. Dazu sei $T \subset \Omega$ ein Testvolumen und ν dessen äußere Normale, dann erhalten wir:

Schema 2.2 (Erhaltungsform)

$$\partial_t \int_T u = \int_{\partial T} \mathcal{M}(u) \nabla p \cdot \nu \quad (2.6)$$

$$\int_T p = - \int_{\partial T} \nabla u \cdot \nu \quad (2.7)$$

Nun diskretisieren wir das polygonal berandete Gebiet Ω , indem wir es in eine Familie polygonaler Zellen (Finite-Volumen-Zellen, Testvolumina) $\mathcal{T} = \{T_i\}_{i \in \mathcal{I}}$ für eine Indexmenge \mathcal{I} zerlegen. Die Funktionen u und p werden wir durch stückweise (auf den Testvolumina T_i) konstante Funktionen U, P approximieren. Dabei stehe U_i für den Wert der Funktion U auf der Gitterzelle T_i .

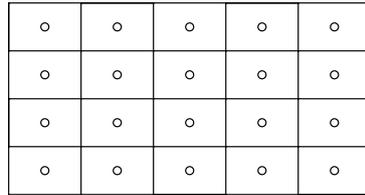


Abbildung 2.2: Diskretisierung durch ein Rechteckgitter

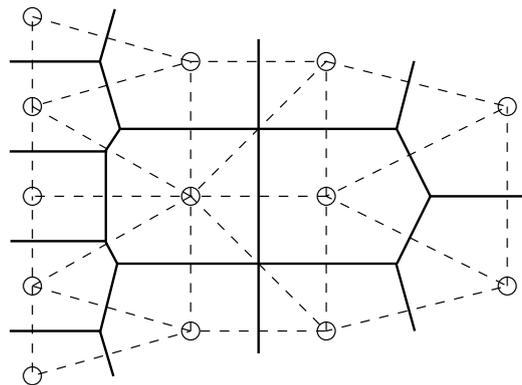


Abbildung 2.3: Konstruktion eines Gitters als Voronoi-Diagramm

Weiterhin bezeichne $\mathcal{N}(i)$ die Indizes der Zellen, die mit T_i benachbart sind, d.h. eine gemeinsame Kante haben. Für $x \in \Omega$ sei $i(x)$ der Index der Zelle für die $x \in T_{i(x)}$ ist, sofern x nicht auf einer Kante liegt. Eine solche Kante zwischen zwei Zellen T_i und T_j sei mit e_{ij} bezeichnet, und \mathcal{E} sei die Menge aller inneren Kanten der Diskretisierung. Mit ν_{ij} bezeichnen wir die Normale an eine Kante e_{ij} , die von T_i nach T_j weist.

Weiterhin wollen wir annehmen, dass eine Familie von Punkten $\{x_i\}$ mit $x_i \in T_i$ gegeben ist, so dass stets $\nu_{ij} = \frac{x_j - x_i}{|x_j - x_i|}$ gilt. Außerdem sei $d_{ij} := |x_j - x_i|$. Abbildung 2.1 illustriert diese Konfiguration.

Bemerkung 2.3 (Konstruktion der Diskretisierung) Den einfachsten Fall einer solchen Diskretisierung stellt ein regelmäßiges Rechteckgitter wie in Abbildung 2.2 dar.

Ein unstrukturiertes Gitter, das die oben genannten Voraussetzungen erfüllt, kann man beispielsweise als Voronoi-Diagramm einer geeigneten Triangulierung des Gebietes erzeugen (siehe Abbildung 2.3). Dabei bilden die Punkte der ursprünglichen Triangulierung die Menge der $\{x_i\}$.

Im eindimensionalen Fall vereinfachen sich viele dieser Bezeichnungen, insbesondere ist e_{ij} ein Punkt zwischen zwei aufeinanderfolgenden Intervallen, und wir vereinbaren $|e_{ij}| = 1$. Ausserdem ist $\nu_{ij} = \pm 1$, so dass die Forderung $\nu_{ij} = \frac{x_j - x_i}{|x_j - x_i|}$ nun für beliebige Punkte $x_i \in T_i$ erfüllt ist (siehe Abbildung 2.4).

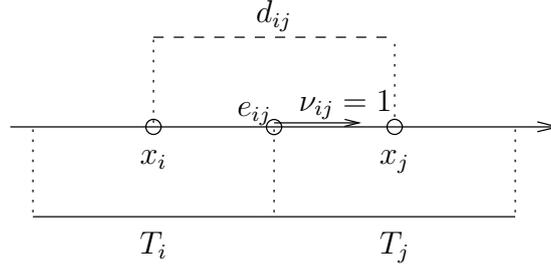


Abbildung 2.4: Diskretisierung in 1D

Da die Mobilität \mathcal{M} auf Zellgrenzen auszuwerten ist, auf welchen die stückweise konstanten Funktionen keinen sinnvollen Wert besitzen, wird diese durch eine diskrete Mobilität $M : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}_0^+$ ersetzt, in die Funktionswerte aus beiden Zellen eingehen. Ist diese symmetrisch, d.h. $M(U, V) = M(V, U)$, ist Massenerhaltung weiterhin garantiert, was wir im Folgenden voraussetzen. Die explizite Konstruktion einer numerischen Mobilität M , die außer diesen Eigenschaften noch eine Art Nichtnegativität der diskreten Lösung garantiert, wird in Abschnitt 4.1 durchgeführt.

Zur Zeitdiskretisierung zerlegen wir das Rechenintervall $(0, T)$ in Zeitschritte der Größe τ mit $N\tau = T$. Außerdem bezeichne U^k die diskrete Lösung nach dem k -ten Zeitschritt.

Die Feinheit der Diskretisierung sei durch die Variablen h und τ bezeichnet. Dabei steht τ für die (konstant angenommene) Zeitschrittweite und h für die Gitterfeinheit im Raum in dem Sinne, dass es Konstanten c und C gibt, so dass

$$\forall e_{ij} \in \mathcal{E} : \quad ch \leq |e_{ij}|, d_{ij} \leq Ch. \quad (2.8)$$

Die stückweise konstanten Funktionen U, V, \dots sind stets von den Diskretisierungsparametern h und τ sowie einem Parameter σ , der die Approximation der Mobilität durch M kontrolliert (vgl. Abschnitt 4.1), abhängig. Um ein Übermaß an Indizes zu vermeiden, betrachten wir diese Abhängigkeit als implizit gegeben und notieren sie nicht bei jedem Auftreten der diskreten Funktionen.

Aufgrund der Randbedingungen verschwinden alle Integrale über Kanten, die Teil von $\partial\Omega$ sind, und wir können mit der vereinbarten Notation folgendes Finite-Volumen-Schema aufstellen:

Schema 2.4 (Finite-Volumen-Schema)

$$\frac{U_i^{k+1} - U_i^k}{\tau} = \frac{1}{|T_i|} \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} M(U_i^{k+1}, U_j^{k+1}) |e_{ij}| \frac{P_j^{k+1} - P_i^{k+1}}{d_{ij}} \quad (2.9)$$

$$P_i^{k+1} = -\frac{1}{|T_i|} \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} |e_{ij}| \frac{U_j^{k+1} - U_i^{k+1}}{d_{ij}} \quad (2.10)$$

Schließlich formulieren wir das Schema in Matrixnotation. Dazu ziehen wir in beiden Gleichungen die Differenzen auf der rechten Seite auseinander und erhalten:

$$U_i^{k+1} = U_i^k + \tau \frac{1}{|T_i|} \left(\sum_{j \in \mathcal{N}(i)} M(U_i^{k+1}, U_j^{k+1}) \frac{|e_{ij}|}{d_{ij}} P_j^{k+1} - \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} M(U_i^{k+1}, U_j^{k+1}) \frac{|e_{ij}|}{d_{ij}} P_i^{k+1} \right) \quad (2.11)$$

$$P_i^{k+1} = -\frac{1}{|T_i|} \left(\sum_{j \in \mathcal{N}(i)} \frac{|e_{ij}|}{d_{ij}} U_j^{k+1} - \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} \frac{|e_{ij}|}{d_{ij}} U_i^{k+1} \right) \quad (2.12)$$

Mit den Abkürzungen

$$\alpha_{ij} := \frac{|e_{ij}|}{d_{ij}} \quad \text{und} \quad \beta_{ij}(U) := M(U_i, U_j) \alpha_{ij}$$

können wir dann Matrizen $K_h(U)$ und L_h durch

$$(K_h(U))_{ij} := \begin{cases} \sum_{k \in \mathcal{N}(i)} \beta_{ik}(U) & : j = i \\ -\beta_{ij}(U) & : j \in \mathcal{N}(i) \\ 0 & : \text{sonst,} \end{cases} \quad (2.13)$$

$$(L_h)_{ij} := \begin{cases} \sum_{k \in \mathcal{N}(i)} \alpha_{ik} & : j = i \\ -\alpha_{ij} & : j \in \mathcal{N}(i) \\ 0 & : \text{sonst,} \end{cases} \quad (2.14)$$

und eine diagonale Massematrix M_h durch $(M_h)_{ii} := |T_i|$ definieren. Damit können wir das Schema in der folgenden Form schreiben:

Schema 2.5 (Matrix-Schema)

$$U^{k+1} = U^k - \tau M_h^{-1} K_h(U^{k+1}) P^{k+1} \quad (2.15)$$

$$P^{k+1} = M_h^{-1} L_h U^{k+1} \quad (2.16)$$

Oder in einer Gleichung:

$$U^{k+1} = U^k - \tau M_h^{-1} K_h(U^{k+1}) M_h^{-1} L_h U^{k+1} \quad (2.17)$$

Nach Konstruktion sind sowohl L_h als auch $K_h(U)$ symmetrisch. Betrachten wir Vektoren $U, V \in \mathbb{R}^{\mathcal{I}}$, so ist nach den Regeln der partiellen Summation, die in 3.2 dargestellt

werden,

$$K_h(U)V \cdot V = - \sum_{i \in \mathcal{I}} \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} M(U_i, U_j) \frac{|e_{ij}|}{d_{ij}} (V_j - V_i) V_i \quad (2.18)$$

$$= \sum_{e_{ij} \in \mathcal{E}} M(U_i, U_j) \frac{|e_{ij}|}{d_{ij}} (V_j - V_i)^2 \quad (2.19)$$

$$\geq 0, \quad (2.20)$$

da M nichtnegativ ist. Analog erhalten wir $L_h V \cdot V \geq 0$, wobei der Wert 0 in diesem Fall nur für konstante Funktionen V angenommen wird. Also sind die Matrizen L_h und $K_h(U)$ symmetrisch und zumindest positiv semidefinit.

Das hierbei in jedem Zeitschritt entstehende Gleichungssystem kann mit einem Iterationsverfahren, z.B. einer einfachen Fixpunktiteration, gelöst werden. Die auftretenden Matrizen können z.B. mit dem CG-Verfahren invertiert werden. In 1D sind sie sogar tridiagonal und die Gauß-Elimination bietet sich als effizientes Lösungsverfahren an.

Dieses Verfahren ist ein reines Finite-Volumen-Schema auf Basis der in [GR 00] vorgestellten numerischen Mobilität. Wir wollen Unterschiede und Gemeinsamkeiten dieser beiden Methoden im Folgenden kurz betrachten.

In [GR 00] wird die Idee der numerischen Mobilität zunächst in einem Finite-Volumen-Ansatz eingeführt. Anschließend werden zwei Methoden betrachtet: Zum einen ein Finite-Elemente Verfahren, das eine matrixwertige Mobilität auf Elementen der Triangulierung verwendet, zum anderen ein FV-Verfahren, das jedoch zur Lösung der Druckgleichung einen FE-Ansatz auf einer dualen Triangulierung verwendet.

Zur Analyse des Verfahrens wird dann in [GR 00] nur noch das Finite-Elemente-Verfahren betrachtet. In diesem Kontext bietet es Vorteile bei der Konvergenzanalyse, da einige für die stetigen FE-Lösungen gültigen Sachverhalte in unserem stückweise konstanten und daher nicht stetigen Fall durch aufwändigere Betrachtungen ersetzt werden müssen, siehe dazu insbesondere Abschnitt 5.1 über die diskrete Hölderstetigkeit und die Behandlung der schwachen Formulierung in Abschnitt 5.2.

Im Vergleich dazu fügt sich die numerische Mobilität natürlicher in den Kontext des hier betrachteten Finite-Volumen-Verfahrens ein. Dies erkaufte man sich jedoch mit der aufwändigeren Handhabung der stückweise konstanten Lösungen.

Im eindimensionalen Fall sieht man leicht die Äquivalenz der beiden Verfahren. Daher erhalten wir in Abschnitt 5.2 auch ein vergleichbares Konvergenzresultat. Für das Finite-Elemente-Verfahren präsentiert [G 02] auch ein Konvergenzresultat in höheren Raumdimensionen. Ein solches Resultat ist für das hier vorgestellte Finite-Volumen-Verfahren bisher noch nicht bekannt.

2.3 Existenz einer diskreten Lösung

Nun beweisen wir zunächst die Existenz einer Lösung dieses Schemas.

Satz 2.6 (Diskrete Existenz) Für einen gegebenen Vektor U^k hat die Gleichung

$$U^{k+1} = U^k - \tau M_h^{-1} K_h(U^{k+1}) M_h^{-1} L_h U^{k+1} \quad (2.21)$$

stets eine Lösung U^{k+1} .

Beweis Sei dazu zunächst $\alpha := \sum_i |T_i| U_i^0 / \sum_i |T_i|$ die durchschnittliche Massendichte (die in unserem Schema erhalten bleibt, wie man direkt aus der Finite-Volumen-Formulierung ablesen kann). Zu einer stückweise konstanten Funktion U soll dann $W = U - \alpha$ stets die auf die Dichte Null normalisierte Funktion bezeichnen.

Betrachten wir den Vektorraum $S = \{W \mid \sum_{i \in \mathcal{I}} |T_i| W_i = 0\}$ aller solchen diskreten Funktionen, die im gewichteten Mittel Null sind, so ist offenbar $W^k \in S$. Nun definieren wir F durch

$$F(W) := (\mathbb{1} + \tau M_h^{-1} K_h(W + \alpha) M_h^{-1} L_h) W - W^k. \quad (2.22)$$

Aufgrund der Massenerhaltung des Schemas bildet F dann S in S ab.

Die quadratische Form $\langle U, V \rangle := U \cdot L_h V$ definiert ein Skalarprodukt auf S (da L_h symmetrisch und auf S positiv definit ist, vgl. Abschnitt 2.2). Mit $\|U\| := \sqrt{\langle U, U \rangle}$ bezeichnen wir die zugehörige Norm. Nun betrachten wir diesbezüglich einen Ball um den Ursprung in S :

$$S_R := \{W \in S \mid \|W\| \leq R\} \quad \text{wobei} \quad R := \|W^k\| \quad (2.23)$$

Zur *reductio ad absurdum* nehmen wir an, F hätte keine Nullstelle in S_R . Dann wäre $G : S_R \rightarrow S_R$ durch $G(U) := -RF(U) / \|F(U)\|$ auf ganz S_R definiert und stetig. Aufgrund des Brouwerschen Fixpunktsatzes hätte G also einen Fixpunkt $X = G(X)$ in S_R . Nach der Definition von G gälte offenbar $\|X\| = R$.

Betrachten wir nun

$$\begin{aligned} \langle F(X), X \rangle &= \langle X - W^k, X \rangle \\ &\quad + \langle \tau M_h^{-1} K_h(X + \alpha) M_h^{-1} L_h X, X \rangle \end{aligned} \quad (2.24)$$

$$\begin{aligned} &= \langle X, X \rangle - \langle W^k, X \rangle \\ &\quad + \tau M_h^{-1} K_h(X + \alpha) M_h^{-1} L_h X \cdot L_h X \end{aligned} \quad (2.25)$$

$$\begin{aligned} &= \langle X, X \rangle - \langle W^k, X \rangle \\ &\quad + \tau K_h(X + \alpha) (M_h^{-1} L_h X) \cdot (M_h^{-1} L_h X) \end{aligned} \quad (2.26)$$

$$\begin{aligned} &\geq \langle X, X \rangle - \langle W^k, X \rangle \\ &\geq \|X\|^2 - \|W^k\| \|X\| \end{aligned} \quad (2.27)$$

$$= \|X\| (\|X\| - \|W^k\|) = \|X\| (R - R) = 0, \quad (2.28)$$

wobei die positive Semidefinitheit von K_h und die Skalarprodukteigenschaften von $\langle \cdot, \cdot \rangle$ eingehen. Nun ergibt

$$0 < \langle X, X \rangle = \langle G(X), X \rangle = -R \langle F(X), X \rangle / \|F(X)\| \leq 0 \quad (2.29)$$

den nötigen Widerspruch, um zu beweisen, dass W^{k+1} mit $F(W^{k+1}) = 0$ existiert. Dann ist $U^{k+1} = W^{k+1} + \alpha$ eine Lösung des diskreten Problems 2.5.

□

3 Ein erstes Konvergenzresultat

3.1 Eine Energieabschätzung

Zunächst betrachten wir wie „partielle Summation“, das diskrete Analogon zu partieller Integration, in unserem Kontext aussieht. Da diese einfachen Umformungen im weiteren Verlauf häufiger auftreten werden, werden sie hier zur einfacheren Referenzierung zusammengefasst dargestellt.

Lemma 3.1 (Partielle Summation) *Seien die Koeffizienten α_{ij} symmetrisch in Bezug auf die Vertauschung von i und j , dann gilt:*

$$\sum_{i \in \mathcal{I}} \sum_{j \in N(i)} \alpha_{ij} (A_j - A_i) B_i = \sum_{e_{ij} \in \mathcal{E}} \alpha_{ij} (A_j - A_i) (B_i - B_j) \quad (3.1)$$

$$\sum_{i \in \mathcal{I}} \sum_{j \in N(i)} \alpha_{ij} (A_j - A_i) A_i = - \sum_{e_{ij} \in \mathcal{E}} \alpha_{ij} (A_j - A_i)^2 \quad (3.2)$$

$$\sum_{i \in \mathcal{I}} \sum_{j \in N(i)} \alpha_{ij} (A_j - A_i) B_i = \sum_{i \in \mathcal{I}} \sum_{j \in N(i)} \alpha_{ij} (B_j - B_i) A_i \quad (3.3)$$

Beweis Zum Beweis von Gleichung (3.1) bemerken wir nur, dass auf der linken Seite jede Kante einmal als e_{ij} und ein zweites mal in der umgekehrten Orientierung e_{ji} vorkommt. Nun ist

$$\alpha_{ij} (A_j - A_i) B_i + \alpha_{ji} (A_i - A_j) B_j \quad (3.4)$$

$$= \alpha_{ij} (A_j - A_i) B_i - \alpha_{ij} (A_j - A_i) B_j \quad (3.5)$$

$$= \alpha_{ij} (A_j - A_i) (B_i - B_j) \quad (3.6)$$

und mit der Konvention, dass \mathcal{E} jede Kante nur einmal enthält, ist die erste Gleichung bewiesen. Aufgrund der Tatsache, dass die rechte Seite symmetrisch in Bezug auf i und j ist, entstehen keine Uneindeutigkeiten aufgrund der nicht definierten Orientierung der Kante.

Gleichung (3.2) folgt nun direkt aus Gleichung (3.1), wenn wir $B = A$ identifizieren. Gleichung (3.3) erhalten wir, indem wir die erste Gleichung zunächst einmal in der dargestellten Form, dann ein zweites Mal unter Vertauschung der Rollen von A und B verwenden.

□

Nun können wir das diskrete Analogon der Energieabschätzung beweisen:

Satz 3.2 (Diskrete Energiegleichung) Seien U und P eine Lösung von Schema 2.4. Dann gilt:

$$\begin{aligned} & \sum_{e_{ij} \in \mathcal{E}} \frac{|e_{ij}|}{d_{ij}} (U_j^N - U_i^N)^2 + \sum_{k=0}^{N-1} \sum_{e_{ij} \in \mathcal{E}} \frac{|e_{ij}|}{d_{ij}} ((U_j^{k+1} - U_i^{k+1}) - (U_j^k - U_i^k))^2 \\ & + 2\tau \sum_{k=0}^{N-1} \sum_{e_{ij} \in \mathcal{E}} M(U_i^{k+1}, U_j^{k+1}) \frac{|e_{ij}|}{d_{ij}} (P_j^{k+1} - P_i^{k+1})^2 = \sum_{e_{ij} \in \mathcal{E}} \frac{|e_{ij}|}{d_{ij}} (U_j^0 - U_i^0)^2 \quad (3.7) \end{aligned}$$

Beweis Wir beginnen mit Gleichung (2.9) des FV-Schemas und testen mit P^{k+1} , d.h. wir multiplizieren beide Seiten mit P_i^{k+1} und summieren anschließend über i :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\tau} \sum_{i \in \mathcal{I}} (U_i^{k+1} - U_i^k) P_i^{k+1} |T_i| \\ & = - \sum_{i \in \mathcal{I}} \sum_{j \in N(i)} M(U_i^{k+1}, U_j^{k+1}) \frac{|e_{ij}|}{d_{ij}} (P_j^{k+1} - P_i^{k+1}) P_i^{k+1} \quad (3.8) \end{aligned}$$

Nun setzen wir Gleichung (2.10) unseres Schemas auf der linken Seite ein:

$$\begin{aligned} & \sum_{i \in \mathcal{I}} (U_i^{k+1} - U_i^k) \sum_{j \in N(i)} |e_{ij}| \frac{U_j^{k+1} - U_i^{k+1}}{d_{ij}} \\ & = -\tau \sum_{i \in \mathcal{I}} \sum_{j \in N(i)} M(U_i^{k+1}, U_j^{k+1}) \frac{|e_{ij}|}{d_{ij}} (P_j^{k+1} - P_i^{k+1}) P_i^{k+1} \quad (3.9) \end{aligned}$$

Nachdem wir die Gleichung in die passende Form

$$\begin{aligned} & \sum_{i \in \mathcal{I}} \sum_{j \in N(i)} \frac{|e_{ij}|}{d_{ij}} (U_i^{k+1} - U_i^k) (U_j^{k+1} - U_i^{k+1}) \\ & = -\tau \sum_{i \in \mathcal{I}} \sum_{j \in N(i)} M(U_i^{k+1}, U_j^{k+1}) \frac{|e_{ij}|}{d_{ij}} (P_j^{k+1} - P_i^{k+1}) P_i^{k+1} \quad (3.10) \end{aligned}$$

gebracht haben, können wir nun die partielle Summation (Gleichung (3.1) auf der linken und Gleichung (3.2) auf der rechten Seite) anwenden

$$\begin{aligned} & \sum_{e_{ij} \in \mathcal{E}} \frac{|e_{ij}|}{d_{ij}} (U_j^{k+1} - U_i^{k+1}) ((U_i^{k+1} - U_i^k) - (U_j^{k+1} - U_j^k)) \\ & = \tau \sum_{e_{ij} \in \mathcal{E}} M(U_i^{k+1}, U_j^{k+1}) \frac{|e_{ij}|}{d_{ij}} (P_j^{k+1} - P_i^{k+1})^2. \quad (3.11) \end{aligned}$$

Jetzt hat die linke Seite die passende Form, um sie mittels $2a(a-b) = a^2 - b^2 + (a-b)^2$ auseinanderzuziehen.

$$\begin{aligned} \sum_{e_{ij} \in \mathcal{E}} \frac{|e_{ij}|}{d_{ij}} \left((U_j^{k+1} - U_i^{k+1})^2 - (U_j^k - U_i^k)^2 + ((U_j^{k+1} - U_i^{k+1}) - (U_j^k - U_i^k))^2 \right) \\ = -2\tau \sum_{e_{ij} \in E} M(U_i^{k+1}, U_j^{k+1}) \frac{|e_{ij}|}{d_{ij}} (P_j^{k+1} - P_i^{k+1})^2 \end{aligned} \quad (3.12)$$

Schließlich summieren wir k von 0 bis $N-1$, wobei sich die beiden ersten Terme als Teleskopsumme zusammenschieben. Damit ist die Behauptung bewiesen. □

Bei geeigneter Regularität von u_0 und einer passenden Projektion auf die stückweise konstanten Funktionen, etwa $u_0 \in C^2$ und $U_i^0 = u_0(x_i)$, ist die rechte Seite der Energiegleichung gleichmäßig beschränkt, und die Terme auf der linken Seite lassen sich entsprechend abschätzen.

Zum Abschluss dieses Abschnittes wollen wir als abkürzende Schreibweise folgende Darstellungen einführen, deren Bezeichnungen in Analogie zu den kontinuierlichen (Halb-) Normen gewählt ist. Da FV-Funktionen stets mit Großbuchstaben bezeichnet sind, besteht keine Verwechslungsgefahr.

Definition 3.3 (Diskrete (Halb-) Normen)

$$|U|_0 := \sqrt{\sum_{i \in \mathcal{I}} |T_i| U_i^2} \quad (3.13)$$

$$|U|_1 := \sqrt{\sum_{e_{ij} \in \mathcal{E}} |e_{ij}| d_{ij} \left(\frac{U_j - U_i}{d_{ij}} \right)^2} \quad (3.14)$$

Dabei ist $\frac{1}{4} |e_{ij}| d_{ij}$ die Fläche eines kantenzentrierten dualen Elements (schraffiert in Abbildung 3.1), so dass wir die $|\cdot|_1$ -Halbnorm als Integral über das Gebiet auffassen können. Wie in Lemma 5.10 sehen wir, dass sie unter geeigneten Voraussetzungen gegen die kontinuierliche H^1 -Halbnorm konvergiert.

3.2 Kompaktheit in der Zeit

Nun werden wir die beiden wesentlichen Teile eines Kompaktheitsargumentes bereitstellen, das uns ein erstes Konvergenzresultat liefert. Zunächst beschäftigen wir uns mit der Kompaktheit in der Zeit. Dazu sei angemerkt, dass wir

$$U(t) = U^k \quad \text{für } t \in [k\tau; (k+1)\tau) \quad (3.15)$$

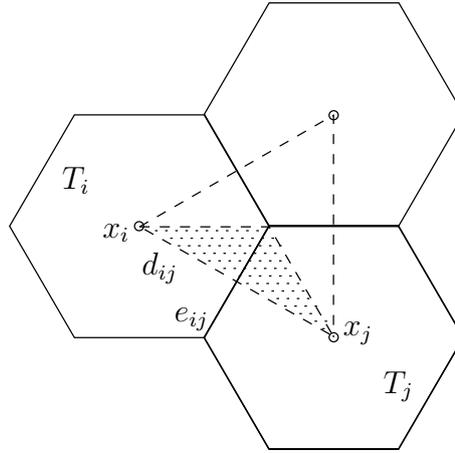


Abbildung 3.1: Fläche eines kantenzentrierten dualen Elementes

annehmen wollen, d.h. U wird von berechneten Zeitschritten aus nach rechts konstant fortgesetzt.

Außerdem werden wird es im Folgenden an verschiedenen Stellen erforderlich sein, dass die diskrete Mobilität M gemäß

$$\max\{M(U_i^k, U_j^k) | e_{ij} \in \mathcal{E}, 0 \leq k \leq N\} \leq \hat{M} \quad (3.16)$$

gleichmäßig beschränkt ist.

Satz 3.4 (Zeitkompaktheit) Sei (U, P) eine Lösung des diskreten Problems 2.4 für die Zeitschrittweite τ und die Ortsdiskretisierungs-Feinheit h . Sei s so dass $0 < s < T = N\tau$ und M nach (3.16) beschränkt. Dann gilt

$$\int_0^{T-s} \sum_{i \in \mathcal{I}} |T_i| (U_i(t+s) - U_i(t))^2 dt \leq \hat{C} \hat{M} s. \quad (3.17)$$

Beweis Zuerst beweisen wir den Satz für den Fall $s = l\tau, l \in \mathbb{N}$. Dazu beginnen wir mit Gleichung (2.9) des FV-Schemas, testen mit $(U^{m+l} - U^m)$ und summieren in der Zeit k von m bis $m + l - 1$:

$$\begin{aligned} & \sum_{k=m}^{m+l-1} \sum_{i \in \mathcal{I}} |T_i| (U_i^{k+1} - U_i^k)(U_i^{m+l} - U_i^m) \\ &= \sum_{k=m}^{m+l-1} \sum_{i \in \mathcal{I}} \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} \tau M(U_i^{k+1}, U_j^{k+1}) \frac{|e_{ij}|}{d_{ij}} (P_j^{k+1} - P_i^{k+1})(U_i^{m+l} - U_i^m) \end{aligned} \quad (3.18)$$

Hierbei bildet die linke Seite bezüglich k eine Teleskopsumme, während wir rechts zunächst nach Gleichung (3.1) partiell summieren und anschließend die Indizierung bezüglich k verschieben.

$$\sum_{i \in \mathcal{I}} |T_i| (U_i^{m+l} - U_i^m)^2 = \sum_{k=1}^l \sum_{e_{ij} \in \mathcal{E}} \tau M(U_i^{m+k}, U_j^{m+k}) \frac{|e_{ij}|}{d_{ij}} (P_j^{m+k} - P_i^{m+k}) ((U_j^{m+l} - U_j^m) - (U_i^{m+l} - U_i^m)) \quad (3.19)$$

Wir spalten die rechte Seite mit der Ungleichung von Cauchy-Schwarz auf und verteilen dabei $\tau \frac{|e_{ij}|}{d_{ij}}$ gleichmäßig auf beide Faktoren:

$$\sum_{i \in \mathcal{I}} |T_i| (U_i^{m+l} - U_i^m)^2 = \sum_{k=1}^l \left(\sum_{e_{ij} \in \mathcal{E}} \tau \frac{|e_{ij}|}{d_{ij}} M(U_i^{m+k}, U_j^{m+k})^2 (P_j^{m+k} - P_i^{m+k})^2 \right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{e_{ij} \in \mathcal{E}} \tau \frac{|e_{ij}|}{d_{ij}} ((U_j^{m+l} - U_j^m) - (U_i^{m+l} - U_i^m))^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.20)$$

Danach summieren wir m von 0 bis $N - l - 1$ und verwenden die Schranke für M . Aufgrund der Ungleichung von Cauchy-Schwarz können wir die Summenzeichen unter die Wurzel ziehen.

$$\begin{aligned} & \tau \sum_{m=0}^{N-l-1} \sum_{i \in \mathcal{I}} |T_i| (U_i^{m+l} - U_i^m)^2 \\ & \leq \sum_{k=1}^l \hat{M} \tau \left(\sum_{m=0}^{N-l-1} \sum_{e_{ij} \in \mathcal{E}} \tau \frac{|e_{ij}|}{d_{ij}} M(U_i^{m+k}, U_j^{m+k}) (P_j^{m+k} - P_i^{m+k})^2 \right)^{\frac{1}{2}} \\ & \quad \left(\sum_{m=0}^{N-l-1} \sum_{e_{ij} \in \mathcal{E}} \tau \frac{|e_{ij}|}{d_{ij}} ((U_j^{m+l} - U_j^m) - (U_i^{m+l} - U_i^m))^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.21) \end{aligned}$$

Schließlich fügen wir im zweiten Faktor mit der Dreiecksungleichung bezüglich m alle Zwischenschritte ein, so dass wir die Energieungleichung in beiden Faktoren anwenden können. Damit ist die rechte Seite beschränkt durch

$$l \hat{M} \tau |U^0|_0 \cdot \sqrt{N} \tau |U^0|_0 \leq l \hat{M} \tau |U^0|_0^2 \sqrt{T} = \hat{C} \hat{M} s, \quad (3.22)$$

und die Behauptung ist in diesem Fall bewiesen.

Betrachten wir nun den allgemeinen Fall $s = (l + \theta)\tau$, $l \in \mathbb{N}$ und $0 < \theta < 1$. Da U auch in der Zeit stückweise konstant ist, können wir folgendermaßen unterscheiden:

$$\begin{aligned} U_i(t + s) &= U_i(t + (l + \theta)\tau) = \\ &= \begin{cases} U_i(t + l\tau) & \text{für } \exists j \in \mathbb{N} : t \in (j\tau, (j + 1 - \theta)\tau) \\ U_i(t + (l + 1)\tau) & \text{für } \exists j \in \mathbb{N} : t \in ((j + 1 - \theta)\tau, (j + 1)\tau) \end{cases} \end{aligned} \quad (3.23)$$

Damit zerfällt das Integral in zwei Teile, die sich leicht mittels des ersten Falles abschätzen lassen.

$$\begin{aligned} &\int_0^{T-s} \sum_{i \in \mathcal{I}} |T_i| (U_i(t + s) - U_i(t))^2 dt \\ &= \tau \sum_{j=0}^{N-l-1} \left((1 - \theta) \sum_{i \in \mathcal{I}} |T_i| (U_i^{j+l} - U_i^j)^2 + \theta \sum_{i \in \mathcal{I}} |T_i| (U_i^{j+l+1} - U_i^j)^2 \right) \\ &\leq (1 - \theta) \hat{C} \hat{M}_s + \theta \hat{C} \hat{M}_s = \hat{C} \hat{M}_s \end{aligned} \quad (3.24)$$

□

3.3 Kompaktheit im Raum

Als nächstes betrachten wir die Kompaktheit im Raum. Dazu gehen wir wie in [MR 01] vor und erhalten das folgende Resultat:

Satz 3.5 (Raumkompaktheit) Für alle $\xi \in \mathbb{R}^d$ sei $\Omega_\xi := \{x \in \Omega \mid [x, x + \xi] \subset \Omega\}$. Dann gilt

$$\int_{\Omega_\xi} (U(x + \xi) - U(x))^2 dx \leq C |\xi| (|\xi| + 2h). \quad (3.25)$$

Beweis Sei $\xi \in \mathbb{R}^d$. Für Finite-Volumen-Zellen $T_i, T_j \in \mathcal{T}$, $j \in \mathcal{N}(i)$ sowie $x \in \Omega_\xi$ definiere

$$\xi_{ij} := \frac{1}{|\xi|} \xi \cdot \nu_{ij} \quad \text{und} \quad (3.26)$$

$$E(x, i, j) := \begin{cases} 1 & \text{falls } [x, x + \xi] \text{ sowohl } e_{ij} \text{ als auch} \\ & T_i \text{ und } T_j \text{ schneidet und } \xi_{ij} > 0 \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (3.27)$$

E zeigt also alle Kanten e_{ij} an, die die Strecke von x nach $x + \xi$ in Richtung von T_i nach T_j schneidet. Siehe dazu auch Abbildung 3.2, in der die entsprechenden Kanten hervorgehoben sind. Dann kann mittels dieser Indikatorfunktion die Differenz $u(x + \xi) - u(x)$ fast überall in Differenzen zwischen benachbarten Zellen zerlegt werden:

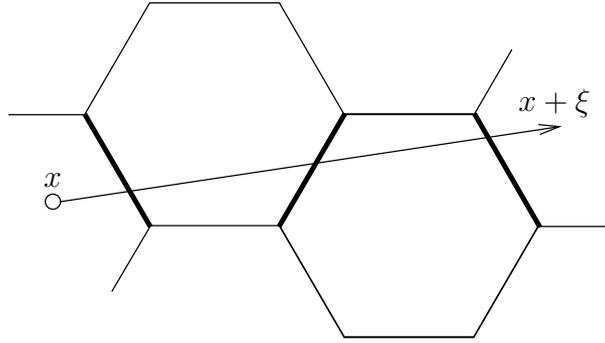


Abbildung 3.2: Definition der Indikatorfunktion E

$$U(x + \xi) - U(x) = U_{i(x+\xi)} - U_{i(x)} = \sum_{e_{ij} \in \mathcal{E}} E(x, i, j)(U_j - U_i) \quad (3.28)$$

Dabei heißt fast überall, dass diese Gleichung nicht gilt, falls die Summe keine zusammenhängende Kette von Element-Paaren T_i, T_j bildet, die von $T_{i(x)}$ bis $T_{i(x+\xi)}$ reicht. Dies ist der Fall, wenn x oder $x + \xi$ nicht im Inneren eines Testvolumens liegen (d.h. falls $i(x)$ oder $i(x + \xi)$ nicht definiert ist), oder wenn, wie in Abbildung 3.3 gezeigt, die Linie von x nach $x + \xi$ entlang einer Kante oder durch einen Schnittpunkt führt. Insbesondere ist die Menge niederdimensional, also vom Maß Null.

Nun betrachten wir die zu untersuchende Differenz, erweitern jeden Summanden mit $\sqrt{\xi_{ij}d_{ij}}$ und ziehen sie nach der Ungleichung von Cauchy-Schwarz passend auseinander:

$$(U(x + \xi) - U(x))^2 = \left(\sum_{e_{ij} \in \mathcal{E}} E(x, i, j)(U_j - U_i) \right)^2 \quad (3.29)$$

$$= \left(\sum_{e_{ij} \in \mathcal{E}} \sqrt{E(x, i, j)\xi_{ij}d_{ij}}(U_j - U_i) \sqrt{\frac{E(x, i, j)}{\xi_{ij}d_{ij}}} \right)^2 \quad (3.30)$$

$$\leq \underbrace{\left(\sum_{e_{ij} \in \mathcal{E}} E(x, i, j)\xi_{ij}d_{ij} \right)}_{(A)} \left(\sum_{e_{ij} \in \mathcal{E}} E(x, i, j) \frac{(U_j - U_i)^2}{\xi_{ij}d_{ij}} \right) \quad (3.31)$$

Nach der Definition von ξ_{ij} und der Eigenschaft der Punkte x_i gilt

$$\xi_{ij}d_{ij} = \frac{1}{|\xi|} \xi \cdot \nu_{ij}d_{ij} = \frac{1}{|\xi|} \xi \cdot (x_j - x_i). \quad (3.32)$$

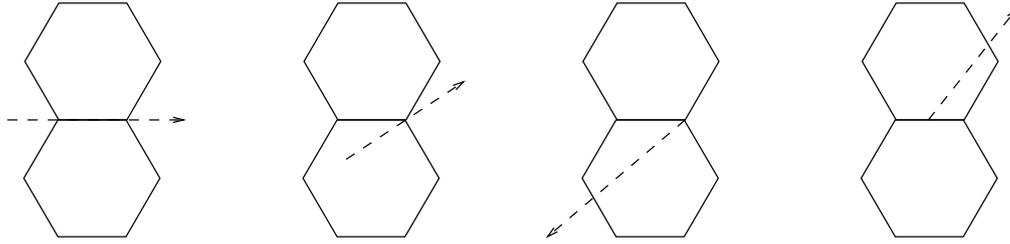


Abbildung 3.3: Fulle, in denen (3.28) nicht gilt

Damit lasst sich Teil (A) folgendermaen abschatzen:

$$(A) = \sum_{e_{ij} \in \mathcal{E}} E(x, i, j) \xi_{ij} d_{ij} \quad (3.33)$$

$$= \sum_{e_{ij} \in \mathcal{E}} E(x, i, j) \frac{1}{|\xi|} \xi \cdot (x_j - x_i) \quad (3.34)$$

$$= \frac{1}{|\xi|} \xi \cdot (x_{i(x+\xi)} - x_{i(x)}) \quad (3.35)$$

$$\leq |x_{i(x+\xi)} - x_{i(x)}| \quad (3.36)$$

$$\leq \underbrace{|x_{i(x+\xi)} - (x + \xi)|}_{\leq h} + \underbrace{|x + \xi - x|}_{\leq |\xi|} + \underbrace{|x - x_{i(x)}|}_{\leq h} \quad (3.37)$$

$$\leq |\xi| + 2h \quad (3.38)$$

Betrachten wir nun wieder das gesamte Produkt (3.31) und integrieren ber Ω_ξ , um die gewnschte Form zu erhalten:

$$\int_{\Omega_\xi} (U(x + \xi) - U(x))^2 dx \leq (|\xi| + 2h) \sum_{e_{ij} \in \mathcal{E}} \frac{(U_j - U_i)^2}{\xi_{ij} d_{ij}} \int_{\Omega_\xi} E(x, i, j) dx \quad (3.39)$$

Fr eine gegebene Kante e_{ij} ist (vgl. Abbildung 3.4)

$$\int_{\Omega_\xi} E(x, i, j) dx = |e_{ij}| |\xi \cdot \nu_{ij}| = |e_{ij}| |\xi| |\xi_{ij}|, \quad (3.40)$$

falls $[x, x + \xi]$ die Kante e_{ij} schneidet, und Null andernfalls.

Damit knnen wir die Abschatzung nun zu Ende fhren, wobei wir im letzten Schritt die Energieabschatzung 3.2 verwenden:

$$\int_{\Omega_{xi}} (U(x + \xi) - U(x))^2 dx \leq (|\xi| + 2h) \sum_{e_{ij} \in \mathcal{E}} \frac{(U_j - U_i)^2}{\xi_{ij} d_{ij}} |e_{ij}| |\xi| |\xi_{ij}| \quad (3.41)$$

$$\leq (|\xi| + 2h) |\xi| \sum_{e_{ij} \in \mathcal{E}} |e_{ij}| \frac{(U_j - U_i)^2}{d_{ij}} \quad (3.42)$$

$$\leq C |\xi| (|\xi| + 2h) \quad (3.43)$$

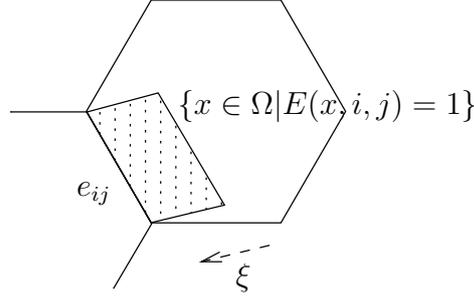


Abbildung 3.4: Die Fläche von $\{x \in \Omega_\xi \mid E(x, i, j) = 1\}$

□

3.4 Konvergenz einer Teilfolge

Wir möchten auf die diskreten Lösungen U den Kompaktheitssatz von Fréchet–Riesz–Kolmogorov ([A 99], Satz 2.15) verwenden, um zu beweisen, dass eine Teilfolge von U in $L^2(\Omega_T)$ konvergiert. Dazu müssen wir zunächst noch die gleichmäßige L^2 -Beschränktheit von U beweisen.

Satz 3.6 (Beschränktheit in L^2) Wenn die diskrete Mobilität beschränkt ist (3.16), so gilt:

$$\sum_{i \in \mathcal{I}} |T_i| (U_i^N)^2 \leq C(T + \hat{M}) \sum_{i \in \mathcal{I}} |T_i| (U_i^0)^2 \quad (3.44)$$

Beweis Wir beginnen wiederum mit Gleichung (2.9) der Finite-Volumen-Formulierung und testen diesmal mit U^{k+1} .

$$\sum_{i \in \mathcal{I}} |T_i| (U_i^{k+1} - U_i^k) U_i^{k+1} = \tau \sum_{i \in \mathcal{I}} \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} |e_{ij}| M(U_i^{k+1}, U_j^{k+1}) \frac{P_j^{k+1} - P_i^{k+1}}{d_{ij}} U_i^{k+1} \quad (3.45)$$

Nun zerlegen wir die linke Seite mittels $2a(a - b) = a^2 - b^2 + (a - b)^2$, während wir auf der rechten Seite partiell summieren (Gleichung (3.1)).

$$\begin{aligned} & \sum_{i \in \mathcal{I}} |T_i| ((U_i^{k+1})^2 - (U_i^k)^2 + (U_i^{k+1} - U_i^k)^2) \\ &= -2\tau \sum_{e_{ij} \in \mathcal{E}} |e_{ij}| M(U_i^{k+1}, U_j^{k+1}) \frac{P_j^{k+1} - P_i^{k+1}}{d_{ij}} (U_j^{k+1} - U_i^{k+1}) \quad (3.46) \end{aligned}$$

Anschließend zerteilen wir die rechte Seite mit der Ungleichung von Cauchy-Schwarz, während wir auf der linken Seite den positiven Term $(U_i^{k+1} - U_i^k)^2$ weglassen. Dabei wird

das negative Vorzeichen in einen der quadratischen Terme absorbiert.

$$\begin{aligned} \sum_{i \in \mathcal{I}} |T_i| (U_i^{k+1})^2 &\leq \sum_{i \in \mathcal{I}} |T_i| (U_i^k)^2 \\ + 2\tau \sum_{e_{ij} \in \mathcal{E}} |e_{ij}| M(U_i^{k+1}, U_j^{k+1})^2 \frac{(P_j^{k+1} - P_i^{k+1})^2}{d_{ij}} &+ 2\tau \sum_{e_{ij} \in \mathcal{E}} |e_{ij}| \frac{(U_j^{k+1} - U_i^{k+1})^2}{d_{ij}} \end{aligned} \quad (3.47)$$

Nun iterieren wir über alle Zeitschritte, um die Abschätzung auf U^0 zurückzuführen.

$$\begin{aligned} \sum_{i \in \mathcal{I}} |T_i| (U_i^N)^2 &\leq \sum_{i \in \mathcal{I}} |T_i| (U_i^0)^2 + 2\tau \sum_{k=0}^{N-1} \sum_{e_{ij} \in \mathcal{E}} |e_{ij}| \frac{(U_j^{k+1} - U_i^{k+1})^2}{d_{ij}} \\ &+ 2\tau \hat{M} \sum_{k=0}^{N-1} \sum_{e_{ij} \in \mathcal{E}} |e_{ij}| M(U_i^{k+1}, U_j^{k+1}) \frac{(P_j^{k+1} - P_i^{k+1})^2}{d_{ij}} \end{aligned} \quad (3.48)$$

Den dritten Summanden können wir nun mit der Energiegleichung 3.2 gegen U^0 abschätzen. Beim zweiten Summanden ist dies jedoch nur für den Teil innerhalb der Summe über k möglich, so dass sich der Faktor $N\tau = T$ ergibt.

□

Nun denken wir uns U außerhalb des Rechengebietes $\Omega_T := \Omega \times (0, T)$ konstant in der Zeit und mit Null im Ort fortgesetzt. Damit folgt die Zeitkompaktheit für ganz \mathbb{R} , da alle Differenzen außerhalb des in Satz 3.4 referenzierten Zeitintervalls Null sind. Allerdings müssen wir Differenzen über den Rand im Ort noch betrachten. Dazu verwenden wir einen diskreten Spursatz ([EGH 00], Lemma 10.5):

Lemma 3.7 (Diskreter Spursatz) *Sei $\partial\mathcal{E}$ die Menge der Kanten, die in $\partial\Omega$ liegen. Sei $i(e)$ für eine Kante $e \in \partial\mathcal{E}$ der Index der Zelle $T_i \in \mathcal{T}$, deren Randkante e ist. Dann ist*

$$\sum_{e \in \partial\mathcal{E}} |e| U_{i(e)}^2 \leq C (|U|_0^2 + |U|_1^2) . \quad (3.49)$$

Damit können wir nun auch die Differenzen über Randkanten abschätzen:

Lemma 3.8 (Raumkompaktheit) *Sei U außerhalb von Ω mit Null fortgesetzt, dann gilt*

$$\int_{\Omega_T} (U(x + \xi, t) - U(x, t))^2 dx dt \leq C |\xi| . \quad (3.50)$$

Beweis Der Ansatz erfolgt wie im Beweis zu Satz 3.5 bis auf die Tatsache, dass nun zusätzlich Differenzen über Randkanten berücksichtigt werden (wobei der äußere Funktionswert Null ist). Daher ergibt sich auch dieselbe Abschätzung bis auf den zusätzlichen Summanden

$$2 \sum_{k=0}^N \tau \int_{\Omega} \sum_{e \in \partial\mathcal{E}} \partial E(x, e) (U_{i(e)}^k)^2 , \quad (3.51)$$

wobei $\partial E(x, e)$ wie erwartet definiert ist durch

$$\partial E(x, e) := \begin{cases} 1 & \text{falls } [x, x + \xi] \text{ sowohl } e \text{ als auch } T_{i(e)} \text{ schneidet} \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (3.52)$$

Wie dort ist $\int_{\Omega} E(x, e) \leq |\xi| |e|$, so dass sich Gleichung (3.51) aufgrund des Spursatzes und anschließend mit der L^2 -Abschätzung 3.6 und der Energiegleichung 3.2 durch

$$2 \sum_{k=0}^N \tau |\xi| \sum_{e \in \partial \mathcal{E}} |e| (U_{i(e)}^k)^2 \leq C \sum_{k=0}^N \tau |\xi| (|U^k|_0^2 + |U^k|_1^2) \quad (3.53)$$

$$\leq CT |\xi| (|U^0|_0^2 + |U^0|_1^2) \quad (3.54)$$

abschätzen lässt.

□

Damit ist der Kompaktheitssatz von Fréchet–Riesz–Kolmogorov anwendbar und wir erhalten:

Satz 3.9 (Konvergenz in $L^2(\Omega_T)$) *Es gibt $u \in L^2(\Omega_T)$ und eine Teilfolge von $\{U\}$, so dass*

$$U \rightarrow u \quad \text{in } L^2(\Omega_T) \quad \text{für } (h, \tau, \sigma) \rightarrow 0. \quad (3.55)$$

Dabei ist σ ein Parameter der diskreten Mobilität \mathcal{M} , den wir in Abschnitt 4.1 näher betrachten.

Nun wollen wir noch ein Regularitätsresultat für den Grenzwert u erwähnen.

Satz 3.10 ($H^{1,2}(\Omega)$ -Regularität von u) *Sei u der Grenzwert aus Satz 3.9. Dann ist $u \in H^{1,2}(\Omega)$.*

Beweis Betrachten wir eine Testfunktion $\varphi \in C^\infty$, deren Träger kompakt in Ω liegt. Aus der Kompaktheit im Raum (Satz 3.5) erhalten wir mittels der Ungleichung von Cauchy–Schwarz:

$$\int_{\mathbb{R}^d} \frac{U(x + \xi) - U(x)}{|\xi|} \varphi(x) dx \leq \frac{\sqrt{C |\xi| (|\xi| + 2h)}}{|\xi|} \|\varphi\|_0 \quad (3.56)$$

Aufgrund der L^2 -Konvergenz von U können wir im Integral zur Grenze übergehen. Anschließend verschieben wir die Integrationsvariablen, und es ergibt sich

$$\int_{\mathbb{R}^d} \frac{u(x + \xi) - u(x)}{|\xi|} \varphi(x) dx \leq \sqrt{C} \|\varphi\|_0 \quad (3.57)$$

$$\int_{\mathbb{R}^d} \frac{\varphi(x - \xi) - \varphi(x)}{|\xi|} u(x) dx \leq \sqrt{C} \|\varphi\|_0. \quad (3.58)$$

Nun setzen wir $\xi := \varepsilon e_i$, und führen einen Grenzübergang $\varepsilon \rightarrow 0$ durch. Es ergibt sich, dass die schwachen Ableitungen von u in L^2 liegen

$$\left| \int_{\mathbb{R}^d} \partial_i \varphi(x) u(x) dx \right| \leq C \|\varphi\|_0 \quad \implies \quad u \in H^{1,2}. \quad (3.59)$$

□

Korollar 3.11 (Schwache Randwerte) *Insbesondere besitzt die Grenzfunktion u schwache Randwerte in $L^2(\partial\Omega)$.*

4 Ein schwacher Nichtnegativitätssatz

In diesem Kapitel werden wir eine schwache Form eines Nichtnegativitätsergebnisses für die diskreten Lösungen beweisen. „Schwach“ bedeutet dabei, dass die diskreten Lösungen zwar negativ sein können, aber oberhalb einer Schranke von $-\varepsilon$ liegen, die mit dem Approximationsparameter σ der diskreten Mobilität (siehe unten) gegen Null konvergiert.

4.1 Eine Entropieungleichung

Zuerst leiten wir nach der Energiegleichung die zweite fundamentale Abschätzung her, die im Folgenden den Beweis der Nichtnegativität erlaubt. Diese Abschätzung wird – ebenfalls in Anlehnung an ein kontinuierliches Resultat – als Entropieungleichung bezeichnet. Um sie zu formulieren, benötigen wir zunächst die folgende Definition.

Definition 4.1 (Zulässiges Entropie-Mobilitäts-Paar) *Sei $m : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ eine stetige und nichtnegative Approximation der kontinuierlichen Mobilität \mathcal{M} und $s_0 \in \mathbb{R}^+$. Dann heißt ein Paar (G, M) von Funktionen $G : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}_0^+$ und $M : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}_0^+$ ein zulässiges Entropie-Mobilitäts-Paar genau dann, wenn gilt:*

- M ist stetig und symmetrisch in Bezug auf seine zwei Argumente,
- $M(U, U) = m(U)$,
- $M(U_i, U_j)(G'(U_j) - G'(U_i)) = U_j - U_i$,

wobei $g(s) = \int_{s_0}^s \frac{1}{m(r)} dr$ und $G(s) = \int_{s_0}^s g(r) dr$.

Insbesondere ist es zulässig, M als harmonisches Integralmittel der approximierten Mobilität m über dem Intervall von U_i bis U_j zu wählen:

$$M(U_i, U_j) = \begin{cases} \left(\int_{U_i}^{U_j} \frac{1}{m(r)} dr \right)^{-1} & \text{if } U_i \neq U_j \\ m(U_i) & \text{if } U_i = U_j \end{cases} \quad (4.1)$$

Satz 4.2 (Diskrete Entropieungleichung) *Sei (G, M) ein zulässiges Entropie-Mobilitäts-Paar. Dann gilt die folgende Ungleichung:*

$$\sum_{i \in \mathcal{I}} |T_i| G(U^N) + \tau \sum_{k=1}^N \sum_{i \in \mathcal{I}} |T_i| (P_i^k)^2 \leq \sum_{i \in \mathcal{I}} |T_i| G(U^0) \quad (4.2)$$

Beweis Wir beginnen mit Gleichung (2.9) des Finite-Volumen-Schemas und testen diese mit $G'(U^{k+1})$, d.h. wir multiplizieren mit $G'(U_i^{k+1})$ und summieren über i für alle Testvolumina:

$$\sum_{i \in \mathcal{I}} |T_i| (U_i^{k+1} - U_i^k) G'(U_i^{k+1}) = \tau \sum_{i \in \mathcal{I}} \sum_{j \in N(i)} M(U_i^{k+1}, U_j^{k+1}) \frac{|e_{ij}|}{d_{ij}} (P_j^{k+1} - P_i^{k+1}) G'(U_i^{k+1}) \quad (4.3)$$

Nun können wir die rechte Seite mittels Gleichung (3.1) der partiellen Summation umformen:

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^{N-1} \sum_{i \in \mathcal{I}} |T_i| (U_i^{k+1} - U_i^k) G'(U_i^{k+1}) &= \\ &= \tau \sum_{k=0}^{N-1} \sum_{e_{ij} \in \mathcal{E}} M(U_i^{k+1}, U_j^{k+1}) \frac{|e_{ij}|}{d_{ij}} (P_j^{k+1} - P_i^{k+1}) (G'(U_i^{k+1}) - G'(U_j^{k+1})) \end{aligned} \quad (4.4)$$

Wenn wir links die Konvexität von G und rechts die Entropie-Mobilitäts Eigenschaft anwenden, erhalten wir

$$\sum_{k=0}^{N-1} \sum_{i \in \mathcal{I}} |T_i| (G(U_i^{k+1}) - G(U_i^k)) \leq \tau \sum_{k=0}^{N-1} \sum_{e_{ij} \in \mathcal{E}} \frac{|e_{ij}|}{d_{ij}} (P_j^{k+1} - P_i^{k+1}) (U_i^{k+1} - U_j^{k+1}). \quad (4.5)$$

Die linke Seite zieht sich dann als Teleskopsumme zusammen, während wir rechts Gleichung (3.1) rückwärts anwenden.

$$\sum_{i \in \mathcal{I}} |T_i| G(U_i^N) - \sum_{i \in \mathcal{I}} |T_i| G(U_i^0) \leq -\tau \sum_{k=0}^{N-1} \sum_{i \in \mathcal{I}} \sum_{j \in N(i)} \frac{|e_{ij}|}{d_{ij}} P_i^{k+1} (U_i^{k+1} - U_j^{k+1}) \quad (4.6)$$

Wir müssen jetzt nur noch die zweite Gleichung des Finite-Volumen-Schemas (2.10) einsetzen und der Beweis der Entropieungleichung ist erbracht.

□

4.2 Diskrete Nichtnegativität

Satz 4.3 (Nichtnegativität) *Zu jedem $\varepsilon > 0$ gibt es ein $\delta > 0$ und ein Entropie-Mobilitäts Paar (G, M) , so dass für alle $\sigma < \delta$ das folgende Resultat über schwache Nichtnegativität erfüllt ist. Dabei ist n der Wachstumsexponent von \mathcal{M} nahe Null wie in Gleichung (2.5).*

1. $u^0 \geq 0 \Rightarrow U > -\varepsilon$ für $0 < n \leq 2$
2. $u^0 \geq \delta \Rightarrow U > -\varepsilon$ für $n = 2$

$$3. u^0 \geq \delta \Rightarrow U > \frac{\sigma}{2} \quad \text{für } n > 2$$

Beweis Zunächst werden passende Entropie-Mobilitäts Paare (G_σ, M_σ) , definiert. Sei dazu $0 < \sigma < \delta$.

Für $1 \leq n$, definieren wir eine Approximation der kontinuierlichen Mobilität \mathcal{M} durch

$$m(u) := \mathcal{M}(\max\{\sigma, u\}), \quad (4.7)$$

während wir für $0 < n < 1$

$$m(u) := \begin{cases} \mathcal{M}(u) & \text{if } u \geq 0 \\ \sigma \mathcal{M}(-u) & \text{if } u < 0 \end{cases} \quad (4.8)$$

schreiben. Daraus ergibt sich dann wie in Abschnitt 4.1 ein zulässiges Entropie-Mobilitäts-Paar (G, M) .

Nun bemerken wir, dass die rechte Seite der Entropieungleichung stets beschränkt ist. Für $n \geq 2$ hat u^0 einen echt positiven Abstand von der Null, so dass die Singularität von G an dieser Stelle vermieden wird. Für $n < 2$ hat G bei Null keine Singularität, wie man leicht sieht, indem man die zweite Stammfunktion von $(\mathcal{M}(u))^{-1}$ berechnet.

Nun müssen wir nach dem Wachstumsverhalten von G drei Fälle unterscheiden: $0 < n < 1$, $1 \leq n \leq 2$ und $2 < n$.

Fall 1: $1 \leq n \leq 2$

Bezeichnen wir mit R_i die i -te Stammfunktion von $(m(U))^{-1}$. Dann können wir die Entropie G für $U < \sigma$ folgendermaßen schreiben:

$$G(U) = R_2(\sigma) - R_2(s_0) - R_1(s_0)(\sigma - s_0) + \frac{(U - \sigma)^2}{2m(\sigma)} + (U - \sigma)(R_1(\sigma) - R_1(s_0)) \quad (4.9)$$

Da R_2 konvex ist, ist $R_2(\sigma) - R_2(s_0) - R_1(s_0)(\sigma - s_0) \geq 0$. Offensichtlich ist außerdem $\frac{(U - \sigma)^2}{2m(\sigma)} \geq 0$.

Damit erhalten wir

$$(U_i^k - \sigma)(R_1(\sigma) - R_1(s_0)) \leq G(U_i^k) \quad \text{für } U_i^k < \sigma. \quad (4.10)$$

Dieselbe Ungleichung gilt aber auch für $U_i^k \geq \sigma$, da die Monotonie von R_1 die linke Seite für genügend kleine Werte von σ negativ macht.

Aus der Entropieungleichung ergibt sich dann

$$\sum_{i \in \mathcal{I}} |T_i| (U_i^k - \sigma)(R_1(\sigma) - R_1(s_0)) \leq \sum_{i \in \mathcal{I}} |T_i| G(U_i^k) \leq \sum_{i \in \mathcal{I}} |T_i| G(U_i^0) \leq C. \quad (4.11)$$

Schließlich können wir folgendermaßen abschätzen:

$$C \geq ch^d (\min_{i \in \mathcal{I}} \{U_i^k\} - \sigma)(R_1(\sigma) - R_1(s_0)) \quad (4.12)$$

$$\geq ch^d (\min_{i \in \mathcal{I}} \{U_i^k\})(R_1(\sigma) - R_1(s_0)) \quad (4.13)$$

$$\min_{i \in \mathcal{I}} \{U_i^k\} \leq \frac{C}{ch^d (R_1(\sigma) - R_1(s_0))} \quad (4.14)$$

In diesem Fall gilt $R_1(\sigma) \rightarrow -\infty$ für $\sigma \rightarrow 0$, so dass die rechte Seite gegen Null konvergiert. Dies beweist die Behauptung in Fall 1.

Fall 2: $n > 2$

Wie oben erhalten wir Gleichung (4.11). Nun betrachten wir

$$K_\beta = \{i \in \mathcal{I} : U_i^k < \beta\}. \quad (4.15)$$

$$\frac{C}{R_1(s_0) - R_1(\sigma)} \geq \sum_{i \in K_\beta} |T_i| (\sigma - U_i^k) \quad (4.16)$$

$$\geq \sum_{i \in K_\beta} ch^d (\sigma - U_i^k) \quad (4.17)$$

$$\geq ch^d |K_\beta| \min_{K_\beta} \{\sigma - U_i^k\} \quad (4.18)$$

$$\geq ch^d |K_\beta| (\sigma - \beta) \quad (4.19)$$

$$|K_{\sigma/2}| \leq \frac{2C}{ch^d \cdot \sigma (R_1(s_0) - R_1(\sigma))} \quad (4.20)$$

Und da $-\sigma R_1(\sigma) \rightarrow \infty$ für $\sigma \rightarrow 0$, wird $K_{\sigma/2}$ leer für ein genügend kleines σ , was zu beweisen war.

Fall 3: $0 < n < 1$

Hier wählen wir als Startpunkt der Integration $s_0 = 0$, was G zu $G(u) = \sigma^{-1} R_2(-u)$ für $u < 0$ vereinfacht. Darauf können wir wieder die Entropieungleichung anwenden.

$$\begin{aligned} C &\geq \sum_{i \in \mathcal{I}} |T_i| G(U_i^0) \geq \sum_{i \in \mathcal{I}} T_i G(U_i^k) \geq \sum_{i \in K_{-\varepsilon}} |T_i| \sigma^{-1} R_2(-U_i^k) \\ &\geq |K_{-\varepsilon}| ch^d \sigma^{-1} \min_{i \in K_{-\varepsilon}} \{R_2(-U_i^k)\} \geq |K_{-\varepsilon}| ch^d \sigma^{-1} R_2(\varepsilon) \end{aligned} \quad (4.21)$$

Damit erhalten wir die Ungleichung

$$|K_{-\varepsilon}| \leq \frac{C\sigma}{ch^d R_2(\varepsilon)}, \quad (4.22)$$

deren rechte Seite wiederum gegen Null konvergiert. Damit ist auch der letzte Fall abgeschlossen.

□

5 Gleichmäßige Konvergenz in 1D

Nun wollen wir beweisen, dass der Grenzwert der diskreten Lösungen eine schwache Lösung des kontinuierlichen Problems ist. Dazu ziehen wir uns auf den (im Raum) eindimensionalen Fall zurück.

5.1 Diskrete Hölderstetigkeit

Zunächst benötigen wir ein diskretes Analogon zur gleichmäßigen Hölder-Stetigkeit, um damit später die gleichmäßige Konvergenz beweisen zu können. Dazu definieren wir:

Definition 5.1 (Diskrete Hölderstetigkeit) Eine Menge stückweise konstanter Finite-Volumen-Funktionen $U : \Omega_T \rightarrow \mathbb{R}$ heißt diskret gleichmäßig hölderstetig zum Exponenten $0 < \alpha \leq 1$

$$\text{im Ort genau dann, wenn} \quad |U_j^k - U_i^k| \leq C |x_j - x_i|^\alpha, \quad (5.1)$$

$$\text{in der Zeit genau dann, wenn} \quad |U_i^{k+l} - U_i^k| \leq C |l\tau|^\alpha, \quad (5.2)$$

wobei die Konstante C unabhängig von h ist.

Wenn im Folgenden von Hölderstetigkeit die Rede ist, ist stets diese diskrete Hölderstetigkeit gemeint.

Dann folgern wir aus der Energiegleichung 3.2, dass unsere diskrete Lösung U im Raum hölderstetig zum Exponenten $\frac{1}{2}$ ist.

Satz 5.2 (Hölderstetigkeit im Raum) Sei $\{U\}$ eine Familie von Lösungen des Finite-Volumen-Schemas 2.4. Dann sind diese Funktionen gleichmäßig hölderstetig zum Exponenten $\frac{1}{2}$.

Beweis Aus der Energiegleichung erhalten wir in 1D, da im Eindimensionalen $|e_{ij}| = 1$ ist, die Abschätzung

$$\sum_{i,i+1 \in \mathcal{I}} \frac{(U_{i+1} - U_i)^2}{d_{i,i+1}} \leq C |U^0|_1^2. \quad (5.3)$$

Wir werden eine Differenz der Form $|U_{i+j} - U_i|$ mit der Dreiecksungleichung auseinanderziehen und anschließend mit der Ungleichung von Cauchy-Schwarz in die passende Form bringen, um Ungleichung 5.3 anwenden zu können.

$$|U_{i+j} - U_i| \leq \sum_{k=1}^j |U_{i+k} - U_{i+k-1}| \quad (5.4)$$

$$= \sum_{k=1}^j \frac{|U_{i+k} - U_{i+k-1}|}{d_{i+k-1,i+k}^{\frac{1}{2}}} \cdot d_{i+k-1,i+k}^{\frac{1}{2}} \quad (5.5)$$

$$\leq \left(\sum_{k=1}^j \frac{|U_{i+k} - U_{i+k-1}|^2}{d_{i+k-1,i+k}} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{k=1}^j d_{i+k-1,i+k} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (5.6)$$

$$\leq C |U|_1 (x_{i+j} - x_i)^{\frac{1}{2}} \quad (5.7)$$

$$\leq C |U^0|_1 (x_{i+j} - x_i)^{\frac{1}{2}} \quad (5.8)$$

□

Als nächstes betrachten wir die Hölderstetigkeit in der Zeit. Dazu benötigen wir zunächst folgenden Hilfssatz:

Lemma 5.3 (Hölderstetigkeit in der Zeit) *Sei M nach (3.16) beschränkt und U eine Familie von diskreten Lösungen des Finite-Volumen-Schemas 2.4. Dann gilt:*

$$\sum_{i \in \mathcal{I}} |T_i| (U_i^{l+m} - U_i^l)^2 \leq C \hat{M} |U^0|_1^2 \sqrt{m\tau} \quad (5.9)$$

Beweis Zum Beweis testen wir die erste Gleichung des Schemas 2.4 mit $U^{k+1} - U^l$. Damit erhalten wir

$$\begin{aligned} & \sum_{i \in \mathcal{I}} |T_i| (U_i^{k+1} - U_i^k)(U_i^{k+1} - U_i^l) \\ &= \tau \sum_{i \in \mathcal{I}} \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} M(U_i^{k+1}, U_j^{k+1}) \frac{|e_{ij}|}{d_{ij}} (P_j^{k+1} - P_i^{k+1})(U_i^{k+1} - U_i^l). \end{aligned} \quad (5.10)$$

Als nächstes werden wir auf der linken Seite ein U_i^l einschieben und rechts die partielle Summation nach (3.1) durchführen und anschließend über die Zeit summieren.

$$\begin{aligned} & \sum_{k=l}^{l+m-1} \sum_{i \in \mathcal{I}} |T_i| ((U_i^{k+1} - U_i^l) - (U_i^k - U_i^l))(U_i^{k+1} - U_i^l) \\ &= - \sum_{k=l}^{l+m-1} \tau \sum_{e_{ij} \in \mathcal{E}} M(U_i^{k+1}, U_j^{k+1}) \frac{|e_{ij}|}{d_{ij}} \\ & \quad (P_j^{k+1} - P_i^{k+1})((U_j^{k+1} - U_j^l) - (U_i^{k+1} - U_i^l)) \end{aligned} \quad (5.11)$$

Nun wird die linke Seite mittels $2a(a-b) = a^2 - b^2 + (a-b)^2$, die rechte mit der Ungleichung von Cauchy-Schwarz aufgespalten. Dabei wird dort einmal M gegen \hat{M} abgeschätzt.

$$\begin{aligned} & \sum_{k=l}^{l+m-1} \sum_{i \in \mathcal{I}} |T_i| ((U_i^{k+1} - U_i^l)^2 + (U_i^{k+1} - U_i^k)^2 - (U_i^k - U_i^l)^2) \\ &= -\sqrt{\hat{M}} \left(2\tau \sum_{k=l}^{l+m-1} \sum_{e_{ij} \in \mathcal{E}} \frac{|e_{ij}|}{d_{ij}} M(U_i^{k+1}, U_j^{k+1}) (P_j^{k+1} - P_i^{k+1})^2 \right)^{\frac{1}{2}} \\ & \quad \cdot \left(2\tau \sum_{k=l}^{l+m-1} \sum_{e_{ij} \in \mathcal{E}} \frac{|e_{ij}|}{d_{ij}} ((U_j^{k+1} - U_j^l) - (U_i^{k+1} - U_i^l))^2 \right)^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (5.12)$$

Hier ergeben der erste und der dritte Summand links eine Teleskopsumme, deren unteres Ende Null ist, so dass nur der oberste Term übrigbleibt. Rechts können wir den ersten Faktor mit der Energiegleichung abschätzen. Gleichzeitig gehen wir im Zuge der Abschätzung zu Beträgen über.

$$\begin{aligned} \sum_{k=l}^{l+m-1} \sum_{i \in \mathcal{I}} |T_i| (U_i^{k+1} - U_i^k)^2 + \sum_{i \in \mathcal{I}} |T_i| (U_i^{l+m} - U_i^l)^2 \\ \leq \sqrt{\hat{M}} |U^0|_1 (2\tau \sum_{k=l}^{l+m-1} |U^{k+1}|_1^2 + |U^l|_1^2)^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (5.13)$$

Schließlich können wir den positiven ersten Summanden auf der linken Seite weglassen, und rechts die Normen zu späteren Zeiten mit der Energiegleichung 3.2 gegen U^0 abschätzen.

$$\sum_{i \in \mathcal{I}} |T_i| (U_i^{l+m} - U_i^l)^2 \leq \sqrt{\hat{M}} |U^0|_1 (2\tau m \cdot 2 |U^0|_1^2)^{\frac{1}{2}} \quad (5.14)$$

$$\leq 2\sqrt{\hat{M}} \sqrt{m\tau} |U^0|_1^2 \quad (5.15)$$

□

Damit können wir nun die Hölderstetigkeit auch in der Zeit beweisen:

Satz 5.4 (Hölderstetigkeit in der Zeit) *Unter den Voraussetzungen von Lemma 5.3 ist U hölderstetig in der Zeit zum Exponenten $\frac{1}{8}$, wenn zusätzlich $m\tau \geq h^4$.*

Beweis Sei $x \in \Omega$ und $\delta > 0$ genügend klein, so dass wir o.B.d.A. $[x, x + \delta) \subset \Omega$ annehmen können. Dann schreiben wir

$$\begin{aligned} U^{l+m}(x) - U^l(x) &= \underbrace{\int_x^{x+\delta} U^{l+m}(x) - U^{l+m}(y) dy}_{=(A)} \\ &\quad + \underbrace{\int_x^{x+\delta} U^{l+m}(y) - U^l(y) dy}_{=(B)} + \underbrace{\int_x^{x+\delta} U^l(y) - U^l(x) dy}_{=(C)}, \end{aligned} \quad (5.16)$$

und erhalten aufgrund der Hölderstetigkeit im Raum

$$(A) = \frac{1}{\delta} \int_x^{x+\delta} U^{l+m}(x) - U^{l+m}(y) dy \quad (5.17)$$

$$\leq \frac{1}{\delta} C \delta^{\frac{3}{2}} = C\sqrt{\delta} \quad (5.18)$$

sowie das gleiche Resultat für (C).

Teil (B) schätzen wir mit der Ungleichung von Cauchy-Schwarz gegen das vorhergehende Lemma 5.3 ab.

$$(B) = \frac{1}{\delta} \int_x^{x+\delta} U^{l+m}(y) - U^l(y) \cdot 1 \, dy \quad (5.19)$$

$$\leq \frac{1}{\delta} \left(\int_{\Omega} (U^{l+m}(y) - U^l(y))^2 \, dy \right)^{\frac{1}{2}} \sqrt{\delta} \quad (5.20)$$

$$\leq \frac{1}{\sqrt{\delta}} C(m\tau)^{\frac{1}{4}} \quad (5.21)$$

Mit der Wahl $\delta = (m\tau)^{\frac{1}{4}}$ erhalten wir

$$|U^{l+m}(x) - U^l(x)| \leq |A| + |B| + |C| \quad (5.22)$$

$$\leq C \left(\sqrt{\delta} + \frac{1}{\sqrt{\delta}} (m\tau)^{\frac{1}{4}} + \sqrt{\delta} \right) \quad (5.23)$$

$$= C(m\tau)^{\frac{1}{8}}. \quad (5.24)$$

□

Wir haben damit festgestellt, dass die diskreten Lösungen gleichmäßig hölderstetig in Raum und Zeit sind. Zusammen mit der vorher bewiesenen L^2 -Konvergenz folgt daraus die gleichmäßige Konvergenz. Die Grenzfunktionen sind offenbar (im Lebesgue-Sinne) identisch.

Satz 5.5 (Gleichmäßige Konvergenz) *Seien U Lösungen des Schemas 2.4 in einer Raumdimension. Dann konvergiert die Teilfolge aus 3.9 auch gleichmäßig gegen die Grenzfunktion u .*

Beweis Die Folge U konvergiert in $L^2(\Omega_T)$ gegen eine Funktion u . Außerdem ist sie (diskret) gleichmäßig hölderstetig zum Exponenten $\frac{1}{2}$ (im Raum) bzw. $\frac{1}{8}$ (in der Zeit).

Wir zeigen, dass U auch eine Cauchyfolge in $L^\infty(\Omega_T)$ ist. Dazu betrachten wir zwei Funktionen U, V auf Gittern $\mathcal{T}_U, \mathcal{T}_V$ der Feinheit h_U, h_V und mit Zeitschrittweiten τ_U bzw. τ_V . Wir bezeichnen mit

$$A := \|U - V\|_2 \quad B := \|U - V\|_\infty \quad (5.25)$$

die Abstände der beiden betrachteten Funktionen in den betreffenden Normen. Weiterhin sei $h := \max\{h_U, h_V\}$ und $\tau := \max\{\tau_U, \tau_V\}$.

Dann gilt für $|x - y| > h$

$$|U(x) - U(y)| = |U_{i(x)} - U_{i(y)}| \quad (5.26)$$

$$< C |x_{i(x)} - x_{i(y)}|^{\frac{1}{2}} \quad (5.27)$$

$$\leq C |x - y + h|^{\frac{1}{2}} \quad (5.28)$$

$$\leq C |x - y|^{\frac{1}{2}}, \quad (5.29)$$

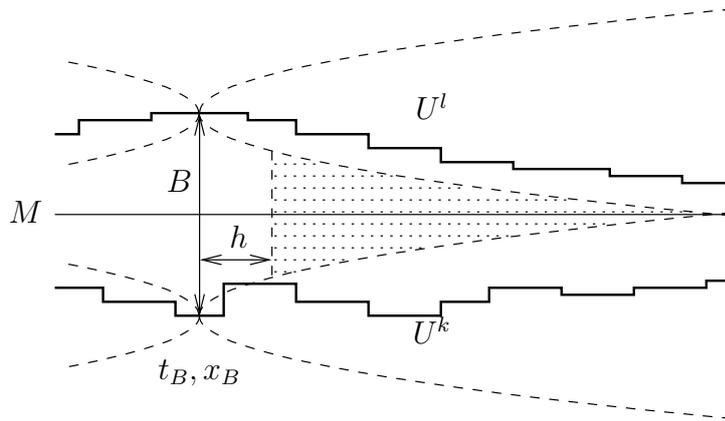


Abbildung 5.1: Abstand zweier diskret hölderstetiger Funktionen

und zusammen mit dem analogen Ergebnis in der Zeit erhalten wir

$$|U(t, x) - U(s, y)| < C \left(|x - y|^{\frac{1}{2}} + |t - s|^{\frac{1}{8}} \right), \quad (5.30)$$

falls $|x - y| > h$ und $|t - s| > \tau$.

Betrachten wir nun also die Funktionen U und V sowie eine Stelle (t_B, x_B) , an der sie den Abstand B annehmen, vgl. 5.1. Also können wir ihren L^2 -Abstand gegen die schraffierte Fläche abschätzen. Sei dazu $M := \frac{1}{2}(U(t_B, x_B) - V(t_B, x_B))$. O.B.d.A. sei $U(t_B, x_B) > M > V(t_B, x_B)$. Der Übersichtlichkeit halber verschieben wir nun so, dass $t_B = 0$ und $x_B = 0$.

Dann ist für $t > \tau, x > h$

$$U(t, x) \geq U(0) - |U(0) - U(t, x)| \quad (5.31)$$

$$\geq U(0) - C(t^{\frac{1}{8}} + x^{\frac{1}{2}}) \quad (5.32)$$

und analog

$$V(t, x) \leq V(0) + C(t^{\frac{1}{8}} + x^{\frac{1}{2}}). \quad (5.33)$$

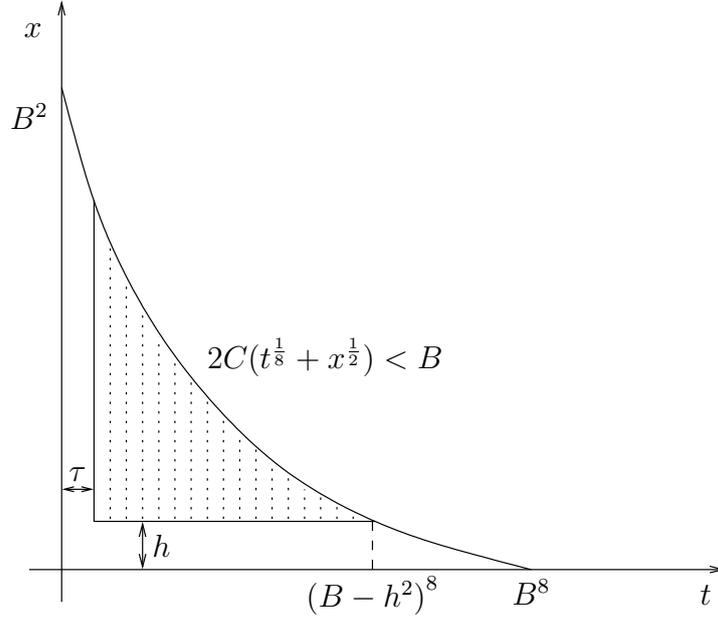


Abbildung 5.2: Integrationsbereich in Abschätzung (5.38)

In Raum und Zeit ergibt sich also

$$A = \int_{\Omega_T} (U(t, x) - V(t, x))^2 dxdt \quad (5.34)$$

$$\geq \int_{U > M > V} (U(t, x) - V(t, x))^2 dxdt \quad (5.35)$$

$$\geq \int_{t > \tau, x > h, 2C(t^{\frac{1}{8}} + x^{\frac{1}{2}}) < B} (U(t, x) - V(t, x))^2 dxdt \quad (5.36)$$

$$\geq \int_{t > \tau, x > h, 2C(t^{\frac{1}{8}} + x^{\frac{1}{2}}) < B} \left(B - 2C(t^{\frac{1}{8}} + x^{\frac{1}{2}}) \right)^2 dxdt \quad (5.37)$$

$$\geq C \int_{\tau}^{\left(\frac{B}{2C} - h^2\right)^8} \int_h^{\left(\frac{B}{2C} - t^{\frac{1}{8}}\right)^2} \left(\frac{B}{2C} - x^{\frac{1}{2}} - t^{\frac{1}{8}} \right)^2 dxdt \quad (5.38)$$

$$\geq C \int_0^{\left(\frac{B}{2C}\right)^8} \int_0^{\left(\frac{B}{2C} - t^{\frac{1}{8}}\right)^2} \left(\frac{B}{2C} - x^{\frac{1}{2}} - t^{\frac{1}{8}} \right)^2 dxdt - C(hT + \tau |\Omega|) \left(\frac{B}{2C} \right)^2 \quad (5.39)$$

$$\geq C \frac{1}{2970} B^{12} - C(h + \tau) B^2. \quad (5.40)$$

Dabei illustriert Abbildung 5.2 den Integrationsbereich in Ort und Zeit.

Also konvergiert die L^∞ -Norm, falls die L^2 -Norm dies tut.

□

5.2 Konvergenz gegen die schwache Lösung

Zunächst betrachten wir noch einmal den diskreten Druck P . Aufgrund der Entropiegleichung 4.2 ist dieser in $L^2(\Omega \times (\tau, T))$ gleichmäßig beschränkt, also gilt:

Satz 5.6 (Schwache Konvergenz des Druckes) *Die diskreten Druckfunktionen P konvergieren schwach gegen eine Funktion p in $L^2(\Omega \times (\varepsilon, T))$ für $0 < \varepsilon < T$.*

Wir können (für den eindimensionalen Fall) zeigen, dass die Grenzwerte u, p aus den Sätzen 3.9 und 5.6 eine schwache Lösung des kontinuierlichen Problems im folgenden Sinne sind:

Problem 5.7 (Schwache Lösung) *Wir nennen die Funktionen $u, p \in L^2(0, T; H^{1,2}(\Omega))$ eine schwache Lösung der Dünne-Filme-Gleichung, wenn für alle entsprechenden Testfunktionen φ gilt:*

$$\int_{\Omega_T} (u - u_0) \partial_t \varphi = \int_{[u>0] \times [0, T]} \mathcal{M}(u) \nabla p \cdot \nabla \varphi \quad \forall \varphi \in C^\infty(\Omega_T), \varphi(T) = 0 \quad (5.41)$$

$$\int_{\Omega} p \varphi = \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla \varphi \quad \forall \varphi \in C^\infty(\Omega), \text{ fast alle } t \in (0, T) \quad (5.42)$$

Dazu testen wir die beiden Gleichungen des Finite-Volumen-Schemas 2.4 mit passenden Testfunktionen, um anschließend im Integral zur Grenze überzugehen. Dabei sei zu einer Testfunktion φ der Wert an der Stelle x_i im k -ten Zeitschritt mit Φ_i^k bezeichnet. Die Differenzenquotienten werden mittels partieller Summation (3.3) auf die Testfunktion gebracht.

Problem 5.8 (Folgerung aus dem diskreten Problem)

$$\begin{aligned} & \sum_{k=0}^{N-1} \tau \sum_{i \in \mathcal{I}} |T_i| (U_i^k - U_i^0) \frac{\Phi_i^{k+1} - \Phi_i^k}{\tau} \\ &= - \sum_{k=0}^{N-1} \tau \sum_{i \in \mathcal{I}} \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} M(U_i^{k+1}, U_j^{k+1}) |e_{ij}| P_i^{k+1} \frac{\Phi_j^{k+1} - \Phi_i^{k+1}}{d_{ij}} \quad \forall \Phi^N = 0 \end{aligned} \quad (5.43)$$

$$\sum_{i \in \mathcal{I}} |T_i| P_i^{k+1} \Phi_i = - \sum_{i \in \mathcal{I}} \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} |e_{ij}| U_i^{k+1} \frac{\Phi_j - \Phi_i}{d_{ij}} \quad (5.44)$$

Zum Beweis der Konvergenz gehen wir in den einzelnen Integraltermen zur Grenze über. Die Konvergenz im Zeitableitungs-Term folgt sofort aus der L^2 -Konvergenz der einzelnen Faktoren.

Lemma 5.9 (Zeitableitung)

$$\sum_{k=0}^{N-1} \tau \sum_{i \in \mathcal{I}} |T_i| (U_i^k - U_i^0) \frac{\Phi_i^{k+1} - \Phi_i^k}{\tau} \rightarrow \int_{\Omega_T} (u - u_0) \partial_t \varphi \quad (5.45)$$

Lemma 5.10 (Druckgleichung)

$$\sum_{i \in \mathcal{I}} |T_i| P_i \Phi_i \rightarrow \int_{\Omega} p \varphi \quad (5.46)$$

$$- \sum_{i \in \mathcal{I}} \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} |e_{ij}| U_i \frac{\Phi_j - \Phi_i}{d_{ij}} \rightarrow \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla \varphi \quad (5.47)$$

Beweis Dabei folgt (5.46) direkt aus der Tatsache, dass P schwach in L^2 gegen p und Φ stark gegen φ konvergiert.

Also wenden wir uns noch (5.47) zu. Dazu betrachten wir die Differenz der beiden Integrale und wälzen den Gradienten von u auf die Testfunktion, schieben $\int U \Delta \varphi$ dazwischen und teilen das Gebiet Ω in Testvolumina T_i auf. Anschließend formulieren wir das Integral über $\Delta \varphi$ in ein Integral über den Rand des Testvolumens um. Dabei muss der Rand des Gebietes noch gesondert behandelt werden.

$$- \left(- \sum_{i \in \mathcal{I}} \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} |e_{ij}| U_i \frac{\Phi_j - \Phi_i}{d_{ij}} - \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla \varphi \right) \quad (5.48)$$

$$= \sum_{i \in \mathcal{I}} \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} |e_{ij}| U_i \frac{\Phi_j - \Phi_i}{d_{ij}} - \int_{\Omega} u \Delta \varphi + \int_{\partial \Omega} u \partial_{\nu} \varphi \quad (5.49)$$

$$= \sum_{i \in \mathcal{I}} \left(U_i \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} |e_{ij}| \frac{\Phi_j - \Phi_i}{d_{ij}} - U_i \int_{T_i} \Delta \varphi \right) + \int_{\Omega} U \Delta \varphi - \int_{\Omega} u \Delta \varphi + \int_{\partial \Omega} u \partial_{\nu} \varphi \quad (5.50)$$

$$= \sum_{i \in \mathcal{I}} U_i \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} \int_{e_{ij}} \left(\frac{\Phi_j - \Phi_i}{d_{ij}} - \nabla \varphi \cdot \nu_{ij} \right) + \int_{\Omega} (U - u) \Delta \varphi + \int_{\partial \Omega} (u - U) \partial_{\nu} \varphi \quad (5.51)$$

Die ersten beiden Terme konvergieren gegen Null, also gilt für Testfunktionen mit kompakten Träger in Ω die behauptete Konvergenz und damit die Identität $\int p \varphi = - \int u \Delta \varphi$.

Nach Korollar 3.11 besitzt u schwache Randwerte in L^2 (die wir ebenfalls mit u bezeichnen), andererseits ist U auf dem Rand wegen des Spursatzes 3.7 gleichmäßig beschränkt und besitzt deshalb einen schwachen Grenzwert in $L^2(\partial \Omega)$, den wir mit v bezeichnen.

Mit einem Dichtheitsargument folgt dann

$$\int_{\partial\Omega} (u - v) \partial_\nu \varphi = 0 \quad \forall \varphi \in C^\infty(\Omega), \varphi = 0 \text{ auf } \partial\Omega. \quad (5.52)$$

Betrachten wir nun einen Teil D des polygonalen Randes von Ω , der in einer Hyperebene H liegt. O.B.d.A. sei $H = \text{span}\{e_2, \dots, e_d\}$ und $\nu = (1, 0, \dots, 0, 0)$.

Dann können beliebige glatte $(d - 1)$ -dimensionale Testfunktionen $\psi(x_2, \dots, x_d)$ mit Träger kompakt in D durch $\varphi = x_1 \cdot \psi(x_2, \dots, x_d)$ im Innern von Ω und einer Umgebung von D und geeignete Glättung zur Null bis zum restlichen Rand von Ω so fortgesetzt werden, dass nach Gleichung (5.52) auch

$$\int_D (u - v) \psi = \int_D (u - v) \partial_\nu \varphi = 0 \quad \forall \psi \in C_0^\infty(D), \quad (5.53)$$

womit die Identität $u = v$ fast überall auf dem Rand bewiesen ist. □

Lemma 5.11 (Mobilität) *In einer Raumdimension gilt*

$$-\sum_{k=0}^{N-1} \tau \sum_{i \in \mathcal{I}} \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} M(U_i^{k+1}, U_j^{k+1}) |e_{ij}| P_i^{k+1} \frac{\Phi_j^{k+1} - \Phi_i^{k+1}}{d_{ij}} \rightarrow \int_{[u>0] \times [0, T]} \mathcal{M}(u) \nabla p \cdot \nabla \varphi. \quad (5.54)$$

Beweis Zunächst betrachten wir die Mobilität und beweisen die gleichmäßige Konvergenz von $M(U)$ gegen $\mathcal{M}(u)$. Betrachten wir zwei benachbarte Elemente T_i, T_j mit $j \in \mathcal{N}(i)$ und einen Punkt $x \in T_i$, sowie einen Zeitpunkt $t \in [k\tau, (k+1)\tau)$. Wir unterscheiden zwei Fälle:

Fall 1: $n \geq 1$

Nach dem Mittelwertsatz gilt aufgrund der Definition 4.1 der Entropie-Mobilitäts Paare

$$M(U_i^k, U_j^k) = m(\xi) = \frac{1}{G^n(\xi)} \quad \text{mit } \xi \in [U_i^k, U_j^k]. \quad (5.55)$$

Daher gilt aufgrund der Definition (Gleichung (4.7)) von M in diesem Fall:

$$|\mathcal{M}(u(x, t)) - M(U_i^k, U_j^k)| = |\mathcal{M}(u(x, t)) - m(\xi)| \quad (5.56)$$

$$\leq |\mathcal{M}(u(x, t)) - \mathcal{M}(\xi)| + |\mathcal{M}(\xi) - m(\xi)| \quad (5.57)$$

$$\leq \sup_{s < \max U} |\mathcal{M}'(s)| |u(x, t) - \xi| + \mathcal{M}(\sigma) \quad (5.58)$$

Schließlich ist nach Satz 3.10 $u \in L^\infty(H^1(\Omega))$, nach dem Einbettungssatz von Sobolev in 1D also im Raum auch hölderstetig zum Exponenten $\frac{1}{2}$, und daher gilt

$$|u(t, x) - \xi| \leq |u(t, x) - U_i^k| + |u(t, x) - U_j^k| \quad (5.59)$$

$$\leq |u(t, x) - U_i^k| + |u(t, x) - u(t, x_j)| + |u(t, x_j) - U_j^k| \quad (5.60)$$

$$\leq |u(t, x_i) - U_i^k| + Ch^{\frac{1}{2}} + |u(t, x_j) - U_j^k|, \quad (5.61)$$

was aufgrund der gleichmäßigen Konvergenz von U ebenfalls gleichmäßig gegen Null konvergiert.

Fall 2: $0 < n < 1$

Betrachten wir die Menge, auf der u größer als δ ist:

$$S_\delta := \{(x, t) \in \Omega_T | u(x, t) \geq \delta\} \quad (5.62)$$

Wähle dabei $\delta > 0$ so, dass für gegebenes $\varepsilon > 0$ gilt, dass $\mathcal{M}(s) < \varepsilon$ falls $|s| < 2\delta$. Dann folgt wie oben

$$|\mathcal{M}(u(x, t)) - M(U_i^k, u_j^k)| \leq \varepsilon \quad \text{auf } S_\delta. \quad (5.63)$$

Für genügend kleine h, τ, σ gilt aber, dass $U \geq -\delta$ und daher

$$|\mathcal{M}(u(x, t)) - M(U_i^k, u_j^k)| \leq \varepsilon + \mathcal{M}(\sigma) \quad \text{auf } \Omega_T \setminus S_\delta. \quad (5.64)$$

Damit ist die gleichmäßige Konvergenz von M bewiesen. Nun betrachten wir die Integrale für einen Zeitschritt k , wobei wir wie oben zwischen S_δ und $\Omega \setminus S_\delta$ unterscheiden. Dazu sei

$$\mathcal{I}_\delta := \{i \in \mathcal{I} | T_i \subset S_\delta\}, \quad \mathcal{I}'_\delta := \{i \in \mathcal{I} | T_i \cap S_\delta \neq \emptyset\} \\ \text{und } \bar{\mathcal{I}}_\delta := \{i \in \mathcal{I} | T_i \not\subset S_\delta\}. \quad (5.65)$$

Aufgrund der gleichmäßigen Konvergenz ist U auf $\Omega \setminus S_\delta$ (und, da stückweise konstant, auch auf Elementen T_i mit $i \in \bar{\mathcal{I}}_\delta$, die nur teilweise in $\Omega \setminus S_\delta$ liegen) für genügend kleine h, τ, σ zumindest kleiner als $\frac{3}{2}\delta$. Wegen der diskreten Hölderstetigkeit (vgl. Satz 5.2) ist U dann auch auf Nachbarelementen T_j mit $j \in \mathcal{N}(i), i \in \bar{\mathcal{I}}_\delta$ noch kleiner als 2δ . Daher können wir mit der Energiegleichung 3.2 abschätzen:

$$\sum_{i \in \bar{\mathcal{I}}_\delta} \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} M(U_i^{k+1}, U_j^{k+1}) |e_{ij}| P_i^{k+1} \frac{\Phi_j^{k+1} - \Phi_i^{k+1}}{d_{ij}} \\ \leq \max_{U < 2\delta} \left(\sqrt{M(U)} \right) \left(\sum_{e_{ij} \in \mathcal{E}} \frac{|e_{ij}|}{d_{ij}} M(U_i, U_j) (P_j - P_i)^2 \right) \|\Phi\|_{1,2} \leq C(2\delta)^{\frac{n}{2}}, \quad (5.66)$$

wobei n wie in (2.5) definiert der Wachstumsexponent von \mathcal{M} ist. Damit konvergiert dieser Term auf der Menge $[u = 0]$ gegen Null.

Schließlich muss noch die Menge S_δ betrachtet werden. Betrachtet man die Energiegleichung auf den Testvolumina T_i mit $i \in \mathcal{I}'_\delta$ die ganz oder teilweise in S_δ liegen, und bringt $(\frac{\delta}{2})^n \leq M(U)$ auf die andere Seite, so ergibt sich

$$\sum_{i \in \mathcal{I}'_\delta} \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} \frac{|e_{ij}|}{d_{ij}} (P_j - P_i)^2 \leq C \left(\frac{2}{\delta} \right)^n. \quad (5.67)$$

Damit erhalten wir wie in Abschnitt 3.3 für U nun auch für P zumindest auf der Menge S_δ ein Kompaktheitsresultat im Raum und daraus die H^1 -Eigenschaft für p . Dann schätzen wir folgendermaßen ab:

$$\begin{aligned} & \left| - \sum_{i \in \mathcal{I}} \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} M(U_i^{k+1}, U_j^{k+1}) |e_{ij}| P_i^{k+1} \frac{\Phi_j^{k+1} - \Phi_i^{k+1}}{d_{ij}} - \int_{[u>0]} \mathcal{M}(u) \nabla p \cdot \nabla \varphi \right| \\ & \leq \left| \sum_{e_{ij} \in \mathcal{E}} \frac{P_j^{k+1} - P_i^{k+1}}{d_{ij}} \frac{\Phi_j^{k+1} - \Phi_i^{k+1}}{d_{ij}} \int_{T_i \cup T_j} |M(U_i^{k+1}, U_j^{k+1}) - \mathcal{M}(u(t, x))| dx \right| \\ & + C(2\delta)^{\frac{n}{2}} + \sup_{s < \max u} |\mathcal{M}(s)| \left| \sum_{i \in \mathcal{I}_\delta} \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} |e_{ij}| P_i^{k+1} \frac{\Phi_j^{k+1} - \Phi_i^{k+1}}{d_{ij}} - \int_{T_i} \nabla p \cdot \nabla \varphi \right| \quad (5.68) \end{aligned}$$

Der erste Term konvergiert aufgrund der gleichmäßigen Konvergenz von M . Den zweiten Term kontrollieren wir durch die Wahl von δ , und mit dem dritten Term verfahren wir wie beim zweiten Teil der Druckgleichung 5.10.

□

Damit ist das gewünschte Resultat bewiesen.

Korollar 5.12 (Konvergenz) Sei $\{U\}, \{P\}$ eine Familie von Lösungen des Finite-Volumen-Schemas 2.4 in einer Raumdimension. Dann konvergiert eine Teilfolge von U für $h, \tau, \sigma \rightarrow 0$ in L^2 und gleichmäßig sowie von P schwach in L^2 gegen eine schwache Lösung u, p des kontinuierlichen Problems in Sinn von 5.7.

6 Ein einfaches Operatorsplitting

Im Folgenden werden wir das reduzierte Modell schrittweise wieder bis zur vollständigen Surfactant-Gleichung ausbauen. Dabei beginnen wir damit, zunächst einen einfachen Transportterm zur Dünne-Filme-Gleichung hinzuzufügen.

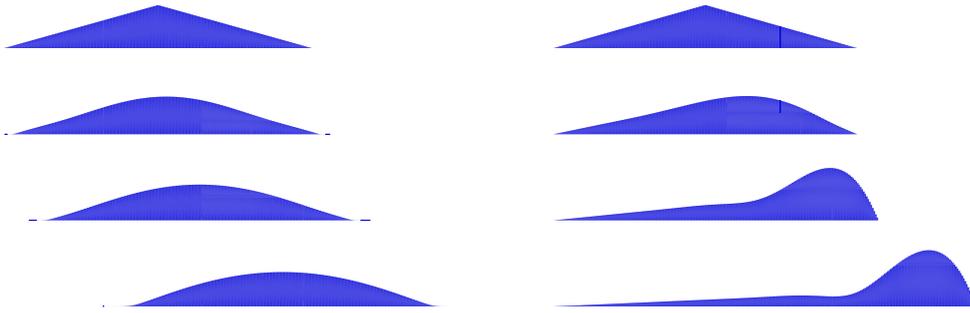


Abbildung 6.1: Ein dünner Film mit linearem (links) und Burgers-Transport (rechts)
 $t_0 = 0; t_1 = 0,1; t_2 = 0,5$ und $t_3 = 1,5$
 Numerische Simulation

Problem 6.1 (Dünne Filme mit Transport) Wir ergänzen die Gleichung der dünnen Filme um einen Transportterm

$$\partial_t u + \operatorname{div}(\mathcal{M}(u)\nabla\Delta u) + \operatorname{div}f(u) = 0, \quad (6.1)$$

welcher von linearen $f(u) = bu$ oder Burgers-Typ $f(u) = bu^2$ mit $b = \operatorname{const} \in \mathbb{R}^d$ ist.

Dabei ist der lineare Fall interessant, weil dafür eine Ähnlichkeitslösung (vgl. Kapitel 6.3) bekannt ist. Der nichtlineare Fall mit einem Konvektionsterm vom Burgers-Typ (vgl. Abbildung 6.1 rechts) entwickelt aufsteilende Fronten und ist näher am in der Surfactant-Gleichung 1.1 vorkommenden Transportterm.

In Abbildung 6.1 sieht man die Entwicklung derselben Ausgangskonfiguration mit den verschiedenen Formen des Transports, die wir hier betrachten. Dabei rechnen wir auf $\Omega = (-1; 1)$. Die Mobilität hat hier die Form $\mathcal{M}(u) = \frac{1}{3}u^3$ und der Konvektionsterm $f(u) = 0,27u$ bzw. $f(u) = 9u^2$. Die Abbildung wurde mit dem Verfahren berechnet, das wir in diesem Abschnitt vorstellen.

Auf der linken Seite beobachtet man, wie sich das erwartete Profil einstellt, während der Film gleichzeitig mit gleichmäßiger Geschwindigkeit nach rechts wandert. Auf der rechten Seite beginnt sich die Front zunächst aufzusteilen, um dann nach einer Wartezeit mit der Bewegung nach rechts zu beginnen. An der Front stellt sich ein Kontaktwinkel ein, der zwischen dem von der Dünne-Filme-Gleichung favorisierten Winkel (siehe links) und der senkrechten Front der reinen Burgers-Konvektion liegt. Die Abbildungen wurden mit dem Verfahren berechnet, das in diesem Abschnitt vorgestellt wird.

6.1 Der Splitting-Ansatz

Dabei verwenden wir einen sogenannten Operatorsplitting-Ansatz. Das bedeutet hier, dass wir die Ortsableitungen in zwei Teile aufteilen, und diese nacheinander berechnen.

Wir führen also für jeden diskreten Zeitschritt U^k, U^{k+1} einen Zwischenschritt $U^{k+\frac{1}{2}}$ ein, und zerlegen die Zeitableitung folgendermaßen:

Schema 6.2 (Einfaches Operatorsplitting)

$$\frac{U^{k+\frac{1}{2}} - U^k}{\tau} = -\operatorname{div} f(U^k) \tag{6.2}$$

$$\frac{U^{k+1} - U^{k+\frac{1}{2}}}{\tau} = -\operatorname{div} (\mathcal{M}(U^{k+1}) \nabla \Delta U^{k+1}) \tag{6.3}$$

Addieren wir die beiden Gleichungen, ergibt sich eine semiimplizite Diskretisierung der Zeitableitung des Problems 6.1.

$$\frac{U^{k+1} - U^k}{\tau} + \operatorname{div} (\mathcal{M}(U^{k+1}) \nabla \Delta U^{k+1}) + \operatorname{div} f(U^k) = 0 \tag{6.4}$$

Also können wir den Transportterm explizit, den Term höherer Ordnung jedoch implizit diskretisieren. Dies ist von Vorteil, weil einerseits eine explizite Diskretisierung der vierten Ableitungen Zeitschrittweiten $\tau \leq Ch^4$ erfordern würde, andererseits jedoch ein implizites Lösen des upwind-Schemas für den Transport (siehe unten) zu harten nichtlinearen Problemen in jedem Zeitschritt führt. Die Splitting-Strategie kann den Zeitaufwand der numerischen Rechnung im Vergleich zu diesen beiden problematischen Ansätzen wesentlich reduzieren. Außerdem können für die beiden Terme unterschiedliche, jeweils speziell angepasste Diskretisierungsverfahren verwendet werden.

Wir wenden uns nun im Detail den Diskretisierungen der beiden Schritte zu. Zum zweiten Schritt muss dabei nicht viel gesagt werden, da er exakt der bisher betrachteten Dünne-Filme-Gleichung entspricht. Wir betrachten also im nächsten Abschnitt den Transportterm.

6.2 Diskretisierung des Transporttermes

Für den Transportterm des Operatorsplitting stehen zahlreiche Standardmethoden zur Lösung von Transportgleichungen zur Verfügung, wie sie etwa in [K 97] beschrieben werden. Hier wurden erste Versuche mit dem Engquist-Osher-Verfahren aus [EO 81] durchgeführt.

Dabei wird die Gleichung zunächst auf einem Testvolumen $T \subset \Omega$ in Erhaltungsform geschrieben

$$\int_T \partial_t u = - \int_T \operatorname{div} f(u) = - \int_{\partial T} f(u) \cdot \nu. \tag{6.5}$$

Nun betrachten wir eine Zerlegung \mathcal{T} des Gebietes Ω wie in Abschnitt 2.2. Dann können wir Gleichung (6.5) auf allen Testvolumina T_i betrachten, und das Integral über den Rand von T_i in einzelne Randkanten zerlegen.

Nehmen wir nun wieder stückweise konstante Funktionen U zur Approximation der Lösung, so ergibt sich zunächst die Schwierigkeit, dass wir U auf Kanten zwischen konstanten Bereichen auswerten müssen.

Daher ersetzen wir die Funktion $f(\cdot)$ durch einen numerischen Fluss $G_{ij}(\cdot, \cdot)$, in den die Funktionswerte auf beiden Seiten eingehen, und der die folgenden Bedingungen erfüllt:

Definition 6.3 (Numerischer Fluss) Eine Funktion $G_{ij} : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ heißt numerischer Fluss zu $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^d$ und einer Diskretisierung \mathcal{T} , wenn für alle Kanten $e_{ij} \in \mathcal{E}$ gilt:

- G_{ij} ist lokal Lipschitz-stetig in beiden Argumenten,
- G_{ij} ist antisymmetrisch, d.h. lokal massenerhaltend, und
- $G(U, U) = \nu_{ij} \cdot f(U)$.

Dann können wir die Transportgleichung folgendermaßen diskretisieren:

Schema 6.4 (Finite-Volumen-Verfahren)

$$\frac{U_i^{k+1} - U_i^k}{\tau} = -\frac{1}{|T_i|} \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} G_{ij}(U_i^k, U_j^k) \quad (6.6)$$

Wir verwenden hier einen Numerischen Fluss nach Engquist und Osher [EO 81]. Dabei sollen Funktionswerte immer entgegen der Richtung des Transportes ausgewertet werden.

Definition 6.5 (Engquist-Osher-Fluss) Eine differenzierbare Funktion $g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ zerlegen wir in einen Summe aus einer Funktion positiver und eine negativer Steigung

$$g^+(U) := g(0) + \int_0^U \max\{g'(s), 0\} ds \quad \text{und} \quad g^-(V) := \int_0^V \min\{g'(s), 0\} ds . \quad (6.7)$$

Dann kann man den Engquist-Osher-Fluss schreiben als

$$G_{ij}(U, V) = |e_{ij}| \left((\nu_{ij} \cdot f(U))^+ + (\nu_{ij} \cdot f(V))^- \right) . \quad (6.8)$$

Man stellt allerdings schnell fest, dass ein solches Finite-Volumen-Verfahren erster Ordnung einen hohen Anteil numerischer Diffusion zur Folge hat. Daher untersuchen wir nun Verfahren höherer Approximationsordnung.

Wir betrachten dazu ein Verfahren, das als lineare Rekonstruktion bezeichnet wird. Dabei wird aus den konstanten Werten der FV-Funktion auf benachbarten Zellen eine lokal affine (aber über Zellränder i.d.R. nicht stetige!) Funktion rekonstruiert. Der Wert dieser Funktion in der Mitte einer Randkante wird dann als Funktionswert im numerischen Fluss verwendet.

Im Detail gehen wir folgendermaßen vor: Zu einem Testvolumen T_i und zwei nebeneinanderliegenden Nachbarelementen T_j, T_k (wir schreiben $(j, k) \in \mathcal{N}_2(i)$) betrachten wir die affine Funktion $L_{ijk}(x) := m_{ijk} \cdot x + b_{ijk}$, die durch die Punkte x_i, x_j, x_k und die dazugehörigen Funktionswerte U_i, U_j, U_k eindeutig bestimmt wird, vgl. Abbildung 6.2.

Die Punkte x_i, x_j, x_k können dabei nicht auf einer Geraden liegen, da andernfalls $\nu_{ij} = -\nu_{ik}$ gälte. Dann wären die beiden benachbarten Kanten parallel, und kämen, da sie einen gemeinsamen Endpunkt haben, aufeinander zu liegen. Dies wäre aber keine erlaubte FV-Zelle.

Nun werten wir diese lineare Funktion am Mittelpunkt der Kante e_{ij} , den wir mit x_{ij} bezeichnen wollen, aus und setzen diesen Wert in den numerischen Fluss ein.

In dieser Form neigt das Schema jedoch dazu, an Schockfronten Oszillationen zu erzeugen. Um diese zu vermeiden, verwenden wir einen sogemannten min-mod-Limiter.

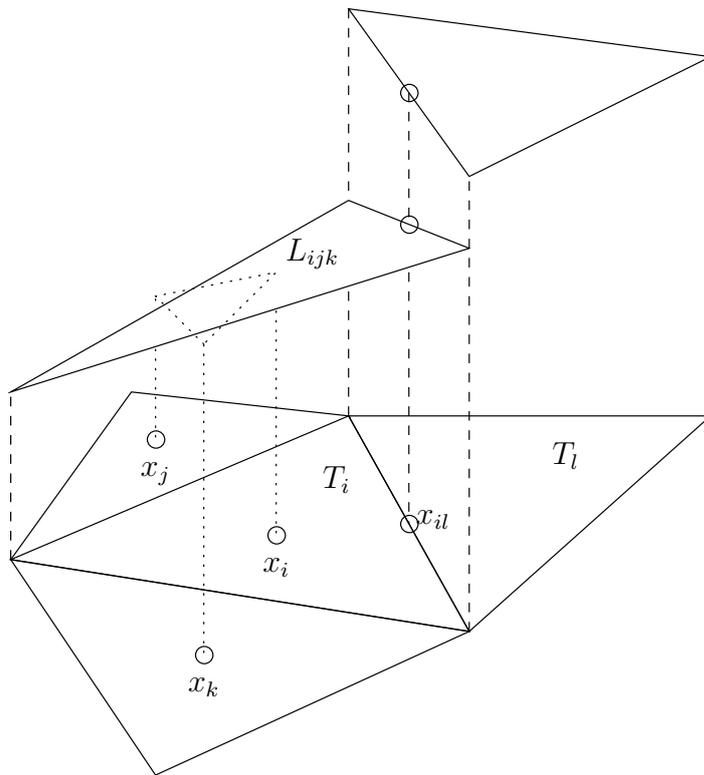


Abbildung 6.2: Lineare Rekonstruktion

Dabei wählen wir unter allen möglichen linearen Rekonstruktionen auf einer Zelle diejenige mit der geringsten Steigung aus. Falls auf einer Zelle ein lokales Extremum vorliegt, verwenden wir anstelle einer linearen Rekonstruktion wieder den konstanten Wert auf dem betrachteten Testvolumen.

Schema 6.6 (Lineare Rekonstruktion mit min-mod-Limiter) *Zu drei benachbarten Finite-Volumen-Zellen $T_i, T_j, T_k \in \mathcal{T}$ mit $i \in \mathcal{I}, (j, k) \in \mathcal{N}_2(i)$ sei*

$$L_{ijk}(x) = m_{ijk} \cdot x + b_{ijk} \quad (6.9)$$

die eindeutig definierte affine Funktion mit

$$L_{ijk}(x_\alpha) = U_\alpha \quad \forall \alpha \in \{i, j, k\}. \quad (6.10)$$

Sei $m_i := m_{ij_0k_0}$ so, dass

$$|m_{ij_0k_0}| < |m_{ijk}| \quad \forall (j, k) \in \mathcal{N}_2(i), j \neq j_0, k \neq k_0 \quad (6.11)$$

und

$$\sigma_i := \begin{cases} 0 & : \text{ falls } \forall j \in \mathcal{N}(i) : U_j > U_i \quad \text{oder } \forall j \in \mathcal{N}(i) : U_j < U_i, \\ 1 & : \text{ sonst.} \end{cases} \quad (6.12)$$

Dann definieren wir

$$U_{ij} = U_i + \sigma_i m_i \cdot (x_{ij} - x_i) \quad (6.13)$$

und

$$\frac{U_i^{k+1} - U_i^k}{\tau} = -\frac{1}{|T_i|} \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} G_{ij}(U_{ij}^k, U_{ji}^k). \quad (6.14)$$

In diesem Schema können verschiedene numerische Flüsse verwendet werden. Wir setzen hier den Engquist-Osher-Fluss 6.5 ein.

6.3 Eine Lösung mit linearem Transport

In diesem Abschnitt betrachten wir für dieses Splitting-Verfahren numerische Experimente zur Konvergenz. Dazu untersuchen wir Problem 6.1 mit der Mobilität $\mathcal{M}(u) = u$ und einem linearen Transportterm $f(u) = bu$.

Dann können wir eine bekannte Lösung der Dünne-Filme-Gleichung (wie sie auch in [GR 00] verwendet wurde) auf den Fall mit Transport erweitern.

Satz 6.7 (Lösung mit linearem Transport) *Sei u eine Lösung von Problem 2.1. Dann ist v definiert durch $v(x, t) := u(x - bt, t)$ eine Lösung des Problems 6.1 mit linearem Transport $f(u) = bu$.*

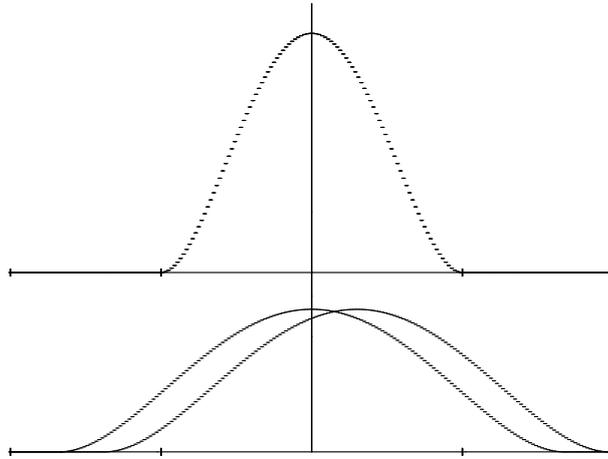


Abbildung 6.3: Ähnlichkeitslösung mit linearem Transport, numerische Simulation

Beweis Aufgrund der Kettenregel ist $\nabla v = \nabla u$ und $\partial_t v = -b \cdot \nabla u + \partial_t u$. Setzen wir nun v in Problem 6.1 ein, so erhalten wir

$$\partial_t v + \operatorname{div}(\mathcal{M}(v)\nabla\Delta v) + \operatorname{div}(bv) \quad (6.15)$$

$$= -b \cdot \nabla u + \partial_t u + \operatorname{div}(\mathcal{M}(u)\nabla\Delta u) + \operatorname{div}(bu) \quad (6.16)$$

$$= \partial_t u + \operatorname{div}(\mathcal{M}(u)\nabla\Delta u) \quad (6.17)$$

$$= 0, \quad (6.18)$$

$$(6.19)$$

da u die Dünne-Filme-Gleichung 2.1 löst.

□

Abbildung 6.3 zeigt, wie eine Lösung der Dünne-Filme-Gleichung 2.1 zu einer Lösung der Gleichung mit hinzugefügtem Transportterm 6.1 korrespondiert. Die Darstellung zeigt auch, wie die numerische Lösung aus stückweise konstanten Funktionen zusammengesetzt ist.

Nun betrachten wir die folgende selbstähnliche Lösung der Dünne-Filme-Gleichung nach [SH 88] in einer Raumdimension:

$$u(x, t) = \frac{1}{120(t + \tau)^{\frac{1}{5}}} \left(\omega^2 - \frac{x^2}{(t + \tau)^{\frac{2}{5}}} \right)_+^2 \quad (6.20)$$

Für unsere Untersuchungen wählen wir $\omega = 2$, $\tau = 4^{-5}$ und $b = 100$ sowie für das Rechengebiet $\Omega = (-1; 1)$ und $T = 0,012$. Die Zeitdiskretisierung wird so gewählt, dass $\tau \sim h$.

Den Fehler messen wir in der L^∞ -Norm in der Einheit 10^{-4} . Wir messen den Fehler $e_t := \|u(t, \cdot) - U(t, \cdot)\|_{\infty, \Omega}$ zur Zeit $t = 0,008$ und als Maximum $\max e := \|u - U\|_{\infty, \Omega_T}$

Rechnung ohne Transport					Rechnung mit Transport				
n	100	200	400	800	n	100	200	400	800
e_t	54,1	26,6	13,1	6,57	e_t	70,3	34,3	17,0	8,48
c		1,02	1,02	1,01	c		1,03	1,01	1,01
$\max e$	165	82,5	41,1	20,5	$\max e$	165	82,5	41,1	20,5
c		1,01	1,00	1,00	c		1,01	1,00	1,00

Tabelle 6.1: Fehler und Konvergenzraten bei stückweise konstanter Lösung

Rechnung ohne Transport					Rechnung mit Transport				
n	200	400	800	1600	n	200	400	800	1600
e_t	0,99	0,29	0,085	0,044	e_t	3,10	0,54	0,13	0,038
c		1,74	1,74	1,00	c		2,50	2,01	1,81
$\max e$	3,55	1,06	0,27	0,059	$\max e$	10,2	2,21	0,31	0,075
c		1,74	1,97	2,20	c		2,21	2,82	2,05

Tabelle 6.2: Fehler und Konvergenzraten bei linearer Interpolation

über das komplette Zeitintervall. Dabei stellen wir fest, dass der größte Fehler in den ersten Zeitschritten auftritt. Außerdem berechnen wir daraus jeweils einen experimentellen Konvergenzexponenten c :

$$c = \frac{\ln(e_{h_0}/e_{h_1})}{\ln(h_0/h_1)} \quad (6.21)$$

Wir stellen in Tabelle 6.1 fest, dass der maximale Fehler (der, wie erwähnt, zu Beginn der Rechnung auftritt) in beiden Rechnungen fast genau gleichgroß ist. Zu späteren Zeiten ist der Fehler mit Transport etwas größer als in der reinen Dünne-Filme-Rechnung.

Wir beobachten eine Konvergenz erster Ordnung in h . Eine bessere Konvergenzrate ist aufgrund der stückweise konstanten Approximation nicht zu erwarten.

Daher glätten wir diese Lösung nun durch eine stückweise lineare Interpolation zwischen den Mittelpunkten der Diskretisierungsintervalle, und berechnen deren Fehler, um zu sehen, wieviel durch die schlechte Approximationsordnung der stückweise konstanten Funktionen verloren geht.

Dabei zeigt Tabelle 6.2, dass das Finite-Volumen-Verfahren eine ähnliche Konvergenzordnung wie das vergleichbare Finite-Elemente-Verfahren aus [GR 00] erreicht. Auch nach dem Hinzufügen eines Transportterms (und des dazu verwendeten Operatorsplittings) verschlechtert sich diese nicht wesentlich.

7 Ein Verfahren für die Surfactant-Gleichung

Nachdem wir die Effizienz des Operatorsplitting-Ansatzes zur Trennung von konvektiven und diffusiven Termen beobachtet haben, werden wir uns mit diesem Ansatz nun dem

vollen Surfactant-Problem 1.1 zuwenden.

7.1 Operatorsplitting in der Zeit

Zunächst betrachten wir das Problem in der folgenden Form:

Problem 7.1 (Dünnere Flüssigkeitsfilm mit Surfactant)

$$\partial_t u + \frac{1}{3} \mathcal{S} \operatorname{div} (u^3 \nabla \Delta u) - \frac{1}{2} \operatorname{div} (u^2 \nabla w) = 0 \quad \text{in } \Omega \quad (7.1)$$

$$v = \frac{1}{2} \mathcal{S} (u^2 \nabla \Delta u) - (u \nabla w) \quad (7.2)$$

$$\partial_t w + \operatorname{div} (vw) - \mathcal{D} \Delta w = 0 \quad \text{in } \Omega \quad (7.3)$$

$$\partial_\nu u = \partial_\nu \Delta u = \partial_\nu w = 0 \quad \text{auf } \partial \Omega \quad (7.4)$$

$$u(0, \cdot) = u_0 \quad \text{in } \Omega \quad (7.5)$$

$$w(0, \cdot) = w_0 \quad \text{in } \Omega \quad (7.6)$$

Dabei haben wir die Geschwindigkeit (vgl. Formel (1.14)) aus der Surfactant-Gleichung isoliert. Damit stellt sich das Problem als System zweier gekoppelter Konvektions-Diffusions-Gleichungen und einer explizit zu berechnenden Geschwindigkeit dar.

Auf dieser Grundlage führen wir nun in den beiden Gleichungen (7.1) und (7.3) ein Operatorsplitting nach der Art von Kapitel 6.1 durch. Damit ergibt sich das folgende Schema:

Schema 7.2 (Operatorsplitting für das Surfactant-Problem)

$$\frac{U^{k+\frac{1}{2}} - U^k}{\tau} = \frac{1}{2} \operatorname{div} \left((U^k)^2 \nabla W^k \right) \quad (7.7)$$

$$\frac{U^{k+1} - U^{k+\frac{1}{2}}}{\tau} = -\frac{1}{3} \mathcal{S} \operatorname{div} \left((U^{k+1})^3 \nabla \Delta U^{k+1} \right) \quad (7.8)$$

$$V^{k+1} = \frac{1}{2} \mathcal{S} (U^{k+1})^2 \nabla \Delta U^{k+1} - U^{k+1} \nabla W^k \quad (7.9)$$

$$\frac{W^{k+\frac{1}{2}} - W^k}{\tau} = -\operatorname{div} (V^{k+1} W^k) \quad (7.10)$$

$$\frac{W^{k+1} - W^{k+\frac{1}{2}}}{\tau} = \mathcal{D} \Delta W^{k+1} \quad (7.11)$$

Dabei diskretisieren wir die konvektiven Terme (7.7) und (7.10) explizit, während alle Terme mit höheren Ableitungen ((7.8) und (7.11)) zur besseren Kontrolle der Zeitschrittweise implizit diskretisiert werden. Die Geschwindigkeit (7.9) wird einfach aus den zu diesem Zeitpunkt bekannten Werten berechnet.

7.2 Ortsdiskretisierung

Nun betrachten wir die einzelnen Schritte des Splittings im Detail und untersuchen, wie jeweils die Ortsdiskretisierung vorzunehmen ist.

Dabei sind die Verfahren für die einzelnen Schritte alle schon weiter oben beschrieben: Für die konvektiven Terme (7.7) und (7.10) verwenden wir das Engquist-Osher-Verfahren mit linearer Rekonstruktion und min-mod-Limiter aus Abschnitt 6.2. Der Dünne-Filme-Term (7.8) wird mit dem in Abschnitt 2.2 vorgestellten Verfahren behandelt. Die Geschwindigkeit (7.9) kann explizit berechnet werden, und für die Oberflächendiffusion (7.11) verwenden wir ein FV-Verfahren, in dem der Laplace-Operator wie in der Druckgleichung (2.10) des Dünne-Filme-Problems behandelt wird.

Wir betrachten zwei verschiedene Diskretisierungen. Der erste Vorschlag diskretisiert alle Terme auf einem einheitlichen Gitter, wie es in Abschnitt 2.2 definiert wurde.

Die zweite Variante arbeitet mit dualen Gittern für die Diskretisierung der Filmhöhe und der Surfactant-Konzentration. Diese Methode wurde in einer Raumdimension implementiert und wird daher auch nur im Eindimensionalen beschrieben. Die dargestellten Beispielrechnungen wurden alle mit dieser Methode durchgeführt.

7.3 Die einzelnen Splitting-Schritte

Wir betrachten zuerst eine Diskretisierung, die nur *ein* Finite-Volumen-Gitter verwendet. Sei dazu \mathcal{T} eine Zerlegung des Gebietes Ω in Testvolumina, die die Eigenschaften aus Abschnitt 2.2 besitzt. Wir diskretisieren U und W als stückweise konstante Funktionen auf Gitterzellen T_i . Die Geschwindigkeit V benötigen wir nur in der Orthogonalkomponente auf Kanten e_{ij} der Triangulierung, dieser Wert soll mit V_{ij} bezeichnet sein. Betrachten wir jetzt die einzelnen Schritte des Splittings:

Marangoni-Fluss

In unserem Splitting werden Marangoni-Kräfte durch den folgenden Term beschrieben:

$$\frac{U^{k+\frac{1}{2}} - U^k}{\tau} = \frac{1}{2} \operatorname{div} \left((U^k)^2 \nabla W^k \right) \quad (7.12)$$

Diesen diskretisieren wir ähnlich wie den Transportterm in Abschnitt 6.2 durch

$$\frac{U^{k+\frac{1}{2}} - U^k}{\tau} = \frac{1}{2} \frac{1}{|T_i|} \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} G_{ij}(U_i^k, U_j^k), \quad (7.13)$$

$$\text{wobei} \quad f_{ij}(U) = U^2 \frac{W_j^k - W_i^k}{d_{ij}} \nu_{ij}. \quad (7.14)$$

Dabei wird $\nabla W \cdot \nu$ durch einen Differenzenquotienten über die Kante approximiert. Dessen Vorzeichen ist wesentlich für die Auswertung des Engquist-Osher-Flusses.

Kapillar-Fluss

Zur Diskretisierung der Dünne-Filme-Gleichung ist nicht viel zu sagen, da sie vollständig wie in Abschnitt 2.2 erfolgt. Der Schritt

$$\frac{U^{k+1} - U^{k+\frac{1}{2}}}{\tau} = -\frac{1}{3} \mathcal{S} \operatorname{div} \left((U^{k+1})^3 \nabla \Delta U^{k+1} \right) \quad (7.15)$$

wird diskretisiert durch

$$\frac{U_i^{k+1} - U_i^k}{\tau} = \frac{1}{|T_i|} \sum_{j=i-1, i+1} M(U_i^{k+1}, U_j^{k+1}) \frac{P_j^{k+1} - P_i^{k+1}}{d_{ij}} \quad (7.16)$$

$$P_i^{k+1} = -\frac{1}{|T_i|} \sum_{j=i-1, i+1} \frac{U_j^{k+1} - U_i^{k+1}}{d_{ij}} \quad (7.17)$$

$$\text{für die Mobilität } \mathcal{M}(u) = \frac{1}{3} \mathcal{S} u^3. \quad (7.18)$$

Geschwindigkeit

Die Geschwindigkeit V wird explizit aus den bisher bekannten Werten berechnet.

$$V^{k+1} = \frac{1}{2} \mathcal{S} (U^{k+1})^2 \nabla \Delta U^{k+1} - U^{k+1} \nabla W^k \quad (7.19)$$

Dabei werden alle Ableitungen durch die passenden Differenzenquotienten ersetzt. Um U auf Kanten auszuwerten, wird über die beiden benachbarten Zellen gemittelt.

$$U_{ij} := \frac{|T_i| U_i + |T_j| U_j}{|T_i| + |T_j|} \quad (7.20)$$

$$V_{ij}^{k+1} = \frac{1}{2} \mathcal{S} (U_{ij}^{k+1})^2 \frac{-P_j^{k+1} - (-P_i^{k+1})}{d_{ij}} - U_{ij}^{k+1} \frac{W_j^k - W_i^k}{d_{ij}} \quad (7.21)$$

Surfactant-Transport

Dieser Term beschreibt den Transport des Surfactant auf der Oberfläche des Filmes, wenn dieser mit der Bewegung der Flüssigkeit (mit der Geschwindigkeit V) mitgezogen wird.

$$\frac{W^{k+\frac{1}{2}} - W^k}{\tau} = -\operatorname{div}(V^{k+1} W^k) \quad (7.22)$$

Er wird ebenfalls mit dem Verfahren aus Abschnitt 6.2 behandelt. Dabei ergibt sich ein Schritt der Gestalt

$$\frac{W^{k+\frac{1}{2}} - W^k}{\tau} = -\frac{1}{|T_i|} \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} G_{ij}(W_i^k, W_j^k) \quad (7.23)$$

$$\text{mit } f_{ij}(U) = U V_{ij}^{k+1} \nu_{ij}. \quad (7.24)$$

Wiederum ist insbesondere das Vorzeichen der Geschwindigkeit in Normalenrichtung für die Aufteilung des Flusses nach Engquist-Osher von Bedeutung.

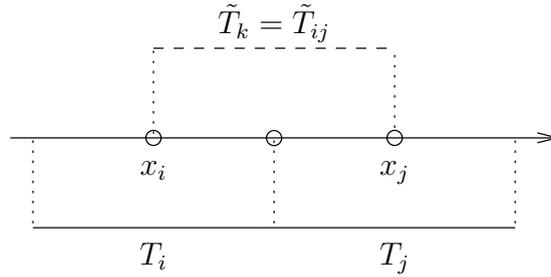


Abbildung 7.1: Duale Gitter in 1D

Oberflächendiffusion

Die Oberflächendiffusion wird wie der Laplace-Operator in der Druckgleichung des Dünne-Filme-Problems behandelt.

$$\frac{W^{k+1} - W^{k+\frac{1}{2}}}{\tau} = \mathcal{D}\Delta W^{k+1} \quad (7.25)$$

$$\frac{W^{k+1} - W^{k+\frac{1}{2}}}{\tau} = \frac{1}{|T_i|} \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} \frac{W_j^{k+1} - W_i^{k+1}}{d_{ij}} \quad (7.26)$$

Zur Lösbarkeit ist zu bemerken, dass sich eine Matrix der Form L_h wie in (2.14) ergibt, die symmetrisch und positiv definit ist. Diese kann mit Standardmethoden wie etwa Gradientenabstiegsverfahren invertiert werden. Im Eindimensionalen hat die Matrix Tridiagonalgestalt und die Inverse kann effizient mit der Gauß-Elimination berechnet werden.

7.4 Diskretisierung mit dualen Gittern

Alternativ betrachten wir nun eine Methode, Film und Surfactant auf dualen Gittern darzustellen. Dazu ziehen wir uns auf den Fall einer Raumdimension zurück, für den das Verfahren bisher implementiert ist. Dort sei \mathcal{T} eine Triangulierung wie in Abschnitt 2.2, und $\tilde{\mathcal{T}}$ eine dazu duale Triangulierung, bei der die Mittelpunkte zweier benachbarter Zellen x_i und x_j die Ränder einer dualen Zelle $\tilde{T}_k = \tilde{T}_{ij}$ darstellen (siehe Abbildung 7.1). Dieselbe Notation verwenden wir auch für eine Zelle $T_i = T_{jk}$ des primären Gitters, die zwischen den beiden Zellmittelpunkten \tilde{x}_j und \tilde{x}_k des dualen Gitters $\tilde{\mathcal{T}}$ liegt. Die Gitterzellen seien jeweils von links fortlaufend nummeriert, so dass z.B. T_4 der linke Nachbar von T_5 ist.

Um die Notation übersichtlich zu halten, werden wir stückweise konstante Funktionen des dualen Gitters mit $\tilde{V}, \tilde{W} \dots$ bezeichnen. Wir approximieren die Filmhöhe durch eine Funktion U , die stückweise konstant auf dem primären Gitter \mathcal{T} ist, während Geschwindigkeit \tilde{V} und Surfactantkonzentration \tilde{W} diskrete Funktionen auf dem dualen Gitter $\tilde{\mathcal{T}}$ sind.

Um die Methoden auf den dualen Gittern ins Zweidimensionale zu übertragen, liegt es nahe, ein Gitter als Triangulierung des Gebietes, und das duale Gitter dazu als Voronoi-Diagramm zu konstruieren. Die Kantenschnittpunkte des Voronoi-Diagramms sind dann

geeignete Mittelpunkte x_i für die Dreiecke T_i der Triangulierung, nämlich die Schnittpunkte der Mittelsenkrechten. Dabei müssen allerdings noch einige Änderungen an den folgenden Schritten vorgenommen werden, da (im Gegensatz zum Eindimensionalen) stets zwei duale Zellen auf einer Kante liegen.

Nun betrachten wir die Splitting-Schritte noch einmal im Detail.

Marangoni-Fluss

In der alternativen Methode diskretisieren wir die Marangoni-Konvektion

$$\frac{U^{k+\frac{1}{2}} - U^k}{\tau} = \frac{1}{2} \operatorname{div} \left((U^k)^2 \nabla W^k \right) \quad (7.27)$$

ähnlich wie oben durch

$$\frac{U^{k+\frac{1}{2}} - U^k}{\tau} = \frac{1}{2} \frac{1}{|T_i|} \sum_{j=-1,+1} G_{i,i+j}(U_{i,i+j}^k, U_{i+j,i}^k), \quad (7.28)$$

$$\text{wobei} \quad f_{i,i+j}(U) = U^2 \frac{\tilde{W}_{i+j,i+2j}^k - \tilde{W}_{i-j,i}^k}{\tilde{x}_{i+j,i+2j} - \tilde{x}_{i-j,i}} \nu_{ij}. \quad (7.29)$$

Dabei wird $\nabla W \cdot \nu$ durch einen zentralen Differenzenquotienten über zwei Gitterzellen approximiert. Es ist zu beachten, dass $U_{i,i+j}$ einen Wert aus der linearen Rekonstruktion bezeichnet, während $\tilde{W}_{i,i+j}$ den (konstanten) Wert von \tilde{W} auf der dualen Zelle $\tilde{T}_{i,i+j}$ bezeichnet, die auf der Kante $e_{i,i+j}$ liegt.

Kapillar-Fluss

Die Diskretisierung der Dünne-Filme-Gleichung

$$\frac{U^{k+1} - U^{k+\frac{1}{2}}}{\tau} = -\frac{1}{3} \mathcal{S} \operatorname{div} \left((U^{k+1})^3 \nabla \Delta U^{k+1} \right) \quad (7.30)$$

erfolgt exakt wie oben:

$$\frac{U_i^{k+1} - U_i^k}{\tau} = \frac{1}{|T_i|} \sum_{j=i-1,i+1} M(U_i^{k+1}, U_j^{k+1}) \frac{P_j^{k+1} - P_i^{k+1}}{d_{ij}} \quad (7.31)$$

$$P_i^{k+1} = -\frac{1}{|T_i|} \sum_{j=i-1,i+1} \frac{U_j^{k+1} - U_i^{k+1}}{d_{ij}}, \quad (7.32)$$

$$\text{für die Mobilität} \quad \mathcal{M}(u) = \frac{1}{3} \mathcal{S} u^3. \quad (7.33)$$

Geschwindigkeit

Die Geschwindigkeit berechnet man explizit.

$$V^{k+1} = \frac{1}{2} \mathcal{S} (U^{k+1})^2 \nabla \Delta U^{k+1} - U^{k+1} \nabla W^k \quad (7.34)$$

Dabei werden alle Ableitungen durch die passenden Differenzenquotienten ersetzt. Um U , das stückweise konstant auf dem primären Gitter ist, auf dem dualen Gitter auszuwerten, wird jeweils über zwei benachbarte Zellen gemittelt.

$$\tilde{V}_i^{k+1} = \frac{1}{2} \mathcal{S} \left(\frac{U_{i,i+1}^{k+1} + U_{i-1,i}^{k+1}}{2} \right)^2 \frac{-P_{i,i+1}^{k+1} - (-P_{i-1,i}^{k+1})}{x_{i,i+1} - x_{i-1,i}} - \frac{U_{i,i+1}^{k+1} + U_{i-1,i}^{k+1}}{2} \frac{\tilde{W}_{i+1}^k - \tilde{W}_{i-1}^k}{\tilde{x}_{i+1} - \tilde{x}_{i-1}} \quad (7.35)$$

Surfactant-Transport

Der Transport des Surfactant mit der Geschwindigkeit des Filmes

$$\frac{W^{k+\frac{1}{2}} - W^k}{\tau} = -\text{div}(V^{k+1}W^k) \quad (7.36)$$

wird wieder mit dem Engquist-Osher Verfahren mit Rekonstruktion behandelt. Dabei ergibt sich

$$\frac{\tilde{W}^{k+\frac{1}{2}} - \tilde{W}^k}{\tau} = -\frac{1}{|T_i|} \sum_{j=-1,+1} G_{i,i+j}(\tilde{W}_{i,i+j}^k, \tilde{W}_{i+j,i}^k) \quad (7.37)$$

$$\text{mit } f_{i,i+j}(U) = U \frac{\tilde{V}_i^{k+1} + \tilde{V}_{i+j}^{k+1}}{2} \nu_{ij}. \quad (7.38)$$

Oberflächendiffusion

Die Oberflächendiffusion wird ebenfalls wie im vorherigen Abschnitt diskretisiert. Im Unterschied dazu befinden wir uns hier jedoch auf dem dualen Gitter.

$$\frac{\tilde{W}^{k+1} - \tilde{W}^{k+\frac{1}{2}}}{\tau} = \mathcal{D} \Delta \tilde{W}^{k+1} \quad (7.39)$$

$$\frac{\tilde{W}^{k+1} - \tilde{W}^{k+\frac{1}{2}}}{\tau} = \frac{1}{|T_i|} \sum_{j=i-1,i+1} \frac{\tilde{W}_j^{k+1} - \tilde{W}_i^{k+1}}{d_{ij}} \quad (7.40)$$

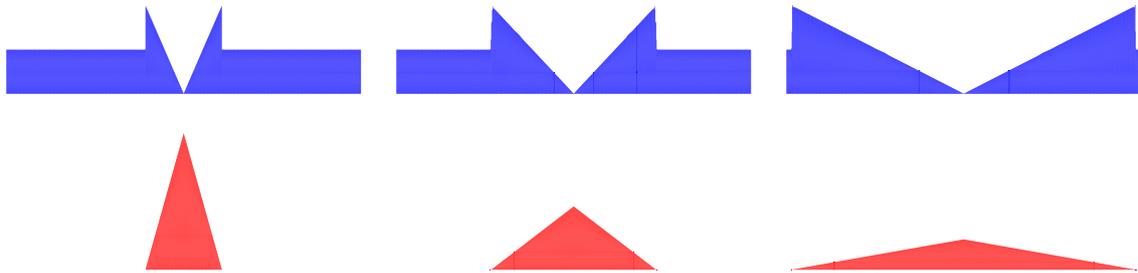


Abbildung 7.2: Ähnlichkeitslösung aus [JG 92] zu den Zeitschritten

$$t_0 = 0 + \tau; t_1 = 0,09 + \tau \text{ und } t_2 = 0,9 + \tau$$

Numerische Simulation

Filmhöhe u					Surfactant-Konzentration w				
n	100	200	400	800	n	100	200	400	800
e_t	111	83,3	51,4	37,9	e_t	9,53	1,84	0,818	0,407
c		0,41	0,70	0,44	c		2,37	1,17	1,01
$\max e$	160	119	72,6	52,1	$\max e$	23,4	11,8	5,89	2,94
c		0,43	0,71	0,48	c		0,99	1,00	1,00

Tabelle 7.1: Fehler und Konvergenzraten bzgl. der Lösung aus [JG 92]

7.5 Numerische Ergebnisse

Auch für dieses Verfahren wollen wir numerische Konvergenzuntersuchungen durchführen. Dazu betrachten wir die folgende Ähnlichkeitslösung von 1.1 aus [JG 92] für $\mathcal{D} = \mathcal{S} = 0$:

$$\xi(t, x) = \frac{|x|}{t^{\frac{1}{3}}} \quad (7.41)$$

$$u(t, x) = \begin{cases} 2\xi & \text{für } \xi \leq 1 \\ 1 & \text{für } \xi > 1 \end{cases} \quad w(t, x) = \begin{cases} \frac{1}{6}(1 - \xi)/t^{\frac{1}{3}} & \text{für } \xi \leq 1 \\ 0 & \text{für } \xi > 1 \end{cases} \quad (7.42)$$

Abbildung 7.2 zeigt das Ergebnis des numerischen Verfahrens auf $\Omega = (0; 1)$ aus der Ausgangskonfiguration zur Zeit $t = \tau = 0,01$. Dabei sind Surfactant (rot) und Film (blau) aus Gründen der besseren Sichtbarkeit in y -Richtung unterschiedlich skaliert.

Hierbei können wir den Abstand der diskreten Lösung von der bekannten Ähnlichkeitslösung berechnen. Wir messen den Fehler in $L^2(\Omega)$ in der Einheit 10^{-3} , jeweils zur Zeit $t = 0,5$ und als Maximum über $(0; 0,9)$, vgl. Tabelle 7.1.

Wir beobachten eine Konvergenz erster Ordnung für die Surfactant-Konzentration und ungefähr der Ordnung $\frac{1}{2}$ für die Filmhöhe.

Die folgenden Abbildungen zeigen Ergebnisse weiterer numerischer Experimente. Dabei wird zur Darstellung die Surfactant-Konzentration (rot) auf die Filmhöhe (blau) gezeichnet. Wie in der Herleitung der Lubrikationsapproximation in Abschnitt 1 beschrieben,

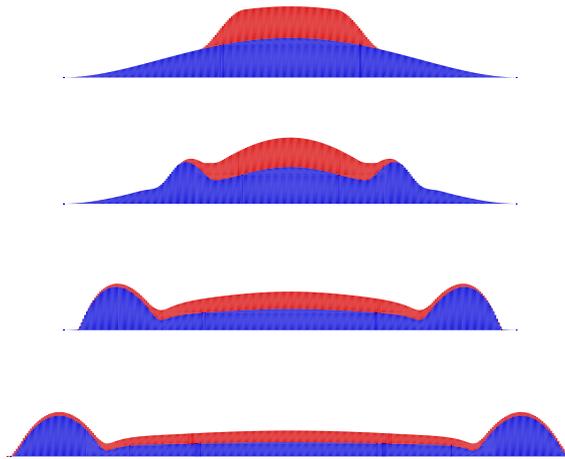


Abbildung 7.3: Ausbreitung des Filmes unter dem Einfluss des Surfactant
 $t_0 = 0; t_1 = 0,0002; t_2 = 0,0035$ und $t_3 = 0,0175$

ist die Filmhöhe skaliert durch eine typische Höhe, die Surfactant-Konzentration durch die Konzentration eines gesättigten Monolayers. Da es also in diesem Fall keine physikalisch sinnvolle Skalierung der beiden Graphen zueinander gibt, wurde jeweils eine Variante gewählt, in der beide Funktionen gut sichtbar sind.

Die Abbildungen zeigen jeweils die tatsächliche, stückweise konstante, Lösung des Finite-Volumen-Verfahrens. Daher kann auch bei relativ feiner Diskretisierung des Gitters (ca. 1000 Zellen) ein „Treppeneffekt“ sichtbar sein.

Die Parameter zu den jeweiligen Rechnungen werden im Folgenden aufgelistet. Alle Rechnungen fanden auf $\Omega = (-1; 1)$ statt.

Abbildung 7.3 zeigt einen Film mit Träger in $(-0,5; 0,5)$, der in der Mitte 0,25 Einheiten hoch ist und auf den ein kleinerer Surfactant-Tropfen in gesättigter Konzentration aufgebracht wurde. Dabei ist $\mathcal{S} = 10^{-2}$ und $\mathcal{D} = 10^{-5}$.

Man bemerkt, dass sich der Film ausbreitet, sobald der Surfactant den Rand erreicht hat. Dies ist insbesondere bemerkenswert, weil man bei der Dünne-Filme-Gleichung mit Mobilität u^3 (die sich aus der no-slip Randbedingung am Flüssigkeit-Substrat-Interface ergibt) ohne Surfactant keine Ausbreitung erwartet.

Die Abbildung 7.4 zeigt denselben Surfactant-Tropfen auf einen Film, der zu Beginn die konstante Höhe 0,1 hat. Die Ausbreitungsparameter waren $\mathcal{S} = \mathcal{D} = 10^{-2}$. Man sieht, wie der Film sich in einer Welle nach außen bewegt und sich dabei in der Mitte einen Krater bildet.

Eine ähnliche Ausgangskonfiguration, bei der die Ausbreitung allerdings stark konvektionsdominiert ist, zeigt Abbildung 7.5. Hierbei sind $\mathcal{S} = \mathcal{D} = 10^{-6}$. Die Form der Lösung nähert sich im konvektionsdominierten Setting insbesondere im Bereich der Welle der Ähnlichkeitslösung aus Abbildung 7.2.

Als nächstes betrachten wir in Abbildung 7.6 noch ein Beispiel, in dem die Diffusion des Surfactant dominiert. Für verhältnismäßig großes \mathcal{D} , hier $\mathcal{D} = 0,1; \mathcal{S} = 0,001$

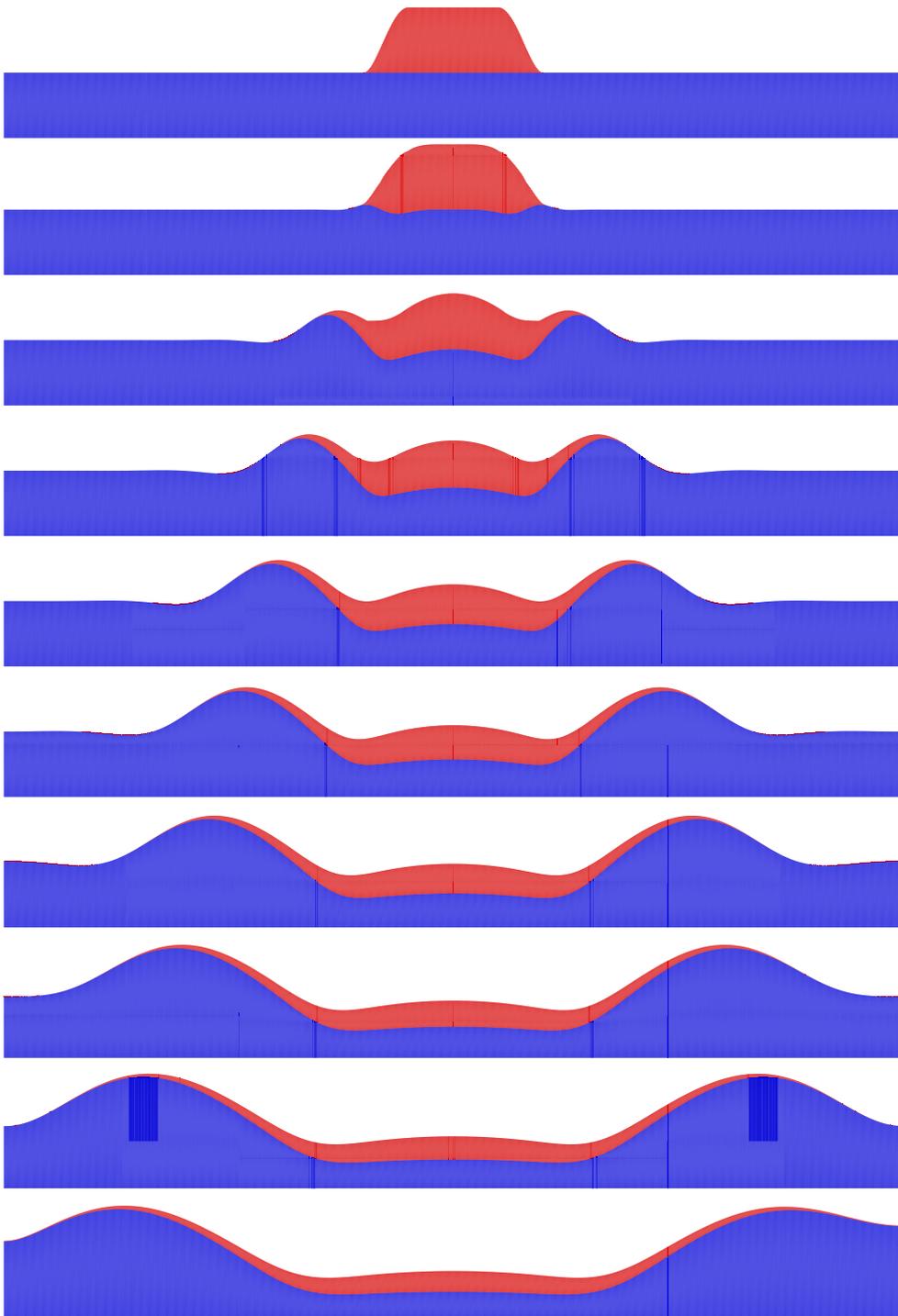


Abbildung 7.4: Surfactant-Tropfen auf ebenem Film

$t_0 = 0; t_1 = 0,00001; t_2 = 0,00005; t_3 = 0,00018; t_4 = 0,00043;$
 $t_5 = 0,00084; t_6 = 0,0015; t_7 = 0,0034; t_8 = 0,0049$ und $t_9 = 0,0067$

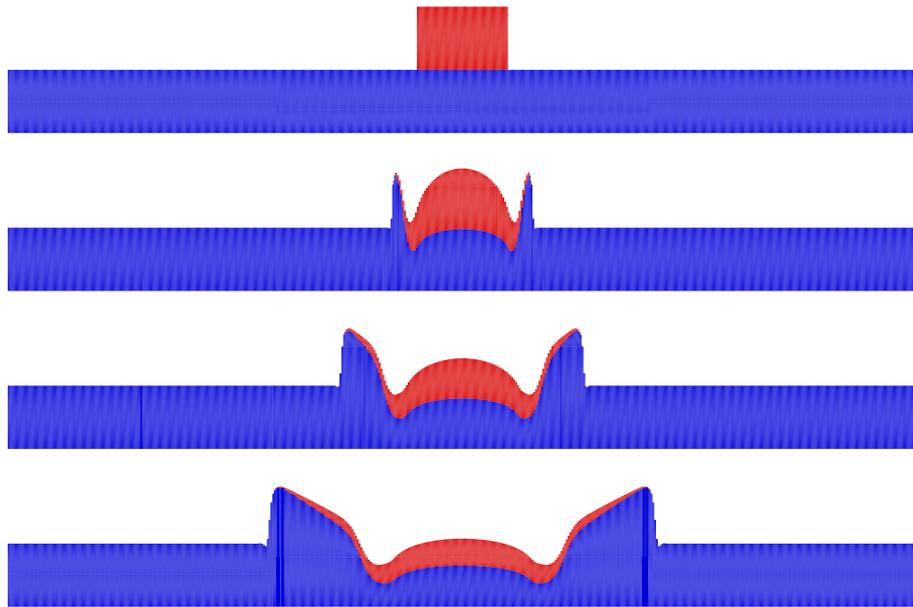


Abbildung 7.5: Konvektionsdominiertes Setting

$$t_0 = 0; t_1 = 0,0008; t_2 = 0,008 \text{ und } t_3 = 0,035$$

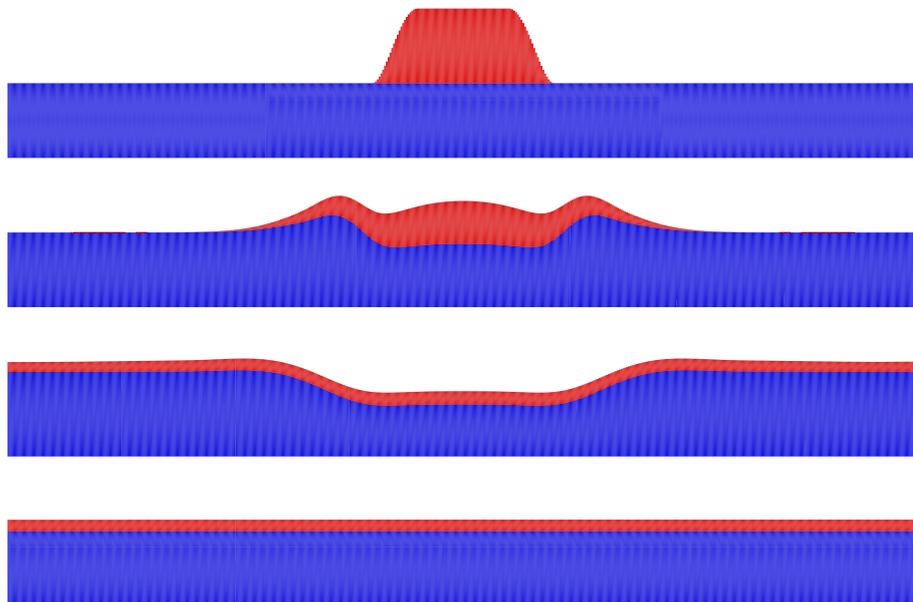


Abbildung 7.6: Starke Diffusion des Surfactant

$$t_0 = 0; t_1 = 0,1; t_2 = 2 \text{ und } t_3 = 10^5$$

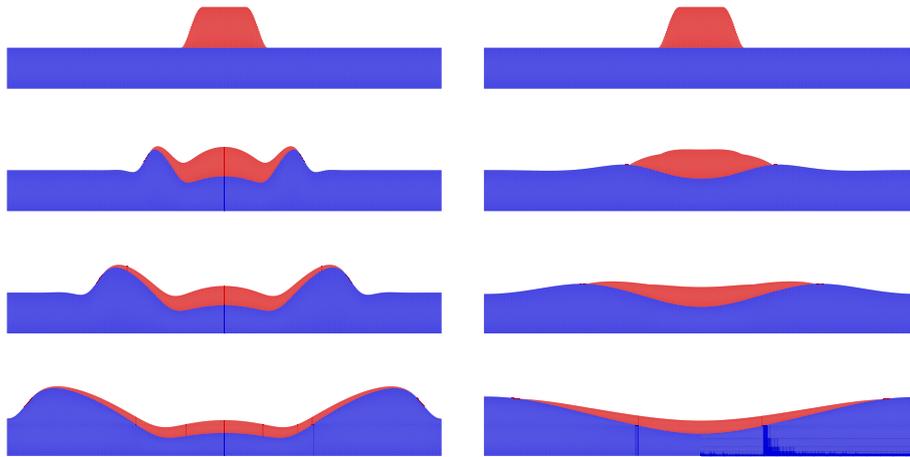


Abbildung 7.7: Verhalten des Filmes für $\mathcal{S} = 0,01$ (links) und $\mathcal{S} = 1$ (rechts)
 $t_0 = 0; t_1 = 0,1; t_2 = 0,5$ und $t_3 = 2$

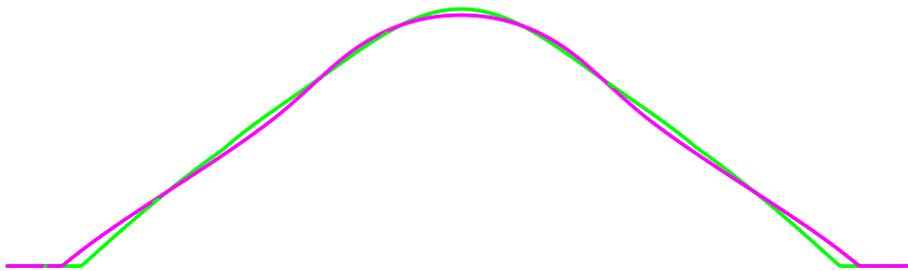


Abbildung 7.8: Ausbreitung des Surfactant für $\mathcal{S} = 1$ (grün) und $\mathcal{S} = 0,01$ (violett)
 jeweils bei $t = 2$

stellt man fest, dass die Diffusion des Surfactant so schnell ist, dass er die Welle im Film schnell überholt und sich gleichmäßig über die Oberfläche ausbreitet. Das Ausgleichen der Filmhöhe, die in der Anfangsphase durch Marangoni-Kräfte ausgelenkt wurde, durch die Kapillarkräfte geschieht auf einer wesentlich größeren Zeitskala.

Nun wollen wir noch den Effekt der Kapillaritätskonstante \mathcal{S} betrachten. Dazu vergleichen wir eine Rechnung mit ansonsten gleichen Parametern ($\mathcal{D} = 0,0001$) mit $\mathcal{S} = 1$ und $\mathcal{S} = 0,01$. Bei kleinerer Kapillaritätskonstante ist die Welle, die durch die Marangoni-Konvektion entsteht, wesentlich ausgeprägter. Abbildung 7.7 zeigt für beide Fällen dieselben Zeitschritte.

Zur Verdeutlichung betrachten wir in Abbildung 7.8 die Surfactant-Verteilung jeweils zur Zeit $t = 2$. Diese zeigt deutlich den Effekt der Kapillarität auf die Ausbreitung des Surfactant, die bei größerem \mathcal{S} etwas verlangsamt wird. Allerdings ist der Gradient bei kleinerer Kapillaritätskonstante deutlich flacher, was der schnelleren Ausbreitung wieder entgegenwirkt.

8 Schlussbemerkungen

Im eindimensionalen Fall zeigt sich das Verfahren in der Lage, das Verhalten eines Surfactant auf einem dünnen Film adäquat darzustellen. Die Vergleiche mit Ähnlichkeitslösungen, zumindest für die reduzierten Probleme in 6.3 und 7.5, zeigen die Effizienz des Splitting-Ansatzes bei der Behandlung des gekoppelten Problems. Die Implementierung auch für den zweidimensionalen Fall erscheint vielversprechend. Inwieweit sich die analytischen Ergebnisse der Abschnitte 3 bis 5 auf ein Verfahren für das volle Problem bzw. auch ins Zweidimensionale erweitern lassen, ist vorerst offen.

Danksagung

Bedanken möchte ich mich insbesondere bei Herrn Prof. Dr. Martin Rumpf für die intensive Betreuung bei der Anfertigung dieser Arbeit, sowie bei Priv-Doz. Dr. Günther Grün und Dipl.-Math. Sandra Wieland, die stets für meine Fragen zur Verfügung standen. Mein Dank gilt außerdem Dipl.-Math. Ulrich Weikard für die Mühe, die Arbeit Korrektur zu lesen, sowie den Mitarbeitern des Instituts für angewandte Mathematik in Bonn und der Arbeitsgruppe für Numerische Mathematik in Duisburg für die zahlreichen fruchtbaren Diskussionen.

Literatur

- [A 99] ALT H.W., *Lineare Funktionalanalysis*, Springer, 1999.
- [B 84] BENSON, *Biochim. Biophys. Acta*, 793, 1984, pp. 18–27.
- [B 00] BECKER J., *Finite Elemente Verfahren zur Dünne-Filme-Gleichung mit nicht-linearem Oberflächenspannungsterm*, Diplomarbeit, Bonn, 2000.
- [BGN 01] BARRETT J.W., GARCKE H., NÜRNBERG R., "Finite Element Approximation of Surfactant Spreading on a Thin Film", eingereicht, 2002.
- [EO 81] ENGQUIST B., OSHER S., "One-sided difference approximations for nonlinear conservation laws", *Math. Comp.*, vol. 31, 1981, pp. 321–351.
- [EGH 00] EYMARD R., GALLOUËT T., HERBIN R., "Finite volume methods", *Handbook of Numerical Analysis VII*, P.G. Ciarlet J.L. Lions Editors, Elsevier, 2000.
- [EGH 98] EYMARD R., GUTNIC M., HILHORST D., "The finite volume method for the richards equation", Preprint Paris-Sud, 1998.
- [G 94] GROTBORG J.B., "Pulmonary flow and transport phenomena", *Annu. Rev. Fluid. Mech.*, vol. 26, 1994, pp. 529–571.

-
- [GG 90] GAVER D.P., GROTBORG J.B., "The dynamics of a localized surfactant on a thin film", *J. Fluid Mech.*, 1990.
- [GR 99] GRÜN G., RUMPF M., "Entropy consistent finite volume schemes for the thin film equation", *Finite volume schemes for complex applications II*, Hermes Science Publications, Paris, 1999.
- [GR 00] GRÜN G., RUMPF M., "Nonnegativity preserving convergent schemes for the thin film equation", *Numer. Math.*, vol. 87, 2000, pp. 113–152.
- [GR 01] GRÜN G., RUMPF M., "Simulation of singularities and instabilities arising in thin film flow", *Europ. J. Appl. Math.*, vol. 12, 2001, pp. 293–320.
- [G 02] GRÜN G., "On the convergence of entropy consistent schemes for lubrication type equations in multiple space dimensions", *Math. Comp.*, erscheint, 2002.
- [JG 92] JENSEN O.E., GROTBORG J.B., "Insoluble surfactant spreading on a thin viscous film: shock evolution and film rupture", *J. Fluid Mech.*, vol. 240, 1992, pp. 259–288.
- [K 97] KRÖNER D., *Numerical schemes for conservation laws*, Wiley–Teubner, 1997.
- [LMS 96] LA DUE J., MULLER M.R., SWANGLER, M., "Cratering phenomena on aircraft anti-icing films", *J. Aircraft*, vol. 33, 1996, pp. 131–138.
- [MR 01] MIKULA K., RAMAROSY N., "Semi-implicit finite volume scheme for solving nonlinear diffusion equations in image processing", *Numer. Math.*, vol. 89, 2001, pp. 561–590.
- [ODB 97] ORON A., DAVIS S.H., BANKOFF S.G., "Long-scale evolution of thin liquid films", *Rev. of Mod. Phys.*, vol. 69, 1997, pp. 931–980.
- [SH 88] SMYTH N.F., HILL J.M., "Higher order nonlinear diffusion", *IMA J. Appl. Math.*, vol. 40, 1988, pp. 73–86.
- [W 98] WILLIAMS H.A.R., *Two-dimensional surfactant-driven flows of thin liquid films*, Dissertation, Cambridge, 1998.
- [W 02] WIELAND S., *Ausbreitung einer oberflächenaktiven Substanz auf einem dünnen Flüssigkeitsfilm*, Dissertation, in Vorbereitung, Bonn, 2002.