

TECHNISCHE UNIVERSITÄT MÜNCHEN
Fakultät für Mathematik

Ein mathematisches Modell zur Kryokonservierung lebenden Gewebes

Kathrin Andrea Ruf

Vollständiger Abdruck der von der Fakultät für Mathematik der Technischen Universität München zur Erlangung des akademischen Grades eines

Doktors der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)

genehmigten Dissertation.

Vorsitzender: Univ.-Prof. Dr. Martin Brokate
Prüfer der Dissertation: 1. Univ.-Prof. Dr. Dr. h.c. mult. Karl-Heinz Hoffmann (em.)
2. Univ.-Prof. Dr. Peter Rentrop
3. Prof. Marek Niezgodka, Ph.D.
Warsaw University of Technology / Polen
(schriftliche Beurteilung)

Die Dissertation wurde am 29.09.2011 bei der Technischen Universität München eingereicht und durch die Fakultät für Mathematik am 20.05.2012 angenommen.

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei all jenen herzlich bedanken, die durch ihre Hilfe und Unterstützung zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben:

An erster Stelle möchte ich meinem Betreuer Herrn Prof. Dr. Dr. h.c. mult. Karl-Heinz Hoffmann für sein Vertrauen und seine Unterstützung danken. Er gab mir die Möglichkeit und den nötigen Freiraum diese Arbeit zu schreiben, bei der ich mich nicht nur in die mathematische Thematik, sondern auch in das spannende Gebiet der Kryokonservierung vertiefen konnte. Seine konstruktiven Vorschläge waren mir stets eine große Hilfe.

Besonderer Dank gebührt Herrn Prof. Dr. Hans Wilhelm Alt für seine Zeit und sein Interesse an meiner Arbeit. Die fruchtbaren Diskussionen während seiner Aufenthalte in Garching, seine Anregungen und Ermutigungen haben wesentlich zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen.

Danken möchte ich auch Herrn Prof. Dr. Martin Brokate, der sich nicht nur bereit erklärt hat, den Prüfungsvorsitz zu übernehmen, sondern der mich die letzten Jahre auch hinsichtlich einer Anstellung an seinem Lehrstuhl uneingeschränkt unterstützt hat und bei Fragen und Problemen stets ein offenes Ohr für mich hatte.

Ich danke auch meinen Gutachtern, Herrn Prof. Dr. Peter Rentrop und Herrn Prof. Dr. Marek Niezgodka, dass sie die Zeit und die Mühe zum Lesen dieser Arbeit aufbringen.

Herzlich bedanken möchte ich mich bei meinen Freunden und Kollegen, die mich in den Hochs und Tiefs mit aufbauenden Worten neu motivierten und hin und wieder für angenehme Ablenkung sorgten. Im Besonderen danke ich Dr. Gabriele Witterstein, für die nette Zeit als Bürokollegin, für die guten Gespräche, die fachlichen Diskussionen und nicht zuletzt für die gewissenhafte Korrektur meiner Arbeit. Auch meiner zweiten Hauptlektorin, Viktoria Fuchs, sowie allen anderen Lektoren ein herzliches Dankeschön.

Vor allem aber bin ich meiner Familie dankbar, meinen Eltern, Rosi und Gerhard, und meinem Bruder Bernhard mit seiner Frau Ingrid für ihr selbstverständliches Engagement, ihren Rückhalt, ihre Geduld und vor allem dafür, dass sie immer für mich da sind. Danke!

Ismaning, 27. September 2011

Kathrin Ruf

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Kryokonservierung	2
1.1.1	Computergesteuerte Einfriergeräte und kritische Phasen beim Gefrierprozess	2
1.1.2	Einfluss der Kühlrate	4
1.1.3	Optimaler Kühlungsverlauf	5
1.2	Modelle für Phasenübergänge	6
1.2.1	Stefan-Problem	7
1.2.2	Phasenfeldmodelle	7
1.3	Poröse Medien	8
1.4	Ziel und Aufbau dieser Arbeit	9
2	Das Mathematische Modell	11
2.1	Erhaltungsgleichungen	13
2.1.1	Massenerhaltung	13
2.1.2	Impulserhaltung	14
2.1.3	Energieerhaltung	15
2.2	Modellierung	17
2.2.1	Zweiter Hauptsatz der Thermodynamik	17
2.2.2	Interaktionsfunktionen	18
2.2.3	Freie Energien	19
2.2.4	Subdifferential der Indikatorfunktion und Reaktionen auf die inneren Nebenbedingungen	20
2.2.5	Konstitutive Gesetze	22
2.2.6	Pseudopotential der Dissipation	23
2.2.7	Modellgleichungen	25
2.2.8	Erweiterung auf ein schwachkompressibles Modell	26
3	Modellreduktion und Existenzsatz	29
3.1	Reduktion des Modells	29
3.2	Anfangs-Randwertprobleme	32
3.2.1	Das Phasenfeldmodell	32
3.2.2	Quasilinear parabolisches Problem	34
3.3	Existenzsatz	34

4	Beweis des Existenzsatzes	37
4.1	Gliederung des Beweises	37
4.2	Durchführung des Beweises	38
4.2.1	Parabolischer Energieterm	38
4.2.2	Zeitdiskretisierung	39
4.2.3	Existenz einer zeitdiskreten Lösung	41
4.2.4	A priori Abschätzungen	44
4.2.5	Kontrolle von Zeitdifferenzen	48
4.2.6	Kompaktheit der Menge approximativer Lösungen	53
4.2.7	Konvergenz auf dem Rand	57
4.2.8	Schwache Lösung des reduzierten Problems	61
5	Numerische Simulation des reduzierten Problems	63
5.1	Diskretisierung und numerisches Verfahren	65
5.1.1	Zeitdiskretisierung	65
5.1.2	Ortsdiskretisierung	65
5.1.3	Numerisches Verfahren	66
5.2	Die nichtlineare Phasenfeldfunktion φ	71
5.3	Modellkonstanten	73
5.3.1	Kenngößen für Gewebe allgemein	73
5.3.2	Verwendete Konstanten bei der Simulation	74
5.4	Diskretisierungsdaten	75
5.5	Simulationsergebnisse	75
5.5.1	Vergleich mit Messdaten	76
5.5.2	Temperaturverlauf	77
6	Zusammenfassung und Ausblick	81
A	Anhang	83
A.1	Wichtige Definitionen und Sätze	83
A.1.1	Konvexe Analysis	83
A.1.2	Funktionalanalysis	84
A.2	Rechnungen	86
A.2.1	Herleitungen bei den Erhaltungsgleichungen	86
A.2.2	Herleitung der klassischen Terme der freien Energie	88
A.2.3	Subgradienten von I_M und Beweis zu Satz 2.1	89
A.2.4	Entropieproduktionsrate H ausgehend von der Energieerhaltung	90
A.2.5	Materialgleichung mit Ersatz-Reaktionsfunktion	91
A.2.6	Positivität der absoluten Temperatur	92
A.2.7	Diskrete Partielle Integration	94
B	Symbolverzeichnis	95

Kapitel 1

Einleitung

In vielen Bereichen des alltäglichen Lebens spielt die Konservierung von biologischen Substanzen eine große Rolle. In der Lebensmittel- und Futtermittelindustrie zielt dies meist auf eine möglichst lange Lagerung und Haltbarkeit von Nahrungsmitteln ab, ohne nennenswerte Einbußen hinsichtlich Geschmack, Form, Konsistenz, Vitaminen und anderen Nährstoffen zu haben.

Häufig ist hier der Einsatz von Kälte ein wesentliches Mittel, wie etwa bei der Kühlung von Fleisch- und Milchprodukten, bei der Gefriertrocknung von Kaffee, Kräutern und Gewürzen oder bei der Herstellung von Tiefkühlprodukten jeder Art.

Durch Absenkung der Temperatur können Alterungs- und Wachstumsprozesse, die durch Stoffwechselfvorgänge verursacht werden, stark verlangsamt werden. Hintergrund ist, dass in Zellen, die beim Einfrieren tiefen Temperaturen ausgesetzt sind, biochemische Prozesse reduziert und unterhalb der Glasübergangstemperatur von -136 °C sogar gänzlich blockiert werden. Theoretisch ist in diesem Bereich die Konservierung bis auf unbestimmte Zeit möglich; lediglich Einflüsse der ionisierenden Erdstrahlung oder kosmischen Strahlen auf die Zellen sind hier noch vorhanden, vgl. [35], [40] und [50].

Auch in der Biologie und Medizin sind in vielen Anwendungsbereichen der Forschung, Konservierung und Therapie kryobiophysikalische Effekte von großer Bedeutung, s. [5]. Der Name leitet sich aus dem griechischen Wort *Kryos* für „Kälte“ oder „Frost“ her und bezieht sich auf Effekte, die Kälte- oder Frosteinwirkung auf biologisches Gewebe haben. Sie sind physikalischer, chemischer oder biologischer Natur und resultieren aus dem Wärme- und Stoffaustausch, der bei thermischen Prozessen in biologischen Systemen beim Abkühlen, Gefrieren, Auftauen oder Erwärmen hervorgerufen wird, und sind sowohl von der Temperatur als auch von den thermischen Geschwindigkeiten der Prozesse abhängig.

Therapeutische Anwendungen dieser Effekte sind etwa Schmerzlinderung, Entzündungshemmung, Muskelaktivierung, Zellzerstörung, Stimulation oder Zellkonservierung, vgl. [5].

Wir werden uns hier auf den Anwendungsbereich der Kryokonservierung lebender Zellen und lebenden Gewebes beschränken.

1.1 Kryokonservierung

Die *Kryokonservierung* ist ein Verfahren zur Aufbewahrung und Haltbarmachung von Zellen oder biologischem Gewebe. Dabei stellt für die Zellen die Lagerung bei tiefen Temperaturen auch unterhalb von -196 °C an sich kein großes Problem dar. Allerdings ist die Gefahr ihrer Sterblichkeit im Temperaturbereich von circa -15 °C bis -60 °C , der sowohl beim Einfrieren als auch beim Auftauen durchschritten werden muss, besonders hoch, s. [35]. Für die erfolgreiche Kryokonservierung ist es daher essenziell, in diesem Bereich den Gefrier- und Auftauvorgang so durchzuführen, dass eine hohe Viabilität der zu konservierenden Zellen oder Gewebestrukturen gewährleistet wird. Dies stellt hinsichtlich der ablaufenden komplexen thermischen Prozesse und kryobiophysikalischen Effekte eine große Herausforderung dar.

1.1.1 Computergesteuerte Einfriergeräte und kritische Phasen beim Gefrierprozess

Bei der Kryokonservierung werden kleine Gewebeproben in einer wässrigen Einfrierlösung in speziellen Einfriergeräten tiefgefroren und wieder aufgetaut. Diese Einfriergeräte bestehen primär aus einer Gefrierkammer, die an ein Kühlsystem basierend auf Stickstoffgas (Siedetemperatur -196 °C) angeschlossen ist, sowie einem Gitter, in das Plastikampullen mit Gewebeproben oder Zellsuspensionen gestellt werden können. Zwei Sensoren zur Messung der Temperatur in der Kammer und in der Probe leiten die Messdaten an einen Computer weiter, der während des Gefrierprozesses das vorgegebene Kühlprofil und die daraus resultierenden Temperaturkurven auf dem Bildschirm darstellt, das Kühlprotokoll speichert und das Kühlsystem bezüglich des vorgegebenen Kühlprofils steuert.

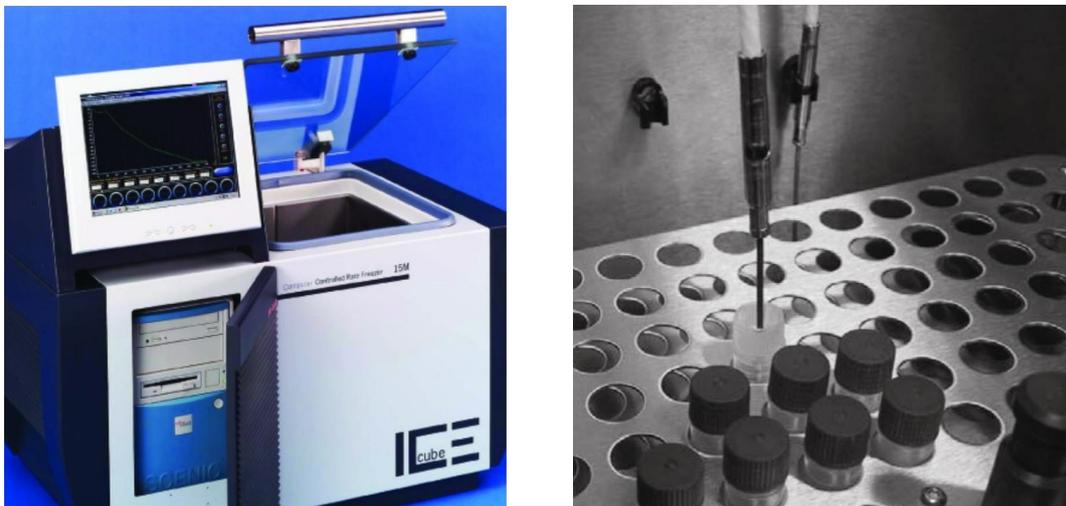


Abbildung 1.1: IceCube 15M der Firma SY-LAB Geräte GmbH, Österreich, mit Ampullen und Temperatursensoren in der Halterung, aus [29].

In Abbildung 1.1 ist ein solcher Gefrierapparat der Firma SY-LAB Geräte GmbH aus Österreich abgebildet. Mit diesem IceCube 15M können gewünschte Kühlprofile manuell eingegeben oder aus einer zuvor erstellten Datei eingelesen werden. Dieses Gerät eignet sich daher hinsichtlich der Optimierung des Kryoprozesses.

Experimente mit diesem Gerät haben gezeigt, dass die Temperatur in der Nähe des Gefrierpunktes ein ungleichmäßiges Verhalten aufweist, weil hier wegen der Kristallisation die latente Wärme frei wird, s. [29]. Ein typischer Temperaturverlauf bei konstanter Kühlrate ist in Abbildung 1.2 dargestellt.

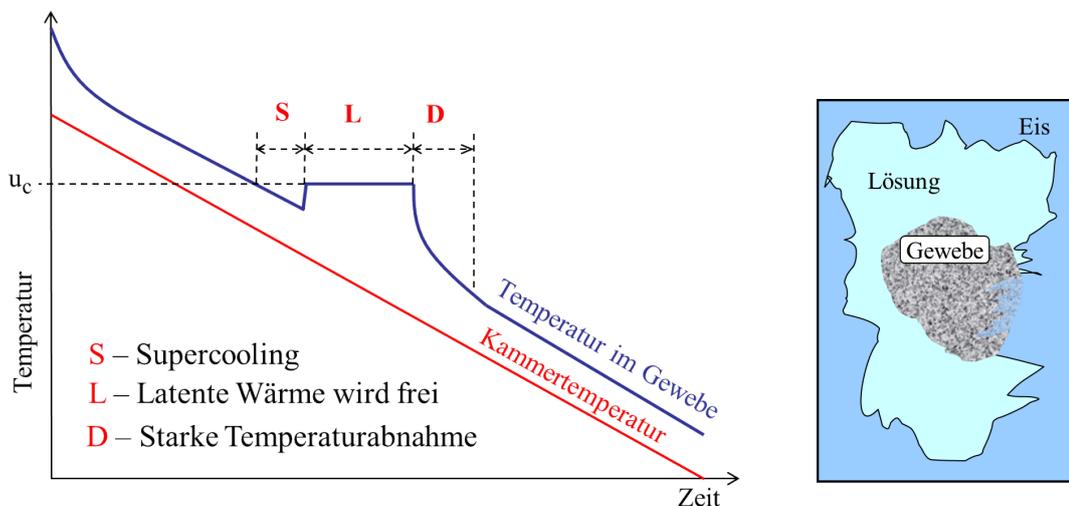


Abbildung 1.2: Kritische Phasen beim Einfrieren von lebenden Zellen (links) und Ampulle mit Gewebeprobe in einer kryogenen Kochsalzlösung (rechts), nach [29].

Dieser irreguläre Verlauf kann in drei Phasen eingeteilt werden:

Die erste Phase (S) der Unterkühlung (Supercooling) ist ein bekanntes Phänomen, tritt häufig bei der Verwendung kleiner Mengen der Zellsuspensionslösung auf und birgt selbst für die Zellen keine große Gefahr. In Kombination mit der zweiten Phase, in der die latente Wärme (L) frei wird, kann es jedoch zu Problemen kommen. Es bilden sich Dendriten (baumartige Kristallstrukturen, wie zum Beispiel Schneeflocken), die die Zellmembran mechanisch schädigen können. Es hat sich gezeigt, dass sich umso mehr Dendriten ausbilden, je länger diese Phase andauert. Nach Abschluss des Phasenübergangs kommt es schließlich in der dritten Phase zu einem plötzlichen Temperaturabfall (D), der einen Temperaturschock in den Zellen verursachen kann.

Die Dauer und Ausprägung dieser Phasen, sowie deren Einfluss auf die Zellen wird vor allem von der Kühlrate beeinflusst.

1.1.2 Einfluss der Kühlrate

Sowohl beim Einfrieren als auch beim Auftauen hat die Kühlrate einen erheblichen Einfluss auf die kryobiophysikalischen Effekte, die durch die thermischen Prozesse in einem biologischen Gewebe oder einer Zellsuspension hervorgerufen werden.

Man kann dabei im Wesentlichen zwischen Effektgruppen in drei Geschwindigkeitsbereichen des Kühlvorgangs unterscheiden. Das heißt also Effekten, die vor allem beim langsamen (ca. 10 – 40 K/min), schnellen (ca. 60 – 100 K/min) oder extrem schnellen Einfrieren (ca. 30.000 – 1.000.000 K/min) auftreten, s. [5] und [45]. Die Bereiche sind nur als Richtwerte zu sehen, da sie sowohl vom verwendeten Zell- oder Gewebetyp als auch von äußeren Umständen, wie etwa dem Hinzufügen von Kryoprotektiva zur Zellsuspension abhängen.

Ausführliche Beschreibungen der Abläufe und möglicher Effekte während des Gefrierprozesses findet man in vielen Veröffentlichungen zum Thema Kryobiologie und Kryokonservierung, zum Beispiel in [36], [50], [5] oder [41]. Wir beschränken uns hier auf die wichtigsten Vorgänge, die das Überleben der Zellen bei der Kryokonservierung beeinflussen.

Dazu betrachten wir im Folgenden Zellen in einer kochsalzhaltigen Suspensionslösung, wie in Abbildung 1.2 dargestellt. (Dies trifft auch auf Gewebszellen zu, da sich diese in einem extrazellulären Fluid innerhalb der extrazellulären Matrix befinden).

Langsames Einfrieren

Unter der Verwendung niedriger Gefriereraten tritt beim Erreichen der Keimbildungstemperatur, die unterhalb der Gefriertemperatur liegt, in der *extrazellulären Lösung* die Bildung von Eiskeimen auf.

Bei der fortschreitenden Kristallisation des Wassers in der Suspensionslösung werden Fremdstoffe, wie zum Beispiel Salze, nur im begrenzten Maße in das Kristallgitter eingebaut. Dadurch kommt es zu einer erhöhten Salzkonzentration in der extrazellulären Lösung. Der osmotische Druck auf die Zellmembran steigt an, sodass Wasser aus dem Zellinneren in den extrazellulären Bereich fließt, wodurch die Eiskeimbildungstemperatur in der Zelle sinkt und die Unterkühlung in der Zelle stärker wird, sprich das *intrazelluläre Fluid* weiterhin ungefroren bleibt. Bei fallender Temperatur führt dies zu einer fortschreitenden Dehydrierung und Schrumpfung der Zelle, was zu irreversiblen Schäden führen kann.

Außerdem kann durch die Wechselwirkung des extrazellulären Eises mit der Zellmembran diese mechanisch geschädigt werden.

Schnelles Einfrieren

Bei schneller Abkühlung kommt es neben der Eiskristallisation in der extrazellulären Lösung auch im intrazellulären Bereich zur Bildung kleiner, unregelmäßig geformter Eiskristalle. Diese sind relativ instabil. Wird die Gewebeprobe später zu langsam erwärmt,

schließen sich diese instabilen Eiskristalle zu größeren, stabileren Eisclustern zusammen, die die Zellmembran von innen schädigen können.

Durch den Einsatz von Gefrierschutzmittel können die Effekte bei langsamem und schnellem Einfrieren für die Zellen positiv beeinflusst werden, allerdings ergeben sich dann zusätzliche Gefahrenpotentiale. Hohe Konzentrationen können zelltoxisch wirken, und auch durch die Zugabe und das Auswaschen der Gefrierschutzadditive können osmotische Druckunterschiede den Zellen schaden.

Extrem hohe Kühlraten

Unter der Verwendung extrem hoher Kühlraten erstarrt die Gewebe- oder Zellprobe, ohne dass sich extra- oder intrazelluläres Eis bildet. Dabei nimmt die Viskosität der zellulären Fluide extrem zu, bis ein glasartiger, amorpher Zustand erreicht wird, in dem keine biochemischen Reaktionen mehr ablaufen können. Dieser Vorgang wird *Vitrifikation* genannt.

Allerdings kann der Einsatz so hoher Raten und den damit verbundenen plötzlichen Temperaturschwankungen zu einem thermischen Schock und so zu einer Schädigung der Zellen führen. Kryoprotektiva können die nötigen extrem hohen Kühlraten senken, was jedoch mit den oben beschriebenen Risiken verbunden ist.

1.1.3 Optimaler Kühlungsverlauf

Zieht man all diese Effekte in Betracht, so zeigt sich, dass die Überlebenswahrscheinlichkeit der Zellen in Abhängigkeit von der Kühlrate die Form eines „umgedrehten U’s“ hat, s. [36]. Wie man in Abbildung 1.3 deutlich erkennt, ist die Kurve für jeden Zelltyp spezifisch und kann zum Beispiel durch den Einsatz von Gefrierschutzadditiven verschoben werden. Alle dargestellten Kurven haben gemein, dass eine optimale Viabilität in einem Übergangsbereich zwischen langsamem und schnellem Kühlen erzielt wird.

Auch die Auftauration hat einen Einfluss auf die Überlebenswahrscheinlichkeit. So haben zum Beispiel Experimente gezeigt, dass Zellsuspensionen, die bei einem supraoptimalen Kühlverlauf eingefroren wurden, eine höhere Überlebenswahrscheinlichkeit bei schnellem Auftauen besitzen, s. [36].

Ein experimentelles Vorgehen bei der Bestimmung des optimalen Kühlungsverlaufs erfordert in der Regel viel Erfahrung und eine Vielzahl an Experimenten. Hilfreich sind hier Sammlungen reproduzierbarer, spezifischer Konservierungsprotokolle, die auch auf die Methodik und technischen Aspekte eingehen, wie etwa in [15] und [14]. Allerdings gibt es weiterhin eine große Zahl biologischer Materialien, deren Konservierung in dieser Form noch nicht erfasst ist.

Problematisch ist die Optimierung des Gefrierprozesses vor allem bei komplexen biologischen Systemen, wie Gewebestrukturen oder sogar ganzer Organe. Diese bestehen in der

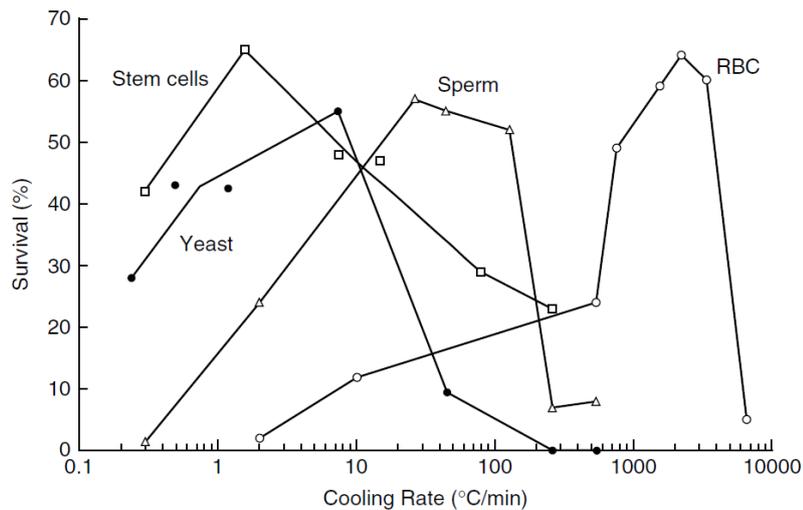


Abbildung 1.3: Das Überleben diverser Zelltypen bei der Kryokonservierung als Funktion der Kühlrate, aus [36]. Dargestellt sind die Funktionsverläufe für Mäuse-Stammzellen des Knochenmarks (Stem cells), Hefe (Yeast), Mausspermien (Sperm) und menschlicher roter Blutkörperchen (RBC).

Regel aus mehreren unterschiedlichen Zelltypen, die jede für sich ganz spezifische kryobiologische Anforderungen besitzen, s. [35] oder [36]. Außerdem ist die Zelldichte in Geweben oder Organen wesentlich höher als in einer Zellsuspensionslösung, wodurch der Wärmetransfer durch das Gewebe erschwert wird. Zum Beispiel kann in festem Gewebe die Packungsdichte bis zu 80% betragen, in Zellsuspensionslösung ist jedoch die Kryokonservierung bereits bei einer Dichte von 20% problematisch, vgl. [29].

Vor allem im Hinblick auf die hohen Anforderungen dieser komplexen biologischen Systeme hinsichtlich eines optimierten Kryokonservierungsprozesses ist eine experimentelle Bestimmung des Kühlverlaufs kaum realisierbar.

Daher ist die Entwicklung und Untersuchung mathematischer Modelle zur Beschreibung der während der Kryokonservierung auftretenden biophysikalischen Prozesse wichtig, um mit Hilfe dieser Modelle einen optimalen Kühlverlauf für die betrachtete Gewebeprobe zu berechnen, der anschließend über Experimente verifiziert werden kann.

1.2 Modelle für Phasenübergänge

Aus der Vielzahl mathematischer Modelle für Prozesse, die bei der Kryokonservierung stattfinden, greifen wir im Folgenden zwei Ansätze heraus, die sich zur Beschreibung von Phasenübergängen bewährt haben, nämlich die Formulierung als Stefan-Problem und die Formulierung als Phasenfeldmodell.

1.2.1 Stefan-Problem

Das *Stefan-Problem* ist ein klassisches Modell zur Beschreibung des Übergangs zwischen fester und flüssiger Phase eines homogenen Mediums und ist wohl der bekannteste Vertreter der Probleme mit freiem Rand.

In jeder der beiden Phasen ist hier die Wärmeleitungsgleichung zu lösen. Des Weiteren wird der Verlauf der Phasengrenze zwischen festem und flüssigem Medium gesucht, der a priori unbekannt ist und von der sogenannten Stefan Bedingung bestimmt wird. Die Energie muss über diesen freien Rand, an dem der Phasenübergang stattfindet, erhalten bleiben. Da beim Phasenübergang von fest nach flüssig die latente Wärme freigesetzt wird, kommt es dabei trotz stetigem Temperaturverlauf zu einem sprunghaften Anstieg der inneren Energie.

Rund um dieses Problem existieren viele wissenschaftliche Abhandlungen, nicht zuletzt auf Grund der relativ einfachen Formulierung und der Anwendbarkeit für viele industrielle Problemstellungen. Eine detaillierte Beschreibung dieses Problems, seiner Historie sowie Verallgemeinerungen und Varianten findet man zum Beispiel in [46] oder [17].

Allerdings kommt es bei diesem Modellansatz zu Schwierigkeiten, wenn man Phasenübergänge beschreiben möchte, bei denen sich die Topologie des freien Randes ändert. Dies kann zum Beispiel passieren, wenn sich Bereiche der festen Phase vereinigen oder sich die flüssige Phase in mehrere Bereiche aufteilt; etwa beim Gefrieren und Auftauen von Wasser in porösen Medien.

Daher ist in letzter Zeit die Verwendung von Phasenfeldgleichungen zur Beschreibung von Phasenübergängen und anderen damit verbundenen Prozessen sehr populär geworden.

1.2.2 Phasenfeldmodelle

Im Gegensatz zum Stefan-Problem erfolgt bei *Phasenfeldmodellen* nicht mehr die geometrische Betrachtung der Phasengrenze, sondern die Überlegungen basieren auf der Betrachtung der Gibbsschen freien Energie, die von einer *Phasenvariablen* abhängt. Diese glatte Funktion kennzeichnet den Aggregatzustand des Mediums und nimmt üblicherweise die Werte -1 im festen und 1 im flüssigen Zustand an. Dabei unterliegt sie innerhalb der Grenzschicht, die sich im Bereich des Phasenübergangs ausbildet, einer starken Änderung. Wie schmal die Bandbreite dieser Grenzschicht ausfällt kann über einen kleinen Parameter gesteuert werden, sodass eine scharfe Grenze zwischen den beiden Phasen beliebig approximiert werden kann.

Diese Methode wurde von G. Caginalp in [12] für einen Erstarrungsprozess vorgestellt, bei dem der ortsabhängige Volumenanteil der flüssigen Phase als Phasenvariable fungiert. Unter anderem wurde hier das resultierende System partieller Differentialgleichungen hinsichtlich Existenz und Regularität untersucht.

Seither wurden diverse Prozesse, die bei der Kryokonservierung auftreten, mit Phasenfeldmodellen betrachtet, vgl. [8]:

Für den Effekt der Unterkühlung wurden zum Beispiel in [49] und [24] Phasenfeldmodelle aufgestellt; in [49] wurde zudem die Oberflächenspannung an der Phasengrenze sowie die Eiskeimbildung modelliert.

Im Zuge des SPP 1253 sind im Projekt „Optimal Control in Cryopreservation of Cells and Tissue“ mit Hilfe von Phasenfeldmodellen weitere Erkenntnisse gewonnen worden. So wurde, um die schädigenden Einflüsse auf eine erfolgreiche Kryokonservierung bezüglich der freiwerdenden latenten Wärme und der Bildung intrazellulären Eises zu reduzieren, in [29] die Optimalsteuerung für den Kühlungsverlauf mit der Temperatur in der Gefrierkammer als Steuerung betrachtet. Dabei ist ein Phasenfeldmodell basierend auf [12], [30] und [23] verwendet worden.

Es hat sich herausgestellt, dass für den optimalen Kühlungsverlauf bei der Kryokonservierung eine bezüglich der Temperatur nicht monoton fallende Kurve gewählt werden sollte. Die Effizienz des ermittelten optimalen Temperaturverlaufs konnte anhand eines Experiments mit dentalem, weichem Gewebe bestätigt werden, vgl. [29] und Abbildung 5.2.

1.3 Poröse Medien

Die Beschreibung des Gefrierprozesses innerhalb der *extrazellulären Matrix* eines Gewebes basiert auf der Thermodynamik *poröser Medien*, wie sie zum Beispiel in [23] mit Hilfe eines Phasenfeldmodells betrachtet wird. Verwandte Modelle wurden bereits im Hinblick auf das Gefrieren von Wasser im Erdboden, teils mit darin enthaltenen Gaspipelines, formuliert und Fallbeispiele numerisch simuliert, vgl. [7] oder [37].

Im Falle von biologischem Gewebe repräsentiert dabei die extrazelluläre Matrix das poröse Medium. In seinen *Poren* befinden sich die Zellen, die von einer Flüssigkeit, dem *extrazellulären Fluid*, umgeben sind. In Abbildung 1.4 ist die Skizze eines Gewebequerschnitts dargestellt.

Eine Besonderheit poröser Medien ist, egal ob es sich hier um Böden oder Gewebestrukturen handelt, dass der ungefrorene Wasseranteil in den Poren des Mediums nur von der Temperatur abhängt und sich daher als Funktion von ihr darstellen lässt. Er kann somit als Materialeigenschaft des Gewebes aufgefasst werden, die von der Porengröße, ihrer Verteilung und dem Material der festen Matrix abhängt. Der Funktionsverlauf kann aus Messdaten bestimmt werden. In der Bodenkunde erfolgt dies über Daten von NMR-Messungen (Kernspinresonanzspektroskopie).

Des Weiteren wird durch die Interaktion des flüssigen Wassers mit der festen Matrix eine gleichmäßige Eiskeimbildung hervorgerufen, wodurch die Unterkühlung des Wassers verhin-

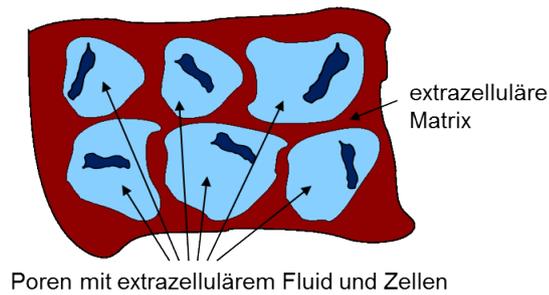


Abbildung 1.4: Querschnitt durch ein Gewebe. Die Zellen liegen in kleinen Kanälen in der extrazellulären Matrix und sind von einem extrazellulären Fluid umgeben, nach [8].

dert wird. In Abbildung 1.5 ist der charakteristische Temperaturverlauf in einem porösen Medium bei einer konstanten Kühlrate dargestellt; im Vergleich zu Abbildung 1.2 fehlt hier die Unterkühlungsphase (S).

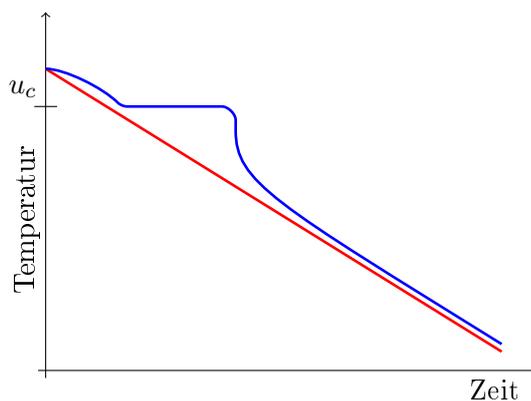


Abbildung 1.5: Temperaturverlauf (blau) in einem porösen Medium bei konstanter Kühlrate (rot) (Gefrieretemperatur u_c).

1.4 Ziel und Aufbau dieser Arbeit

Ziel dieser Arbeit ist es, ein Phasenfeldmodell, das von Michel Frémond in [23] aufgestellt wurde und das Gefrieren von Wasser in einem porösen Medium beschreibt, mathematisch zu analysieren und zu überprüfen, ob es sich auch für die Kryokonservierung lebender Zellen als Modell für die Bildung extrazellulären Eises eignet. Hintergrund ist, dass das Gewebe mit seiner extrazellulären Matrix und den im Porenraum in einem extrazellulären Fluid eingebetteten Zellen ebenfalls als poröses Medium betrachtet werden kann.

In Kapitel 2 gehen wir zunächst näher auf das verwendete Modell ein. Wir gehen dabei davon aus, dass für das betrachtete poröse Medium mit dem eingeschlossenen Wasser die *Kontinuumshypothese* gilt. Für die Herleitung der Massen- und Energieerhaltung für das Modell arbeiten wir in Abschnitt 2.1 im Gegensatz zu [23] nicht mit dem *Prinzip der Virtuellen Kräfte*, sondern leiten sie über das Prinzip der *Erhaltungsgleichungen* her. In Abschnitt 2.2 erfolgt mit den konstitutiven Gesetzen die Herleitung modellspezifischer Eigenschaften. Dabei zeigen wir, dass für das Frémondsche Modell sowohl der zweite Hauptsatz der Thermodynamik, als auch eine weitere wichtige Eigenschaft, die Positivität der absoluten Temperatur, erfüllt ist. Neben diesem inkompressiblen Modell präsentieren wir in Abschnitt 2.2.8 noch ein weiteres Modell, mit dem kleinere Druck- und Dichteunterschiede in einem Gewebe behandelt werden können. Hierzu verwenden wir das Konzept der Schwachkompressibilität, das heißt, dass relativ gesehen nur kleine Schwankungen um Mittelwerte in Druck und Dichte angenommen werden, und dass diese Schwankungen sich proportional zueinander verhalten.

Um die Existenz einer Lösung untersuchen zu können, führen wir in Kapitel 3 zunächst durch geeignete Einschränkung eine Modellreduktion durch. Dabei ist zu beachten, dass wir sowohl für das inkompressible Frémondsche Modell, als auch für das schwachkompressible Modell dasselbe reduzierte Modell erhalten. In Abschnitt 3.2 wird dann ein geeignetes Anfangs-Randwertproblem aufgestellt. Für das quasilineare parabolische Anfangs-Randwertproblem formulieren wir in Abschnitt 3.3 einen Existenzsatz, der uns die Existenz einer schwachen Lösung garantiert.

Kapitel 4 widmet sich dem Beweis dieses Existenzsatzes. Dies geschieht mit Hilfe der Rothe-Methode; das heißt, wir führen zunächst eine Zeitdiskretisierung durch und konstruieren so eine Folge approximativer Lösungen. Die Theorie monotoner Operatoren sichert die Existenz dieser zeitdiskreten Lösungen. Durch a priori Abschätzungen erhalten wir zunächst eine schwache Konvergenz für die Folge der Lösungen. Die starke Konvergenz, die für die Nichtlinearität benötigt wird, resultiert aus der gleichmäßigen Beschränktheit der Zeitdifferenzen und anschließender Kompaktheitsargumente. Mit der Konvergenz am Rand des betrachteten Gebiets können wir zum Limes übergehen und so die Existenz einer schwachen Lösung zeigen. Im Verlauf dieses Beweises verwendete wichtige Sätze werden dabei im Anhang in Abschnitt A.1 angefügt.

Kapitel 5 befasst sich schließlich mit der numerischen Simulation eines Gefriervorganges mit Hilfe der Finiten Elemente Methode. Dabei arbeiten wir mit dem reduzierten Modell aus Abschnitt 3.2.2 und vergleichen die Simulationsergebnisse mit Messdaten. Diese erhalten wir aus einem Kühlprotokoll, das beim Einfrieren von Gewebeprobe mit dem IceCube 15M von SY-LAB im Rahmen des SPP 1253 aufgezeichnet wurde.

Die Resultate dieser Arbeit werden abschließend in Kapitel 6 zusammengefasst. Ferner erfolgt hier ein Ausblick auf mögliche weiterführende Fragestellungen, die sich aus dieser Arbeit ergeben.

Kapitel 2

Das Mathematische Modell

In diesem Abschnitt stellen wir ein physikalisches Modell von Michel Frémond aus [23] vor, das den Gefrierprozess von Wasser in einem porösen Medium wiedergibt und auf den Regeln der Kontinuums- und Thermodynamik basiert. Das Modell beschreibt ein poröses Medium, in dem Wasser teils in flüssiger, teils in fester, also gefrorener Form vorliegt und gibt neben den auftretenden Massenflüssen auch die Phasenübergänge zwischen flüssigem Wasser und Eis wieder.

Für das Frémondsche Modell verwenden wir die folgenden vereinfachten Modellannahmen. Das unbewegte poröse Medium besteht aus einer sogenannten *Matrix* aus einem festen, starren Material mit konstanter Dichte ρ_m . Außerdem werden die beiden Wasserphasen als inkompressibel mit gleicher konstanter Dichte ρ angenommen. Diese letzte Annahme ist realistisch, weil sich die Dichte des Wassers im Gegensatz zu anderen Materialgrößen mit der Temperatur nur geringfügig ändert, was in Abschnitt 5.3.1 näher erläutert wird.

Bei dem betrachteten Phasenfeldmodell wird die Porenstruktur des porösen Mediums nicht detailliert wiedergegeben. Es handelt sich hierbei vielmehr um ein makroskopisches Modell, das in jedem Raumpunkt die Existenz der beiden Komponenten - poröses Medium und Wasser - mit all ihren Phasen - starre Matrix des porösen Mediums, flüssiges Wasser und Eis - ermöglicht und so die exakten Grenzen zwischen der Matrix und dem Wasser innerhalb eines Kontrollvolumens verwischt. Die Verteilung der einzelnen Komponenten und deren Phasen wird innerhalb des Mediums durch drei zeitabhängige Felder als Volumenanteile dargestellt. Dazu betrachten wir ein im Vergleich zur Porengröße hinreichend großes Volumenelement dV und die in diesem Element eingenommenen Volumina dV_a des porösen Mediums ($a = m$ für *matrix*), des flüssigen Wassers ($a = l$ für *liquid*) und des Eises ($a = i$ für *ice*) und definieren die entsprechenden Felder durch

$$\beta_a := \frac{dV_a}{dV}. \quad (2.1)$$

Damit diese Definition sinnvoll ist, gehen wir davon aus, dass das betrachtete Gesamtvolumen seinerseits gegenüber dV groß genug ist. Im weiteren Verlauf können wir dann ein solches Volumenelement näherungsweise als einen Ort \boldsymbol{x} im betrachteten Gebiet Ω (offen und zusammenhängend) identifizieren. Dieser Ansatz wird auch das *Konzept der Volumenanteile* genannt und basiert auf einer allgemeinen Theorie für die Modellierung poröser Medien, vgl. [19].

Die oben definierten Volumenanteile unterliegen beim Frémondschen Modell den folgenden Einschränkungen:

- Der Volumenanteil des porösen Mediums β_m sei konstant bezüglich der Zeit t und dem Ort \mathbf{x} . Damit bleibt auch die *Porosität* $\epsilon := 1 - \beta_m$ im gesamten Gebiet konstant.
- Es gelten die folgenden *inneren Nebenbedingungen*: Die Größe der anteiligen Volumina dV_a ist nicht negativ und übersteigt nicht die Größe des Volumenelements dV . Außerdem wird das Volumenelement vollständig von den drei Komponenten ausgefüllt. Damit gilt

$$0 \leq \beta_l, \beta_i, \beta_m \leq 1, \quad \text{und} \quad \beta_l(\mathbf{x}, t) + \beta_i(\mathbf{x}, t) + \beta_m = 1.$$

Da β_m konstant ist, können wir diese Nebenbedingungen umformen zu

$$0 \leq \beta_l, \beta_i \leq \epsilon, \quad \text{und} \quad \beta_l(\mathbf{x}, t) + \beta_i(\mathbf{x}, t) = \epsilon. \quad (2.2)$$

Aufgrund der Kopplung durch die inneren Nebenbedingungen kann lediglich ein Volumenanteil der Wasserkomponente - wir greifen hierfür β_l heraus - frei gewählt werden. Dieser Volumenanteil kann dann als *Phase* in unserem Phasenfeldmodell interpretiert werden.

Als *Zustandsgrößen*, das heißt Felder, die von der Zeit t und dem Ort \mathbf{x} abhängen, wählen wir neben den oben definierten Volumenanteilen β_l für flüssiges Wasser, β_i für Eis und β_m für das poröse Medium, die für die beiden Komponenten gleiche absolute Temperatur u . Wir fassen diese in einer gemeinsamen *Zustandsvariablen* \mathcal{E} zusammen:

$$\mathcal{E} = (\beta_l, \beta_i, \beta_m, u).$$

Die Geschwindigkeiten der einzelnen Phasen werden in dem von Frémond vorgestellten Modell als gegeben angenommen.

Da das poröse Medium, wie oben bereits erwähnt, unbewegt ist, sind demzufolge auch $\frac{d^m \beta_m}{dt}$ und dessen Geschwindigkeit \mathbf{U}_m gleich Null. Dabei bezeichne $\frac{d^m}{dt}$ die *materielle Ableitung*, oder *substantielle Ableitung*, bezüglich des porösen Mediums (analog $\frac{d^l}{dt}$ für flüssiges Wasser und $\frac{d^i}{dt}$ für Eis). Allgemein lautet die materielle Ableitung einer physikalischen Größe ϕ bezüglich des Materials a

$$\frac{d^a \phi}{dt} = \frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \phi \cdot \mathbf{U}_a, \quad (2.3)$$

mit der Geschwindigkeit \mathbf{U}_a des Materials a . Außerdem wird auch Eis als starr und unbeweglich angesehen; das heißt es besitzt ebenfalls die Geschwindigkeit $\mathbf{U}_i = \mathbf{0}$.

Das betrachtete Modell muss des Weiteren den üblichen kontinuumsmechanischen, hydrodynamischen und thermodynamischen Gesetzmäßigkeiten genügen, vgl. zum Beispiel [17], [34], [27] oder [16]. Daher wenden wir uns im nächsten Abschnitt zunächst den Erhaltungsgleichungen zu.

2.1 Erhaltungsgleichungen

Bei der Herleitung der Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie werden wir auf einen wichtigen Satz der Kontinuumsmechanik zurückgreifen, mit dessen Hilfe sich die jeweilige lokale Formulierung auf elegante Art und Weise aufstellen lässt: das *Reynoldssche Transporttheorem*. Es beschreibt die substantielle zeitliche Ableitung eines bewegten Gebietintegrals. Für ausführliche Herleitungen und Beweise dieses Satzes verweisen wir auf [17], [47], [27] oder [26].

Im Körper Ω betrachten wir ein *materielles Volumen* oder *Kontrollvolumen* $V(t)$ (ein bewegtes Volumen, das zu jedem Zeitpunkt aus denselben ihrerseits beweglichen Materieteilchen besteht) mit Referenzkonfiguration $V_0 \subset \Omega$ zur Zeit $t = t_0$. Der zeitliche Verlauf des Ortes \mathbf{x} und damit die Bewegung eines Materieteilchens mit Position \mathbf{X} in V wird beschrieben durch eine stetig differenzierbare Funktion $\mathbf{x}(\mathbf{X}, t)$ mit positiver Funktionaldeterminante $\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}}$. Das Teilchen habe dabei die Geschwindigkeit $\mathbf{U}(\mathbf{x}, t)$ ¹. Für die zeitliche Änderung einer stetig differenzierbaren physikalischen Größe mit Dichte ϕ in einem beschränkten materiellen Volumen $V(t)$ gilt dann das Reynoldssche Transporttheorem

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \phi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} = \int_{V(t)} \frac{\partial \phi}{\partial t}(\mathbf{x}, t) + \operatorname{div}(\phi(\mathbf{x}, t)\mathbf{U}(\mathbf{x}, t)) d\mathbf{x}. \quad (2.4)$$

Das Reynoldssche Transporttheorem ist zu jeder Zeit t für jedes solche materielle Volumen $V(t)$ und damit auch für den gesamten betrachteten Körper Ω erfüllt. Da das Gebiet Ω selbst starr und unbewegt ist, werden wir im weiteren Verlauf auch das entsprechende materielle Volumen mit Ω bezeichnen.

2.1.1 Massenerhaltung

Für die einzelnen Komponenten unseres Modells gilt das Prinzip der Massenerhaltung. Das heißt, dass in jedem beliebigen, aber fest gewählten materiellen Volumen $V(t)$ in Ω Materie weder entsteht noch verschwindet, also die Änderung der Gesamtmasse einer Komponente mit Massendichte μ Null ist. Mit dem Reynoldsschen Transporttheorem folgt also

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \mu d\mathbf{x} = \int_{V(t)} \frac{\partial \mu}{\partial t} + \operatorname{div}(\mu\mathbf{U}) d\mathbf{x} = 0,$$

wobei \mathbf{U} wieder die Geschwindigkeit der Teilchen bezeichnet. Da diese Gleichung für jedes Volumen erfüllt sein muss, folgt, dass der Integrand selbst verschwindet:

$$\frac{\partial \mu}{\partial t} + \operatorname{div}(\mu\mathbf{U}) = 0, \quad (2.5)$$

oder mit der materiellen Ableitung (2.3)

$$\frac{d^a \mu}{dt} + \mu \operatorname{div} \mathbf{U}_a = 0.$$

¹ $\mathbf{U}(\mathbf{x}, t)$ ist hier die Geschwindigkeit in Euler-Koordinaten. Zu Euler- und Lagrange-Koordinaten s. [17], [47], [27].

Diese Bedingung wird auch *Kontinuitätsgleichung* in differentieller Form genannt.

Die beiden Komponenten in unserem Modell, Wasser und das poröse Medium, besitzen nach Definition (2.1) die Anteile $\beta_w = \beta_l + \beta_i$ und β_m am Gesamtvolumen. Als Massendichten ergeben sich demnach die Partialdichte $\mu_w = \rho\beta_w = \rho(\beta_l + \beta_i)$ für Wasser und $\mu_m = \rho_m\beta_m$ für das poröse Medium. Zudem gilt im Falle von Wasser

$$\mu\mathbf{U} = \rho\beta_w\mathbf{U}_w = \rho(\beta_l\mathbf{U}_l + \beta_i\mathbf{U}_i) = \rho\beta_l\mathbf{U}_l,$$

weil für die Geschwindigkeit von Eis $\mathbf{U}_i = \mathbf{0}$ vorausgesetzt wurde. Damit ergibt sich aus (2.5) für die Massenerhaltung von Wasser die folgende Gleichung

$$\Delta M_w(\beta_l, \beta_i, \operatorname{div} \mathbf{U}_l) := \rho \frac{\partial \beta_l}{\partial t} + \rho \frac{\partial \beta_i}{\partial t} + \rho \operatorname{div}(\beta_l \mathbf{U}_l) = 0, \quad (2.6)$$

oder mit der materiellen Ableitung (2.3)

$$\Delta M_w(\beta_l, \beta_i, \operatorname{div} \mathbf{U}_l) := \rho \frac{d^l \beta_l}{dt} + \rho \frac{\partial \beta_i}{\partial t} + \rho \beta_l \operatorname{div} \mathbf{U}_l = 0.$$

Für das poröse Medium ist die Kontinuitätsgleichung

$$\rho_m \frac{\partial \beta_m}{\partial t} + \rho_m \operatorname{div}(\beta_m \mathbf{U}_m) = 0$$

wegen der konstanten Porosität ϵ und $\mathbf{U}_m = \mathbf{0}$ stets erfüllt.

2.1.2 Impulserhaltung

Eine weitere Erhaltungsgleichung in der Hydrodynamik liefert die Impulserhaltung. Sie beschreibt die Bewegung der Flüssigkeit und besagt, dass die zeitliche Änderung des Gesamtimpulses einer Masse mit Dichte $\mu\mathbf{U}$ gleich der auf diese Masse einwirkenden äußeren Kräfte ist. Diese teilen sich in Volumenkräfte mit Dichte $\mu\mathbf{f}$, wie zum Beispiel Graviationskräfte und Oberflächenkräfte auf, die durch den Cauchyschen Spannungstensor $\bar{\sigma}$ charakterisiert werden. Für ein materielles Volumen $V(t)$ bedeutet das

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \mu \mathbf{U} \, d\mathbf{x} = \int_{V(t)} \mu \mathbf{f} \, d\mathbf{x} + \int_{\partial V(t)} \bar{\sigma} \boldsymbol{\nu} \, dS,$$

wobei $\boldsymbol{\nu}$ den äußeren Einheitsnormalenvektor an $V(t)$ bezeichnet. Das Reynoldssche Transporttheorem lässt sich komponentenweise auch auf Vektorfelder anwenden. So erhalten wir, siehe A.2.1, unter der Verwendung des Transportsatzes (2.4), der Kontinuitätsgleichung (2.5) und des Divergenzsatzes von Gauß

$$\int_{V(t)} \mu \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + (\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{U} \right) d\mathbf{x} = \int_{V(t)} \mu \mathbf{f} \, d\mathbf{x} + \int_{V(t)} \operatorname{div} \bar{\sigma} \, d\mathbf{x},$$

wobei $\operatorname{div} \bar{\sigma}$ die „*Matrixdivergenz*“ mit

$$(\operatorname{div} \bar{\sigma})_j = \left(\sum_{k=1}^n \frac{\partial \bar{\sigma}_{jk}}{\partial x_k} \right)_j \quad \text{für } j = 1, \dots, n$$

bezeichnet (siehe [17]), sowie $(\mathbf{U} \cdot \nabla) = \sum_{j=1}^n U_j \frac{\partial}{\partial x_j}$. Wie schon bei der Kontinuitätsgleichung ist auch die Impulserhaltung für jedes beschränkte Kontrollvolumen zu erfüllen. Sofern die auftretenden Dichtefunktionen glatt genug sind, folgt also

$$\mu \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + (\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{U} \right) = \mu \mathbf{f} + \operatorname{div} \bar{\sigma}. \quad (2.7)$$

2.1.3 Energieerhaltung

Schließlich muss das Modell noch dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik genügen: dem Gesetz der Energieerhaltung.

Die Gesamtenergie in einem gegebenen Kontrollvolumen $V(t)$ mit Massendichte μ setzt sich zusammen aus der makroskopischen kinetischen Energie und der inneren Energie mit Dichte e , die neben der potentiellen Energie auch den Energiebeitrag mikroskopischer Bewegungen beinhaltet sowie von den Zustandsgrößen und somit von \mathcal{E} abhängig ist.

Die Gesamtenergie pro Volumeneinheit lautet also

$$\mu \frac{1}{2} |\mathbf{U}|^2 + e.$$

Ihre Änderung wird durch die Wirkung der äußeren Volumen- und Oberflächenkräfte aus der Impulserhaltung 2.1.2, den Wärmefluss \mathbf{q} und die Wärmeproduktion im Inneren des Volumens mit Rate r bestimmt. Demnach erhalten wir für die zeitliche Änderung der Energie

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{V(t)} \mu \frac{1}{2} |\mathbf{U}|^2 + e \, d\mathbf{x} &= \int_{V(t)} \mu \mathbf{f} \cdot \mathbf{U} \, d\mathbf{x} + \int_{\partial V(t)} \bar{\sigma} \boldsymbol{\nu} \cdot \mathbf{U} \, dS \\ &\quad - \int_{\partial V(t)} \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\nu} \, dS + \int_{V(t)} r \, d\mathbf{x}. \end{aligned}$$

Diese Gleichung lässt sich wieder mit Hilfe des Reynoldsschen Transporttheorems (2.4) und des Integralsatzes von Gauß umformen, siehe hierzu Abschnitt A.2.1. Auf Grund der Impulserhaltung (2.7) können dabei die Terme der kinetischen Energie durch Terme der rechten Seite eliminiert werden. Wir erhalten

$$\int_{V(t)} \frac{\partial e}{\partial t} + \operatorname{div}(e\mathbf{U}) \, d\mathbf{x} = \int_{V(t)} \bar{\sigma} : \nabla \mathbf{U} - \operatorname{div} \mathbf{q} + r \, d\mathbf{x},$$

mit dem *Skalarprodukt für Matrizen*

$$\bar{\sigma} : \nabla \mathbf{U} = \sum_{j,k=1}^n \bar{\sigma}_{jk} \frac{\partial U_j}{\partial x_k}.$$

Da diese Gleichung für jedes beschränkte materielle Volumen erfüllt sein muss, folgt für glatte Funktionen die Energieerhaltung in Divergenzform

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \operatorname{div}(e\mathbf{U}) = \bar{\sigma} : \nabla \mathbf{U} - \operatorname{div} \mathbf{q} + r. \quad (2.8)$$

Beim betrachteten Frémondschen Modell ist die gesamte innere Energie gleich der Summe der inneren Energien des flüssigen Wassers e_l , des Eises e_i und der Matrix e_m , also

$$e = e_l + e_i + e_m.$$

Da in unserem Modell lediglich Geschwindigkeiten des flüssigen Wassers berücksichtigt werden, verschwinden die dem Eis und der Matrix entsprechenden Divergenzterme auf der linken Seite in (2.8) ebenso wie die zugehörigen Geschwindigkeitsterme im Matrixskalarprodukt auf der rechten Seite.

Wie in [23] gehen wir für das flüssige Wasser von reibungsfreien Strömungen aus. Das heißt, es können nur Druckkräfte an der Oberfläche längs der Normalenrichtung $\boldsymbol{\nu}$ übertragen werden, vgl. [17]. Diese besitzen die Dichte $-p\boldsymbol{\nu}$, sodass wir also den Spannungstensor $\bar{\sigma} = -p\mathbb{I}$ erhalten, wobei p den Druck und \mathbb{I} die Einheitsmatrix bezeichnet. Für das Skalarprodukt der beiden Matrizen in (2.8) liefert dies

$$\bar{\sigma} : \nabla \mathbf{U}_l = -p\mathbb{I} : \nabla \mathbf{U}_l = -p \sum_{k=1}^n \frac{\partial (U_l)_k}{\partial x_k} = -p \operatorname{div} \mathbf{U}_l.$$

Des Weiteren nehmen wir an, dass keine Wärmequellen im Inneren des Gebiets existieren, sodass die Wärmeproduktionsrate $r = 0$ gesetzt werden kann. Damit lautet die Energieerhaltungsgleichung für das betrachtete Modell

$$\frac{\partial e_l}{\partial t} + \frac{\partial e_i}{\partial t} + \frac{\partial e_m}{\partial t} + \operatorname{div}(e_l \mathbf{U}_l) = -p \operatorname{div} \mathbf{U}_l - \operatorname{div} \mathbf{q},$$

oder mit der materiellen Ableitung (2.3)

$$\frac{d^l e_l}{dt} + \frac{\partial e_i}{\partial t} + \frac{\partial e_m}{\partial t} + e_l \operatorname{div} \mathbf{U}_l = -p \operatorname{div} \mathbf{U}_l - \operatorname{div} \mathbf{q}. \quad (2.9)$$

2.2 Modellierung

Neben den Erhaltungsgleichungen muss das Modell auch dem zweiten Hauptsatz der Thermodynamik genügen. Darauf, sowie auf modellspezifische Eigenschaften, gehen wir in diesem Abschnitt ein.

2.2.1 Zweiter Hauptsatz der Thermodynamik

Eine fundamentale Forderung der Thermodynamik an das System ist die Erfüllung des zweiten Hauptsatzes der Thermodynamik. Er besagt, dass Wärme ohne Einsatz anderer Energieformen nicht von kalten in warme Bereiche fließen und keine mechanische Energie durch bloßes Abkühlen gewonnen werden kann, vgl. [17].

Diese Forderung manifestiert sich in einer Bilanzgleichung für die Gesamtentropie in einem materiellen Volumen $V(t)$, die ein Maß für die Unordnung des Systems ist. Für die Entropie gilt, dass sie mit der Zeit nicht kleiner werden kann. Genauer heißt dies, dass die zeitliche Änderung der Entropie mit Dichte s mindestens so groß ist wie der Entropieabfluss über den Gebietsrand und der Entropiezugewinn durch Wärmequellen im Inneren des Gebiets.

Dies wird durch die *Clausius-Duhem-Ungleichung*

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} s \, d\mathbf{x} \geq - \int_{\partial V(t)} \frac{1}{u} \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\nu} \, dS + \int_{V(t)} \frac{r}{u} \, d\mathbf{x} \quad (2.10)$$

zum Ausdruck gebracht. Mit dem Reynoldsschen Transporttheorem (2.4) und dem Divergenzsatz von Gauß erhalten wir die differenzielle Beziehung

$$\frac{\partial s}{\partial t} + \operatorname{div}(s\mathbf{U}) \geq - \operatorname{div} \frac{\mathbf{q}}{u} + \frac{r}{u},$$

die für alle Lösungen der Erhaltungsgleichungen zu jeder Zeit t und in jedem Punkt \mathbf{x} erfüllt sein muss, damit das Modell *thermodynamisch konsistent* ist.

Durch Einführen einer *Entropieproduktionsrate* H , vgl. [23], lässt sich diese Beziehung als Gleichung formulieren. Der zweite Hauptsatz der Thermodynamik lautet dann

$$\frac{\partial s}{\partial t} + \operatorname{div}(s\mathbf{U}) = - \operatorname{div} \frac{\mathbf{q}}{u} + \frac{r}{u} + H \quad \text{mit } H \geq 0. \quad (2.11)$$

Die Entropieproduktionsrate, die aus irreversiblen Prozessen im Inneren des Gebiets resultiert, ist also gegeben durch

$$H := \frac{\partial s}{\partial t} + \operatorname{div}(s\mathbf{U}) + \operatorname{div} \frac{\mathbf{q}}{u} - \frac{r}{u}.$$

Übertragen auf das betrachtete Frémondsche Modell bedeutet dies

$$\frac{d^l s_l}{dt} + \frac{\partial s_i}{\partial t} + \frac{\partial s_m}{\partial t} + s_l \operatorname{div} \mathbf{U}_l = - \operatorname{div} \frac{\mathbf{q}}{u} + H, \quad (2.12)$$

mit der zugehörigen Entropieproduktionsrate

$$H := \frac{d^l s_l}{dt} + \frac{\partial s_i}{\partial t} + \frac{\partial s_m}{\partial t} + s_l \operatorname{div} \mathbf{U}_l + \operatorname{div} \frac{\mathbf{q}}{u}. \quad (2.13)$$

Neben dieser Bilanzgleichung für die Entropie, die ebenso wie die innere Energie von den Zustandsgrößen abhängt, werden wir im weiteren Verlauf auch die *Helmholtz-Beziehung*

$$s(\mathcal{E}) = -\frac{\partial \psi}{\partial u}(\mathcal{E}) \quad (2.14)$$

verwenden. Das in dieser Gleichung auftretende thermodynamische Potential ψ , die *freie Energie*, ist die Basisgröße zur Beschreibung der Materialeigenschaften, s. [23], und hängt von der Zustandsvariablen \mathcal{E} ab. Mit Hilfe der freien Energie, die unter anderem auch Interaktionen zwischen Wasser und dem porösen Medium berücksichtigt, werden wir über die Energieerhaltung und die thermodynamische Beziehung

$$\psi(\mathcal{E}) = e(\mathcal{E}) - s(\mathcal{E})u \quad (2.15)$$

konstitutive Gesetze herleiten, die der Clausius-Duhem-Ungleichung (2.10) genügen.

2.2.2 Interaktionsfunktionen

Die Eigenschaften des Zustands eines Materials werden durch die freie Energie beschrieben. Dabei spielt für Wasser in einem porösen Medium die mikroskopische Struktur, das heißt die Geometrie und die Verteilung der Poren in der Matrix, eine wesentliche Rolle, vgl. [23] und [25].

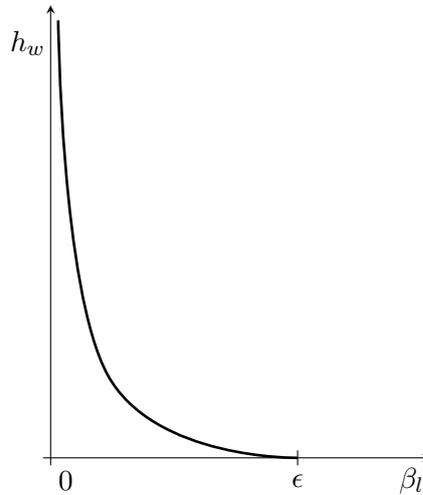
In den Poren der Matrix, die im Bereich der Korngrößen des Mediums liegen können, kommt es dabei zwischen dem Wasser und dem porösen Medium zu Interaktionen, die den Gefrierprozess beeinflussen. Diese strukturellen Effekte bewirken im makroskopischen Bereich einen progressiven Phasenübergang und andere unerwartete Phänomene, s. [23], die bei den freien Energien durch spezielle Funktionen als zusätzliche Entropieterme mitberücksichtigt werden und von den Volumenanteilen des Wassers abhängen.

Bei diesen Funktionen handelt es sich um eine Interaktionsfunktion h_w , sowie die phasen-spezifischen Funktionen h_l und h_i , die sich rein auf die Interaktion des flüssigen Wassers beziehungsweise des Eises mit der Porenwand beziehen.

Auf Grund der konstanten Porosität können wir den Anteil des Eises durch den Anteil des flüssigen Wassers ausdrücken, sodass die Interaktionsfunktion h_w mit

$$h_w(\beta_l) := h_l \beta_l + h_i \beta_i$$

als eine Funktion aufgefasst werden kann, die lediglich von β_l abhängt. Experimente belegen diese Abhängigkeit und zeigen, dass sie bezüglich β_l monoton fallend ist, sodass wir eine Funktion h_w wie in Abbildung 2.1 annehmen können.

Abbildung 2.1: Interaktionsfunktion h_w bzgl. β_l

2.2.3 Freie Energien

Die freien Energien für das in [23] betrachtete Modell lauten

$$\psi_l(\mathcal{E}) := -\rho\beta_l \frac{L}{u_c}(u - u_c) - \rho C_v \beta_l u \ln u + \rho\beta_l u h_l, \quad (2.16)$$

$$\psi_i(\mathcal{E}) := -\rho C_v \beta_i u \ln u + \rho\beta_i u h_i, \quad (2.17)$$

$$\begin{aligned} \psi_w(\mathcal{E}) &= \psi_l(\mathcal{E}) + \psi_i(\mathcal{E}) \\ &= -\rho\beta_l \frac{L}{u_c}(u - u_c) - \rho C_v \epsilon u \ln u + \rho\epsilon u h_w, \end{aligned} \quad (2.18)$$

$$\psi_m(\mathcal{E}) := -\rho_m C_m \beta_m u \ln u. \quad (2.19)$$

Hierbei ist u_c die *kritischen Temperatur*, die den Gefrierpunkt des Wassers angibt, L die latente Wärme, die während des Phasenübergangs bei der kritischen Temperatur frei wird, und C_v die spezifische Wärmekapazität des Wassers beziehungsweise C_m die des porösen Mediums. Für Wasser treten hier neben den klassischen Termen (Herleitung in Abschnitt A.2.2) auch Terme des im vorhergehenden Abschnitt 2.2.2 erwähnten energetischen Beitrags der Interaktion von Wasser mit der Porenwand in der Matrix auf.

Erweiterte freie Energien

Da im Frémondschen Modell die inneren Nebenbedingungen (2.2) als Eigenschaften des Materials und dessen Zustand angesehen werden, sollen sie ebenfalls in den freien Energien berücksichtigt werden.

Ziel ist es, die freien Energien für jegliche Werte von β_l , β_i und β_m zu definieren, um so die Abhängigkeiten zwischen den Volumenanteilen zu beseitigen. Das heißt, die freien Energien sind dann auch für physikalisch unmögliche Situationen definiert. Zugleich ist dabei die Einhaltung der inneren Nebenbedingungen für eine mögliche Evolution zu gewährleisten, vgl. [23] und [25].

In [23] geschieht dies durch Hinzufügen eines irregulären Terms: der Indikatorfunktion I_M (Definition s. A.1) auf der Menge

$$M := \{(\beta_l, \beta_i, \beta_m) \in \mathbb{R}^3 \mid 0 \leq \beta_l, \beta_i \leq 1 - \beta_m \text{ und } \beta_l + \beta_i = 1 - \beta_m\},$$

die durch die inneren Nebenbedingungen (2.2) bestimmt wird.

Wir erhalten also die erweiterten freien Energien

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_l(\mathcal{E}) &:= \psi_l(\mathcal{E}) + I_M(\beta_l, \beta_i, \beta_m) \\ &= -\rho\beta_l \frac{L}{u_c}(u - u_c) - \rho C_v \beta_l u \ln u + \rho\beta_l u h_l + I_M(\beta_l, \beta_i, \beta_m), \\ \bar{\psi}_i(\mathcal{E}) &:= \psi_i(\mathcal{E}) + I_M(\beta_l, \beta_i, \beta_m) = -\rho C_v \beta_i u \ln u + \rho\beta_i u h_i + I_M(\beta_l, \beta_i, \beta_m), \\ \bar{\psi}_m(\mathcal{E}) &:= \psi_m(\mathcal{E}) + I_M(\beta_l, \beta_i, \beta_m) = -\rho_m C_m \beta_m u \ln u + I_M(\beta_l, \beta_i, \beta_m), \end{aligned}$$

die zwar bezüglich der Temperatur glatt bleiben, aber Unstetigkeiten bezüglich der Volumenanteile zulassen.

Die Definition der Entropie über die Helmholtz-Beziehung und der inneren Energie erfolgt wie in (2.14) und (2.15) weiterhin mit der ursprünglichen freien Energie ψ , also

$$s(\mathcal{E}) = -\frac{\partial \psi}{\partial u}(\mathcal{E}) \quad \text{und} \quad e(\mathcal{E}) = \psi(\mathcal{E}) + s(\mathcal{E})u.$$

Somit lauten die inneren Energien unter Verwendung von (2.16) - (2.19)

$$e_l = \rho\beta_l L + \rho\beta_l C_v u, \quad e_i = \rho\beta_i C_v u, \quad e_m = \rho_m \beta_m C_m u. \quad (2.20)$$

2.2.4 Subdifferential der Indikatorfunktion und Reaktionen auf die inneren Nebenbedingungen

In diesem Abschnitt betrachten wir das Subdifferential ∂I_M der Indikatorfunktion I_M , Definition s. A.2. Dabei gehen wir näher auf die Subgradienten und deren Komponenten ein, die wir *Reaktionen* $R_{a_1 a_2}$ mit $a_1, a_2 \in \{l, i\}$ auf die inneren Nebenbedingungen (2.2) nennen und den Phasenübergang charakterisieren.

Für einen Materiepunkt flüssigen Wassers sind diese Reaktionen definiert durch

$$\begin{aligned} &\{R_{ll}(\beta_l(t, \mathbf{x}), \beta_i(t, \mathbf{x}), \beta_m, t, \mathbf{x}), R_{li}(\beta_l(t, \mathbf{x}), \beta_i(t, \mathbf{x}), \beta_m, t, \mathbf{x}), 0\} \\ &\in \partial I_M(\beta_l(t, \mathbf{x}), \beta_i(t, \mathbf{x}), \beta_m), \end{aligned}$$

und für einen Materiepunkt aus Eis durch

$$\begin{aligned} & \{R_{il}(\beta_l(t, \mathbf{x}), \beta_i(t, \mathbf{x}), \beta_m, t, \mathbf{x}), R_{ii}(\beta_l(t, \mathbf{x}), \beta_i(t, \mathbf{x}), \beta_m, t, \mathbf{x}), 0\} \\ & \in \partial I_M(\beta_l(t, \mathbf{x}), \beta_i(t, \mathbf{x}), \beta_m). \end{aligned}$$

Das Subdifferential ∂I_M in $(\beta_l, \beta_i, \beta_m)$ ist genau dann nicht leer, wenn $(\beta_l, \beta_i, \beta_m)$ in der Menge M liegt, also $I_M(\beta_l, \beta_i, \beta_m) = 0$ und damit die inneren Nebenbedingungen erfüllt sind.

Außerdem gilt für die Reaktionen eines Subgradienten $(R_{al}, R_{ai}, 0) \in \partial I_M(\beta_l, \beta_i, \beta_m)$ in einem Materiepunkt des Mediums a , wie in Abschnitt A.2.3 gezeigt wird,

$$(R_{al}, R_{ai}, 0) \in \partial I_M(\beta_l, \beta_i, \beta_m) \Leftrightarrow \begin{cases} R_{ai} \geq 0 \text{ und } R_{al} - R_{ai} \leq 0 & \text{für } \beta_l = 0, \\ R_{al} \geq 0 \text{ und } R_{al} - R_{ai} \geq 0 & \text{für } \beta_l = \epsilon, \\ R_{al} = R_{ai} & \text{für } 0 < \beta_l < \epsilon. \end{cases} \quad (2.21)$$

Diese Reaktionen besitzen zudem die folgenden Eigenschaften:

Satz 2.1 (s. [23], Theorem 11.4). *Für jede mögliche Entwicklung, für die die inneren Nebenbedingungen (2.2) erfüllt sind, gilt*

$$\begin{aligned} \forall (R_{ll}, R_{li}, 0) \in \partial I_M(\beta_l, \beta_i, \beta_m) : & \quad \frac{d^l \beta_l}{dt} R_{ll} + \frac{d^l \beta_i}{dt} R_{li} \geq 0, \\ \forall (R_{il}, R_{ii}, 0) \in \partial I_M(\beta_l, \beta_i, \beta_m) : & \quad \frac{\partial \beta_l}{\partial t} R_{il} + \frac{\partial \beta_i}{\partial t} R_{ii} \geq 0, \end{aligned}$$

wobei es sich bei den Zeitableitungen um linksseitige Ableitungen handelt.

In Abschnitt A.2.3 findet sich der Beweis dieses Satzes.

Die zeitlichen Änderungen der Volumenanteile in den obigen Ungleichungen unterliegen ebenfalls den Nebenbedingungen, also (2.2)

$$\beta_l(\mathbf{x}, t) + \beta_i(\mathbf{x}, t) = \epsilon.$$

Die substantielle Ableitung und partielle zeitliche Ableitung dieser Gleichung liefert (vgl. Bemerkung 11.16 in [23])

$$\frac{d^l \beta_l}{dt} + \frac{d^l \beta_i}{dt} = 0 \quad \text{und} \quad \frac{\partial \beta_l}{\partial t} + \frac{\partial \beta_i}{\partial t} = 0.$$

Diese Eigenschaften der Reaktionen und Geschwindigkeiten der Volumenanteile werden bei der Aufstellung der konstitutiven Gesetze verwendet.

2.2.5 Konstitutive Gesetze

Um ein poröses Medium im Rahmen der Kontinuumsmechanik vollständig beschreiben zu können, müssen neben den Erhaltungsgleichungen auch konstitutive Gesetze für alle thermodynamischen Größen aufgestellt werden, die nicht direkt aus den Bewegungs- und Temperaturzuständen bestimmt werden können.

Die *konstitutiven Gesetze*, auch *Materialgesetze* oder *konstitutiven Gleichungen* genannt, stellen die Beziehung zwischen der Entropiequelle H , den inneren Kräften, den Zustandsgrößen und der Historie der Materialien her. Dabei dürfen sie nicht im Widerspruch zum zweiten Hauptsatz der Thermodynamik (2.11) oder den inneren Nebenbedingungen (2.2) stehen, vgl. [19].

Ausgangspunkt ist die Energieerhaltungsgleichung (2.9). Unter Verwendung der thermodynamischen Beziehung $e = \psi + us$, der Helmholtz-Beziehung $s = -\frac{\partial \psi}{\partial u}$ und Einsetzen der Bilanzgleichung für die Entropie (2.12) erhalten wir, s. Abschnitt A.2.4,

$$\frac{\partial \psi_l}{\partial \beta_l} \frac{d^l \beta_l}{dt} + \frac{\partial \psi_l}{\partial \beta_i} \frac{d^l \beta_i}{dt} + \frac{\partial \psi_i}{\partial \beta_l} \frac{\partial \beta_l}{\partial t} + \frac{\partial \psi_i}{\partial \beta_i} \frac{\partial \beta_i}{\partial t} + \psi_l \operatorname{div} \mathbf{U}_l + \frac{\mathbf{q}}{u} \cdot \nabla u + uH = -p \operatorname{div} \mathbf{U}_l.$$

Damit ist die Entropieproduktionsrate H aus (2.13) gegeben durch

$$uH = -\frac{\partial \psi_l}{\partial \beta_l} \frac{d^l \beta_l}{dt} - \frac{\partial \psi_l}{\partial \beta_i} \frac{d^l \beta_i}{dt} - \frac{\partial \psi_i}{\partial \beta_l} \frac{\partial \beta_l}{\partial t} - \frac{\partial \psi_i}{\partial \beta_i} \frac{\partial \beta_i}{\partial t} - \psi_l \operatorname{div} \mathbf{U}_l - \frac{\mathbf{q}}{u} \cdot \nabla u - p \operatorname{div} \mathbf{U}_l. \quad (2.22)$$

Wir gehen davon aus, dass die Entropieproduktion durch dissipative Kräfte \mathbf{F}^d hervorgerufen wird, sowie durch Kräfte, die aus den Reaktionen $R_{a_1 a_2}$ mit $a_1, a_2 \in \{l, i\}$ auf die inneren Nebenbedingungen herrühren und die wir mit dem Vektor \mathbf{F}_{reac} bezeichnen.

Die Historie der Materialien und deren thermodynamische Heterogenität werden durch einen Vektor $\delta \mathcal{E}$ repräsentiert, der die Änderung des Zustands, also die Evolution der Zustandsvariablen \mathcal{E} beschreibt. Damit lässt sich die Gleichung (2.22) wie folgt formulieren

$$uH = \mathbf{F}^d \cdot \delta \mathcal{E} + \mathbf{F}_{\text{reac}} \cdot \delta \mathcal{E}. \quad (2.23)$$

Aus dieser Gleichung erhalten wir für die Zustandsänderung

$$\delta \mathcal{E} = \left(\operatorname{div} \mathbf{U}_l, \frac{d^l \beta_l}{dt}, \frac{d^l \beta_i}{dt}, \frac{\partial \beta_l}{\partial t}, \frac{\partial \beta_i}{\partial t}, \nabla u \right)^T. \quad (2.24)$$

Die Komponenten des reaktiven Kraftvektors \mathbf{F}_{reac} sind genau die Reaktionen auf die inneren Nebenbedingungen (2.2). Er ist demnach gegeben durch

$$\mathbf{F}_{\text{reac}} = (0, R_{ll}, R_{li}, R_{il}, R_{ii}, 0)^T. \quad (2.25)$$

Somit gilt für die reaktive Entropieproduktion H_{reac} , die aus eben diesen Reaktionen resultiert

$$uH_{\text{reac}} = \mathbf{F}_{\text{reac}} \cdot \delta \mathcal{E}. \quad (2.26)$$

Dabei stellt Satz 2.1 für positive u sicher, dass $H_{\text{reac}} \geq 0$ ist, weil

$$uH_{\text{reac}} = \mathbf{F}_{\text{reac}} \cdot \delta \mathcal{E} = \underbrace{\frac{d^l \beta_l}{dt} R_{ll} + \frac{d^l \beta_i}{dt} R_{li}}_{\geq 0} + \underbrace{\frac{\partial \beta_l}{\partial t} R_{il} + \frac{\partial \beta_i}{\partial t} R_{ii}}_{\geq 0} \stackrel{\text{Satz 2.1}}{\geq} 0.$$

Den dissipativen Kraftvektor \mathbf{F}^d , der die Differenz von inneren und nicht dissipativen Kräften beinhaltet, erhalten wir aus den Gleichungen (2.22) und (2.23). Es gilt

$$\mathbf{F}^d = \left(-(p + \psi_l), -\frac{\partial \psi_l}{\partial \beta_l} - R_{ll}, -\frac{\partial \psi_l}{\partial \beta_i} - R_{li}, -\frac{\partial \psi_i}{\partial \beta_l} - R_{il}, -\frac{\partial \psi_i}{\partial \beta_i} - R_{ii}, -\frac{\mathbf{q}}{u} \right)^T. \quad (2.27)$$

2.2.6 Pseudopotential der Dissipation

Im Folgenden werden wir die dissipativen Kräfte bestimmen und so die konstituierenden Gleichungen aufstellen. Hierfür wählen wir wie in [23], [28], [39] oder [13] einen sehr eleganten Weg, indem wir ein sogenanntes *Pseudopotential der Dissipation* $\Phi^d = \Phi^d(\mathcal{E}, \mathcal{W})$ einführen. Dieses hängt neben den Zustandsgrößen \mathcal{E} auch von einem Vektor \mathcal{W} ab, der zeitliche Änderungsraten wie partielle Zeitableitungen, Geschwindigkeiten und Flüsse beinhaltet. Dabei beschreibt dieser Vektor die tatsächliche Evolution des Materials, wenn es sich bei ihm um den Vektor $\delta \mathcal{E}$ handelt.

Mit Hilfe dieses Pseudopotentials lassen sich dann hinreichende Bedingungen für die thermodynamische Konsistenz des Modells angeben. Dabei handelt es sich bei Φ^d immer dann um ein Pseudopotential der Dissipation, wenn Φ^d eine nichtnegative Funktion ist, die bezüglich \mathcal{W} konvex und subdifferenzierbar ist mit $\Phi^d(\mathcal{E}, \mathbf{0}) = 0$.

Wir gehen also davon aus, dass ein Vektor $\mathcal{G}^d(\mathcal{E}, \mathcal{W})$ existiert, sodass die dissipativen Kräfte definiert sind durch $\mathcal{G}^d \in \partial \Phi^d$ und dass für alle \mathcal{E} und \mathcal{W}

$$\mathcal{G}^d \cdot \mathcal{W} \geq 0$$

gilt. Da jedoch die Geschwindigkeiten in $\delta \mathcal{E}$ nicht unabhängig voneinander sind - die Kopplung tritt durch die Massenerhaltung (2.6) auf - muss diese Ungleichung modifiziert werden. Wir nehmen daher an, dass es Reaktionen $\lambda(\mathbf{x}, t)$ auf diese Abhängigkeit gibt, sodass für alle \mathcal{E} und \mathcal{W} gilt

$$\mathcal{G}^d \cdot \mathcal{W} \geq \lambda \Delta M_w,$$

also

$$\mathcal{G}^d \cdot \mathcal{W} \geq \lambda \rho \left(\frac{d^l \beta_l}{dt} + \frac{\partial \beta_i}{\partial t} + \beta_l \operatorname{div} \mathbf{U}_l \right). \quad (2.28)$$

Damit sind die *konstitutiven Gleichungen* gegeben durch

$$H(\mathcal{E}, \delta\mathcal{E}, \mathbf{x}, t) = \mathcal{G}^d \cdot \delta\mathcal{E} + H_{\text{reac}}(\mathcal{E}, \delta\mathcal{E}, \mathbf{x}, t), \quad (2.29)$$

mit

$$\begin{aligned} \mathbf{F}^d(\mathcal{E}, \delta\mathcal{E}, \mathbf{x}, t) &= u\mathcal{G}^d(\mathcal{E}, \delta\mathcal{E}, \mathbf{x}, t), \\ uH_{\text{reac}}(\mathcal{E}, \delta\mathcal{E}, \mathbf{x}, t) &= \mathbf{F}_{\text{reac}}(\mathcal{E}, \mathbf{x}, t) \cdot \delta\mathcal{E}. \end{aligned}$$

Bei der Massenerhaltung handelt es sich um eine Nebenbedingung, die die Geschwindigkeiten involviert - im Gegensatz zu den inneren Nebenbedingungen (2.2), die nur auf den Zustandsgrößen \mathcal{E} beruhen. Die Reaktionen λ sind deshalb als dissipative Eigenschaften definiert, wobei die Reaktionen $R_{a_1 a_2}$ auf die inneren Nebenbedingungen (2.2) für $a_1, a_2 \in \{l, i\}$ nichtdissipative Eigenschaften besitzen.

Im betrachteten Frémondschen Modell wird demnach der Phasenübergang als nicht dissipativ angenommen, sodass die Dissipation lediglich aus der thermalen Leitfähigkeit herrührt.

Wir können also die Komponenten des Vektors $\mathcal{G}^d = (\mathcal{G}_1^d, \dots, \mathcal{G}_6^d, \mathcal{G}_7^d)^T$ durch

$$\mathcal{G}^d = \mathcal{G}_{\text{reac}}^d + \mathcal{G}^{dd}$$

in einen reaktiven, nicht dissipativen Part $\mathcal{G}_{\text{reac}}^d = (\mathcal{G}_1^d, \dots, \mathcal{G}_6^d, 0)^T$ und einen dissipativen Part $\mathcal{G}^{dd} = (0, \dots, 0, \mathcal{G}_7^d)^T$ aufteilen, weil lediglich die letzte Komponente \mathcal{G}_7^d zusammen mit $\delta\mathcal{E}$ einen energetischen Beitrag mit dem Temperaturgradienten liefern kann.

Schränken wir die Ungleichung (2.28) auf den nicht dissipativen Part $\mathcal{G}_{\text{reac}}^d$ ein, so wird diese zur Gleichung

$$\mathcal{G}_{\text{reac}}^d \cdot \delta\mathcal{E} = \lambda \Delta M_w, \quad (2.30)$$

da $\Delta M_w = 0$.

Aus den Gleichungen (2.22) und (2.29) folgt

$$u\mathcal{G}^{dd} \cdot \delta\mathcal{E} = -\frac{\mathbf{q}}{u} \cdot \nabla u. \quad (2.31)$$

Klassischerweise wählt man für die Dichte des Wärmeflusses die Beziehung

$$\mathbf{q} = -\kappa \nabla u,$$

die auch *Fourier Gesetz* genannt wird. Es folgt aus der einfachen Beobachtung, dass Wärme aus wärmeren Bereichen in kältere Bereiche fließt, s. [17]. Dabei ist $-\nabla u$ die stärkste Abstiegsrichtung. Da für das vorliegende Modell isotrope Eigenschaften angenommen werden, ist die Wärmeleitfähigkeit κ hier eine positive Konstante.

Diese Wahl garantiert, dass aus (2.31) durch

$$\mathcal{G}^{dd} \cdot \delta \mathcal{E} = \frac{\kappa}{u^2} |\nabla u|^2 \geq 0. \quad (2.32)$$

mit $\kappa > 0$ ein nichtnegativer Beitrag zur Entropieproduktion geliefert wird.

Damit liefert (2.29), (2.30) und (2.32)

$$\mathcal{G}^d = \left(\lambda \rho \beta_l, \lambda \rho, 0, 0, \lambda \rho, \frac{\kappa}{u^2} \nabla u \right)^T,$$

und wir erhalten durch (2.29) mit (2.24), (2.25), (2.26), (2.27) und das Fourier Gesetz die konstitutiven Gleichungen

$$\begin{aligned} -(p + \psi_l) &= u \lambda \rho \beta_l, \\ -\frac{\partial \psi_l}{\partial \beta_l} - R_{ll} &= \lambda u \rho, \\ -\frac{\partial \psi_l}{\partial \beta_i} - R_{li} &= 0, \\ -\frac{\partial \psi_i}{\partial \beta_l} - R_{il} &= 0, \\ -\frac{\partial \psi_i}{\partial \beta_i} - R_{ii} &= \lambda u \rho, \\ -\mathbf{q} &= \kappa \nabla u. \end{aligned} \quad (2.33)$$

2.2.7 Modellgleichungen

Zusammenfassend erhalten wir die folgenden, für das betrachtete Frémondsche Modell relevanten Differentialgleichungen für die Zustandsgrößen β_l , β_i , β_m und u .

Dazu setzen wir die entsprechenden Definitionen der freien Energien nach Kapitel 2.2.3, die inneren Energien (2.20) und das Fourier Gesetz ein und erhalten die *Massenerhaltung für Wasser*

$$\rho \frac{d^l \beta_l}{dt} + \rho \frac{\partial \beta_i}{\partial t} + \rho \beta_l \operatorname{div} \mathbf{U}_l = 0 \quad (2.34)$$

sowie die *Energieerhaltung*

$$\begin{aligned} \rho(C_v u + L) \frac{d^l \beta_l}{dt} + \rho C_v \beta_l \frac{d^l u}{dt} + \rho C_v u \frac{\partial \beta_i}{\partial t} + \rho C_v \beta_i \frac{\partial u}{\partial t} \\ + \rho_m \beta_m C_m \frac{\partial u}{\partial t} + \rho \beta_l (C_v u + L) \operatorname{div} \mathbf{U}_l - \kappa \Delta u = -p \operatorname{div} \mathbf{U}_l. \end{aligned} \quad (2.35)$$

Dabei sind die konstitutiven Gleichungen (2.33)

$$-p + \rho\beta_l \frac{L}{u_c}(u - u_c) + \rho C_v \beta_l u \ln u - \rho\beta_l u h_l = \lambda u \rho \beta_l, \quad (2.36)$$

$$\rho \frac{L}{u_c}(u - u_c) + \rho C_v u \ln u - \rho u h_l - \rho u \beta_l \frac{\partial h_l}{\partial \beta_l} - R_{ll} = \lambda u \rho, \quad (2.37)$$

$$-\rho\beta_l u \frac{\partial h_l}{\partial \beta_l} - R_{li} = 0, \quad (2.38)$$

$$-\rho\beta_i u \frac{\partial h_i}{\partial \beta_i} - R_{il} = 0, \quad (2.39)$$

$$\rho C_v u \ln u - \rho u h_i - \rho\beta_i u \frac{\partial h_i}{\partial \beta_i} - R_{ii} = \lambda u \rho. \quad (2.40)$$

$$-\mathbf{q} = \kappa \nabla u. \quad (2.41)$$

zu erfüllen.

Wie in Abschnitt 2.2.5 eingangs erwähnt wurde, müssen die konstitutiven Gesetze den inneren Nebenbedingungen und dem zweiten Hauptsatz der Thermodynamik $H \geq 0$ genügen. Dies ist tatsächlich der Fall, vgl. Theorem 11.5, [23]. Dabei wird die Positivität der absoluten Temperatur u im Modell von Frémond vorausgesetzt. Dies kann durch Fallunterscheidung bezüglich β_l gewährleistet werden, was im Anhang in Abschnitt A.2.6 gezeigt wird.

2.2.8 Erweiterung auf ein schwachkompressibles Modell

Bei dem bisher betrachteten Modell mit Gleichungen aus Abschnitt 2.2.7 handelt es sich um ein *inkompressibles Modell*, das heißt, die Dichte des Wassers wird als konstant angenommen.

Um kleineren Druckunterschieden innerhalb des Gewebes gerecht zu werden, ist die Erweiterung auf ein *schwachkompressibles Modell* sinnvoll. Schwachkompressibel bedeutet, dass es für Dichte und Druck nur kleine Änderungen $\tilde{\rho}$ und \tilde{p} um Mittelwerte ρ_0 und p_0 gibt, die sich proportional zueinander verhalten mit einem Proportionalitätsfaktor α , vgl. [4].

Das heißt, dass Dichte und Druck folgende Bedingungen erfüllen:

$$\rho = \rho_0 + \tilde{\rho}, \quad p = p_0 + \tilde{p} \quad \text{mit } \tilde{\rho} = \alpha \tilde{p}. \quad (2.42)$$

Außerdem sind die Änderungen relativ zu den Mittelwerten gesehen sehr klein, also gilt $\tilde{\rho} \ll \rho_0$ und $\tilde{p} \ll p_0$. Daher können Produkte, in denen $\tilde{\rho}$ und \tilde{p} als Faktoren auftreten, vernachlässigt werden.

Mit der Kontinuitätsgleichung (2.5) erhalten wir mit $\mu_w = (\rho_0 + \tilde{\rho})(\beta_l + \beta_i)$ für diesen Modellansatz für die Massenerhaltung des Wassers

$$\rho_0 \frac{\partial \beta_l}{\partial t} + \rho_0 \frac{\partial \beta_i}{\partial t} + \epsilon \frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial t} + \rho_0 \operatorname{div}(\beta_l \mathbf{U}_l) = 0.$$

Auf Grund der konstanten Porosität ϵ kann diese Gleichung noch vereinfacht werden zu

$$\epsilon \frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial t} + \rho_0 \operatorname{div}(\beta_l \mathbf{U}_l) = 0. \quad (2.43)$$

Über die Beziehung in (2.42) können wir so eine Bedingung für die Druckänderung herleiten:

$$\frac{\partial \tilde{p}}{\partial t} = -\frac{\rho_0 \operatorname{div}(\beta_l \mathbf{U}_l)}{\alpha \epsilon}.$$

Zur Energieerhaltung (2.35) des inkompressiblen Modells kommen noch die Terme bezüglich der Variation in der Dichte hinzu, sodass wir für das schwachkompressible Modell die Energieerhaltungsgleichung

$$\begin{aligned} & \rho_0(C_v u + L) \frac{d^l \beta_l}{dt} + \rho_0 C_v \beta_l \frac{d^l u}{dt} + \rho_0 C_v u \frac{\partial \beta_i}{\partial t} + \rho_0 C_v \beta_i \frac{\partial u}{\partial t} + \rho_m \beta_m C_m \frac{\partial u}{\partial t} \\ & + \rho_0 \beta_l (C_v u + L) \operatorname{div} \mathbf{U}_l + \frac{\partial \tilde{p}}{\partial t} (C_v \epsilon u + \beta_l L) - \kappa \Delta u = -p_0 \operatorname{div} \mathbf{U}_l. \end{aligned} \quad (2.44)$$

betrachten.

Die konstitutiven Gleichungen (2.36) - (2.41) werden, mit den entsprechenden Annahmen für das schwachkompressible Modell, weiter verwendet.

Kapitel 3

Modellreduktion und Existenzsatz

Nachdem wir in Kapitel 2 die Gleichungen des Frémondschen Modells hergeleitet haben, erfolgt nun die mathematische Analyse dieses Modells. Hierfür ist jedoch das ursprüngliche Gleichungssystem aus Abschnitt 2.2.7 zu komplex, sodass wir es zunächst etwas vereinfachen werden.

3.1 Reduktion des Modells

Um die Modellreduktion durchzuführen, stellen wir in diesem Abschnitt Beobachtungen zu ein paar Eigenschaften des vorliegenden Modells auf, um anschließend geeignete Vereinfachungen treffen zu können, die es uns dann ermöglichen, die Existenz einer schwachen Lösung zu zeigen.

Die erste Beobachtung betrifft Eigenschaften der Reaktionen auf die inneren Nebenbedingungen (2.2), die sich in den konstitutiven Gesetzen (2.37) - (2.40) widerspiegeln. Diese vier Gleichungen lassen sich, wie in Abschnitt A.2.5 beschrieben, zu einer Materialgleichung

$$\rho \frac{L}{u_c} (u - u_c) = \rho u \frac{\partial h_w(\beta_l)}{\partial \beta_l} + \tilde{R}(\beta_l), \quad (3.1)$$

mit einer Ersatz-Reaktionsfunktion

$$\tilde{R}(\beta_l) := (R_{ll} - R_{li}) + (R_{il} - R_{ii})$$

zusammenfassen, wodurch eine erste Reduktion des Modells erfolgt. Das Verhalten dieser Reaktionsfunktion kann dabei in Abhängigkeit von β_l aus den Eigenschaften der Reaktionen nach Abschnitt A.2.3 bestimmt werden.

Die zweite Beobachtung bezieht sich auf die Eigenschaft der Interaktionsfunktion $h_w(\beta_l)$. In Abschnitt 2.2.2 haben wir bereits gesehen, dass die Interaktionen des Wassers mit der Porenwand durch diese Funktion ausgedrückt werden können, die vom Volumenanteil β_l des flüssigen Wassers abhängt und experimentell bestimmt werden kann. Ein Verlauf dieser Funktion wurde dabei in Abbildung 2.1 angegeben.

Im Zusammenhang mit dieser Interaktionsfunktion machen wir noch weitere Beobachtungen.

Oberhalb der Gefriertemperatur u_c liegt Wasser ausschließlich in flüssiger Form vor, das heißt, in diesem Bereich sind die Volumenanteile $\beta_l = \epsilon$ und $\beta_i = 0$ konstant. Bei Temperaturen unterhalb oder gleich u_c kann Wasser sowohl in flüssiger als auch in fester Form, also Eis, vorliegen. In diesem Bereich, das heißt für $0 < \beta_l < \epsilon$, ist $\tilde{R}(\beta_l) = 0$, da hier für die Reaktionen $(R_{ll} - R_{li}) = (R_{il} - R_{ii}) = 0$ gilt, vgl. Abschnitt A.2.3.

Dadurch reduziert sich die Materialgleichung (3.1) auf

$$\frac{\partial h_w(\beta_l)}{\partial \beta_l} = \frac{L(u - u_c)}{u_c u} \quad \text{für } 0 < \beta_l < \epsilon,$$

sodass β_l als eine Funktion in Abhängigkeit von der Temperatur darstellbar ist.

Experimente liefern hierfür eine wie in Abbildung 3.1 dargestellte Kurve.

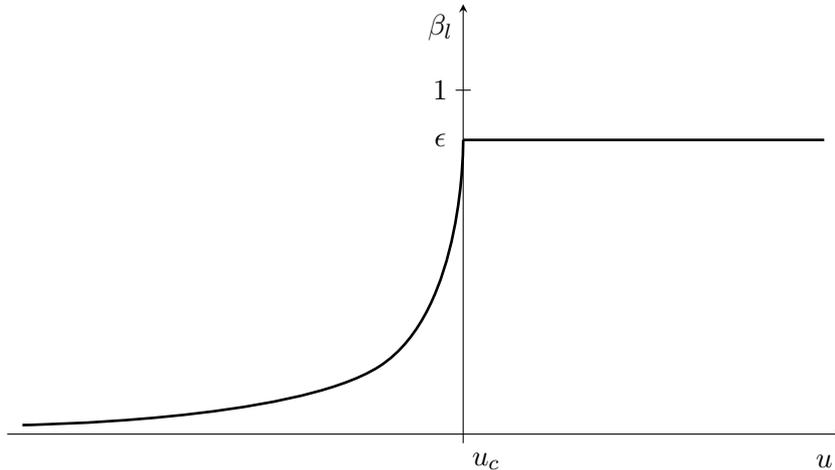


Abbildung 3.1: Volumenanteil des Wassers β_l in Abhängigkeit der Temperatur u

Wir können β_l also wie folgt formal definieren

$$\beta_l := \varphi \left(\frac{L(u - u_c)}{u_c u} \right), \quad \text{mit } \varphi(y) := \left(\frac{\partial h_w(\beta_l)}{\partial \beta_l} \right)^{-1} (y). \quad (3.2)$$

Für die zeitliche Ableitung von β_l gilt somit

$$\frac{\partial \beta_l}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \varphi \left(\frac{L(u - u_c)}{u_c u} \right). \quad (3.3)$$

Da in dieser Arbeit vor allem der Phasenübergang zwischen flüssigem Wasser und Eis im porösen Medium von Interesse ist, führen wir für das betrachtete Modell nun die folgenden

Vereinfachungen durch, um im weiteren Verlauf die Existenz einer schwachen Lösung zeigen zu können:

1. Wir befinden uns in der „Matschzone“, das heißt es gilt $0 < \beta_l < \epsilon$. Weil $\beta_i = \epsilon - \beta_l$ ist, gilt somit auch $0 < \beta_i < \epsilon$. Damit betrachten wir Temperaturen $u \leq u_c$, wodurch die Differenzierbarkeit von φ gewährleistet ist.
2. Da das betrachtete Gebiet sehr klein ist, kann angenommen werden, dass auch die Geschwindigkeit \mathbf{U}_l sehr klein ist; wir setzen hier $\mathbf{U}_l = 0$.

Die Annahme $\mathbf{U}_l = \mathbf{0}$ hat zur Folge, dass sowohl bei der Massenerhaltung (2.34) als auch bei der Energieerhaltung (2.35) die Divergenzterme verschwinden und die materielle Ableitung auf eine reine partielle Zeitableitung reduziert wird. Außerdem können auf Grund der konstanten Porosität die Zeitableitungen von β_i durch Zeitableitungen von β_l ausgedrückt werden, sodass β_i als Modellvariable entfallen kann.

Dies impliziert, dass die Massenerhaltung (2.34) wegen

$$\rho \frac{\partial \beta_l}{\partial t} + \rho \frac{\partial \beta_i}{\partial t} = \rho \frac{\partial \beta_l}{\partial t} + \rho \underbrace{\frac{\partial \beta_i}{\partial \beta_l}}_{=-1} \frac{\partial \beta_l}{\partial t} = 0$$

für jeglichen Volumenanteil β_l stets erfüllt ist und bei den Modellgleichungen vernachlässigt werden kann.

Somit ergibt sich für die Energieerhaltung (2.35)

$$\begin{aligned} 0 &= \rho(C_v u + L) \frac{\partial \beta_l}{\partial t} + \rho C_v \beta_l \frac{\partial u}{\partial t} - \rho C_v u \frac{\partial \beta_l}{\partial t} + \rho C_v (\epsilon - \beta_l) \frac{\partial u}{\partial t} + \rho_m \beta_m C_m \frac{\partial u}{\partial t} - \kappa \Delta u \\ &= \rho L \frac{\partial \beta_l}{\partial t} + \underbrace{(\rho C_v \epsilon + \rho_m \beta_m C_m)}_{=:c} \frac{\partial u}{\partial t} - \kappa \Delta u, \end{aligned} \quad (3.4)$$

wobei c eine positive Konstante ist.

Bemerkung 3.1. *Im Falle des schwachkompressiblen Modells aus Abschnitt 2.2.8 liefert die Massenerhaltung (2.43) mit den obigen Annahmen*

$$\epsilon \frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial t} = 0.$$

Es gibt also keine Änderungen in der Dichte und folglich auch nicht im Druck, sodass wir für das schwachkompressible Modell dasselbe reduzierte Modell erhalten. Die nachstehenden analytischen Betrachtungen gelten folglich auch für dieses Modell.

3.2 Anfangs-Randwertprobleme

Ausgehend von den Modellgleichungen aus Abschnitt 2.2.7 stellen wir nun mit Hilfe der Modellreduktionen aus Abschnitt 3.1 ein Anfangs-Randwertproblem als Phasenfeldmodell auf. Weitere Umformungen bezüglich des Volumenanteils β_l ermöglichen es dieses Problem in ein äquivalentes Anfangs-Randwertproblem zu überführen, das auf einer quasilinearen parabolischen Differentialgleichung basiert und auf das wir uns im weiteren Verlauf der Arbeit beziehen werden.

Um die beiden Probleme formulieren zu können, ist neben passenden Anfangswerten u_0 die Wahl sinnvoller Randbedingungen wichtig.

In unserem Fall benötigen wir eine Randbedingung, die es uns ermöglicht das Einfrieren von Gewebe in einem Gebiet Ω zu betrachten. Hierfür bietet sich eine *Randbedingung dritter Art* an, auch *Robin-Randbedingung* genannt. Sie beschreibt, wie die Temperatur in dem betrachteten Körper durch ein äußeres Medium, das an dem Körper anliegt, mit vorgegebener Temperatur g beeinflusst wird.

Als Ansatz wählen wir dafür das *Newtonsche Abkühlungsgesetz*, vgl. [17]. Hier wird davon ausgegangen, dass sich der Wärmeverlust am Rand des betrachteten Gebiets proportional zur Differenz von Randtemperatur und Temperatur im Kühlmedium verhält, also

$$-\frac{\partial u}{\partial \nu} = \gamma(u - g).$$

Der Proportionalitätsfaktor γ wird *Wärmetransferkoeffizient* oder auch *Wärmedurchgangskoeffizient* genannt.

3.2.1 Das Phasenfeldmodell

Durch die Einschränkungen aus Abschnitt 3.1 gelangen wir zu einem reduzierten Modell, dem *Phasenfeldmodell*

$$\rho L \frac{\partial \beta_l}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial t} - \kappa \Delta u = 0 \quad \text{in } \Omega_T. \quad (3.5)$$

Zu diesem Modell betrachten wir die Anfangs- und Randbedingungen

$$-\frac{\partial u}{\partial \nu} = \gamma(u - g) \quad \text{auf } \Gamma_T, \quad (3.6)$$

$$u(\cdot, 0) = u_0 \quad \text{auf } \Omega. \quad (3.7)$$

Dabei ist $\Omega_T := \Omega \times [0, T]$ ein Raum-Zeit-Zylinder mit beschränktem Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ und Lipschitzrand Γ und $\Gamma_T := \Gamma \times [0, T]$, sowie $g > 0$ eine gegebene Randfunktion und γ ein konstanter, positiver Wärmedurchgangskoeffizient.

Wie wir bereits in Abschnitt 3.1 gesehen haben, kann die Phase β_l durch (3.2)

$$\beta_l = \varphi \left(\frac{L(u - u_c)}{u_c u} \right), \quad \text{mit } \varphi(y) = \left(\frac{\partial h_w(\beta_l)}{\partial \beta_l} \right)^{-1} (y) \quad (3.8)$$

als Funktion in Abhängigkeit von der Temperatur u geschrieben werden. Dadurch ist es möglich die Differentialgleichung (3.5) mit nur einer Unbekannten, der Temperatur u , zu formulieren. Dazu überführen wir nun die Gleichung (3.5) durch

$$\frac{\partial}{\partial t} b(u) := \frac{1}{\kappa} \frac{\partial}{\partial t} (\rho L \beta_l + cu) \quad (3.9)$$

in eine quasilineare parabolische Differentialgleichung der Form

$$\frac{\partial}{\partial t} b(u) - \Delta u = 0.$$

Integration von (3.9) über t liefert mit (3.3)

$$b(u) = \frac{\rho L}{\kappa} \varphi \left(\frac{L(u - u_c)}{u_c u} \right) + \frac{c}{\kappa} u + C, \quad (3.10)$$

wobei C eine beliebige Konstante ist.

Um dem Verlauf von β_l aus Abbildung 3.1 zu entsprechen, seien außerdem φ und damit auch b auf ganz \mathbb{R} definiert und stetig, und es gelte

$$\varphi \left(\frac{L(u - u_c)}{u_c u} \right) \rightarrow 0 \quad \text{und} \quad \varphi_y \left(\frac{L(u - u_c)}{u_c u} \right) \rightarrow 0 \quad \text{für } u - u_c \rightarrow -\infty,$$

dabei ist

$$\varphi_y := \frac{d\varphi}{dy}.$$

Wir wählen nun ohne Beschränkung der Allgemeinheit die Konstante C aus (3.10) so, dass $b(0) = 0$ ist.

Weil $c, \kappa > 0$ sind und weil φ eine stetige und monoton steigende Funktion ist, handelt es sich bei b um eine stetige, streng monoton steigende Funktion. Unter der Voraussetzung, dass die Steigung von φ beschränkt ist, folgt sogar Lipschitz-Stetigkeit für b .

Damit können wir das Modellproblem, das zur mathematischen Analyse herangezogen wird, formulieren.

3.2.2 Quasilinear parabolisches Problem

Im weiteren Verlauf dieser Arbeit betrachten wir das folgende Anfangs-Randwertproblem für eine quasilineare parabolische Differentialgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} b(u) - \Delta u = 0 \quad \text{in } \Omega_T \quad (3.11)$$

mit den Anfangs- und Randwerten

$$-\frac{\partial u}{\partial \nu} = \gamma(u - g) \quad \text{auf } \Gamma_T, \quad (3.12)$$

$$u(\cdot, 0) = u_0 \quad \text{auf } \Omega. \quad (3.13)$$

Wie beim Phasenfeldmodell (3.5) - (3.7) sei dabei $\Omega_T := \Omega \times [0, T]$ ein Raum-Zeit-Zylinder mit beschränktem Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ und Lipschitzrand Γ und $\Gamma_T := \Gamma \times [0, T]$, sowie $g > 0$ eine gegebene Randfunktion und γ ein konstanter, positiver Wärmedurchgangskoeffizient. Dabei ist b eine, durch (3.9) mit (3.8) definierte, streng monoton steigende Lipschitz-stetige Funktion.

Dieses quasilineare parabolische Problem (3.11), (3.12) und (3.13) bezeichnen wir im Folgenden auch als *reduziertes Problem*.

3.3 Existenzsatz

Das Hauptresultat dieser Arbeit ist der Beweis der Existenz einer schwachen Lösung für das quasilineare parabolische Problem (3.11), (3.12) und (3.13). Den diesbezüglichen Existenzsatz werden wir im aktuellen Abschnitt aufstellen. Den zugehörigen Beweis führen wir dann in Kapitel 4 durch.

Zunächst stellen wir die schwache Formulierung des Problems auf und definieren so die schwache Lösung des reduzierten Problems wie folgt:

Definition 3.2. Ein $u \in L^2(\bar{\Omega}_T)$ heißt schwache Lösung des reduzierten Problems (3.11), (3.12) und (3.13), wenn u die schwache Formulierung

$$\begin{aligned} & \int_0^T \int_{\Omega} \nabla u \nabla \xi \, d\mathbf{x} \, dt + \int_0^T \int_{\Gamma} \gamma(u - g) \xi \, dS \, dt - \int_0^T \int_{\Omega} b(u) \frac{\partial \xi}{\partial t} \, d\mathbf{x} \, dt + \\ & + \int_{\Omega} b(u(\mathbf{x}, T)) \xi(\mathbf{x}, T) \, d\mathbf{x} - \int_{\Omega} b(u_0(\mathbf{x})) \xi(\mathbf{x}, 0) \, d\mathbf{x} = 0 \end{aligned} \quad (3.14)$$

für alle Testfunktionen $\xi \in H^1(0, T; H^1(\Omega))$ erfüllt.

Mit dieser Definition können wir nun den Existenzsatz als zentrales Theorem dieser Arbeit formulieren.

Theorem 3.3 (Existenzsatz). *Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ ein beschränktes Gebiet mit Lipschitzrand Γ , sei b eine Lipschitz-stetige, streng monoton steigende Funktion definiert durch (3.9) mit (3.8) und g eine gegebene Randfunktion. Dann besitzt das reduzierte Problem (3.11), (3.12) und (3.13) eine schwache Lösung $u \in L^2(\bar{\Omega}_T)$.*

Kapitel 4

Beweis des Existenzsatzes

In diesem Kapitel widmen wir uns dem Beweis des Existenzsatzes 3.3. Hierfür arbeiten wir mit der *Rothe-Methode*, bei der die Differentialgleichung im Anfangs-Randwertproblem nach Durchführung einer Zeitdiskretisierung durch ein System elliptischer Gleichungen approximiert wird, vgl. [31]. Den Beweis werden wir basierend auf [3] durchführen. Dabei erläutern wir in Abschnitt 4.1 zunächst das Vorgehen bei der Beweisführung, auf die wir in den darauffolgenden Abschnitten detaillierter eingehen werden.

4.1 Gliederung des Beweises

Um den Existenzsatz 3.3 zu beweisen, definieren wir zunächst in Abschnitt 4.2.1 einen parabolischen Energieterm B , mit dessen Hilfe wir dann *a priori* Abschätzungen für die zeitdiskreten Lösungen angeben können. Dabei ist die Existenz eines konvexen Potentials, oder auch einer Stammfunktion, der nichtlinearen Funktion b von Bedeutung.

Zur Konstruktion einer Lösung für das reduzierte Problem generieren wir in Abschnitt 4.2.2 eine Folge von Treppenfunktionen bezüglich der Zeit, die als Approximationen der gesuchten Lösung dienen. Dazu führen wir eine entsprechende Zeitdiskretisierung des reduzierten Problems durch und stellen für dieses zeitdiskrete Problem die schwache Formulierung auf. Die Treppenfunktionen erhalten wir aus den zeitdiskreten Lösungen durch stückweise konstante Interpolation in der Zeit.

Die Existenz einer schwachen zeitdiskreten Lösung folgt dann in Abschnitt 4.2.3 mit Hilfe der Theorie monotoner Operatoren. Über die schwache Form des zeitdiskreten Problems definieren wir dafür einen Operator, der wegen der guten Eigenschaften von b strikt monoton, stetig und koerziv ist, sodass neben der Existenz auch die Eindeutigkeit dieser zeitdiskreten Lösung gesichert ist.

Mit Hilfe stückweise konstanter Zeitinterpolanten schätzen wir in Abschnitt 4.2.4 die zeitdiskreten Lösungen und den parabolischen Energieterm B durch die Daten ab und erhalten somit eine Abschätzung für die parabolische Energienorm. Der Satz von Eberlein-Šmuljan A.7 liefert die schwache Konvergenz der approximativen Lösungen. Des Weiteren erhalten wir durch die Abschätzungen für den parabolischen Energieterm und die Struktur der nichtlinearen Funktion b a priori Abschätzungen.

Die schwache Konvergenz der approximativen Lösungen ist jedoch für die nichtlinearen Terme nicht ausreichend. Daher muss hierfür noch die starke Konvergenz gewährleistet sein.

Dazu zeigen wir zunächst in Abschnitt 4.2.5, dass die Zeitdifferenzen kontrollierbar sind. Die starke Konvergenz folgt schließlich über Kompaktheitsargumente in Abschnitt 4.2.6. Hierbei arbeiten wir mit dem Satz von Riesz-Fréchet-Kolmogorov A.9 für kompakte Teilmengen von $\Omega_T := \Omega \times [0, T]$. Die Verwendung von Diagonalfolgen liefert schließlich die relative Kompaktheit der Menge der approximativen Lösungen auf $L^2(\Omega_T)$.

Mit der Konvergenz auf dem Gebietsrand beschäftigen wir uns anschließend in Abschnitt 4.2.7, sodass wir mit der Grenzwertbildung in Abschnitt 4.2.8 die Existenz einer schwachen Lösung für das reduzierte Problem folgern können.

4.2 Durchführung des Beweises

Bevor wir, wie im vorangehenden Abschnitt erläutert, die Zeitdiskretisierung des reduzierten Problems durchführen, um so eine approximative Lösung zu bestimmen, führen wir im folgenden Abschnitt zunächst einen parabolischen Energieterm ein, das heißt einen Term, in dem die zeitlichen Ableitungen der Evolutionsgleichung (3.11) enthalten sind.

4.2.1 Parabolischer Energieterm

Bei der Aufstellung der Anfangs-Randwertprobleme in Abschnitt 3.2.1 hatten wir die nichtlineare Funktion b festgelegt durch

$$b(u) = \frac{\rho L}{\kappa} \varphi \left(\frac{L(u - u_c)}{u_c u} \right) + \frac{c}{\kappa} u, \quad (4.1)$$

mit den positiven Konstanten ρ, L, c und κ und einer stetigen, monoton steigenden Funktion φ , wodurch es sich bei b selbst um eine stetige, streng monoton steigende Funktion handelt.

Damit existiert aber eine konvexe, stetig differenzierbare Stammfunktion $\Phi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ von b mit $b(u) = \Phi'(u)$. Wir können annehmen, dass $\Phi(0) = 0$ ist und es folgt

$$\Phi(u) = \int_0^u b(\vartheta) d\vartheta.$$

Zu Φ sei, wie in Definition A.3, die konvex konjugierte Funktion $\Psi(z)$ gegeben durch

$$\Psi(z) := \Phi^*(z) := \sup_{u \in \mathbb{R}} \{zu - \Phi(u)\} = \sup_{u \in \mathbb{R}} \int_0^1 (z - b(\vartheta u)) u d\vartheta.$$

Auf Grund der Konvexität von Φ definieren wir nun mit Hilfe dieser konvex Konjugierten den parabolischen Energieterm

$$B(u) := \Psi(b(u)) = b(u)u - \Phi(u) = \int_0^1 (b(u) - b(\vartheta u)) u \, d\vartheta = \int_0^u b(u) - b(\vartheta) \, d\vartheta. \quad (4.2)$$

Aus der Monotonie von b folgt weiter $B(u) \geq 0$ für alle $u \in \mathbb{R}$. Es gilt nämlich für $u \geq 0$

$$B(u) = \int_0^u \underbrace{b(u) - b(\vartheta)}_{\geq 0} \, d\vartheta \geq 0$$

und für $u < 0$

$$B(u) = \int_0^u b(u) - b(\vartheta) \, d\vartheta = \int_u^0 \underbrace{b(\vartheta) - b(u)}_{\geq 0} \, d\vartheta \geq 0.$$

Die Monotonie von b impliziert außerdem für Differenzen von Φ

$$\Phi(u) - \Phi(v) = \int_v^u b(\vartheta) \, d\vartheta \begin{cases} \geq b(v)(u - v) \\ \leq b(u)(u - v) \end{cases}$$

für alle $u \geq v$. Damit erhalten wir zusammen mit der Definition von B aus

$$B(u) - B(v) = b(u)u - \Phi(u) - b(v)v + \Phi(v) = b(u)u - b(v)v - (\Phi(u) - \Phi(v))$$

die Ungleichungen

$$B(u) - B(v) \leq (b(u) - b(v)) u, \quad (4.3)$$

$$B(u) - B(v) \geq (b(u) - b(v)) v. \quad (4.4)$$

4.2.2 Zeitdiskretisierung

Um die Lösung des reduzierten Problems zu approximieren, werden wir nun eine Folge von Treppenfunktionen erzeugen, die wir aus der Zeitdiskretisierung des Problems erhalten. Dafür definieren wir den Zeitschritt

$$h := \frac{T}{N}$$

und suchen zu jedem Zeitpunkt

$$t_N^k := kh \quad \text{für } k \in \mathbb{N}_0, k \leq N$$

die zeitdiskrete Lösung $u_N^k(\mathbf{x})$. Mit dieser Wahl können wir eine sukzessive Verfeinerung des Zeitgitters erreichen, indem wir für die nächst feinere Auflösung die doppelte Anzahl an Zeitschritten wählen. So sind dann die einzelnen Zeitdiskretisierungen ineinander geschachtelt.

Außerdem approximieren wir die zeitliche Ableitung $b_t(u)$ für $(k-1)h \leq t \leq kh$ durch den Rückwärts-Differenzenquotienten

$$\partial_t^{-h}b(u) := \frac{b(u_N^k) - b(u_N^{k-1})}{h}.$$

Somit erhalten wir mit den Anfangswerten $u_N^0(\mathbf{x}) := u_0$ das *zeitdiskrete Problem*

$$\frac{b(u_N^k) - b(u_N^{k-1})}{h} - \Delta u_N^k = 0 \quad \text{in } \Omega, \quad (4.5)$$

$$-\frac{\partial u_N^k}{\partial \nu} = \gamma(u_N^k - g) \quad \text{auf } \Gamma. \quad (4.6)$$

Im Folgenden befinden wir uns im Zeitschritt t_N^k und nehmen an, dass u_N^{k-1} aus dem vorherigen Zeitschritt bekannt ist.

Auch für das zeitdiskrete Problem können wir eine schwache Form aufstellen. Wir sagen dann, dass u_N^k eine schwache Lösung des zeitdiskreten Problems (4.5), (4.6) ist, wenn u_N^k für alle Testfunktionen $\xi \in H^1(\Omega)$ die Gleichung

$$\int_{\Omega} \nabla u_N^k \cdot \nabla \xi \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \frac{1}{h} (b(u_N^k) - b(u_N^{k-1})) \xi \, d\mathbf{x} + \int_{\Gamma} \gamma(u_N^k - g) \xi \, dS = 0 \quad (4.7)$$

erfüllt.

Diese zeitlich diskreten Approximationen für die Lösung erweitern wir nun zu Treppenfunktionen, um auch mit ihnen im Raum-Zeit-Zylinder arbeiten zu können. Wir bezeichnen daher mit \bar{u}_N die *stückweise konstante Zeitinterpolante* von u_N^k , das heißt

$$\bar{u}_N(\mathbf{x}, t) = u_N^k(\mathbf{x}) \quad \text{für } (k-1)h < t \leq kh.$$

Die schwache Formulierung (4.7) lautet dann bezüglich \bar{u}_N zum Zeitpunkt t

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \nabla \bar{u}_N(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla \xi \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \frac{1}{h} (b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, t)) - b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, t-h))) \xi \, d\mathbf{x} \\ + \int_{\Gamma} \gamma(\bar{u}_N(\mathbf{x}, t) - g) \xi \, dS = 0 \end{aligned} \quad (4.8)$$

für alle Testfunktionen $\xi \in H^1(\Omega)$.

4.2.3 Existenz einer zeitdiskreten Lösung

In diesem Abschnitt zeigen wir, dass es in jedem Zeitschritt eine schwache Lösung des zeitdiskreten Problems (4.5), (4.6) gibt und dass diese sogar eindeutig ist. Dies geschieht mit Hilfe der *Theorie der monotonen Operatoren*.

Wir gehen dabei iterativ vor. Das heißt, wir betrachten die schwache Formulierung (4.7) im Zeitschritt t_N^k , $0 < k \leq N$ und gehen davon aus, dass die Lösungen des zeitdiskreten Problems aus den vorhergehenden Zeitschritten existieren und somit gegeben sind. Mit Hilfe der schwachen Formulierung können wir so einen Operator A definieren, für den der folgende Hauptsatz der Theorie monotoner Operatoren zu zeigen ist.

Satz 4.1 (Satz von Browder und Minty ([43], Kapitel 3 Satz 1.5)). *Sei X ein separabler, reflexiver, reeller Banachraum mit einer Basis $\{w_i\}_{i \in \mathbb{N}}$. Ferner sei $A : X \rightarrow X^*$ ein monotoner, koerziver, hemistetiger Operator. Dann existiert für alle $f \in X^*$ eine Lösung $u \in X$ von*

$$Au = f. \quad (4.9)$$

Die Lösungsmenge ist abgeschlossen, beschränkt und konvex. Falls A strikt monoton ist, ist die Lösung von (4.9) eindeutig.

Damit existiert eine schwache Lösung für das zeitdiskrete Problem und wir können zum nächsten Zeitschritt übergehen. Diesen Iterationsprozess setzen wir dann so lange fort, bis wir für jeden Zeitschritt t_N^k die Existenz einer zeitdiskreten Lösung gezeigt haben.

Definition des Operators

Die schwache Formulierung (4.7) des zeitdiskreten Problems legt nahe, für den betrachteten Banachraum den Raum $X := H^1(\Omega)$ zu wählen, bei dem es sich, wie im Satz von Browder und Minty 4.1 gefordert, um einen separablen, reflexiven, reellen Banachraum handelt mit der Norm

$$\|u\|_X = \|u\|_{H^1(\Omega)} = \left(\|u\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\nabla u\|_{L^2(\Omega)}^2 \right)^{1/2}.$$

Nach Multiplikation von (4.7) mit der Schrittweite definieren wir nun im Zeitschritt t_N^k den Operator $A : X \rightarrow X^*$ durch

$$\langle Au, \xi \rangle := h \int_{\Omega} \nabla u \nabla \xi \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} (b(u) - b(w)) \xi \, d\mathbf{x} + \int_{\Gamma} h \gamma (u - g) \xi \, dS$$

für alle $\xi \in X$.

Diesen Operator überprüfen wir im Folgenden auf Monotonie, Koerzivität und Stetigkeit.

Monotonie

Da es sich bei $b(u)$ um eine streng monoton steigende Funktion handelt, ist auch A strikt monoton, denn für alle $u, v \in X$ mit $u \neq v$ gilt

$$\begin{aligned} \langle Au - Av, u - v \rangle &= \\ &= \int_{\Omega} h (\nabla u - \nabla v) \nabla(u - v) \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \underbrace{(b(u) - b(v)) (u - v)}_{>0} \, d\mathbf{x} + \int_{\Gamma} h\gamma(u - v)^2 \, dS \\ &> h \|\nabla(u - v)\|_{L^2(\Omega)}^2 + h\gamma \|u - v\|_{L^2(\Gamma)}^2 \geq 0. \end{aligned}$$

Koerzivität

Zudem handelt es sich bei A um einen koerziven Operator. Es ist nämlich

$$\begin{aligned} \langle Au, u \rangle &= \int_{\Omega} h |\nabla u|^2 \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} (b(u) - b(w)) u \, d\mathbf{x} + \int_{\Gamma} h\gamma(u - g)u \, dS \\ &= \int_{\Omega} h |\nabla u|^2 \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} b(u)u \, d\mathbf{x} - \int_{\Omega} b(w)u \, d\mathbf{x} + \int_{\Gamma} h\gamma u^2 \, dS - \int_{\Gamma} h\gamma u g \, dS \\ &\stackrel{(4.1)}{=} \int_{\Omega} h |\nabla u|^2 \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \frac{c}{\kappa} u^2 + \frac{\rho L}{\kappa} \underbrace{\varphi\left(\frac{L(u - u_c)}{u_c u}\right)}_{\geq 0} \underbrace{u}_{>0} \, d\mathbf{x} + \int_{\Gamma} h\gamma u^2 \, dS \\ &\quad - \int_{\Omega} b(w)u \, d\mathbf{x} - \int_{\Gamma} h\gamma u g \, dS \\ &\geq h \|\nabla u\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{c}{\kappa} \|u\|_{L^2(\Omega)}^2 + h\gamma \|u\|_{L^2(\Gamma)}^2 - \int_{\Omega} u b(w) \, d\mathbf{x} - \int_{\Gamma} h\gamma u g \, dS. \end{aligned}$$

Für die letzten beiden Terme wenden wir für $\varepsilon_1, \varepsilon_2 > 0$ die Youngsche Ungleichung (A.1) an und erhalten

$$\begin{aligned} \langle Au, u \rangle &\geq h \|\nabla u\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{c}{\kappa} \|u\|_{L^2(\Omega)}^2 + h\gamma \|u\|_{L^2(\Gamma)}^2 \\ &\quad - \frac{\varepsilon_1}{2} \|u\|_{L^2(\Omega)}^2 - \frac{1}{2\varepsilon_1} \|b(w)\|_{L^2(\Omega)}^2 - h\gamma \frac{\varepsilon_2}{2} \|u\|_{L^2(\Gamma)}^2 - \frac{h\gamma}{2\varepsilon_2} \|g\|_{L^2(\Gamma)}^2. \end{aligned}$$

Durch geschickte Wahl der $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ erreichen wir, dass die Koeffizienten vor $\|u\|_{L^2(\Omega)}$ und $\|u\|_{L^2(\Gamma)}$ nicht negativ werden. Wir wählen hier $\varepsilon_1 < 2c/\kappa$ und $\varepsilon_2 = 2$. Dies liefert

$$\begin{aligned} \langle Au, u \rangle &\geq h \|\nabla u\|_{L^2(\Omega)}^2 + \underbrace{\left(\frac{c}{\kappa} - \frac{\varepsilon_1}{2}\right)}_{=: C_1} \|u\|_{L^2(\Omega)}^2 - \underbrace{\left(\frac{1}{2\varepsilon_1} \|b(w)\|_{L^2(\Omega)}^2 - \frac{h\gamma}{2\varepsilon_2} \|g\|_{L^2(\Gamma)}^2\right)}_{\geq -C_2} \\ &\geq C \|u\|_X^2 - C_2 \end{aligned}$$

für ein $C > 0$ mit $C := \min\{h, C_1\}$. Damit ist

$$\frac{\langle Au, u \rangle}{\|u\|_X} \geq C \|u\|_X - \frac{C_2}{\|u\|_X} \xrightarrow{\|u\|_X \rightarrow \infty} \infty$$

und somit ist A koerziv.

Stetigkeit

Der Operator A ist als Kombination stetiger Operatoren selbst stetig, was wir nun zeigen werden.

Sei $(u_k)_{k \in \mathbb{N}}$ eine Folge in X mit $u_k \xrightarrow{k \rightarrow \infty} u$ in X . Dann ist $\nabla u_k \xrightarrow{k \rightarrow \infty} \nabla u$ und $u_k \xrightarrow{k \rightarrow \infty} u$ in $L^2(\Omega)$. Da b Lipschitz-stetig ist existiert eine Konstante $C_1 > 0$, sodass

$$\|b(u_k) - b(u)\|_{L^2(\Omega)} \leq C_1 \|u_k - u\|_{L^2(\Omega)}. \quad (4.10)$$

Weiter erhalten wir mit der Hölder-Ungleichung und dem Spursatz

$$\begin{aligned} \langle Au_k - Au, \xi \rangle &= \int_{\Omega} h (\nabla u_k - \nabla u) \nabla \xi \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} (b(u_k) - b(u)) \xi \, d\mathbf{x} \\ &\quad + \int_{\Gamma} h \gamma (u_k - u) \xi \, dS \\ &\stackrel{\text{Hölder}}{\leq} h \|\nabla u_k - \nabla u\|_{L^2(\Omega)} \|\nabla \xi\|_{L^2(\Omega)} + \|b(u_k) - b(u)\|_{L^2(\Omega)} \|\xi\|_{L^2(\Omega)} \\ &\quad + h \gamma \|u_k - u\|_{L^2(\Gamma)} \|\xi\|_{L^2(\Gamma)} \\ &\stackrel{(4.10)}{\leq} h \|\nabla u_k - \nabla u\|_{L^2(\Omega)} \|\nabla \xi\|_{L^2(\Omega)} + C_1 \|u_k - u\|_{L^2(\Omega)} \|\xi\|_{L^2(\Omega)} \\ &\quad + h \gamma \|u_k - u\|_{L^2(\Gamma)} \|\xi\|_{L^2(\Gamma)} \\ &\stackrel{\text{Spursatz}}{\leq} h \|\nabla u_k - \nabla u\|_{L^2(\Omega)} \|\nabla \xi\|_{L^2(\Omega)} + C_1 \|u_k - u\|_{L^2(\Omega)} \|\xi\|_{L^2(\Omega)} \\ &\quad + C_2 h \gamma \|u_k - u\|_X \|\xi\|_X \\ &\leq C \|u_k - u\|_X \|\xi\|_X \end{aligned}$$

mit $C_2 > 0$ und $C := \max\{h, C_1\} + C_2$.

Damit folgt für alle $\xi \in X$

$$\|Au_k - Au\|_{X^*} = \sup_{\|\xi\|_X \leq 1} |\langle Au_k - Au, \xi \rangle| \leq C \|u_k - u\|_X,$$

also $Au_k \rightarrow Au$ in X^* . Folglich ist A stetig und somit insbesondere hemistetig.

Existenz einer eindeutigen, schwachen Lösung

Da X , wie eingangs erwähnt, ein separabler, reflexiver und reeller Banachraum ist und der oben definierte Operator A strikt monoton, koerziv und stetig ist, sind alle Voraussetzungen des Satzes von Browder und Minty erfüllt. Das heißt zu jeder rechten Seite $f \in X^*$ existiert ein eindeutiges $u \in X$, sodass

$$\langle Au, \xi \rangle = \langle f, \xi \rangle$$

für alle $\xi \in X$. Bei der schwachen Formulierung (4.7) handelt es sich bei der rechten Seite um $f = 0$. Im Zeitschritt t_N^k besitzt also (4.7) eine eindeutige Lösung für alle $\xi \in X$ und für das zeitdiskrete Problem (4.5), (4.6) existiert eine eindeutige schwache Lösung in X .

4.2.4 A priori Abschätzungen

Für den weiteren Verlauf des Existenzbeweises sind a priori Abschätzungen für die Folge der zeitdiskreten Lösungen durch die Daten wesentlich. Zudem führen wir in diesem Abschnitt auch Abschätzungen bezüglich des parabolischen Energieterms B durch und zeigen so, dass die zeitdiskreten Lösungen in der parabolischen Energienorm beschränkt sind. Mit Hilfe der Abschätzungen von B können wir dann auch Abschätzungen für die nichtlineare Funktion b angeben.

Abschätzung in der parabolischen Energienorm

Die Beschränktheit der zeitdiskreten Lösungen in der parabolischen Energienorm liefert der folgende Satz:

Satz 4.2. *Sei \bar{u}_N mit $u_N^k \in H^1(\Omega)$ zu jedem Zeitpunkt $t \in [0, T]$ Lösung der schwachen Formulierung (4.8). Dann existiert eine Konstante $C > 0$, sodass*

$$\|B(\bar{u}_N)\|_{L^\infty(0,T;L^1(\Omega))} + \|\nabla \bar{u}_N\|_{L^2(0,T;L^2(\Omega))}^2 + \|\bar{u}_N\|_{L^2(0,T;L^2(\Gamma))}^2 \leq C.$$

Beweis: Um die a priori Abschätzungen für u_N^k und \bar{u}_N zu erhalten, testen wir zunächst die schwache Formulierung (4.8) mit der Lösung $\xi = \bar{u}_N$. Mit Hilfe der Youngschen Ungleichung (A.1) sowie den Ungleichungen (4.3) und (4.4) für den parabolischen Energieterm erhalten wir für $\varepsilon > 0$

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{\Omega} \frac{1}{h} (b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, t)) - b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, t-h))) \bar{u}_N(\mathbf{x}, t) \, d\mathbf{x} \\ &\quad + \int_{\Omega} |\nabla \bar{u}_N(\mathbf{x}, t)|^2 \, d\mathbf{x} + \int_{\Gamma} \gamma (\bar{u}_N(\mathbf{x}, t) - g) \bar{u}_N(\mathbf{x}, t) \, dS \\ &\stackrel{(A.1)}{\geq} \frac{1}{h} \int_{\Omega} B(\bar{u}_N(\mathbf{x}, t)) - B(\bar{u}_N(\mathbf{x}, t-h)) \, d\mathbf{x} + \|\nabla \bar{u}_N(\cdot, t)\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ &\stackrel{(4.3),(4.4)}{\geq} + \gamma \left(1 - \frac{\varepsilon}{2}\right) \|\bar{u}_N(\cdot, t)\|_{L^2(\Gamma)}^2 - \frac{\gamma}{2\varepsilon} \|g\|_{L^2(\Gamma)}^2. \end{aligned}$$

Integration über t von 0 bis lh mit $l \in \{1, \dots, N\}$ liefert dann, da \bar{u}_N und damit auch $b(\bar{u}_N)$ und $B(\bar{u}_N)$ eine Treppenfunktion ist,

$$\begin{aligned}
 0 &\geq \int_0^{lh} \|\nabla \bar{u}_N(\cdot, t)\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{1}{h} \int_{\Omega} B(\bar{u}_N(\mathbf{x}, t)) - B(\bar{u}_N(\mathbf{x}, t-h)) \, d\mathbf{x} \\
 &\quad + \gamma \left(1 - \frac{\varepsilon}{2}\right) \|\bar{u}_N(\cdot, t)\|_{L^2(\Gamma)}^2 - \frac{\gamma}{2\varepsilon} \|g\|_{L^2(\Gamma)}^2 \, dt \\
 &= h \sum_{k=1}^l \left\| \nabla u_N^k \right\|_{L^2(\Omega)}^2 + \int_{\Omega} B(u_N^l) - B(u_N^0) \, d\mathbf{x} \\
 &\quad + \gamma \left(1 - \frac{\varepsilon}{2}\right) h \sum_{k=1}^l \left\| u_N^k \right\|_{L^2(\Gamma)}^2 - \frac{\gamma}{2\varepsilon} \int_0^{lh} \|g\|_{L^2(\Gamma)}^2 \, dt.
 \end{aligned}$$

Dadurch erhalten wir

$$\begin{aligned}
 &\int_{\Omega} \underbrace{B(u_N^l)}_{\geq 0} \, d\mathbf{x} + h \sum_{k=1}^l \left\| \nabla u_N^k \right\|_{L^2(\Omega)}^2 + \gamma \left(1 - \frac{\varepsilon}{2}\right) h \sum_{k=1}^l \left\| u_N^k \right\|_{L^2(\Gamma)}^2 \\
 &\leq \int_{\Omega} B(u_N^0) \, d\mathbf{x} + \frac{\gamma}{2\varepsilon} \int_0^{lh} \|g\|_{L^2(\Gamma)}^2 \, dt \leq C_{\varepsilon},
 \end{aligned} \tag{4.11}$$

weil die rechte Seite aus den Anfangs- und Randdaten gegeben und beschränkt ist.

Da l in (4.11) beliebig gewählt wurde, folgt

$$h \sum_{k=1}^l \left\| \nabla u_N^k \right\|_{L^2(\Omega)}^2 = \int_0^{lh} \|\nabla \bar{u}_N\|_{L^2(\Omega)}^2 \, dt \leq C \quad \Rightarrow \quad \nabla \bar{u}_N \in L^2(0, T; L^2(\Omega)), \tag{4.12}$$

$$h \sum_{k=1}^l \left\| u_N^k \right\|_{L^2(\Gamma)}^2 = \int_0^{lh} \|\bar{u}_N\|_{L^2(\Gamma)}^2 \, dt \leq C \quad \Rightarrow \quad \bar{u}_N \in L^2(0, T; L^2(\Gamma)). \tag{4.13}$$

Die allgemeine Poincaré-Ungleichung, Satz A.6, impliziert für Konstanten $C, \tilde{C} < \infty$

$$\|\bar{u}_N\|_{L^2(0, T; L^2(\Omega))} \leq C \left(\|\nabla \bar{u}_N\|_{L^2(0, T; L^2(\Omega))} + 1 \right) \leq \tilde{C}.$$

Somit ist \bar{u}_N in $L^2(0, T; H^1(\Omega))$ beschränkt.

Da es sich bei $L^2(0, T; H^1(\Omega))$ um einen reflexiven Banachraum handelt und (\bar{u}_N) für alle $N \in \mathbb{N}$ in diesem beschränkt ist, gibt es nach dem Satz von Eberlein-Šmuljan A.7 eine schwach konvergente Teilfolge (\bar{u}_{N_k}) . Das heißt, es gibt ein $u \in L^2(0, T; H^1(\Omega))$ mit

$$\bar{u}_{N_k} \rightharpoonup u \quad \text{für } N_k \rightarrow \infty.$$

Auf Grund der Nichtlinearität von b reicht jedoch die schwache Konvergenz von u nicht aus, um die Grenzwertbildung in der schwachen Formulierung (4.7) durchführen zu können. Die Frage nach der starken Konvergenz wird im Anschluss an diesen Abschnitt behandelt.

Aus (4.11) erhalten wir zudem Abschätzungen für den parabolischen Energieterm. Es folgt für jedes $l \in \{1, \dots, N\}$

$$\int_{\Omega} B(u_N^l) d\mathbf{x} \leq C \quad \Rightarrow \quad B(u_N^l) \in L^1(\Omega). \quad (4.14)$$

Damit gilt aber auch

$$\max_{l \in \{1, \dots, N\}} \|B(u_N^l)\|_{L^1(\Omega)} \leq C \quad \Rightarrow \quad \max_{l \in \{1, \dots, N\}} \|B(\bar{u}_N(\cdot, lh))\|_{L^1(\Omega)} \leq C,$$

also

$$B(\bar{u}_N) \in L^\infty(0, T; L^1(\Omega)). \quad (4.15)$$

Aus (4.12), (4.13) und (4.15) erhalten wir somit durch

$$\|B(\bar{u}_N)\|_{L^\infty(0, T; L^1(\Omega))} + \|\nabla \bar{u}_N\|_{L^2(0, T; L^2(\Omega))}^2 + \|\bar{u}_N\|_{L^2(0, T; L^2(\Gamma))}^2 \leq C$$

die Beschränktheit der parabolischen Energienorm. \square

A priori Abschätzungen für b

Aus der Abschätzung für den parabolischen Energieterm erhalten wir mit der Monotonie von b eine erste Abschätzung.

Lemma 4.3. *Sei B definiert wie in (4.2) und b definiert wie in (4.1). Wenn $B(\bar{u}_N)$ in $L^\infty(0, T; L^1(\Omega))$ beschränkt ist, dann ist auch $b(\bar{u}_N)$ in $L^\infty(0, T; L^1(\Omega))$ beschränkt.*

Beweis: Wir definieren $\sigma := \frac{1}{\delta} \operatorname{sgn}(b(z))$ mit $\delta > 0$. Durch die Definition von $B(z)$ erhalten wir für alle $z \in \mathbb{R}$

$$B(z) = \sup_{\tilde{\sigma} \in \mathbb{R}} \int_0^1 (b(z) - b(s\tilde{\sigma})) \tilde{\sigma} ds \geq \int_0^1 b(z)\sigma - \sigma b(s\sigma) ds = \frac{1}{\delta} |b(z)| - \int_0^\sigma b(s) ds.$$

Mit Hilfe der Monotonie von b gilt weiter

$$B(z) \geq \frac{1}{\delta} |b(z)| - \int_0^\sigma b(s) ds \geq \frac{1}{\delta} |b(z)| - \frac{1}{\delta} \underbrace{\sup_{|s| \leq \frac{1}{\delta}} |b(s)|}_{=: C_\delta \geq 0}.$$

Damit folgt für alle $z \in \mathbb{R}$

$$|b(z)| \leq \delta B(z) + C_\delta,$$

und im Speziellen

$$|b(\bar{u}_N)| \leq \delta B(\bar{u}_N) + C_\delta. \quad (4.16)$$

Also liefert (4.15), dass $b(\bar{u}_N)$ im Raum $L^\infty(0, T; L^1(\Omega))$ beschränkt ist. \square

Analog zu [46], Kapitel II.1, können wir wegen der speziellen Gestalt der nichtlinearen Funktion b noch höhere Regularität für b zeigen.

Lemma 4.4. *Sei wieder B definiert wie in (4.2). Sei weiter b definiert wie in (4.1) durch*

$$b(u) = \frac{c}{\kappa}u + \frac{\rho L}{\kappa} \varphi \left(\frac{L(u - u_c)}{u_c u} \right)$$

mit einer stetigen, monotonen Funktion φ aus (3.8) und positiven Konstanten c, κ, ρ und L . Wenn $B(\bar{u}_N)$ in $L^\infty(0, T; L^1(\Omega))$ beschränkt ist, dann ist $b(\bar{u}_N)$ in $L^\infty(0, T; L^2(\Omega))$ beschränkt.

Beweis: Wie in Abschnitt 4.2.1 sei $b(u) = \Phi'(u)$ und $\Phi(u) = \int_0^u b(s) ds$. Zu Φ sei $\Psi = \Phi^*$ die konvex konjugierte Funktion und der parabolische Energieterm B sei wieder definiert durch

$$B(u) := \Psi(b(u)) = \Phi^*(b(u)) = b(u)u - \Phi(u).$$

Weil $b(u)$ das Potential Φ besitzt, ist $\partial\Phi(u)$ nicht leer. Daher gilt mit Corollar A.5 für die Bikonjugierte $\Phi^{**} = \Psi^* = \Phi$. Des Weiteren folgt aus Corollar A.5 mit Proposition A.4 und der Definition von B , dass $u \in \partial\Psi(b(u))$, da $\Psi(b(u)) + \Phi(u) = b(u)u$. Weil b streng monoton ist, gilt weiter

$$u \in \partial\Psi(b(u)) \quad \Rightarrow \quad \Psi(b(u)) = B(u) = \int_0^{b(u)} b^{-1}(w) dw.$$

Da $0 \leq \varphi \leq 1 - \beta_m \leq 1$ ist gilt

$$w = b(u) = \frac{c}{\kappa}u + \frac{\rho L}{\kappa} \varphi \left(\frac{L(u - u_c)}{u_c u} \right) \leq C_1 u + C_2$$

mit positiven Konstanten $C_1 := c/\kappa$ und $C_2 := \rho L/\kappa$. Dann ist

$$u = b^{-1}(w) \geq \frac{1}{C_1}(w - C_2).$$

Also können wir B wie folgt abschätzen

$$B(u) = \int_0^{b(u)} b^{-1}(w) dw \geq \int_0^{b(u)} \frac{1}{C_1}(w - C_2) dw = \frac{1}{2C_1} (b(u) - C_2)^2 - \frac{C_2^2}{2C_1}.$$

Somit erhalten wir für jedes $l \in \{1, \dots, N\}$ aus (4.14) mit der Youngschen Ungleichung

$$\begin{aligned} C &\geq \int_{\Omega} B(u_N^l) d\mathbf{x} &\geq \int_{\Omega} \frac{1}{2C_1} (b(u_N^l) - C_2)^2 - \frac{C_2^2}{2C_1} d\mathbf{x} \\ &= \frac{1}{2C_1} \int_{\Omega} b^2(u_N^l) - 2b(u_N^l)C_2 d\mathbf{x} \\ &\stackrel{(A.12)}{\geq} \frac{1}{2C_1} \int_{\Omega} b^2(u_N^l) d\mathbf{x} - \frac{1}{C_1} \left[\frac{\varepsilon}{2} \int_{\Omega} b^2(u_N^l) d\mathbf{x} + \frac{1}{2\varepsilon} \int_{\Omega} C_2^2 d\mathbf{x} \right] \\ &= \frac{1}{2C_1} (1 - \varepsilon) \left\| b(u_N^l) \right\|_{L^2(\Omega)}^2 - \frac{C_2^2}{2C_1 \varepsilon} |\Omega| \end{aligned}$$

mit einer positiven Konstante $C < \infty$ und einem $\varepsilon > 0$. Dabei bezeichne $|\Omega|$ das n -dimensionale Lebesgue-Maß von Ω . Mit der Wahl $\varepsilon < 1$ ist demnach $b(u_N^l)$ für jedes $l \in \{1, \dots, N\}$ in $L^2(\Omega)$ beschränkt, da Ω ein beschränktes Gebiet im \mathbb{R}^n ist. Wir können also folgern

$$\max_{l \in \{1, \dots, N\}} \|b(u_N^l)\|_{L^2(\Omega)} \leq C \quad \Rightarrow \quad \max_{l \in \{1, \dots, N\}} \|b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, lh))\|_{L^2(\Omega)} \leq C.$$

Damit ist $b(\bar{u}_N)$ im Raum $L^\infty(0, T; L^2(\Omega))$ beschränkt. \square

4.2.5 Kontrolle von Zeitdifferenzen

Wie bereits im vorherigen Abschnitt erwähnt wurde, ist die schwache Konvergenz von u_N^k und damit von \bar{u}_N nicht ausreichend, um bei der schwachen Formulierung (4.8) den Limes bilden zu können. Hierzu wird starke Konvergenz benötigt. Dafür muss die Kompaktheit in der Zeit gewährleistet sein. Daher werden wir in diesem Abschnitt für \bar{u}_N eine Abschätzung der Zeitdifferenzen herleiten, sodass für diese der folgende Satz gilt:

Satz 4.5. Für jedes $t \in [0, T]$ sei \bar{u}_N mit $u_N^k \in H^1(\Omega)$ Lösung der schwachen Formulierung (4.8). Dann gilt für alle $\vartheta \in [0, T]$

$$\int_0^{T-\vartheta} \int_{\Omega} (\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + \vartheta) - \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau))^2 d\mathbf{x} d\tau \leq C\vartheta \quad (4.17)$$

mit einer Konstanten $C > 0$.

Beweis: Um diesen Satz zu beweisen, testen wir zunächst die schwache Formulierung (4.8) mit einer bezüglich der Zeit t konstanten Funktion

$$\xi = \partial_t^{kh} \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau) = \frac{1}{kh} (\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + kh) - \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau)).$$

Dabei sei $k \in \{1, \dots, N-1\}$, sowie $(j-1)h < \tau \leq jh$ für $j \in \{1, \dots, N-k\}$ und $N = T/h$.

Da es sich bei \bar{u}_N und $b(\bar{u}_N)$ um Treppenfunktionen handelt, können wir $\tau = jh$ annehmen. Wir erhalten also für die schwache Formulierung (4.8)

$$\begin{aligned} & \underbrace{\int_{\Omega} \nabla \bar{u}_N(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla \xi d\mathbf{x}}_{=: I_1} + \underbrace{\int_{\Omega} \frac{1}{h} (b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, t)) - b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, t-h))) \xi d\mathbf{x}}_{=: I_2} \\ & + \underbrace{\int_{\Gamma} \gamma(\bar{u}_N(\mathbf{x}, t) - g) \xi dS}_{=: I_3} = 0. \end{aligned} \quad (4.18)$$

Die drei Integrationsterme I_1 , I_2 und I_3 aus (4.18) werden wir nun getrennt voneinander betrachten. Dabei führen wir jeweils eine Integration über t für $jh < t \leq (j+k)h$, beziehungsweise über $\tau < t < \tau + kh$, und anschließend eine weitere Integration über τ durch.

Im Verlauf der Abschätzung der einzelnen Terme werden wir dabei mehrfach die Cauchy-Schwarzsche-Ungleichung (CSU), die Hölder-Ungleichung (H.U.) und die Minkowski-Ungleichung (M.U.) anwenden.

Dies liefert uns für I_1 :

$$\begin{aligned}
 & \int_0^{T-kh} \int_{jh}^{(j+k)h} \int_{\Omega} \left| \nabla \bar{u}_N(\mathbf{x}, t) \cdot \frac{1}{kh} \nabla (\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + kh) - \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau)) \right| d\mathbf{x} dt d\tau \\
 & \stackrel{\text{CSU}}{\leq} \frac{1}{kh} \int_0^{T-kh} \int_{\Omega} \int_{jh}^{(j+k)h} |\nabla \bar{u}_N(\mathbf{x}, t)| dt |\nabla (\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + kh) - \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau))| d\mathbf{x} d\tau \\
 & = \frac{1}{kh} \int_0^{T-kh} \int_{\Omega} h \sum_{i=1}^k |\nabla \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + ih)| |\nabla \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + kh) - \nabla \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau)| d\mathbf{x} d\tau \\
 & \stackrel{\text{M.U.}}{\leq} \frac{1}{kh} h \sum_{i=1}^k \int_0^{T-kh} \int_{\Omega} |\nabla \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + ih)| |\nabla \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + kh) - \nabla \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau)| d\mathbf{x} d\tau \\
 & \stackrel{\text{H.U.}}{\leq} \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \left[\int_0^{T-kh} \int_{\Omega} |\nabla \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + ih)|^2 d\mathbf{x} d\tau \right]^{1/2} \\
 & \quad \cdot \left[\int_0^{T-kh} \int_{\Omega} |\nabla \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + kh) - \nabla \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau)|^2 d\mathbf{x} d\tau \right]^{1/2} \\
 & \leq \frac{1}{k} k \max_{i \in \{1, \dots, k\}} \left[\int_0^{T-kh} \int_{\Omega} |\nabla \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + ih)|^2 d\mathbf{x} d\tau \right]^{1/2} \\
 & \quad \cdot \left[\int_0^{T-kh} \int_{\Omega} |\nabla \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + kh) - \nabla \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau)|^2 d\mathbf{x} d\tau \right]^{1/2} \\
 & \stackrel{\text{M.U.}}{\leq} \max_{i \in \{1, \dots, k\}} \left[\int_0^{T-kh} \int_{\Omega} \underbrace{|\nabla \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + ih)|^2}_{\in L^2(0, T; L^2(\Omega))} d\mathbf{x} d\tau \right]^{1/2} \\
 & \quad \cdot \left[\left(\int_0^{T-kh} \int_{\Omega} \underbrace{|\nabla \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + kh)|^2}_{\in L^2(0, T; L^2(\Omega))} d\mathbf{x} d\tau \right)^{1/2} \right. \\
 & \quad \left. + \left(\int_0^{T-kh} \int_{\Omega} \underbrace{|\nabla \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau)|^2}_{\in L^2(0, T; L^2(\Omega))} d\mathbf{x} d\tau \right)^{1/2} \right] \\
 & \leq C.
 \end{aligned}$$

Für den Term I_3 erhalten wir:

$$\begin{aligned}
 & \int_0^{T-kh} \int_{jh}^{(j+k)h} \int_{\Gamma} \left| \gamma (\bar{u}_N(\mathbf{x}, t) - g(\mathbf{x}, t)) \frac{1}{kh} (\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + kh) - \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau)) \right| dS dt d\tau \\
 & \stackrel{\text{M.U.}}{\leq} \frac{\gamma}{kh} \int_0^{T-kh} \int_{jh}^{(j+k)h} \int_{\Gamma} |\bar{u}_N(\mathbf{x}, t)| |\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + kh) - \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau)| dS dt d\tau \\
 & \quad + \frac{\gamma}{kh} \int_0^{T-kh} \int_{jh}^{(j+k)h} \int_{\Gamma} |g(\mathbf{x}, t)| |\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + kh) - \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau)| dS dt d\tau \\
 & \leq \frac{\gamma}{kh} h \sum_{i=1}^k \int_0^{T-kh} \int_{\Gamma} |\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + ih)| |\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + kh) - \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau)| dS d\tau \\
 & \quad + \frac{\gamma}{kh} \int_0^{T-kh} \int_{\Gamma} kh \max_{\zeta \in [0, k]} |g(\mathbf{x}, \tau + \zeta h)| |\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + kh) - \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau)| dS d\tau \\
 & \stackrel{\text{H.U.}}{\leq} \left[\frac{\gamma}{k} \sum_{i=1}^k \left(\int_0^{T-kh} \int_{\Gamma} |\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + ih)|^2 dS d\tau \right)^{1/2} \right. \\
 & \quad \left. + \gamma \left(\int_0^{T-kh} \int_{\Gamma} \left| \max_{\zeta \in [0, k]} g(\mathbf{x}, \tau + \zeta h) \right|^2 dS d\tau \right)^{1/2} \right] \\
 & \quad \cdot \left[\int_0^{T-kh} \int_{\Omega} |\nabla \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + kh) - \nabla \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau)|^2 d\mathbf{x} d\tau \right]^{1/2} \\
 & \stackrel{\text{M.U.}}{\leq} \left[\frac{\gamma}{k} \max_{i \in \{1, \dots, k\}} \left(\int_0^{T-kh} \int_{\Gamma} \underbrace{|\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + ih)|^2}_{\in L^2(0, T; L^2(\Gamma))} dS d\tau \right)^{1/2} \right. \\
 & \quad \left. + \gamma \left(\int_0^{T-kh} \int_{\Gamma} \underbrace{\left| \max_{\zeta \in [0, k]} g(\mathbf{x}, \tau + \zeta h) \right|^2}_{\in L^2(0, T; L^2(\Gamma))} dS d\tau \right)^{1/2} \right] \\
 & \quad \cdot \left[\left(\int_0^{T-kh} \int_{\Omega} \underbrace{|\nabla \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + kh)|^2}_{\in L^2(0, T; L^2(\Omega))} d\mathbf{x} d\tau \right)^{1/2} \right. \\
 & \quad \left. + \left(\int_0^{T-kh} \int_{\Omega} \underbrace{|\nabla \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau)|^2}_{\in L^2(0, T; L^2(\Omega))} d\mathbf{x} d\tau \right)^{1/2} \right] \\
 & \leq C.
 \end{aligned}$$

Für I_2 liefern die beiden Integrationen

$$\begin{aligned} & \int_0^{T-kh} \int_{jh}^{(j+k)h} \int_{\Omega} \frac{b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, t)) - b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, t-h))}{kh^2} (\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau+kh) - \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau)) \, d\mathbf{x} \, dt \, d\tau \\ &= \frac{1}{kh} \int_0^{T-kh} \int_{\Omega} (b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau+kh)) - b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau))) (\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau+kh) - \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau)) \, d\mathbf{x} \, d\tau. \end{aligned}$$

Da die beiden Terme I_1, I_3 betragsmäßig beschränkt sind, erhalten wir für $\vartheta := kh$ mit $k \in \{1, \dots, N-1\}$ die folgende Abschätzung

$$\int_0^{T-\vartheta} \int_{\Omega} (b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau+\vartheta)) - b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau))) (\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau+\vartheta) - \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau)) \, d\mathbf{x} \, d\tau \leq C\vartheta. \quad (4.19)$$

Weil diese Abschätzung offensichtlich auch für $\vartheta = 0$ und $\vartheta = T = hN$ gilt, wird sie also von beliebigen ganzzahligen Vielfachen $\vartheta = kh$ mit $k \in \{0, \dots, N\}$ und der Schrittweite h erfüllt.

Wir zeigen nun, dass dies auch für jedes ϑ mit $0 \leq \vartheta < T$ der Fall ist. Dazu setzen wir $\vartheta := kh + \sigma$ mit $0 \leq \sigma < h$ und $k \in \{0, \dots, N-1\}$. Das Integral können wir nun wie folgt unterteilen

$$\begin{aligned} & \int_0^{T-\vartheta} \int_{\Omega} (b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau+\vartheta)) - b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau))) (\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau+\vartheta) - \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau)) \, d\mathbf{x} \, d\tau \\ &= \int_0^{T-(k+1)h} \int_{\Omega} (b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau+\vartheta)) - b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau))) (\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau+\vartheta) - \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau)) \, d\mathbf{x} \, d\tau \\ & \quad + \int_{T-(k+1)h}^{T-kh-\sigma} \int_{\Omega} (b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau+\vartheta)) - b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau))) (\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau+\vartheta) - \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau)) \, d\mathbf{x} \, d\tau \\ &= \sum_{i=1}^{N-k-1} \int_{(i-1)h}^{ih} \int_{\Omega} (b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau+\vartheta)) - b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau))) (\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau+\vartheta) - \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau)) \, d\mathbf{x} \, d\tau \\ & \quad + \sum_{i=N-k}^{N-k} \int_{(i-1)h}^{ih-\sigma} \int_{\Omega} (b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau+\vartheta)) - b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau))) (\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau+\vartheta) - \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau)) \, d\mathbf{x} \, d\tau \\ &= \sum_{i=1}^{N-k-1} \left(\int_{(i-1)h}^{ih-\sigma} \int_{\Omega} (b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau+\vartheta)) - b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau))) (\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau+\vartheta) - \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau)) \, d\mathbf{x} \, d\tau \right. \\ & \quad \left. + \int_{ih-\sigma}^{ih} \int_{\Omega} (b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau+\vartheta)) - b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau))) (\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau+\vartheta) - \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau)) \, d\mathbf{x} \, d\tau \right) \\ & \quad + \sum_{i=N-k}^{N-k} \int_{(i-1)h}^{ih-\sigma} \int_{\Omega} (b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau+\vartheta)) - b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau))) (\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau+\vartheta) - \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau)) \, d\mathbf{x} \, d\tau \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \sum_{i=1}^{N-k} \int_{(i-1)h}^{ih-\sigma} \int_{\Omega} (b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + \vartheta)) - b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau))) (\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + \vartheta) - \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau)) \, d\mathbf{x} \, d\tau \\
 &\quad + \sum_{i=1}^{N-k-1} \int_{ih-\sigma}^{ih} \int_{\Omega} (b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + \vartheta)) - b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau))) (\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + \vartheta) - \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau)) \, d\mathbf{x} \, d\tau.
 \end{aligned}$$

Weil \bar{u}_N eine Treppenfunktion ist gilt für $(i-1)h < \tau < ih$

$$\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + \vartheta) = \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + kh + \sigma) = \begin{cases} \bar{u}_N(\mathbf{x}, (i+k)h) & \text{für } \tau + \sigma \leq ih, \\ \bar{u}_N(\mathbf{x}, (i+k+1)h) & \text{für } \tau + \sigma > ih, \end{cases}$$

und $\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau) = \bar{u}_N(\mathbf{x}, ih)$. Damit ist weiter

$$\begin{aligned}
 &= \sum_{i=1}^{N-k} \int_{(i-1)h}^{ih-\sigma} \int_{\Omega} (b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, (i+k)h)) - b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, ih))) \cdot \\
 &\quad \cdot (\bar{u}_N(\mathbf{x}, (i+k)h) - \bar{u}_N(\mathbf{x}, ih)) \, d\mathbf{x} \, d\tau \\
 &\quad + \sum_{i=1}^{N-k-1} \int_{ih-\sigma}^{ih} \int_{\Omega} (b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, (i+k+1)h)) - b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, ih))) \cdot \\
 &\quad \cdot (\bar{u}_N(\mathbf{x}, (i+k+1)h) - \bar{u}_N(\mathbf{x}, ih)) \, d\mathbf{x} \, d\tau \\
 &= \sum_{i=1}^{N-k} (h - \sigma) \int_{\Omega} (b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, (i+k)h)) - b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, ih))) (\bar{u}_N(\mathbf{x}, (i+k)h) - \bar{u}_N(\mathbf{x}, ih)) \, d\mathbf{x} \\
 &\quad + \sum_{i=1}^{N-k-1} \sigma \int_{\Omega} (b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, (i+k+1)h)) - b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, ih))) \cdot \\
 &\quad \cdot (\bar{u}_N(\mathbf{x}, (i+k+1)h) - \bar{u}_N(\mathbf{x}, ih)) \, d\mathbf{x} \\
 &= (h - \sigma) \sum_{i=1}^{N-k} \int_{\Omega} (b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, (i+k)h)) - b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, ih))) (\bar{u}_N(\mathbf{x}, (i+k)h) - \bar{u}_N(\mathbf{x}, ih)) \, d\mathbf{x} \\
 &\quad + \sigma \sum_{i=1}^{N-k-1} \int_{\Omega} (b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, (i+k+1)h)) - b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, ih))) \cdot \\
 &\quad \cdot (\bar{u}_N(\mathbf{x}, (i+k+1)h) - \bar{u}_N(\mathbf{x}, ih)) \, d\mathbf{x} \\
 &= \frac{h - \sigma}{h} \int_0^{T-kh} \int_{\Omega} (b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + kh)) - b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau))) \cdot \\
 &\quad \cdot (\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + kh) - \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau)) \, d\mathbf{x} \, d\tau \\
 &\quad + \frac{\sigma}{h} \int_0^{T-(k+1)h} \int_{\Omega} (b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + (k+1)h)) - b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau))) \cdot \\
 &\quad \cdot (\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + (k+1)h) - \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau)) \, d\mathbf{x} \, d\tau.
 \end{aligned}$$

Da (4.19) bereits für ganzzahlige Vielfache von h gezeigt wurde, können wir nun wie folgt abschätzen

$$\leq (h - \sigma) \frac{1}{h} Ckh + \sigma \frac{1}{h} C(k+1)h = C(k(h - \sigma) + (k+1)\sigma) = C(kh + \sigma) = C\vartheta.$$

Damit ist (4.19) für alle $\vartheta \in [0, T]$ erfüllt.

Wir zerlegen nun $b(\bar{u}_N)$ in einen linearen Term b_1 und einen monotonen Term b_2 durch

$$b(\bar{u}_N) = \underbrace{\frac{c}{\kappa} \bar{u}_N}_{=: b_1(\bar{u}_N)} + \underbrace{\frac{\rho L}{\kappa} \varphi\left(\frac{L(\bar{u}_N - u_c)}{u_c \bar{u}_N}\right)}_{=: b_2(\bar{u}_N)}.$$

Dabei sind beide Funktionen b_1 und b_2 stetig und monoton steigend bezüglich \bar{u}_N .

Mit dieser Zerlegung erhalten wir aus (4.19)

$$\begin{aligned} & \int_0^{T-\vartheta} \int_{\Omega} ((b_1(\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + \vartheta)) + b_2(\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + \vartheta))) - (b_1(\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau)) + b_2(\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau)))) \cdot \\ & \quad \cdot (\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + \vartheta) - \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau)) \, d\mathbf{x} \, d\tau \\ &= \int_0^{T-\vartheta} \int_{\Omega} \frac{c}{\kappa} (\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + \vartheta) - \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau))^2 \, d\mathbf{x} \, d\tau + \\ & \quad + \int_0^{T-\vartheta} \int_{\Omega} \underbrace{(b_2(\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + \vartheta)) - b_2(\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau)))}_{\geq 0} (\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + \vartheta) - \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau)) \, d\mathbf{x} \, d\tau \\ &\leq C\vartheta. \end{aligned}$$

Es folgt also

$$\int_0^{T-\vartheta} \int_{\Omega} (\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + \vartheta) - \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau))^2 \, d\mathbf{x} \, d\tau \leq C\vartheta$$

für alle $\vartheta \in [0, T]$. □

4.2.6 Kompaktheit der Menge approximativer Lösungen

Mit Hilfe der in Abschnitt 4.2.5 aufgestellten Abschätzungen für die Zeitdifferenzen zeigen wir nun in diesem Abschnitt, dass die Menge der approximativen Lösungen \bar{u}_N relativ kompakt ist. Danach wenden wir uns der Konvergenz für die nichtlineare Funktion b zu.

Konvergenz der approximativen Lösungen

Sei nun \mathcal{A} die Menge der oben definierten approximativen Lösungen $\bar{u}_N \in L^2(0, T; H^1(\Omega))$, die der schwachen Formulierung (4.8) genügen. Wir zeigen zunächst mit Hilfe des Satzes von Riesz-Fréchet-Kolmogorov A.9, dass \mathcal{A} auf jeder kompakten Teilmenge des Raum-Zeit-Zylinders Ω_T relativ kompakt in L^2 ist.

Lemma 4.6. Für jede kompakte Teilmenge $S \subset\subset \Omega_T := \Omega \times [0, T]$ ist die Menge der approximativen Lösungen $\mathcal{A}|_S := \{\chi_S u : u \in \mathcal{A} \subset L^2(0, T; H^1(\Omega))\}$ relativ kompakt in $L^2(S)$.

Die Funktion χ_S bezeichnet dabei die *charakteristische Funktion* auf der Menge S .

Beweis: Sei $S := \tilde{\Omega} \times [0, T - \vartheta]$ eine beliebige kompakte Teilmenge von Ω_T . In Abschnitt 4.2.4 haben wir bereits gezeigt, dass \bar{u}_N in $L^2(0, T; H^1(\Omega))$, und damit auch in $L^2(0, T; L^2(\Omega)) = L^2(\Omega_T)$ beschränkt ist. Also ist die Menge $\mathcal{A}|_S$ eine beschränkte Teilmenge des $L^2(S)$.

Für die Translation von $\bar{u}_N(\mathbf{y}) := \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau)$ um $\mathbf{h} = (\boldsymbol{\zeta}, \vartheta)$ können wir die Norm

$$\|\bar{u}_N(\mathbf{x} + \boldsymbol{\zeta}, \tau + \vartheta) - \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau)\|_{L^2(S)}$$

mit Hilfe der Minkowski-Ungleichung durch separate Translationen in \mathbf{x} und in τ wie folgt abschätzen:

$$\begin{aligned} & \|\bar{u}_N(\mathbf{x} + \boldsymbol{\zeta}, \tau + \vartheta) - \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau)\|_{L^2(S)} \\ &= \|\bar{u}_N(\mathbf{x} + \boldsymbol{\zeta}, \tau + \vartheta) - \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + \vartheta) + \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + \vartheta) - \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau)\|_{L^2(S)} \\ &\leq \underbrace{\|\bar{u}_N(\mathbf{x} + \boldsymbol{\zeta}, \tau + \vartheta) - \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + \vartheta)\|_{L^2(S)}}_{=:\Delta_{\mathbf{x}}} + \underbrace{\|\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + \vartheta) - \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau)\|_{L^2(S)}}_{=:\Delta_{\tau}}, \end{aligned}$$

dabei sei $|\mathbf{h}| < \delta < \text{dist}(S, \partial\Omega_T)$ für ein $\delta > 0$, wodurch $\mathbf{y} + \mathbf{h}$ in Ω_T liegt für $\mathbf{y} \in S$.

Wir betrachten zunächst mit dem Term $\Delta_{\mathbf{x}}$ die Translation im Ort \mathbf{x} . Weil $\nabla \bar{u}_N(\cdot, t)$ in $L^2(\Omega)$ beschränkt ist, erhalten wir hierfür

$$\begin{aligned} \|\bar{u}_N(\mathbf{x} + \boldsymbol{\zeta}, \tau + \vartheta) - \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + \vartheta)\|_{L^2(S)} &= \left\| \int_0^1 \nabla \bar{u}_N(\mathbf{x} + \alpha \boldsymbol{\zeta}, \tau + \vartheta) \cdot \boldsymbol{\zeta} \, d\alpha \right\|_{L^2(S)} \\ &\leq \int_0^1 \|\nabla \bar{u}_N(\mathbf{x} + \alpha \boldsymbol{\zeta}, \tau + \vartheta) \cdot \boldsymbol{\zeta}\|_{L^2(S)} \, d\alpha \leq \int_0^1 \|\nabla \bar{u}_N(\mathbf{x} + \alpha \boldsymbol{\zeta}, \tau + \vartheta)\|_{L^2(S)} \, d\alpha |\boldsymbol{\zeta}| \\ &= \int_0^1 \left(\int_0^{T-\vartheta} \int_{\tilde{\Omega}} \underbrace{(\nabla \bar{u}_N(\mathbf{x} + \alpha \boldsymbol{\zeta}, \tau + \vartheta))^2}_{\in L^2(\Omega)} \, d\mathbf{x} \, d\tau \right)^{1/2} \, d\alpha |\boldsymbol{\zeta}| \leq \int_0^1 C_1 \, d\alpha |\boldsymbol{\zeta}| = C_1 |\boldsymbol{\zeta}|, \end{aligned}$$

wobei $C_1 > 0$ konstant ist.

Für den zweiten Term, Δ_{τ} , benutzen wir die Abschätzung (4.17) aus Satz 4.5. Es ist

$$\|\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + \vartheta) - \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau)\|_{L^2(S)}^2 \leq \int_0^{T-\vartheta} \int_{\tilde{\Omega}} (\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + \vartheta) - \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau))^2 \, d\mathbf{x} \, d\tau \stackrel{(4.17)}{\leq} C\vartheta,$$

also gibt es eine Konstante $C_2 > 0$ mit

$$\|\bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau + \vartheta) - \bar{u}_N(\mathbf{x}, \tau)\|_{L^2(S)} \leq C_2 \sqrt{\vartheta}.$$

Damit folgt

$$\begin{aligned} \|\tilde{u}_N(\mathbf{x} + \boldsymbol{\zeta}, \tau + \vartheta) - \tilde{u}_N(\mathbf{x}, \tau)\|_{L^2(S)} &\leq \Delta_{\mathbf{x}} + \Delta_{\tau} \\ &\leq C_1 |\boldsymbol{\zeta}| + C_2 \sqrt{\vartheta} \leq C(|\mathbf{h}| + \sqrt{|\mathbf{h}|}) \\ &\leq C(\delta + \sqrt{\delta}). \end{aligned}$$

Zu jedem gegebenen, aber beliebigen $\varepsilon > 0$ wählen wir ein $\delta > 0$ so, dass die Ungleichung $C(\delta + \sqrt{\delta}) < \varepsilon$ erfüllt ist. Dann folgt mit dem Satz von Riesz-Fréchet-Kolmogorov A.9, dass $\mathcal{A}|_S$ auf $L^2(S)$ relativ kompakt ist. Da wir aber die kompakte Teilmenge S beliebig gewählt haben, ist dies für jede kompakte Teilmenge S von Ω_T erfüllt, und es folgt die Behauptung. \square

Der folgende Satz liefert die relative Kompaktheit von \mathcal{A} auf dem ganzen Raum-Zeit-Zylinder.

Satz 4.7. *Die Menge der approximativen Lösungen \mathcal{A} ist relativ kompakt auf $L^2(\Omega_T)$.*

Beweis: Wir betrachten jetzt eine Folge $S_k := \tilde{\Omega}_k \times [0, T - \tilde{\vartheta}_k] \subset \subset \Omega_T$ von kompakten Teilmengen des Ω_T mit $S_k \subset S_{k+1}$ für alle $k \in \mathbb{N}$ und $\bigcup_{k \in \mathbb{N}} S_k = \Omega_T$. Dann gibt es für jedes $\mathbf{y} \in \Omega_T$ ein $k_0 \in \mathbb{N}$ mit $\mathbf{y} \in S_{k_0}$.

Nach Lemma 4.6 wissen wir, dass $\mathcal{A}|_{S_k}$ für jedes S_k auf $L^2(S_k)$ relativ kompakt ist.

Sei (u_m) eine beliebige Folge in $\mathcal{A} \subset L^2(\Omega_T)$.

Wir betrachten nun diese Folge eingeschränkt auf S_1 . Dann ist $\chi_{S_1} u_m \in L^2(S_1)$ für $m \in \mathbb{N}$, und da $\mathcal{A}|_{S_1}$ relativ kompakt auf $L^2(S_1)$ ist, gibt es eine konvergente Teilfolge $(u_{m_{1i}})$ von (u_m) . Weiter ist $\chi_{S_2} u_{m_{1i}} \in L^2(S_2)$ für $m \in \mathbb{N}$. Weil $\mathcal{A}|_{S_2}$ relativ kompakt auf $L^2(S_2)$ ist, gibt es also eine konvergente Teilfolge $(u_{m_{2i}})$ von $(u_{m_{1i}})$. Diese ist als Teilfolge der konvergenten Folge $(u_{m_{1i}})$ ebenfalls konvergent in $L^2(S_1)$. Betrachten wir nun die Teilmenge S_3 , so liegt wiederum $\chi_{S_3} u_{m_{2i}} \in L^2(S_3)$ für $m \in \mathbb{N}$.

Wir setzen nun dieses Verfahren für alle $k \in \mathbb{N}$, also alle S_k , weiter fort und erhalten so eine auf $L^2(S_k)$ konvergente Teilfolge $(u_{m_{ki}})$, die zudem konvergent auf allen $L^2(S_j)$ ist mit $j \leq k$.

Nun wählen wir die Diagonalfolge $(u_{m_{kk}})$ als spezielle Teilfolge von (u_m) . Diese ist Teilfolge aller Teilfolgen niedrigerer Stufe; das heißt, die Folge $(u_{m_{kk}})_{k \geq k_0}$ konvergiert auf allen $L^2(S_j)$ für alle $j \leq k_0$.

Damit konvergiert die Diagonalfolge für $k \rightarrow \infty$ für jedes S_k auf $L^2(S_k)$ und somit auch auf $L^2(\bigcup_{k \in \mathbb{N}} S_k) = L^2(\Omega_T)$.

Da man für jede beliebige Folge (u_m) in $\mathcal{A} \subset L^2(\Omega_T)$ eine solche konvergente Diagonalfolge konstruieren lässt, ist \mathcal{A} relativ kompakt auf $L^2(\Omega_T)$. \square

Konvergenz der nichtlinearen Funktion b

Soeben haben wir gezeigt, dass die Menge der approximativen Lösungen \mathcal{A} relativ kompakt ist auf $L^2(\Omega_T)$. Dann gibt es zu jeder Folge (\bar{u}_N) in \mathcal{A} eine Teilfolge, die fast überall konvergiert. Das heißt es gibt eine Teilfolge (\bar{u}_{N_k}) und ein \tilde{u} , sodass $\bar{u}_{N_k}(\mathbf{x}, t) \rightarrow \tilde{u}(\mathbf{x}, t)$ mit $N_k \rightarrow \infty$ für fast alle $(\mathbf{x}, t) \in \Omega_T$.

Da b stetig auf \mathbb{R} ist, folgt also

$$b(\bar{u}_{N_k}(\mathbf{x}, t)) \xrightarrow{N_k \rightarrow \infty} b(\tilde{u}(\mathbf{x}, t))$$

für fast alle (\mathbf{x}, t) .

Weiter ist für jedes \bar{u}_N die Funktion $b(\bar{u}_N)$ beschränkt in $L^\infty(\Omega_T)$. Also existiert eine positive Konstante C_1 , sodass für jedes \bar{u}_N gilt

$$\|b(\bar{u}_N)\|_{L^\infty(0,T;L^2(\Omega))} = \sup_{t \in [0,T]} \int_{\Omega} (b(\bar{u}_N))^2 d\mathbf{x} \leq C_1.$$

Dies impliziert

$$\int_0^T \int_{\Omega} (b(\bar{u}_N))^2 d\mathbf{x} dt \leq T \|b(\bar{u}_N)\|_{L^\infty(0,T;L^2(\Omega))} \leq C_1 T =: C_2$$

für alle \bar{u}_N .

Also ist $b(\bar{u}_N)$ für jedes \bar{u}_N beschränkt in $L^2(\Omega_T)$ und damit ist auch der Grenzwert $b(\tilde{u})$ beschränkt in $L^2(\Omega_T)$.

Nach dem Satz von Eberlein-Šmuljan A.7 besitzt jede beschränkte Folge (\bar{u}_N) im reflexiven Banachraum $L^2(\Omega_T)$ eine schwach konvergente Teilfolge (\bar{u}_{N_k}) in $L^2(\Omega_T)$. Das heißt es gibt ein $b^* \in L^2(\Omega_T)$, sodass

$$b(\bar{u}_{N_k}) \rightharpoonup b^* \quad \text{für } N_k \rightarrow \infty.$$

Da die Menge der approximativen Lösungen relativ kompakt ist im Hilbertraum $L^2(\Omega_T)$ besitzt jede Folge (\bar{u}_N) eine fast überall konvergente Teilfolge (\bar{u}_{N_k}) , sodass $b(\bar{u}_{N_k}) \rightarrow b(\tilde{u})$ in $L^2(\Omega_T)$, also auch $b(\bar{u}_{N_k}) \rightharpoonup b(\tilde{u})$ in $L^2(\Omega_T)$ für $N_k \rightarrow \infty$. Da der schwache Grenzwert eindeutig ist, folgt somit $b(\tilde{u}) = b^*$ und weiter $b(\bar{u}_N) \rightharpoonup b(\tilde{u}) = b^*$ in $L^2(\Omega_T)$ mit $N \rightarrow \infty$.

4.2.7 Konvergenz auf dem Rand

Der letzte noch offene Punkt für den Beweis des Existenzsatzes 3.3 ist die Konvergenz der approximativen Lösungen auf dem Rand von Ω , mit dem wir uns in diesem Abschnitt befassen werden.

Satz 4.8. *Es sei Ω ein beschränktes Gebiet im \mathbb{R}^n mit Lipschitz-Rand Γ und sei (\bar{u}_N) eine Folge in der Menge der approximativen Lösungen $\mathcal{A} \subset L^2(0, T; H^1(\Omega))$ mit Grenzwert $u \in \mathcal{A}$. Dann gilt*

$$\bar{u}_N \rightarrow u \quad \text{in } L^2(\Gamma_T)$$

bezüglich dem $(n - 1)$ -dimensionalen Hausdorffmaß.

Beweis: Für den Beweis dieses Satzes verwenden wir hier die folgenden Notationen für den Lipschitz-Rand nach [2], A 6.2.

Sei wie in der Voraussetzung von Satz 4.8 $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ ein beschränktes Gebiet mit Lipschitz-Rand Γ ; das heißt, es gibt eine offene Überdeckung des Rands mit Mengen U^1, \dots, U^l , sodass für jedes j der Teilrand $\Gamma \cap U^j$ der Graph einer Lipschitz-stetigen Funktion f^j ist und $\Omega \cap U^j$ nur auf einer Seite dieses Graphen liegt. Es gibt also ein $l \in \mathbb{N}$ und für jedes $j = 1, \dots, l$ ein euklidisches Koordinatensystem mit Basisvektoren e_1^j, \dots, e_n^j zum Referenzpunkt $\mathbf{y}^j \in \mathbb{R}^{n-1}$, sowie ein $r^j > 0$, ein $h^j > 0$ und eine Lipschitz-stetige Funktion $f^j : \mathbb{R}^{n-1} \rightarrow \mathbb{R}$, sodass mit $\mathbf{x}_{,n}^j = (x_1^j, \dots, x_{n-1}^j)$ und $\mathbf{x} = \sum_{i=1}^n x_i^j e_i^j$ gilt

$$U^j = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n : |\mathbf{x}_{,n}^j - \mathbf{y}^j| < r^j \text{ und } |x_n^j - f^j(\mathbf{x}_{,n}^j)| < h^j \}$$

und für $\mathbf{x} \in U^j$ gilt

$$\begin{aligned} x_n^j = f^j(\mathbf{x}_{,n}^j) &\Rightarrow \mathbf{x} \in \Gamma, \\ 0 < x_n^j - f^j(\mathbf{x}_{,n}^j) < h^j &\Rightarrow \mathbf{x} \in \Omega, \\ 0 > x_n^j - f^j(\mathbf{x}_{,n}^j) > -h^j &\Rightarrow \mathbf{x} \notin \Omega. \end{aligned}$$

Mit einer weiteren offenen Menge U^0 ist dann $\Gamma \subset \bigcup_{j=1}^l U^j$ und $\bar{\Omega} \subset \bigcup_{j=0}^l U^j$.

Eine anschauliche Darstellung dieser Notationen findet man in Abbildung 4.1 nach [2].

Weiter sei η^j , $j = 0, \dots, l$ eine Partition der Eins auf $\bar{\Omega}$. Dann folgt für $u \in L^2(0, T; H^1(\Omega))$ $u(\mathbf{x}, t) = \sum_{j=0}^l \eta^j u(\mathbf{x}, t)$. Dabei besitzt $\eta^0 u \in L^2(0, T; H^1(\Omega))$ einen kompakten Träger in Ω und $\eta^j u$ liegt dann für $j = 1, \dots, l$ in $L^2(0, T; H^1(\Omega^j))$ mit

$$\Omega^j := \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n : 0 < x_n^j - f^j(\mathbf{x}_{,n}^j) \},$$

wobei $(\eta^j u)(\mathbf{x}, t) = 0$ für $|\mathbf{x}_{,n}^j - \mathbf{y}^j| \geq r^j$ oder $x_n^j - f^j(\mathbf{x}_{,n}^j) \geq h^j$.

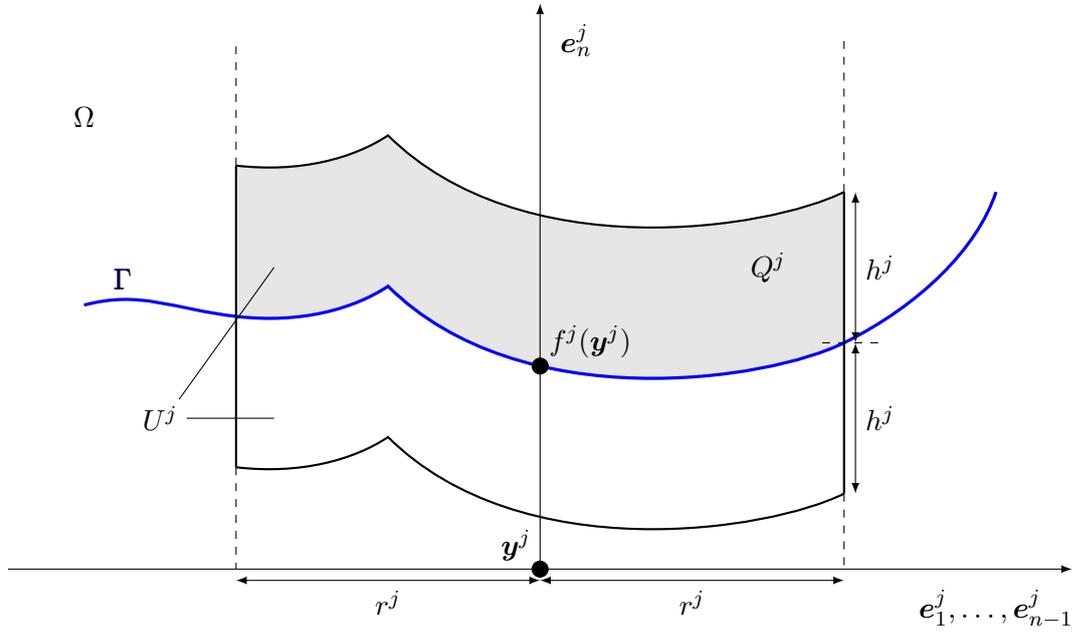


Abbildung 4.1: Veranschaulichung der verwendeten Notationen, nach [2], S. 259

Mit diesen Notationen führen wir nun zum Beweis von Satz 4.8 für jedes $j = 1, \dots, l$ die folgenden Betrachtungen durch.

Sei $w := \eta^j u$ und $v := \eta^j \bar{u}_N$, wobei die Folge der zeitdiskreten Lösungen (\bar{u}_N) aus \mathcal{A} den Grenzwert $u \in \mathcal{A}$ besitzt. Dann ist $v, w \in L^2(0, T; H^1(\Omega^j))$. Weiter setzen wir $\mathbf{y} := \mathbf{x}_n^j \in \mathbb{R}^{n-1}$ mit $|\mathbf{y} - \mathbf{y}^j| < r^j$, das heißt $\mathbf{x} = (\mathbf{y}, f^j(\mathbf{y})) \in \Gamma$.

Für jedes $\vartheta > 0$ mit $0 < \vartheta < h^j$ definieren wir nun $v_\vartheta : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^{n-1} \rightarrow \mathbb{R}$ durch

$$v_\vartheta(\mathbf{y}, t) := v(\mathbf{y}, f^j(\mathbf{y}) + \vartheta, t) \quad \text{mit } (\mathbf{y}, h, t) := \left(\sum_{i=1}^{n-1} y_i \mathbf{e}_i^j + h \mathbf{e}_n^j, t \right)$$

und analog w_ϑ für w . Dann ist

$$\begin{aligned} & |v(\mathbf{y}, f^j(\mathbf{y}), t) - w(\mathbf{y}, f^j(\mathbf{y}), t)| \\ &= \left| (v_\vartheta(\mathbf{y}, t) - w_\vartheta(\mathbf{y}, t)) - \int_0^\vartheta \partial_{\mathbf{e}_n^j} (v_\sigma(\mathbf{y}, t) - w_\sigma(\mathbf{y}, t)) \, d\sigma \right| \\ &\leq |v_\vartheta(\mathbf{y}, t) - w_\vartheta(\mathbf{y}, t)| + \left| \int_0^\vartheta \partial_{\mathbf{e}_n^j} (v_\sigma(\mathbf{y}, t) - w_\sigma(\mathbf{y}, t)) \, d\sigma \right|, \end{aligned}$$

und weiter mit der Hölder-Ungleichung (H.U.)

$$\begin{aligned}
 & |v(\mathbf{y}, f^j(\mathbf{y}), t) - w(\mathbf{y}, f^j(\mathbf{y}), t)|^2 \\
 & \leq 2 |v_\vartheta(\mathbf{y}, t) - w_\vartheta(\mathbf{y}, t)|^2 + 2 \left| \int_0^\vartheta \partial_{e_n^j} (v_\sigma(\mathbf{y}, t) - w_\sigma(\mathbf{y}, t)) d\sigma \right|^2 \\
 & \leq 2 |v_\vartheta(\mathbf{y}, t) - w_\vartheta(\mathbf{y}, t)|^2 + 2 \left(\int_0^\vartheta \left| \partial_{e_n^j} (v_\sigma(\mathbf{y}, t) - w_\sigma(\mathbf{y}, t)) \right| d\sigma \right)^2 \\
 & \stackrel{\text{(H.U.)}}{\leq} 2 |v_\vartheta(\mathbf{y}, t) - w_\vartheta(\mathbf{y}, t)|^2 + 2\vartheta \int_0^\vartheta \left| \partial_{e_n^j} (v_\sigma(\mathbf{y}, t) - w_\sigma(\mathbf{y}, t)) \right|^2 d\sigma.
 \end{aligned}$$

Für $D^j := B_{r^j}(\mathbf{y}^j)$ gilt

$$\int_{D^j} \int_0^{h^j} |v_\vartheta - w_\vartheta|^2 d\vartheta d\mathbf{y} = \int_{\Omega^j} |v - w|^2 d\mathbf{x}.$$

Da die obige Abschätzung für jedes $\vartheta > 0$ gilt, können wir über $[\vartheta_1, \vartheta_2]$ mitteln und es folgt mit $\max\{\vartheta_1, \vartheta_2\} = \vartheta_2$ nach Integration über D^j

$$\begin{aligned}
 & \int_{D^j} |v(\mathbf{y}, f^j(\mathbf{y}), t) - w(\mathbf{y}, f^j(\mathbf{y}), t)|^2 d\mathbf{y} \\
 & \leq 2 \int_{D^j} \frac{1}{\vartheta_2 - \vartheta_1} \int_{\vartheta_1}^{\vartheta_2} |v_\vartheta(\mathbf{y}, t) - w_\vartheta(\mathbf{y}, t)|^2 d\vartheta d\mathbf{y} \\
 & \quad + 2 \int_{D^j} \frac{1}{\vartheta_2 - \vartheta_1} \int_{\vartheta_1}^{\vartheta_2} \vartheta \int_0^\vartheta \left| \partial_{e_n^j} (v_\sigma(\mathbf{y}, t) - w_\sigma(\mathbf{y}, t)) \right|^2 d\sigma d\vartheta d\mathbf{y} \\
 & \leq 2 \frac{1}{\vartheta_2 - \vartheta_1} \int_{D^j} \int_{\vartheta_1}^{\vartheta_2} |v_\vartheta(\mathbf{y}, t) - w_\vartheta(\mathbf{y}, t)|^2 d\vartheta d\mathbf{y} \\
 & \quad + 2\vartheta_2 \int_{D^j} \int_0^{\vartheta_2} \left| \partial_{e_n^j} (v_\sigma(\mathbf{y}, t) - w_\sigma(\mathbf{y}, t)) \right|^2 d\sigma d\mathbf{y} \underbrace{\frac{1}{\vartheta_2 - \vartheta_1} \int_{\vartheta_1}^{\vartheta_2} 1 d\vartheta}_1 \\
 & = 2 \frac{1}{\vartheta_2 - \vartheta_1} \int_{D^j} \int_{\vartheta_1}^{\vartheta_2} |v_\vartheta(\mathbf{y}, t) - w_\vartheta(\mathbf{y}, t)|^2 d\vartheta d\mathbf{y} \\
 & \quad + 2\vartheta_2 \int_{D^j} \int_0^{\vartheta_2} \left| \partial_{e_n^j} (v_\sigma(\mathbf{y}, t) - w_\sigma(\mathbf{y}, t)) \right|^2 d\sigma d\mathbf{y}.
 \end{aligned}$$

Nach Integration über das Zeitintervall $[0, T]$ erhalten wir nun

$$\begin{aligned}
 & \int_0^T \int_{D^j} |v(\mathbf{y}, f^j(\mathbf{y}), t) - w(\mathbf{y}, f^j(\mathbf{y}), t)|^2 d\mathbf{y} dt \\
 & \leq 2 \frac{1}{\vartheta_2 - \vartheta_1} \int_0^T \int_{D^j} \int_{\vartheta_1}^{\vartheta_2} |v_s(\mathbf{y}, t) - w_\vartheta(\mathbf{y}, t)|^2 d\vartheta d\mathbf{y} dt \\
 & \quad + 2\vartheta_2 \int_0^T \int_{D^j} \int_0^{\vartheta_2} \left| \partial_{e_n^j} (v_\sigma(\mathbf{y}, t) - w_\sigma(\mathbf{y}, t)) \right|^2 d\sigma d\mathbf{y} dt \\
 & \leq 2 \frac{1}{\vartheta_2 - \vartheta_1} \int_0^T \int_{D^j} \int_0^{h^j} |v_\vartheta(\mathbf{y}, t) - w_\vartheta(\mathbf{y}, t)|^2 d\vartheta d\mathbf{y} dt \\
 & \quad + 2\vartheta_2 \int_0^T \int_{D^j} \int_0^{\vartheta_2} \left| \partial_{e_n^j} (v_\sigma(\mathbf{y}, t) - w_\sigma(\mathbf{y}, t)) \right|^2 d\sigma d\mathbf{y} dt \\
 & \leq 2 \frac{1}{\vartheta_2 - \vartheta_1} \int_0^T \int_{\Omega^j} |v(\mathbf{x}, t) - w(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x} dt \\
 & \quad + 2\vartheta_2 \int_0^T \int_{D^j} \int_0^{\vartheta_2} \left| \partial_{e_n^j} (v_\sigma(\mathbf{y}, t) - w_\sigma(\mathbf{y}, t)) \right|^2 d\sigma d\mathbf{y} dt \\
 & = 2 \frac{1}{\vartheta_2 - \vartheta_1} \int_0^T \|v - w\|_{L^2(\Omega^j)}^2 dt \\
 & \quad + 2\vartheta_2 \int_0^T \int_{D^j} \int_0^{\vartheta_2} \left| \partial_{e_n^j} (v_\sigma(\mathbf{y}, t) - w_\sigma(\mathbf{y}, t)) \right|^2 d\sigma d\mathbf{y} dt.
 \end{aligned}$$

Da die Menge der approximativen Lösungen $\mathcal{A}|_{\Omega_T^j}$ relativ kompakt ist in $L^2(\Omega^j \times [0, T])$ existiert eine Teilfolge $(v_{\vartheta, n})$, sodass für jedes $\tilde{\varepsilon} > 0$ gilt

$$\|v_{\vartheta, n} - w_{\vartheta, n}\|_{L^2(\Omega^j)} < \tilde{\varepsilon}.$$

Damit folgt

$$2 \frac{1}{\vartheta_2 - \vartheta_1} \int_0^T \|v_{\vartheta, n}(\mathbf{x}, t) - w_{\vartheta, n}(\mathbf{x}, t)\|_{L^2(\Omega^j)}^2 dt < 2 \frac{1}{\vartheta_2 - \vartheta_1} T \tilde{\varepsilon}^2.$$

Außerdem sind $\partial_{e_n^j} v$ und $\partial_{e_n^j} w$ in $L^2(0, T; L^2(\Omega^j))$ beschränkt. Es gibt also eine Konstante $C_1 > 0$ mit

$$\int_0^T \int_{D^j} \int_0^{\vartheta_2} \left| \partial_{e_n^j} (v_\sigma(\mathbf{y}, t) - w_\sigma(\mathbf{y}, t)) \right|^2 d\sigma d\mathbf{y} dt \leq C_1.$$

Durch geeignete Wahl von ϑ_1 und ϑ_2 können wir nun die beiden Integrale bezüglich $\tilde{\varepsilon}$ abschätzen.

Wir wählen dazu zum Beispiel $\vartheta_1 = \vartheta_2/2$ mit $\vartheta_2 = \tilde{\varepsilon}$. Dann folgt für das erste Integral

$$2 \frac{1}{\vartheta_2 - \vartheta_1} \int_0^T \|v_{\vartheta, n}(\mathbf{x}, t) - w_{\vartheta, n}(\mathbf{x}, t)\|_{L^2(\Omega^j)}^2 dt < 2 \frac{1}{\vartheta_2 - \vartheta_1} T \tilde{\varepsilon}^2 = 4T \tilde{\varepsilon}$$

und für das zweite Integral

$$2\vartheta_2 \int_0^T \int_{D^j} \int_0^{\vartheta_2} \left| \partial_{e_n^j} (v_\sigma(\mathbf{y}, t) - w_\sigma(\mathbf{y}, t)) \right|^2 d\sigma d\mathbf{y} dt \leq 2C_1 \tilde{\varepsilon}.$$

Insgesamt erhalten wir also die folgende Abschätzung

$$\int_0^T \int_{D^j} |v(\mathbf{y}, f^j(\mathbf{y}), t) - w(\mathbf{y}, f^j(\mathbf{y}), t)|^2 d\mathbf{y} dt < C_2 \tilde{\varepsilon},$$

wobei $C_2 = 4T + 2C_1$ ist. Da $\tilde{\varepsilon}$ beliebig gewählt war, geht der gesamte Ausdruck für immer kleinere $\tilde{\varepsilon}$ gegen 0.

Die obige Abschätzung gilt für jedes $j = 1, \dots, l$.

Somit können wir über j summieren, sodass für beliebige $\tilde{\varepsilon} > 0$ wegen $w = \eta^j u$ und $u(\mathbf{x}, t) = \sum_{j=0}^l \eta^j u(\mathbf{x}, t)$ sowie $v = \eta^j \bar{u}_N$ und $\bar{u}_N(\mathbf{x}, t) = \sum_{j=0}^l \eta^j \bar{u}_N(\mathbf{x}, t)$ folgt

$$\begin{aligned} & \int_0^T \int_{\Gamma} |\bar{u}_N(\mathbf{x}, t) - u(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathcal{H}^{n-1} dt \\ & \leq 2 \sum_{j=1}^l \int_0^T \int_{D^j} |\eta^j \bar{u}_N(\mathbf{y}, f^j(\mathbf{y}), t) - \eta^j u(\mathbf{y}, f^j(\mathbf{y}), t)|^2 d\mathbf{y} dt \leq 2lC_2 \tilde{\varepsilon}. \end{aligned}$$

Dabei bezeichnet $d\mathcal{H}^{n-1} = dS$ das Flächenelement bezüglich des $(n-1)$ -dimensionalen Hausdorff-Maßes, vgl. [2], sodass damit das Randintegral über eine integrierbare Funktion $f : \Gamma \rightarrow Y$ mit Banachraum Y definiert ist durch

$$\int_{\Gamma} f dS = \int_{\Gamma} f d\mathcal{H}^{n-1} := \sum_{j=1}^l \int_{\Gamma} \eta^j f d\mathcal{H}^{n-1}. \quad (4.20)$$

Da $\tilde{\varepsilon} > 0$ beliebig gewählt war folgt somit

$$\bar{u}_N \rightarrow u \quad \text{in } L^2(\Gamma_T)$$

bezüglich dem $(n-1)$ -dimensionalen Hausdorffmaß. □

4.2.8 Schwache Lösung des reduzierten Problems

Fassen wir die Resultate aus den vorhergehenden Abschnitten zusammen, so können wir nun den Beweis des Existenzsatzes 3.3 schließen.

Sei dazu $\bar{u}_N \in L^2(\bar{\Omega}_T)$ Lösung des zeitdiskreten Problems. Ausgehend von der zugehörigen schwachen Form (4.8) erhalten wir nach Integration über t von 0 bis T

$$\begin{aligned} & \int_0^T \int_{\Omega} \nabla \bar{u}_N(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla \xi d\mathbf{x} dt + \int_0^T \int_{\Omega} \frac{1}{h} (b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, t)) - b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, t-h))) \xi d\mathbf{x} dt \\ & + \int_0^T \int_{\Gamma} \gamma(\bar{u}_N(\mathbf{x}, t) - g) \xi dS dt = 0. \end{aligned}$$

Dabei seien die Testfunktionen ξ aus $H^1(0, T; H^1(\Omega))$. Nach diskreter partieller Integration im zweiten Term, siehe hierzu Abschnitt A.2.7, liefert der Grenzübergang für $h \rightarrow 0$

$$\begin{aligned} & \int_0^T \int_{\Omega} \nabla \bar{u}_N \nabla \xi \, d\mathbf{x} \, dt + \int_0^T \int_{\Gamma} \gamma(\bar{u}_N - g) \xi \, dS \, dt - \int_0^T \int_{\Omega} b(\bar{u}_N) \xi_t \, d\mathbf{x} \, dt \\ & + \int_{\Omega} b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, T)) \xi(\mathbf{x}, T) \, d\mathbf{x} - \int_{\Omega} b(u_0(\mathbf{x})) \xi(\mathbf{x}, 0) \, d\mathbf{x} = 0. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Das heißt aber, dass die approximativen Lösungen \bar{u}_N schwache Lösungen des reduzierten Problems sind.

Für die ersten beiden, linearen Terme in (4.21) genügt die schwache Konvergenz von $\nabla \bar{u}_N$ beziehungsweise von $\bar{u}_N|_{\Gamma}$ gegen u . Dies ist durch die a priori Abschätzungen (4.12) und die Konvergenz von \bar{u} auf dem Rand gewährleistet. In den übrigen Termen von (4.21) ist die nichtlineare Funktion b involviert. Die punktweise Konvergenz von b stellt jedoch die Konvergenz von $b(\bar{u}_N)$ gegen $b(u)$ sicher, sodass (4.21) für $N \rightarrow \infty$ gegen

$$\begin{aligned} & \int_0^T \int_{\Omega} \nabla u \nabla \xi \, d\mathbf{x} \, dt + \int_0^T \int_{\Gamma} \gamma(u - g) \xi \, dS \, dt - \int_0^T \int_{\Omega} b(u) \xi_t \, d\mathbf{x} \, dt \\ & + \int_{\Omega} b(u(\mathbf{x}, T)) \xi(\mathbf{x}, T) \, d\mathbf{x} - \int_{\Omega} b(u_0(\mathbf{x})) \xi(\mathbf{x}, 0) \, d\mathbf{x} = 0 \end{aligned}$$

konvergiert.

Da u somit für alle Testfunktionen $\xi \in H^1(0, T; H^1(\Omega))$ die schwache Form (3.14) erfüllt, haben wir die Existenz einer schwachen Lösung u des reduzierten Problems (3.11), (3.12), (3.13) gezeigt und damit den Existenzsatz 3.3 bewiesen.

Kapitel 5

Numerische Simulation des reduzierten Problems

Nachdem wir die Existenz einer schwachen Lösung für das reduzierte Problem (3.11), (3.12) und (3.13) aus Kapitel 3 gezeigt haben, betrachten wir in diesem Kapitel die numerische Simulation dieses Problems mit Hilfe der Finiten Elemente Methode. Wir arbeiten hier mit Daten, die im Rahmen des SPP 1253 im Projekt „Optimal Control in Cryopreservation of Cells and Tissue“ gewonnen wurden. Ein Kühlprotokoll, das beim Einfrieren von Gewebeprobe mit dem IceCube 15M (s. Abbildung 1.1 auf Seite 2) der SY-LAB Geräte GmbH, Österreich aufgezeichnet wurde, liefert neben der Randfunktion g auch Vergleichsdaten für die Simulation.

In Abbildung 5.2 ist die Displayanzeige des IceCube's mit einem Kühlprotokoll, das beim Tieffrieren von Gewebeprobe aufgezeichnet wurde, zu sehen. Der Kühlungsverlauf ist in rot dargestellt und kann der Tabelle auf der rechten Seite entnommen werden. Die Temperatur im Inneren der Gewebeprobe wird mit Sensoren gemessen, s. Abbildung 5.1, und ist in blau dargestellt. Der im Rahmen des SPP 1253 in [29] berechnete optimale Kühlverlauf (grün), basierend auf einem Modell von C. Caginalp, und die entsprechende Temperaturantwort (blau gestrichelt) sind ebenfalls dargestellt.

Zur Kryokonservierung von Gewebeprobe werden zylindrische Ampullen verwendet, die von außen durch Stickstoffgas heruntergekühlt werden. Wir gehen davon aus, dass die Ampulle dabei von allen Seiten gleichmäßig gekühlt wird. Aus diesem Grund genügt es für die numerische Simulation einen Längsschnitt durch die Ampulle zu betrachten. Das daraus resultierende Rechteck sei das Gebiet Ω . Eine ebene Finite Elemente Diskretisierung ist also ausreichend. Die Skizze einer Ampulle und des betrachteten Gebiets ist in Abbildung 5.1 zu sehen.

Im ersten Abschnitt dieses Kapitels wird die Modelldiskretisierung mittels Galerkin-Approximation und das numerische Verfahren erläutert. Da wir lediglich an dem groben Verlauf der Lösung interessiert sind, beschränken wir uns hier auf ein möglichst einfaches Verfahren. Eine Ansatzfunktion für die nichtlineare Phasenfeldfunktion φ , die den Volumenanteil des flüssigen Wassers β_l in Abhängigkeit von der Temperatur beschreibt, wird in Abschnitt 5.2 angegeben. In Abschnitt 5.3 gehen wir dann auf die Wahl der Modellkonstanten des reduzierten Problems näher ein. Die für die Simulation gewählten Diskretisierungsdaten findet

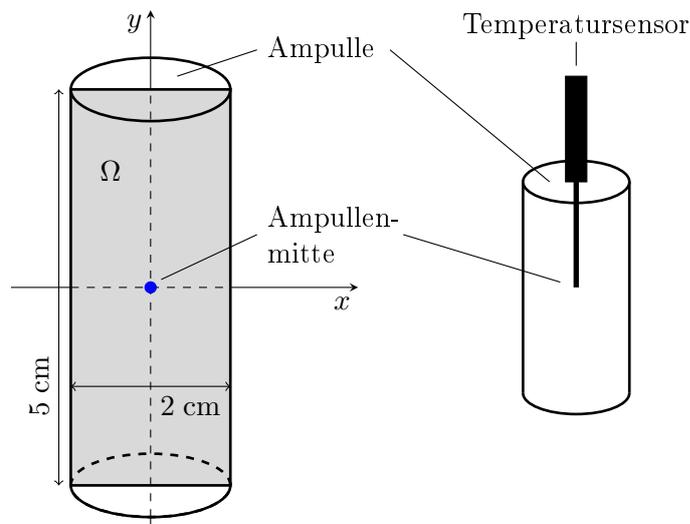


Abbildung 5.1: Skizze einer Ampulle zum Einfrieren von Gewebeproben mit Querschnitt Ω . Zum Vergleich mit den Messergebnissen wird die Temperatur in der Ampullenmitte bestimmt.

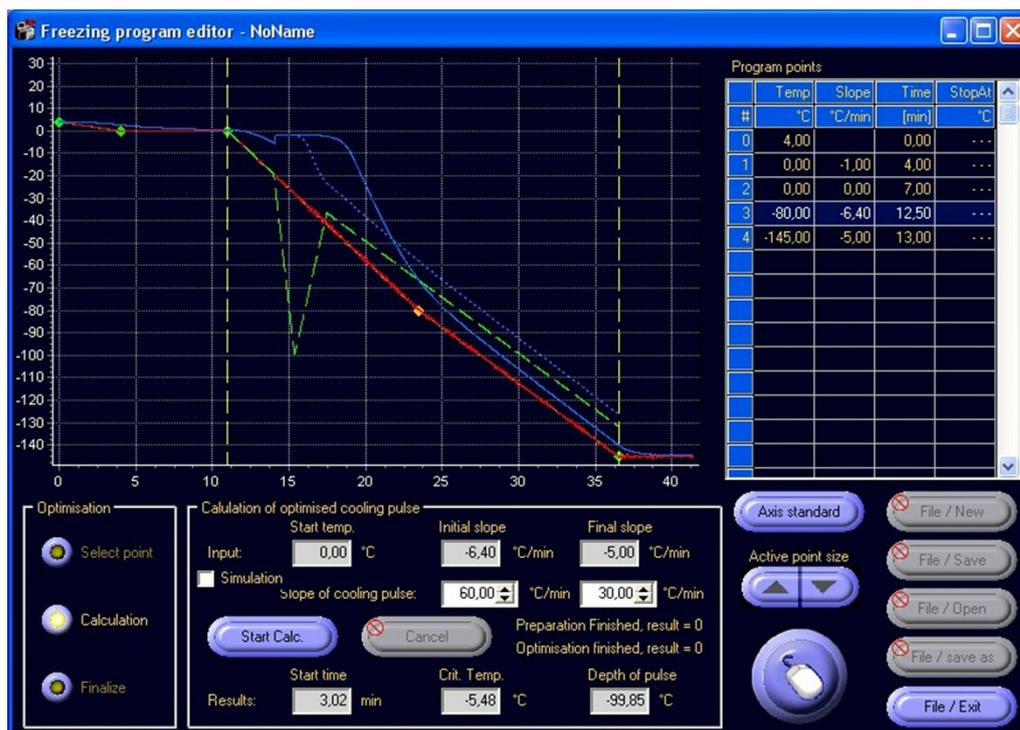


Abbildung 5.2: Kühlprotokoll beim Einfrieren von Gewebeproben: Temperatur (blau) im Inneren der Probe zum Kühlverlauf (rot), s. Tabelle, und optimale Kühlkurve (grün) nach [29] mit zugehöriger Proben temperatur (blau gestrichelt).

man in Abschnitt 5.4. Schließlich werden die Ergebnisse der Simulation in Abschnitt 5.5 präsentiert und mit den Messdaten verglichen.

5.1 Diskretisierung und numerisches Verfahren

In diesem Abschnitt beschäftigen wir uns mit der vollständigen Diskretisierung des reduzierten Problems und stellen das für die Simulation verwendete numerische Verfahren vor.

Die Diskretisierung bezüglich der Zeit wurde bereits in Abschnitt 4.2.2 durchgeführt und wird hier nur kurz aufgegriffen. Für die Ortsdiskretisierung verwenden wir eine Triangulierung mit konformen Elementen. Diese Wahl der Triangulierung ist ebenso wie das numerische Verfahren unter Verwendung der Finiten Elemente Methode Standard. Daher verweisen wir für die Theorie der Finiten Elemente Methode auf [9], [32], [48] und [38].

5.1.1 Zeitdiskretisierung

Wie in Abschnitt 4.2.2 wenden wir für die Zeitdiskretisierung das *implizite Euler-Verfahren* an. Wir betrachten also im Folgenden das zeitdiskrete Modell (4.5), (4.6)

$$\frac{b(u_N^k) - b(u_N^{k-1})}{h} - \Delta u_N^k = 0 \quad \text{in } \Omega, \quad (5.1)$$

$$-\frac{\partial u_N^k}{\partial \nu} = \gamma(u_N^k - g) \quad \text{auf } \Gamma. \quad (5.2)$$

mit Anfangswerten $u_N^0(\mathbf{x}) := u_0$. Dabei ist $T = hN$ mit der Zeitschrittweite h , $u_N^k(\mathbf{x})$ bezeichnet die Temperatur im Ort \mathbf{x} zum Zeitpunkt $t_N^k = hk$ für $k = 0, \dots, N$ und g ist eine gegebene Funktion auf dem Rand Γ von Ω .

Ebenso sei wieder wie in Kapitel 4 u_N^k die schwache Lösung des zeitdiskreten Problems (5.1), (5.2), wenn u_N^k für alle Testfunktionen $\xi \in H^1(\Omega)$ die Gleichung

$$\int_{\Omega} \nabla u_N^k \cdot \nabla \xi \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \frac{1}{h} \left(b(u_N^k) - b(u_N^{k-1}) \right) \xi \, d\mathbf{x} + \int_{\Gamma} \gamma(u_N^k - g) \xi \, dS = 0 \quad (5.3)$$

erfüllt.

5.1.2 Ortsdiskretisierung

Um die Temperatur als gesuchte Größe numerisch berechnen zu können führen wir im Ort eine Diskretisierung mit der *Methode der Finiten Elemente* durch. Dazu triangulieren wir das Gebiet Ω mit konformen Elementen, in unserem Fall mit Dreiecken. Der Lösungsraum für die Temperatur wird dabei mit Hilfe von Finiten Elementen in \mathbf{x} approximiert.

Es sei $\{\eta_j\}_{j=1}^{\infty}$ eine Basis stetiger Funktionen des $H^1(\Omega)$. Für die Simulation werden wir später stückweise affine Funktionen verwenden, im Moment genügt aber für die folgenden

Betrachtungen der etwas allgemeinere Fall.

Wir betrachten die *Galerkin-Approximation* u_m^k von u_N^k im endlich dimensionalen Teilraum S_m von $H^1(\Omega)$ mit Basis $\{\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_M\}$ durch

$$u_m^k = \sum_{j=1}^M u_j \eta_j. \quad (5.4)$$

Damit lässt sich das vollständig diskretisierte Problem mit (5.3) wie folgt formulieren:
Finde $u_m^k \in S_m$, wobei für alle $v \in S_m$ gilt

$$\int_{\Omega} \nabla u_m^k \cdot \nabla v \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \frac{1}{h} \left(b(u_m^k) - b(u_m^{k-1}) \right) v \, d\mathbf{x} + \int_{\Gamma} \gamma (u_m^k - g) v \, dS = 0. \quad (5.5)$$

Dabei sind u_m^{k-1} und die zugehörigen Koeffizienten der Galerkin-Approximation aus dem vorhergehenden Zeitschritt gegeben.

Durch die endlich dimensionale Basis des S_m lässt sich das vollständig diskretisierte Problem als ein System mit M nichtlinearen Gleichungen auffassen, für das die M Koeffizienten u_j von u_m^k zu bestimmen sind. Das heißt (5.5) ist somit äquivalent zu

$$\mathcal{J}_j(u_m^k, \eta_j) := \int_{\Omega} \nabla u_m^k \cdot \nabla \eta_j \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \frac{1}{h} \left(b(u_m^k) - b(u_m^{k-1}) \right) \eta_j \, d\mathbf{x} + \int_{\Gamma} \gamma (u_m^k - g) \eta_j \, dS = 0 \quad (5.6)$$

für alle $j = 1, \dots, M$.

5.1.3 Numerisches Verfahren

In jedem Zeitschritt verwenden wir zur Lösung dieses nichtlinearen Gleichungssystems das *Newton-Verfahren*, wodurch iterativ u_m^k über die Lösung eines linearen Gleichungssystems bestimmt wird. Die Lösung des Systems

$$\mathcal{J}(u, v) = 0, \quad \text{für alle } v \in S_m$$

ist also der Grenzwert der Iteration: Für jedes $k \in \mathbb{N}_0$ sei

$$D\mathcal{J}(u_m^k, v) w^k = -\mathcal{J}(u_m^k, v), \quad \text{für alle } v \in S_m \quad (5.7)$$

$$u_m^{k+1} = u_m^k + w^k \quad (5.8)$$

mit

$$w^k = \sum_{j=1}^M w_j \eta_j \in S_m \quad (5.9)$$

und passenden Voraussetzungen an den Startwert $u_m^0 = u^0$. Dabei handelt es sich bei $D\mathcal{J}$ um die *Gâteaux-Ableitung* von \mathcal{J} , die wir nun berechnen werden.

Gâteaux-Ableitung

Es ist

$$\begin{aligned}
 \mathcal{J}(u + \delta w, v) &= \int_{\Omega} \nabla(u + \delta w) \cdot \nabla v \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \frac{1}{h} \left(b(u + \delta w) - b(u_m^{k-1}) \right) v \, d\mathbf{x} \\
 &\quad + \int_{\Gamma} \gamma(u + \delta w - g) v \, dS \\
 &= \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \delta \nabla w \cdot \nabla v \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \frac{1}{h} \left(b(u + \delta w) - b(u_m^{k-1}) \right) v \, d\mathbf{x} \\
 &\quad + \int_{\Gamma} \gamma(u - g) v \, dS + \int_{\Gamma} \gamma \delta w v \, dS.
 \end{aligned}$$

Also ist

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{\delta} (\mathcal{J}(u + \delta w, v) - \mathcal{J}(u, v)) &= \int_{\Omega} \nabla w \cdot \nabla v \, d\mathbf{x} + \frac{1}{h} \int_{\Omega} \frac{1}{\delta} (b(u + \delta w) - b(u)) v \, d\mathbf{x} \\
 &\quad + \int_{\Gamma} \gamma w v \, dS.
 \end{aligned}$$

Dann folgt für die Gâteaux-Ableitung

$$\begin{aligned}
 D\mathcal{J}(u, v; w) &:= D\mathcal{J}(u, v)w := \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{1}{\delta} (\mathcal{J}(u + \delta w, v) - \mathcal{J}(u, v)) \\
 &= \int_{\Omega} \nabla w \cdot \nabla v \, d\mathbf{x} + \frac{1}{h} \int_{\Omega} b_u(u) w v \, d\mathbf{x} + \int_{\Gamma} \gamma w v \, dS, \quad (5.10)
 \end{aligned}$$

wobei wir unter $b_u(u)$ die schwache Ableitung von b nach u verstehen.

Berechnung von \mathcal{J} und $D\mathcal{J}$

Nützen wir noch die spezielle Struktur von b aus, dann folgt mit

$$b(u) = \frac{c}{\kappa} u + \frac{\rho L}{\kappa} \varphi \left(\frac{L(u - u_c)}{u_c u} \right)$$

für fast alle $\mathbf{x} \in \Omega$

$$b_u(u) = \frac{c}{\kappa} + \frac{\rho L^2}{\kappa u^2} \varphi_y \left(\frac{L(u - u_c)}{u_c u} \right)$$

und weiter aus der Definition (5.6) für \mathcal{J}

$$\begin{aligned}
 \mathcal{J}(u, v) &= \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v \, d\mathbf{x} + \frac{c}{\kappa h} \int_{\Omega} (u - u_m^{k-1}) v \, d\mathbf{x} + \int_{\Gamma} \gamma(u - g) v \, dS \\
 &\quad + \int_{\Omega} \frac{\rho L}{\kappa h} \left(\varphi \left(\frac{L(u - u_c)}{u_c u} \right) - \varphi \left(\frac{L(u_m^{k-1} - u_c)}{u_c u_m^{k-1}} \right) \right) v \, d\mathbf{x}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v \, d\mathbf{x} + \frac{c}{\kappa h} \int_{\Omega} uv \, d\mathbf{x} - \frac{c}{\kappa h} \int_{\Omega} u_m^{k-1} v \, d\mathbf{x} + \gamma \int_{\Gamma} uv \, dS - \gamma \int_{\Gamma} gv \, dS \\
 &\quad + \frac{\rho L}{\kappa h} \int_{\Omega} \left(\varphi \left(\frac{L(u - u_c)}{u_c u} \right) - \varphi \left(\frac{L(u_m^{k-1} - u_c)}{u_c u_m^{k-1}} \right) \right) v \, d\mathbf{x},
 \end{aligned}$$

sowie mit (5.10)

$$\begin{aligned}
 D\mathcal{J}(u, v; w) &= \int_{\Omega} \nabla w \cdot \nabla v \, d\mathbf{x} + \frac{c}{\kappa h} \int_{\Omega} wv \, d\mathbf{x} + \frac{\rho L^2}{\kappa h} \int_{\Omega} \frac{1}{u^2} \varphi_y \left(\frac{L(u - u_c)}{u_c u} \right) wv \, d\mathbf{x} \\
 &\quad + \gamma \int_{\Gamma} wv \, dS.
 \end{aligned}$$

Unter der Verwendung der Galerkin-Approximationen (5.4) und (5.9) erhalten wir dann für die j -te Zeile des Gleichungssystems (5.7)

$$\begin{aligned}
 \mathcal{J}_j(u_h^k, \eta_j) &= \sum_{l=1}^M w_l \left[\int_{\Omega} \nabla \eta_l \cdot \nabla \eta_j \, d\mathbf{x} + \frac{c}{\kappa h} \int_{\Omega} \eta_l \eta_j \, d\mathbf{x} + \gamma \int_{\Gamma} \eta_j \eta_l \, dS \right] \\
 &\quad - \sum_{l=1}^M \tilde{w}_l \left(\frac{c}{\kappa h} \int_{\Omega} \eta_l \eta_j \, d\mathbf{x} \right) - \gamma \int_{\Gamma} g \eta_j \, dS \\
 &\quad + \frac{\rho L}{\kappa h} \int_{\Omega} \left(\varphi \left(\frac{L(u_m^k - u_c)}{u_c u_m^k} \right) - \varphi \left(\frac{L(u_m^{k-1} - u_c)}{u_c u_m^{k-1}} \right) \right) \eta_j \, d\mathbf{x},
 \end{aligned} \tag{5.11}$$

wobei \tilde{w}_l die bekannten Koeffizienten der Galerkin-Approximation von u_N^{k-1} im vorhergehenden Zeitschritt t_N^k bezeichnet, sowie

$$\begin{aligned}
 \left(D\mathcal{J}(u_m^k, \eta_j; w^k) \right)_j &= \sum_{l=1}^M D\mathcal{J}_{jl}(u_m^k, \eta_j) w_l \eta_l \\
 &= \sum_{l=1}^M w_l \left[\int_{\Omega} \nabla \eta_l \cdot \nabla \eta_j \, d\mathbf{x} + \frac{c}{\kappa h} \int_{\Omega} \eta_l \eta_j \, d\mathbf{x} + \gamma \int_{\Gamma} \eta_l \eta_j \, dS \right. \\
 &\quad \left. + \frac{\rho L^2}{\kappa h} \int_{\Omega} \left(\frac{1}{(u_m^k)^2} \varphi_y \left(\frac{L(u_m^k - u_c)}{u_c u_m^k} \right) \right) \eta_l \eta_j \, d\mathbf{x} \right].
 \end{aligned}$$

Da wir für die Ansatzfunktionen η_j mit $j = 1, \dots, M$ lineare Finite Elemente verwenden, besitzen folglich die meisten Integranden in \mathcal{J} und $D\mathcal{J}$ polynomiale Struktur mit konstanten Koeffizienten und können daher leicht explizit berechnet werden. Lediglich die Integrale mit nichtlinearen Termen wie φ , φ_y oder der Randfunktion g müssen durch *numerische Quadratur* approximiert werden.

Da wir lineare Finite Elemente als Basis des S_m gewählt haben, verwenden wir, wie in [1], die Einpunkt-Gauß-Quadratur, die lineare Funktionen exakt integriert.

Die Integrationen in \mathcal{J} und $D\mathcal{J}$ über das Gebiet Ω berechnet man aus der Summe über die Integrale aller Dreiecks-Elemente \hat{T} . Analog ist das Randintegral die Summe über die Kanten \hat{E} , die den Rand Γ bilden. Bezogen auf ein solches Integral über ein Dreieckselement \hat{T} mit Fläche $|\hat{T}|$ lautet für eine nichtlineare Funktion f die n_p -Punkt-Gauß-Quadratur, und im Speziellen für einen Punkt:

$$\int_{\hat{T}} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \approx 2|\hat{T}| \sum_{p=1}^{n_p} f(\mathbf{x}_p) \lambda_p \stackrel{n_p=1}{=} 2|\hat{T}| \frac{1}{2} \bar{f} = |\hat{T}| \bar{f},$$

wobei λ_p die Gewichte in den Punkten \mathbf{x}_p sind und \bar{f} den Funktionswert von f im geometrischen Schwerpunkt des Dreiecks \hat{T} bezeichnet.

Unter Verwendung allgemein nichtlinearer Funktionen f und g liefert also die Einpunkt-Gauß-Quadratur für die fraglichen Integrale in \mathcal{J} und $D\mathcal{J}$

$$\int_{\hat{T}} f \eta_j d\mathbf{x} \approx \frac{1}{3} \bar{f} |\hat{T}| \quad \text{und} \quad \int_{\hat{T}} f \eta_l \eta_j d\mathbf{x} \approx \frac{1}{9} \bar{f} |\hat{T}|, \quad (5.12)$$

sowie

$$\int_{\hat{E}} g \eta_j dS \approx \frac{1}{2} \bar{g} |\hat{E}|, \quad (5.13)$$

für alle Basisfunktionen η_j und η_l , deren Träger \hat{T} beziehungsweise \hat{E} als Teilmenge besitzt. Dabei ist \bar{f} wieder der Funktionswert von f im geometrischen Schwerpunkt des Dreiecks \hat{T} mit Flächeninhalt $|\hat{T}|$. Analog wird g im geometrischen Schwerpunkt der Kante \hat{E} , also im Mittelpunkt, ausgewertet und mit \bar{g} bezeichnet, wobei $|\hat{E}|$ die Kantenlänge von \hat{E} ist.

Im Fall einer Randkurve g , die in der Zeit stückweise linear und zu jedem Zeitpunkt auf dem Rand konstant ist, liefert die Einpunkt-Gauß-Quadratur den exakten Wert des Integrals in (5.11). Da wir so eine Randkurve in der Simulation verwenden, werden demnach nur noch die Integrale über die nichtlineare Funktion φ und deren Ableitung φ_y durch dieses Quadraturverfahren approximiert.

Implementierung und Algorithmus

Die Implementierung des Verfahrens in MATLAB basiert auf den Programm-Codes aus [1]. Dabei verwenden wir, wie bereits erwähnt, eine *Triangulierung* des Gebiets Ω mit Dreieckselementen und global stetigen, auf jedem Element linearen Basisfunktionen η_j für $j = 1, \dots, M$. Diese η_j bilden eine M -dimensionale nodale Basis des $S_m \subset H^1(\Omega)$, das heißt, in den M Gitterpunkten oder Knoten (x_k, y_k) der Triangulierung gilt

$$\eta_j(x_k, y_k) = \delta_{jk} = \begin{cases} 1 & \text{für } j = k \\ 0 & \text{für } j \neq k \end{cases}.$$

Die Berechnung der Integrale in \mathcal{J} und $D\mathcal{J}$ erfolgt über die Summe der Integrale über die einzelnen Elemente. Hierfür muss die Assemblierung im Programmcode von [1] der

Problemstellung entsprechend angepasst werden.

Für das reduzierte Problem wird die Robin-Randbedingung (3.12) verwendet. Daher benötigen wir neben den Implementierungen der Steifigkeitsmatrix $(\int_{\Omega} \nabla \eta_j \cdot \nabla \eta_k d\mathbf{x})_{jk}$ und der Massenmatrix $(\int_{\Omega} \eta_j \eta_k d\mathbf{x})_{jk}$ zusätzlich die Implementierung der durch Quadratur approximierten Integrale nach Gleichungen (5.12) und (5.13), sowie die Implementierung der Massenmatrix $(\int_{\Gamma} \eta_j \eta_k dS)_{jk}$ am Rand Γ .

Die Elementmassenmatrix M_{Γ}^e für eine Randkante \hat{E} , auf der lediglich die beiden Basisfunktionen $\hat{\eta}_1$ und $\hat{\eta}_2$ von Null verschiedene Werte annehmen, gilt

$$M_{\Gamma}^e = \left(\int_{\hat{E}} \hat{\eta}_j \hat{\eta}_k dS \right)_{jk} = \|\hat{E}\| \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}. \quad (5.14)$$

Als Abbruchkriterium für die Newton-Iteration (5.7) - (5.9) verwenden wir die Euklidische Norm der Newton-Korrektur w . Wenn im Verlauf des Gefrierprozesses die Temperatur u_c erreicht und die latente Wärme freigesetzt wird, können große Temperaturgradienten auftreten, weil die Funktion φ_y in u_c eine Sprungstelle besitzt. Da wir keine Schrittweitensteuerung oder adaptive Gitterverfeinerung verwenden, ist es also sinnvoll eine obere Schranke für die Zahl der Iterationen festzulegen.

Somit lautet der für die Simulation verwendete Algorithmus:

Algorithmus 1: Simulation des reduzierten Problems

Gegeben: Triangulierung des Gebiets Ω , Zeitintervall $[0, T]$, Modellkonstanten;

Wähle: Toleranz TOL, Maximale Iterationszahl MaxIter und Zeitschrittweite h ;

Setze Anzahl der Zeitschritte $N = T/h$;

Setze u_m^0 ;

// Berechne u_m^k zum Zeitpunkt $t_N^k = kh$

for $k = 1$ *bis* N **do**

 Setze $u = u_m^{k-1}$ und $j = 1$;

 // Newton-Verfahren

while $j \leq \text{MaxIter}$ **do**

 Berechne \mathcal{J} und $D\mathcal{J}$;

 Löse $D\mathcal{J}w = -\mathcal{J}$;

 Setze $u = u + w$;

if $\|w\| < \text{TOL}$ **then**

 | break;

end if

$j = j + 1$;

end while

$u_m^k = u$;

end for

5.2 Die nichtlineare Phasenfeldfunktion φ

Die Interaktion zwischen flüssigem Wasser und porösem Medium wird, wie bereits in Abschnitt 3.1 erwähnt, durch eine nichtlineare Funktion φ beschrieben, die durch Messungen bestimmt werden kann.

Im Rahmen des SPP 1253 wurden mit dem SY-LAB Geräte IceCube 15M Gewebeproben tiefgefroren und das zugehörige Kühlprotokoll aufgezeichnet. Zur optimalen Steuerung dieser Einfrierprozesse liegt den numerischen Simulationen in [29] für φ die Ansatzfunktion

$$\varphi(y) = H(y) - H(y - \delta) H(-y) \frac{\exp(\alpha\delta) (-\exp(\alpha(y - \delta)) + \alpha y + 1 - \alpha\delta)}{1 - \exp(\alpha\delta) + \alpha\delta \exp(\alpha\delta)},$$

zugrunde, die auf *Heavisidefunktionen* H

$$H(y) := \frac{1}{2} (1 + \operatorname{sgn} y) \quad (5.15)$$

und Exponentialfunktionen basiert.

Um die Messdaten möglichst gut zu approximieren wurden die Parameter α und δ der Ansatzfunktion mit

$$\alpha = 3 \quad \text{und} \quad \delta = -6$$

passend gewählt.

Weil $0 \leq \beta_l \leq \epsilon$ skalieren wir die Ansatzfunktion für die Simulation noch mit dem Faktor ϵ .

Damit ergibt sich für den Volumenanteil β_l für $y = \frac{L(u-u_c)}{u_c u}$ die folgende Fallunterscheidung

$$\beta_l(u) = \varphi(y) = \begin{cases} \epsilon & \text{für } u_c < u, \\ \epsilon \left(1 + \frac{\exp(3y) - 1 - 3y \exp(-18)}{1 - 19 \exp(-18)} \right) & \text{für } \frac{Lu_c}{L+6u_c} < u \leq u_c, \\ 0 & \text{für } u \leq \frac{Lu_c}{L+6u_c}. \end{cases}$$

Der Graph dieser Funktion ist in Abbildung 5.3 dargestellt.

Die nichtlineare Funktion φ ist demnach stetig und bis auf zwei Punkte, nämlich bei den Temperaturen $u = u_c$ und $u = \frac{Lu_c}{L+6u_c}$, in allen Punkten differenzierbar.

Für unsere Simulation verwenden wir die folgende Ableitung von φ , die in Abbildung 5.4 zu sehen ist.

$$\varphi_y(y) = \begin{cases} 0 & \text{für } u_c < u, \\ \epsilon \frac{3 \exp(3y) - 3 \exp(-18)}{1 - 19 \exp(-18)} & \text{für } \frac{Lu_c}{L+6u_c} < u \leq u_c, \\ 0 & \text{für } u \leq \frac{Lu_c}{L+6u_c}. \end{cases}$$

Damit besitzt φ eine maximale Steigung von $\varphi_{y,max} = 3\epsilon \frac{\exp(18) - 1}{\exp(18) - 19}$.

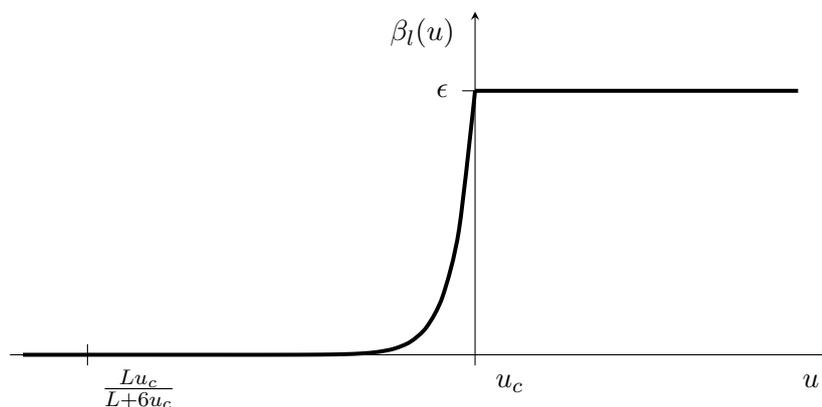


Abbildung 5.3: Graph der für die Simulation verwendeten Funktion $\beta_l(u)$, die den Volumenanteil des flüssigen Wassers bezüglich der Temperatur u angibt.

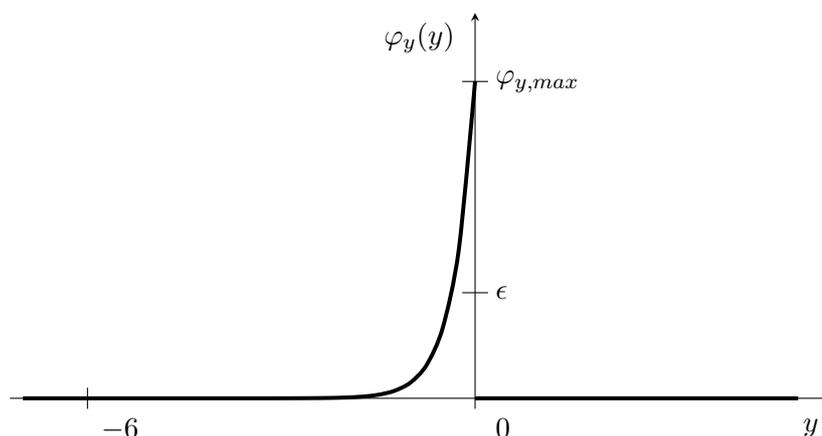


Abbildung 5.4: Graph der Ableitung $\varphi_y(y)$ der für die Simulation verwendeten nichtlinearen Funktion $\varphi(y)$. Dabei entspricht $y = 0$ der Temperatur $u = u_c$ und $y = -6$ der Temperatur $u = \frac{Lu_c}{L+6u_c}$.

Wenn wir mit diesen Definitionen für φ und φ_y auf die Approximation der Integrale in \mathcal{J} und $D\mathcal{J}$ mittels Einpunkt-Gauß-Quadratur zurückblicken, sehen wir, dass die entsprechenden Integrale meist exakt durch die Quadraturformel berechnet werden. Die jeweiligen Integranden sind nämlich lediglich im Bereich, in dem der Phasenübergang stattfindet, also für Temperaturen zwischen u_c und $\frac{Lu_c}{L+6u_c}$, nichtlinear. Dies ist der Fall, da außerhalb dieses Bereichs φ und φ_y konstant sind und φ_y sogar 0 ist. Somit werden also nur im Bereich des Phasenübergangs Integrale in \mathcal{J} und $D\mathcal{J}$ approximiert.

5.3 Modellkonstanten

Bei der Kryokonservierung hängen die Konstanten des betrachteten Modells stark von dem verwendeten Gewebe, von dem Behälter, in dem sich dieses befindet, und auch von der Temperatur ab. Um einen Eindruck über die Diversität der Kenngrößen zu erhalten, werden wir diese nun im aktuellen Abschnitt näher betrachten und anschließend die für die Simulation verwendeten Konstanten angeben.

5.3.1 Kenngrößen für Gewebe allgemein

In [5] sind latente Wärmen und spezifische Wärmekapazitäten unterschiedlicher biologischer Substanzen und Gewebearten aufgelistet. Dabei nimmt reines Wasser in der Regel die größten Werte an. Diese Werte können somit jeweils als obere Schranke der Kenngrößen fungieren.

Die latente Wärme L variiert je nach vorliegender Substanz und Gewebeart im Bereich von 333 kJ/kg für Wasser über 268 kJ/kg für Hirngewebe und 200 kJ/kg für Muskel- und Bindegewebe bis hin zu 128 kJ/kg für Fettgewebe.

Ungefrorenes Gewebe besitzt eine spezifische Wärmekapazität C_v von 3,5 – 3,9 kJ/kg K, die jedoch unterhalb des Gefrierpunktes bei fallender Temperatur stark abnimmt. So hat Muskelgewebe bereits bei einer Temperatur von -3 °C eine spezifische Wärmekapazität von nur mehr 1,9 kJ/kg K, die bei $83\text{ K} = -190\text{ °C}$ bis auf 1,0 kJ/kg K fällt. Im Gegensatz dazu weisen Angiome (Blutschwämme) bei dieser Temperatur mit 2,01 kJ/kg K noch eine sehr hohe spezifische Wärmekapazität auf.

Auch die Wärmeleitfähigkeit κ hängt von der Gewebeart ab. In der Literatur finden sich hier allerdings nur sehr wenige Kennwerte. In ihrem Modell für Zellkulturen verwenden Solano, Gallant und Wood [44] bei Raumtemperatur eine Wärmeleitfähigkeit von 0,8 W/m K, die ein wenig über der Wärmeleitfähigkeit von Wasser mit 0,597 W/m K liegt, vgl. [6]. Die Wärmeleitfähigkeit von Eis ist jedoch mit 2,43 W/m K bei -20 °C deutlich höher.

Der Wärmedurchgangskoeffizient γ wird primär von den Eigenschaften des Gefäßes bestimmt, in dem sich das Gewebe befindet. Je nach Material, Dicke und Beschichtung, aber auch durch den Kontakt des Gewebes mit der Gefäßwand kann dieser Parameter stark schwanken. In [41] wurde zur Konstruktion eines Einfriercontainers zum Einfrieren humaner Erythrozyten (roter Blutkörperchen) der Wärmeübertragungskoeffizient für unterschiedliche Materialien ermittelt. Dabei ergab sich für Kupferplatten ein Koeffizient im Bereich $208 - 268\text{ W/m}^2\text{ K}$ und mit einer Gewebeisolationsschicht, die den Wärmeübergang verbessert, wurden Werte im Bereich $943 - 1038\text{ W/m}^2\text{ K}$ bestimmt.

Je nach Temperatur gibt es bei der Dichte von flüssigem Wasser und Eis nur minimale Unterschiede. So hat Eis bei -20 °C eine Dichte von 920 kg/m^3 und bei 0 °C eine Dichte

von $917,9 \text{ kg/m}^3$, flüssiges Wasser besitzt bei $4 \text{ }^\circ\text{C}$ die größte Dichte von $999,7 \text{ kg/m}^3$ und bei $20 \text{ }^\circ\text{C}$ eine Dichte von $998,2 \text{ kg/m}^3$, s. [6]. Die Annahme einer konstanten Dichte für die Wasserkomponente stellt demnach kaum eine Einschränkung dar.

Ähnliches gilt für die Gefriertemperatur des Wassers, bei der es selbst bei großen Druckunterschieden nur zu sehr geringen Abweichungen im Gradbereich kommt. Wir setzen sie daher bei $0 \text{ }^\circ\text{C} = 273 \text{ K}$ an.

Für die Porosität des Gewebes liefert die Packungsdichte der Zellen in ihrer extrazellulären Matrix einen Anhaltspunkt. Dieser kann bis zu 80% betragen, vgl. [29].

5.3.2 Verwendete Konstanten bei der Simulation

Im betrachteten reduzierten Modell (3.11), (3.12) und (3.13) werden alle oben erwähnten Größen bezüglich Ort, Zeit und Temperatur als konstant angenommen. Insbesondere für die stärker streuenden Kenngrößen - spezifische Wärmekapazität C_v , latente Wärme L , Wärmeleitfähigkeit κ und Wärmedurchgangskoeffizient γ - sollten also plausible Mittelwerte zur numerischen Simulation verwendet werden.

Zur Bestimmung der Simulationskonstanten wurden mehrere Testläufe mit unterschiedlichen Parametersätzen durchgeführt. Dabei wurden jeweils die spezifischen Wärmekapazitäten C_v und C_m , sowie die Dichten ρ und ρ_m gleich gesetzt. Es fiel auf, dass je größer C_v und L gewählt werden, desto größer auch γ gewählt werden muss. Des Weiteren sollte κ nicht zu klein sein, damit eine ausreichend schnelle Temperaturexpansion im Gewebe gewährleistet ist.

Für unsere Simulationen verwenden wir die folgenden Konstanten:

$$\begin{aligned} \text{Gefriertemperatur } u_c &= 273 \text{ K} \\ \text{Dichte } \rho &= 1000 \text{ kg/m}^3 \\ \text{latente Wärme } L &= 125 \text{ kJ/kg} \\ \text{spezifische Wärmeleitfähigkeit } C &= 1,5 \text{ kJ/kg K} \\ \text{Wärmeleitfähigkeit } \kappa &= 0,8 \text{ W/m K} \\ \text{Wärmedurchgangskoeffizient } \gamma &= 270 \text{ W/m}^2 \text{ K} \\ \text{Porosität } \epsilon &= 0,8 \end{aligned}$$

Damit ergibt sich für die Konstante $c = \rho C_v \epsilon - \rho_m C_m \beta_m$ aus (3.4)

$$c = 1500 \text{ kJ/m}^3 \text{ K}.$$

5.4 Diskretisierungsdaten

Außerdem wurde für die Simulation der Zeitschritt $h = 0,1$ s über einen Zeitraum von 2400 s = 40 min gewählt.

Bezüglich des Ortes betrachten wir den Querschnitt einer zylindrischen Ampulle, wie in Abbildung 5.1 dargestellt, die einen Durchmesser von 2 cm und eine Höhe von 5 cm besitzt. Für das resultierende Rechteck wurde eine Triangulierung in COMSOL mit 755 Knoten, 1424 Dreiecks-Elementen generiert. Die maximale Kantenlänge m_{max} dieser Triangulierung beträgt dabei 1,83 mm.

Des Weiteren wurde beim Newton-Verfahren für die Norm der Newton-Korrektur eine Toleranz von $TOL = 10^{-3}$ sowie eine maximale Iterationszahl von $MaxIter = 100$ Iterationen gewählt.

5.5 Simulationsergebnisse

Mit den Modellkonstanten aus Abschnitt 5.3.2 und den Diskretisierungsdaten aus Abschnitt 5.4 wurde der Algorithmus 1 in MATLAB Version 7.8 (R2009a) implementiert. Dabei wurden die Codes für die Finite Elemente Implementierung aus [1] für unsere Problemstellung modifiziert und erweitert.

Über den gesamten Verlauf der Simulation gesehen konvergiert das Newton-Verfahren bereits nach wenig Schritten. Lediglich im Zeitintervall $[660, 5$ s, $1174, 4$ s], in dem beim Phasenübergang die latente Wärme frei wird, siehe Abbildung 5.5, ist wie erwartet die maximale Iterationszahl der Grund für den Abbruch der Newton-Iteration. Dies kann auf die Unstetigkeit der Ableitung in der nichtlinearen Funktion φ , siehe Abbildung 5.4, zurückgeführt werden. Der damit verbundene große Temperaturgradient wirkt sich in der Norm der Newton-Korrektur w aus, sodass deutlich mehr Schritte für die Erfüllung der Toleranzgrenze nötig wären. Trotz des Abbruchs nach 100 Iterationsschritten hält sich hier die maximale Norm der Newton-Korrektur mit 0,091 in Grenzen.

Wie zu Beginn dieses Kapitels erwähnt wurde, verwenden wir als Randfunktion g den im Kühlprotokoll in Abbildung 5.5 dargestellten Kühlverlauf. Dieser wird in Abbildung 5.2 nochmals genauer aufgezeigt. Zur besseren Identifizierung wurde sowohl für die Kurve in Abbildung 5.2 als auch die Kurve in Abbildung 5.5 jeweils die Farbe Rot gewählt.

Aus der durchgeführten Simulation werden zwei Ergebnisse präsentiert und ausgewertet. Zunächst werden wir den Vergleich der Simulation mit den Messdaten aus dem Kühlprotokoll anstellen. Anschließend wird die Temperatur über Ω im zeitlichen Verlauf betrachtet, wobei wir uns hier auf den für den Phasenübergang interessanten Zeitbereich einschränken werden.

5.5.1 Vergleich mit Messdaten

Um einen Vergleich zwischen dem simulierten Gefrierprozess und den Messdaten aus dem Kühlprotokoll in Abbildung 5.5 herstellen zu können, wird aus dieser Abbildung die blaue Messkurve übernommen und in Abbildung 5.5 ebenfalls in blau dargestellt. Ebenso ist die zugrunde liegende Randfunktion g in beiden Abbildungen in rot gekennzeichnet. Der bei der Simulation berechnete Temperaturverlauf in der Mitte der Ampulle trägt in Abbildung 5.5 die Farbe Grün.

Für den Temperaturverlauf in der Mitte der Ampulle $(0,0)$, vgl. Abbildung 5.2, wurde das Element, in dem der Punkt $(0,0)$ liegt, bestimmt und der Wert in der Ampullenmitte per linearer Interpolation ermittelt.

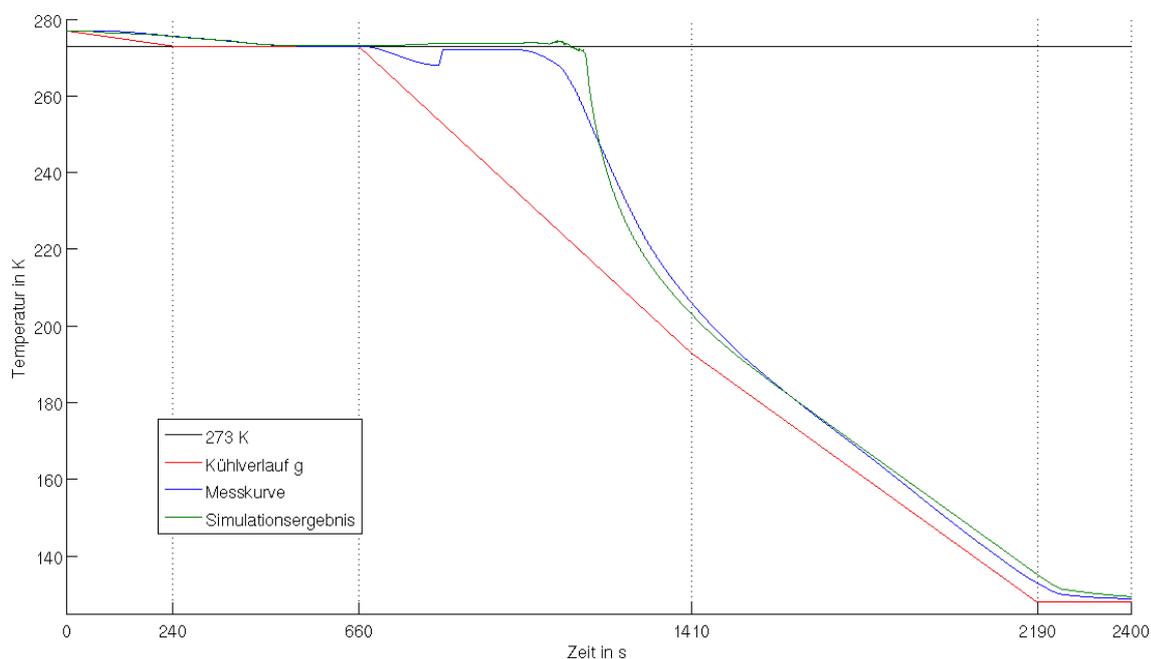


Abbildung 5.5: Vergleich des Simulationsergebnisses (grün) mit den Messdaten (blau) für den Temperaturverlauf in der Mitte der Ampulle beim Kühlverlauf g (rot).

Abbildung 5.5 zeigt deutlich, dass der Verlauf der Messkurve für die verwendeten Modellkonstanten über den gesamten Testzeitraum gut approximiert werden kann.

Auch die für die Kryokonservierung interessanten kritischen Phasen, wie in Abbildung 1.2 zu sehen, können gut dargestellt werden. Da das zugrunde liegende Modell das Gefrieren in einem porösen Medium beschreibt, in dem, wie in der Einleitung erläutert wurde, keine Unterkühlung stattfindet, kann die Unterkühlungsphase auch nicht wiedergegeben werden.

Gut sichtbar ist die Phase, in der die latente Wärme frei wird. Die leichten Schwankungen um den Gefrierpunkt rühren von Effekten der Finite Elemente Diskretisierung und dem verwendeten Verfahren her, sodass sich auch hier der große Temperaturgradient an der Grenze des Phasenübergangs in Kombination mit den verwendeten linearen Finiten Elementen bemerkbar macht. Eine Glättung von φ_y , Gitterverfeinerung oder Ansatzfunktionen höheren Grades vermindern diesen Effekt.

Ebenso ist die dritte Phase, der starke Temperaturabfall im Anschluss an den Phasenübergang, was beim Verfahren die bereits erwähnten Schwierigkeiten mit sich bringt, gut erkennbar.

Insgesamt können wir also aus diesem Vergleich schließen, dass sich das verwendete reduzierte Frémondsche Modell gut für die Simulation der Kryokonservierung von lebendem Gewebe eignet.

5.5.2 Temperaturverlauf

Damit wir einen Eindruck über den Temperaturverlauf auf dem betrachteten Gebiet Ω erhalten, ist in Abbildung 5.7(a) bis Abbildung 5.8(f) eine Folge von Momentaufnahmen dargestellt. Sie zeigen im Minutenabstand zum jeweiligen Zeitpunkt die Temperatur über dem Gebiet. Wir beschränken uns dabei auf den Zeitraum 11 min bis 22 min, in dem, wie in Abbildung 5.6 zu sehen ist, der Phasenübergang mit den kritischen Phasen der Kryokonservierung stattfindet.

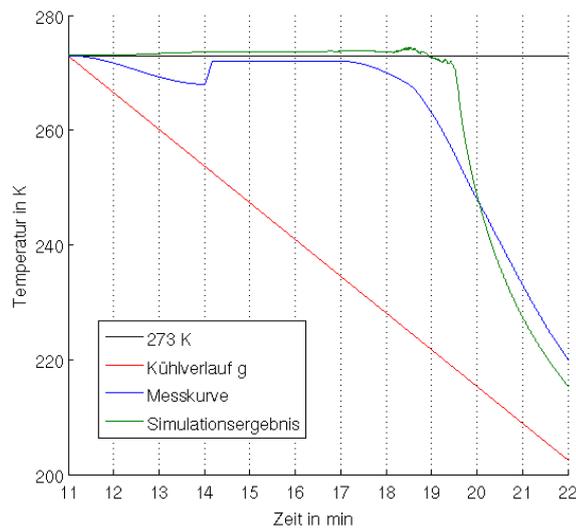


Abbildung 5.6: Ausschnitt aus dem Temperaturverlauf in der Mitte der Probe, vgl. Abbildung 5.5, unter Angabe der Zeitpunkte, zu denen die berechnete Temperatur über ganz Ω betrachtet wird.

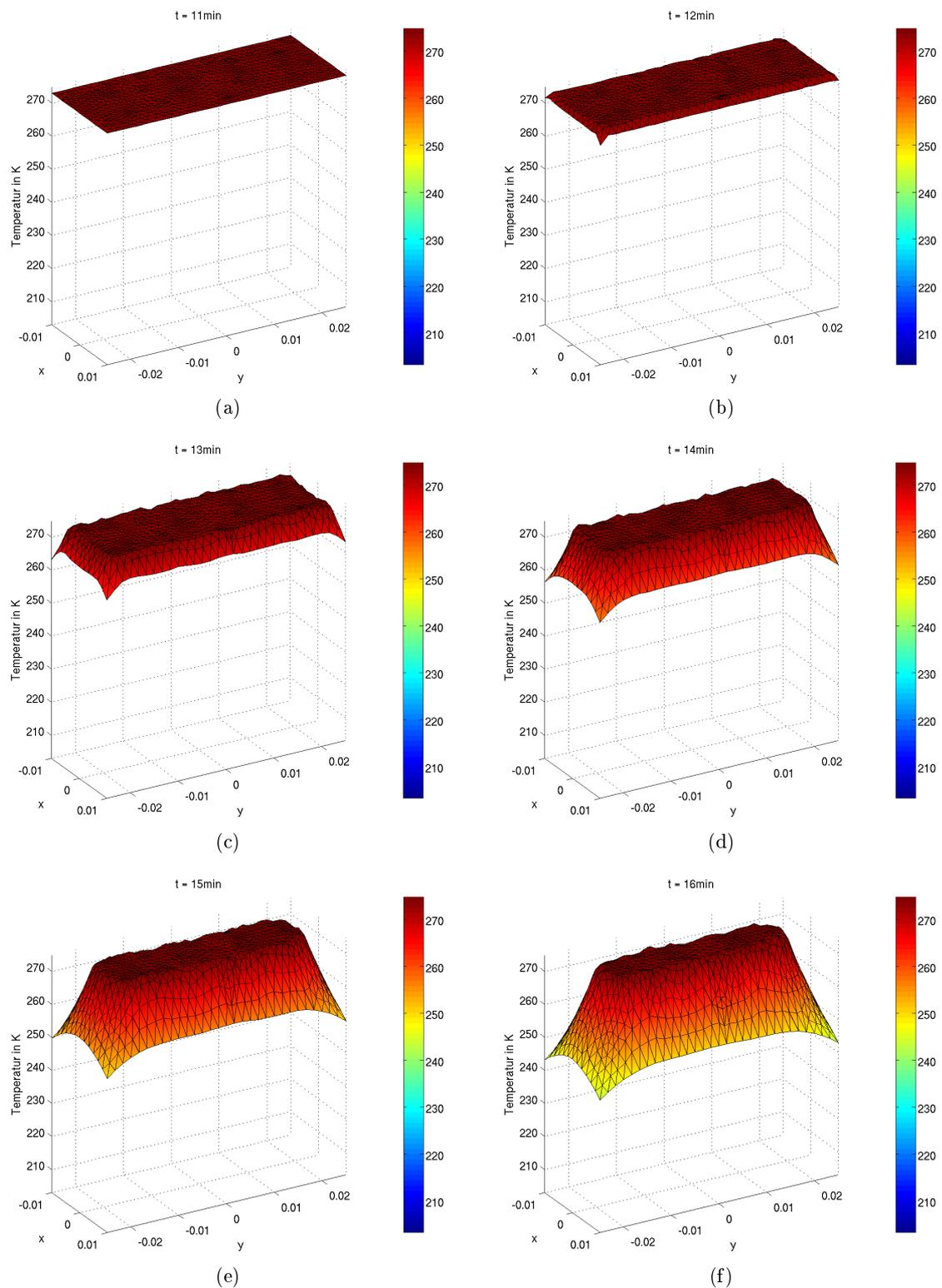
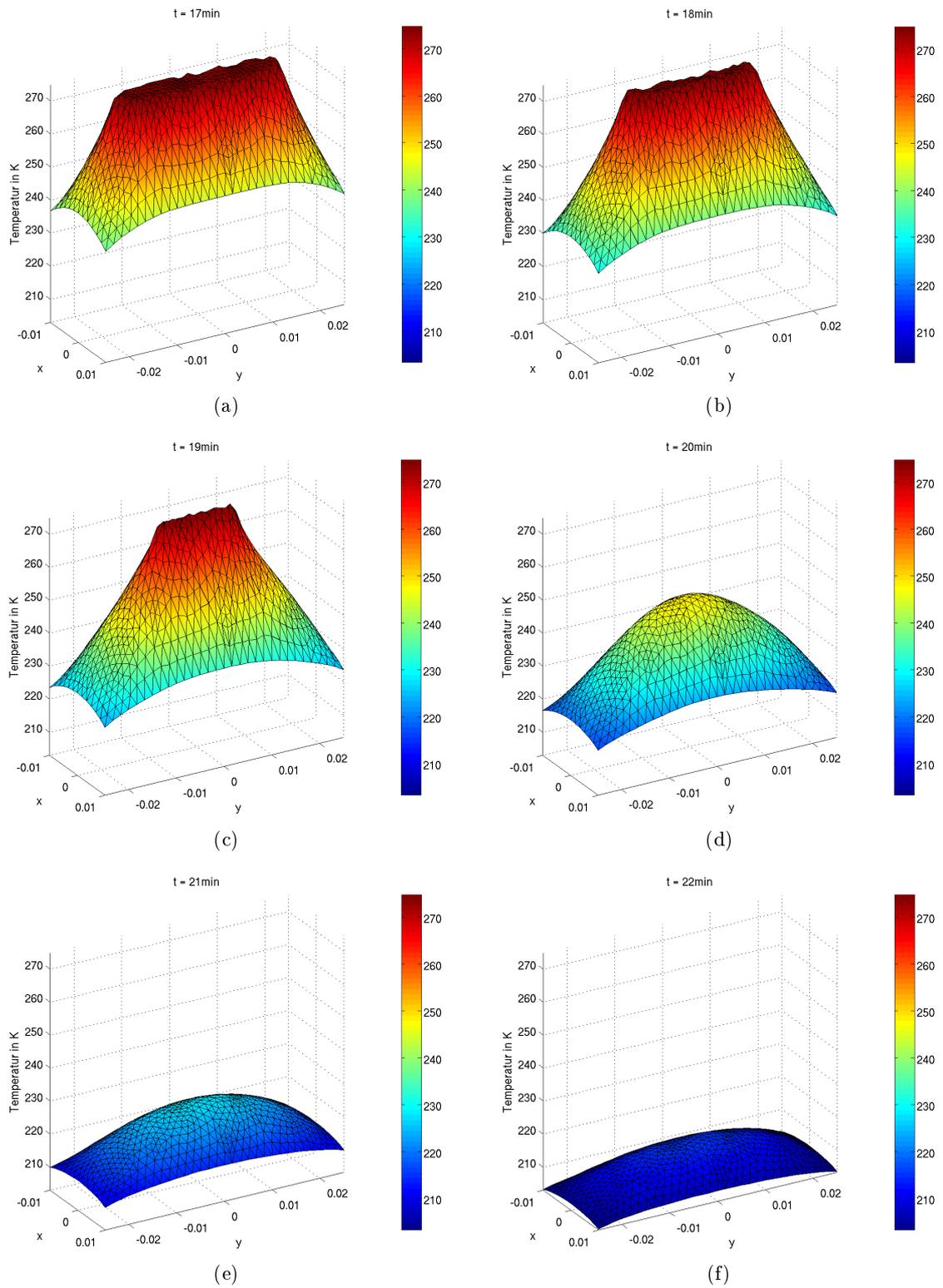


Abbildung 5.7: Temperaturverlauf über Ω im Zeitraum 11 min bis 22 min, Teil 1

Abbildung 5.8: Temperaturverlauf über Ω im Zeitraum 11 min bis 22 min, Teil 2

Da von der 6. bis zur 11. Minute die Randtemperatur konstant auf 273 K gehalten wird, befindet sich die Temperatur in Abbildung 5.7(a) im gesamten Gebiet am beziehungsweise leicht über dem Gefrierpunkt.

Ab der 11. Minute beginnt am Rand die weitere Abkühlung der Probe. Dadurch sinkt zunächst am Rand und später im Inneren der Probe die Temperatur ab, sodass in einem Ortspunkt innerhalb des Gebiets ab der Gefriertemperatur $u_c = 273$ K die Kristallisationsphase beginnt. Dabei wirkt die frei werdende latente Wärme einer weiteren Abkühlung in diesem Ortspunkt entgegen. Erst wenn das Wasser in einem Volumenelement nahezu vollständig gefroren ist, fällt in diesem die Temperatur weiter ab, beginnend am Gebietsrand. Da die Außentemperatur deutlich kühler ist und weiterhin stark fällt, ist auch im betrachteten Gebiet nahe des Randes die Temperaturabnahme im weiteren Verlauf groß. Nahe der Ampullenmitte bleibt jedoch die Temperatur zunächst noch am Gefrierpunkt, da hier weiterhin die latente Wärme während des Phasenübergangs frei wird.

Insgesamt bildet sich also um die Probenmitte während des Phasenübergangs ein Temperaturplateau von 273 K aus, das zu dessen Rand hin stark abfällt und über die Zeit gesehen vom Gebietsrand her immer kleiner wird. Dieses Temperaturverhalten ist in den Abbildungen 5.7(b) bis 5.8(c) zu sehen.

Sobald der Phasenübergang auch in der Ampullenmitte abgeschlossen ist, sinkt hier, wie in den Abbildungen 5.8(d) und 5.8(e) dargestellt, zunächst die Temperatur schnell ab, bis sich nach etwa 22 min wieder in allen Ortspunkten ein gleichmäßiges Abkühlverhalten einstellt, siehe Abbildung 5.8(f).

Die Momentaufnahmen in den Abbildungen 5.7(a) bis 5.8(f) zeigen also in jedem Ortspunkt des betrachteten Gebiets Ω das klassische Verhalten für das Tieffrieren von Zellen. Auch die kritischen Phasen sind in jedem Punkt, wie auch schon in der Probenmitte, wieder gut erkennbar. Der Temperaturverlauf über dem betrachteten Gebiet Ω unterstreicht daher die Eignung des verwendeten reduzierten Frémondschen Modells als Modell zur Kryokonservierung lebenden Gewebes.

Kapitel 6

Zusammenfassung und Ausblick

In diesem Kapitel werden wir kurz den Inhalt und die Ergebnisse dieser Arbeit zusammenfassen. Außerdem geben wir noch einen Ausblick auf mögliche weiterführende Themen, die sich aus dieser Arbeit ergeben.

Ziel dieser Arbeit war es, das von Michel Frémond in [23] präsentierte Phasenfeldmodell zum Gefrieren von Wasser in einem porösen Medium mathematisch zu analysieren und auf die Anwendbarkeit hinsichtlich der Kryokonservierung lebenden Gewebes zu überprüfen.

Nach einer kurzen Herleitung des inkompressiblen Frémondschen Modells (2.34) - (2.41) via Erhaltungsgleichungen wurde eine Erweiterung auf ein schwachkompressibles Modell (2.43), (2.44), (2.36) - (2.41) vorgestellt. Auch die im Modell von Frémond vorausgesetzte Positivität der absoluten Temperatur ist gezeigt worden.

Zur theoretischen und numerischen Behandlung wurden diese Modelle durch geeignete Einschränkung auf ein gemeinsames Modell reduziert. Für dieses quasilineare parabolische Modell (3.11), (3.12), (3.13) wurde dann ein Existenzsatz formuliert.

Der Beweis dieses Existenzsatzes basiert auf [3]. Mit der Rothe-Methode wurde eine Folge zeitdiskreter Lösungen konstruiert. Für deren Existenz als eindeutige schwache Lösungen ist auf die Theorie monotoner Operatoren zurückgegriffen worden. Mit a priori Abschätzungen konnte die schwache Konvergenz für diese Folge zeitdiskreter Lösungen gezeigt werden. Weiter wurde gezeigt, dass die Zeitdifferenzen gleichmäßig beschränkt sind. Mit Kompaktheitsargumenten sowie der Konvergenz am Gebietsrand folgte dann die Existenz einer schwachen Lösung. Die Eindeutigkeit der schwachen Lösung für das reduzierte Problem ist in dieser Arbeit jedoch nicht behandelt worden.

Abschließend wurde mit Hilfe der Finiten Elemente Methode und einem Newton-Verfahren das reduzierte Problem in MATLAB implementiert und numerisch simuliert. Dabei wurden die konstanten Kenngrößen des Modells so gewählt, dass sie für Gewebe plausible Werte repräsentieren. Die Resultate der Simulation wurden mit einem Kühlprotokoll, das im Rahmen des SPP 1253 beim Tieffrieren einer Gewebeprobe mit dem SY-LAB Gerät IceCube 15M aufgezeichnet wurde, verglichen. Dabei ist festzustellen, dass dieses Modell bereits unter der Verwendung eines relativ einfachen Verfahrens mit linearen Finiten Elementen der Gefrierprozess gut approximiert werden kann.

Sowohl bei der numerischen Simulation als auch bei der Modellierung erschließen sich aus dieser Arbeit mehrere weiterführende Themen.

Neben der in dieser Arbeit durchgeführten Simulation des reduzierten Modells können noch numerische Berechnungen für das eigentliche dynamische Frémondsche Modell oder das erweiterte schwachkompressible Modell durchgeführt werden. Da hierfür in der Modellierung die Geschwindigkeit des flüssigen Wassers \mathbf{U}_l als gegeben angenommen wurde, werden weitere Modellgleichungen zur Bestimmung von \mathbf{U}_l benötigt. Dafür können zum Beispiel Darcy-Gesetze herangezogen werden.

Außerdem ist es möglich basierend auf der in dieser Arbeit vorgestellten Modellierung weitere Modelle zu entwickeln, die auch heterogene Eigenschaften des porösen Mediums beziehungsweise des Gewebes besser berücksichtigen. Hierzu gehört etwa die Betrachtung einer nicht ortskonstanten Porosität oder die Modellierung mit nichtkonstanten Kenngrößen des Gewebes, wie etwa der spezifischen Wärmekapazität C_v oder der Wärmeleitfähigkeit κ .

Neben all diesen Ansätzen hat jedoch die Optimierung des Gefriervorgangs unter biologischen Gesichtspunkten, also die Bestimmung eines für die Kryokonservierung optimalen Kühlverlaufs g , in der Praxis den wohl größten Stellenwert. Analog zu den Ergebnissen in [29], basierend auf einem Modell von Caginalp, könnte dies für das Frémondsche Modell ebenfalls durch optimale Steuerung bewerkstelligt werden.

Anhang A

Anhang

Im Anhang werden in Abschnitt A.1 wichtige Definitionen und Sätze angegeben, die im Laufe der Arbeit benötigt werden. Längere Rechnungen sowie einige Beweise und Theoriehintergründe werden dann in Abschnitt A.2 aufgeführt.

A.1 Wichtige Definitionen und Sätze

A.1.1 Konvexe Analysis

Definition A.1 (Indikatorfunktion, ([23], S. 457)). Die Indikatorfunktion I_M einer Menge M ist definiert durch

$$I_M(y) := \begin{cases} 0 & \text{für } y \in M, \\ \infty & \text{für } y \notin M. \end{cases}$$

Wenn die Menge M konvex ist, so ist auch I_M konvex.

Definition A.2 (Subdifferenzierbarkeit, Subgradient und Subdifferential, ([20], Def 5.1)). Sei X ein reeller Banachraum und X^* sein Dualraum. Sei weiter $\overline{\mathbb{R}} := \mathbb{R} \cup \{-\infty, \infty\}$. Eine Funktion F von X nach $\overline{\mathbb{R}}$ heißt in einem Punkt $u \in X$ subdifferenzierbar, wenn sie eine stetige, affine Minorante besitzt, die in u exakt ist. Die Spur (slope) $u^* \in X^*$ einer solchen Minorante heißt Subgradient von F in u , und die Menge aller Subgradienten in u heißt das Subdifferential in u und wird mit $\partial F(u)$ bezeichnet. Wenn F nicht subdifferenzierbar in u ist, gilt $\partial F(u) = \emptyset$. Es gilt die folgende Charakterisierung:

$$u^* \in \partial F(u) \quad \Leftrightarrow \quad F(u) \text{ endlich und } \langle u^*, v - u \rangle + F(u) \leq F(v) \quad \forall v \in X.$$

Definition A.3 (Konvex konjugierte Funktion, ([46], S. 275 und [20], Def 4.1)). Sei X ein reeller Banachraum und X^* sein Dualraum. Zu $F : X \rightarrow \overline{\mathbb{R}}$ definieren wir die (konvex) konjugierte Funktion oder polare Funktion F^* durch

$$F^* : X^* \rightarrow \overline{\mathbb{R}}, \quad u^* \mapsto \sup_{u \in X} \{\langle u^*, u \rangle - F(u)\}.$$

Weiter heißt die konjugierte Funktion zu F^*

$$F^{**} : X \rightarrow \overline{\mathbb{R}}, \quad u \mapsto \sup_{u^* \in X^*} \{\langle u^*, u \rangle - F^*(u^*)\}$$

die bikonjugierte oder bipolare Funktion von F .

Proposition A.4 ([20], Prop. 5.1). *Sei F eine Funktion von X nach $\overline{\mathbb{R}}$, F^* ihre konjugierte Funktion. Dann ist $u^* \in \partial F(u)$ genau dann, wenn*

$$F(u) + F^*(u^*) = \langle u^*, u \rangle$$

Corollar A.5 ([20], S. 23, [11], Satz 7.7 und 7.8, [46], Abschnitt XI.). *Sei X reeller Banachraum. Für jede Funktion F von X nach $\mathbb{R} \cup \{\infty\}$ gilt*

$$u^* \in \partial F(u) \quad \Rightarrow \quad u \in \partial F^*(u^*).$$

Wenn zusätzlich F konvex, unterhalbstetig und eigentlich ist, dann gilt

$$u^* \in \partial F(u) \quad \Leftrightarrow \quad u \in \partial F^*(u^*).$$

Anmerkung: *Ist $\partial F(u) \neq \emptyset$, so folgt $F^{**}(u) = F(u)$.*

A.1.2 Funktionalanalysis

Wir beschränken uns hier auf wenige, teils speziellere Sätze, die im Verlauf der Arbeit verwendet werden, und verweisen sonst auf Standardliteratur, wie [21], [2], [43], [10] oder [33].

Satz A.6 (Allgemeine Poincaré-Ungleichung, ([2], 6.16, S. 240)). *Es sei $\Omega \in \mathbb{R}^n$ offen, beschränkt und zusammenhängend mit Lipschitz-Rand $\partial\Omega$ (siehe Definition [2] A 6.2, S. 257). Weiter sei $\mathcal{A} \in W^{1,p}(\Omega; \mathbb{R}^m)$ nichtleer, konvex und abgeschlossen mit $1 < p < \infty$. Dann ist äquivalent:*

1. *Es gibt ein $u_0 \in \mathcal{A}$ und eine Konstante $C_0 < \infty$, sodass für alle $\xi \in \mathbb{R}^m$ gilt*

$$u_0 + \xi \in \mathcal{A} \quad \Rightarrow \quad |\xi| \leq C_0.$$

2. *Es gibt eine Konstante $C < \infty$ mit*

$$\|u\|_{L^p(\Omega)} \leq C \left(\|\nabla u\|_{L^p(\Omega)} + 1 \right) \quad \text{für alle } u \in \mathcal{A}.$$

Zusatz: *Ist \mathcal{A} zusätzlich ein Kegel mit Spitze 0, d.h. gilt*

$$u \in \mathcal{A}, \quad \alpha \geq 0 \quad \Rightarrow \quad \alpha u \in \mathcal{A},$$

so kann die Ungleichung in 2. ersetzt werden durch

$$\|u\|_{L^p(\Omega)} \leq C \|\nabla u\|_{L^p(\Omega)} \quad \text{für alle } u \in \mathcal{A}.$$

Satz A.7 (Satz von Eberlein-Šmuljan, ([43], S. 179)). *Sei X ein reflexiver Banachraum. Dann besitzt jede beschränkte Folge $(x_n) \in X$ eine schwach konvergente Teilfolge (x_{n_k}) .*

Theorem A.8 (Satz von Riesz, ([2], Satz 2.15, S. 112)). Für $1 \leq p < \infty$ ist $\mathcal{A} \subset L^p(\mathbb{R}^n)$ präkompakt genau dann, wenn es eine Konstante C gibt, sodass

- i) $\sup_{f \in \mathcal{A}} \|f\|_{L^p} \leq C$,
- ii) $\sup_{f \in \mathcal{A}} \|f(\cdot + h) - f\|_{L^p} \rightarrow 0$ für $|h| \rightarrow 0$,
- iii) $\sup_{f \in \mathcal{A}} \|f\|_{L^p(\mathbb{R}^n \setminus B_R(0))} \rightarrow 0$ für $R \nearrow \infty$.

Theorem A.9 (Satz von Riesz-Fréchet-Kolmogorov, ([10], Theorem IV.25, S. 72)). Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ offen und sei $\omega \subset \subset \Omega$. Sei \mathcal{A} eine beschränkte Teilmenge des $L^p(\Omega)$ mit $1 \leq p < \infty$. Wir nehmen an, dass

$$\begin{aligned} \forall \varepsilon > 0 \quad \exists \delta > 0, \quad \delta < \text{dist}(\omega, \partial\Omega), \quad \text{sodass} \\ \|\tau_{\mathbf{h}}\mathbf{f} - \mathbf{f}\|_{L^p(\omega)} < \varepsilon \quad \forall \mathbf{h} \in \mathbb{R}^n \quad \text{mit } |\mathbf{h}| < \delta \quad \text{und } \forall \mathbf{f} \in \mathcal{A}, \end{aligned}$$

wobei $\tau_{\mathbf{h}}\mathbf{f}$ die Translation von \mathbf{f} um \mathbf{h} bezeichnet $(\tau_{\mathbf{h}}\mathbf{f})(\mathbf{x}) = \mathbf{f}(\mathbf{x} + \mathbf{h})$. (Wenn $\mathbf{x} \in \omega$ und $|\mathbf{h}| < \delta < \text{dist}(\omega, \partial\Omega)$, dann ist $\mathbf{x} + \mathbf{h} \in \Omega$). Dann ist $\mathcal{A}|_{\omega}$ relativ kompakt in $L^p(\omega)$.

Satz A.10 (Einbettungssatz auf dem Rand, ([2], A.6.13, S. 272)). Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ offen und beschränkt mit Lipschitz-Rand, so gilt für $1 \leq p < \infty$ und $u_k, u \in W^{1,p}(\Omega)$

$$\begin{aligned} u_k \rightharpoonup u \text{ in } W^{1,p}(\Omega) \\ \text{für } k \rightarrow \infty \end{aligned} \quad \Rightarrow \quad u_k \rightarrow u \text{ (stark)} \in L^p(\partial\Omega) \text{ für } k \rightarrow \infty.$$

Proposition A.11 (Konvergenz von Differenzenquotienten, ([22], Prop 4.2.1)). Sei X ein Banachraum, $1 \leq p < \infty$ und $v \in W^{1,p}(0, T; X)$. Dann gilt

$$\partial_t^{-h}v \longrightarrow \partial_t v \quad \text{in } L^p(0, T; X).$$

Lemma A.12 (Youngsche Ungleichung, ([21], S. 622 und [42], S. 12)). Sei $1 < p, q < \infty$ mit $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$. Dann gilt für alle $a, b > 0$ und für alle $\varepsilon > 0$

$$ab \leq \frac{a^p}{p} + \frac{b^q}{q}$$

und allgemeiner

$$ab \leq \varepsilon \frac{a^p}{p} + C_\varepsilon \frac{b^q}{q}$$

mit $C_\varepsilon = (\varepsilon p)^{-1/p} q^{-1}$.

Sei nun $U \subset \mathbb{R}^n$, $u \in L^p(U)$ und $v \in L^q(U)$. Dann gilt

$$\int_U |uv| \, d\mathbf{x} \leq \frac{1}{p} \int_U |u|^p \, d\mathbf{x} + \frac{1}{q} \int_U |v|^q \, d\mathbf{x}. \quad (\text{A.1})$$

A.2 Rechnungen

In diesem Abschnitt werden zum einen längere oder einfachere Rechnungen aufgeführt, sowie längere Beweise und Theorihintergründe.

A.2.1 Herleitungen bei den Erhaltungsgleichungen

Impulserhaltung

Nach Abschnitt 2.1.2 ist die Impulserhaltung in einem Kontrollvolumen $V(t)$ mit Impulsdichte $\mu \mathbf{U}$, Volumenkräftdichte $\mu \mathbf{f}$ und Cauchyschem Spannungstensor $\bar{\sigma}$ gegeben durch

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \mu \mathbf{U} \, d\mathbf{x} = \int_{V(t)} \mu \mathbf{f} \, d\mathbf{x} + \int_{\partial V(t)} \bar{\sigma} \boldsymbol{\nu} \, dS.$$

Auf der linken Seite gilt für jede Komponente U_j von \mathbf{U} mit $j = 1, \dots, n$ mit dem Reynold-schen Transporttheorem

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{V(t)} \mu U_j \, d\mathbf{x} &\stackrel{(2.4)}{=} \int_{V(t)} \frac{\partial(\mu U_j)}{\partial t} + \operatorname{div}(\mu U_j \mathbf{U}) \, d\mathbf{x} \\ &= \int_{V(t)} \mu \frac{\partial U_j}{\partial t} + \frac{\partial \mu}{\partial t} U_j + U_j \operatorname{div}(\mu \mathbf{U}) + \mu \mathbf{U} \cdot \nabla U_j \, d\mathbf{x} \\ &= \int_{V(t)} U_j \underbrace{\left(\frac{\partial \mu}{\partial t} + \operatorname{div}(\mu \mathbf{U}) \right)}_0 + \mu \left(\frac{\partial U_j}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla U_j \right) \, d\mathbf{x}. \end{aligned}$$

Die Kontinuitätsgleichung (2.5) liefert also

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \mu \mathbf{U} \, d\mathbf{x} = \int_{V(t)} \mu \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + (\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{U} \right) \, d\mathbf{x}$$

mit $(\mathbf{U} \cdot \nabla) = \sum_{j=1}^n \mathbf{U}_j \frac{\partial}{\partial x_j}$.

Nach Anwendung des Divergenzsatzes von Gauß auf der rechten Seite erhalten wir schließlich

$$\int_{V(t)} \mu \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + (\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{U} \right) \, d\mathbf{x} = \int_{V(t)} \mu \mathbf{f} + \operatorname{div} \bar{\sigma} \, d\mathbf{x}$$

mit der „Matrixdivergenz“

$$(\operatorname{div} \bar{\sigma})_j = \left(\sum_{k=1}^n \frac{\partial \bar{\sigma}_{jk}}{\partial x_k} \right)_j \quad \text{für } j = 1, \dots, n.$$

Energieerhaltung

Die Energieerhaltung ist nach Abschnitt 2.1.3 in einem Kontrollvolumen $V(t)$ gegeben durch

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{V(t)} \mu \frac{1}{2} |\mathbf{U}|^2 + e \, d\mathbf{x} &= \int_{V(t)} \mu \mathbf{f} \cdot \mathbf{U} \, d\mathbf{x} + \int_{\partial V(t)} \bar{\sigma} \boldsymbol{\nu} \cdot \mathbf{U} \, dS \\ &\quad - \int_{\partial V(t)} \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\nu} \, dS + \int_{V(t)} r \, d\mathbf{x}, \end{aligned}$$

wobei $\mu \mathbf{f}$ die Dichte der Volumenkräfte und $\bar{\sigma}$ den Cauchyschen Spannungstensor bezeichnet, sowie \mathbf{q} den Wärmefluss und r die Wärmeproduktionsrate im Inneren von V .

Für die Änderung der inneren Energie auf der linken Seite liefert das Reynoldssche Transporttheorem (2.4)

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} e \, d\mathbf{x} = \int_{V(t)} \frac{\partial e}{\partial t} + \operatorname{div}(e\mathbf{U}) \, d\mathbf{x}.$$

Auch bei der Änderung der kinetischen Energie verwenden wir das Reynoldssche Transporttheorem (2.4) und erhalten mit der Kontinuitätsgleichung (2.5)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{V(t)} \frac{1}{2} \mu |\mathbf{U}|^2 \, d\mathbf{x} &= \int_{V(t)} \frac{\partial}{\partial t} \left(\mu \frac{1}{2} |\mathbf{U}|^2 \right) + \operatorname{div} \left(\mu \frac{1}{2} |\mathbf{U}|^2 \mathbf{U} \right) \, d\mathbf{x} \\ &= \int_{V(t)} \frac{1}{2} |\mathbf{U}|^2 \underbrace{\left(\frac{\partial \mu}{\partial t} + \operatorname{div}(\mu \mathbf{U}) \right)}_0 \, d\mathbf{x} \\ &\quad + \int_{V(t)} \mu \left(\mathbf{U} \cdot \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot (\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{U} \right) \, d\mathbf{x} \\ &= \int_{V(t)} \mu \mathbf{U} \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + (\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{U} \right) \, d\mathbf{x}. \end{aligned}$$

Weiter folgt mit der Impulserhaltung (2.7)

$$\int_{V(t)} \mu \mathbf{U} \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + (\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{U} \right) \, d\mathbf{x} = \int_{V(t)} \mathbf{U} \cdot (\mu \mathbf{f} + \operatorname{div} \bar{\sigma}) \, d\mathbf{x}, \quad (\text{A.2})$$

das heißt, die kinetische Energie lässt sich durch Terme der rechten Seite in der Energieerhaltung eliminieren.

Mit dem Divergenzsatz von Gauß erhalten wir für die rechte Seite

$$\begin{aligned} & \int_{V(t)} \mu \mathbf{f} \cdot \mathbf{U} \, d\mathbf{x} + \int_{\partial V(t)} \bar{\sigma} \boldsymbol{\nu} \cdot \mathbf{U} \, dS - \int_{\partial V(t)} \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\nu} \, dS + \int_{V(t)} r \, d\mathbf{x} \\ &= \int_{V(t)} \mu \mathbf{f} \cdot \mathbf{U} + \operatorname{div}(\bar{\sigma}^T \mathbf{U}) - \operatorname{div} \mathbf{q} + r \, d\mathbf{x} \\ &= \int_{V(t)} \mu \mathbf{f} \cdot \mathbf{U} + \mathbf{U} \cdot \operatorname{div} \bar{\sigma} \, d\mathbf{x} + \int_{V(t)} \bar{\sigma} : \nabla \mathbf{U} - \operatorname{div} \mathbf{q} + r \, d\mathbf{x}, \end{aligned}$$

wobei für $A = (a_{jk})_{jk}$ und $B = (b_{jk})_{jk}$ mit $j, k = 1, \dots, n$ gilt

$$A : B = \sum_{j,k=1}^n a_{jk} b_{jk}.$$

Insgesamt lautet also die Energieerhaltung in integrativer Form nach Einsetzen von (A.2) in die rechten Seite

$$\int_{V(t)} \frac{\partial e}{\partial t} + \operatorname{div}(e\mathbf{U}) \, d\mathbf{x} = \int_{V(t)} \bar{\sigma} : \nabla \mathbf{U} - \operatorname{div} \mathbf{q} + r \, d\mathbf{x}.$$

A.2.2 Herleitung der klassischen Terme der freien Energie

Ausgangspunkt für die Bestimmung der freien Energien in Abschnitt 2.2.3 ist die Überlegung, dass für Feststoffe, wie Eis oder das poröse Medium, die innere Energie proportional zur Temperatur ist, das heißt

$$e_i = C_v u \quad \text{und} \quad e_m = C_m u,$$

wobei die Proportionalitätsfaktoren C_v beziehungsweise C_m die spezifischen Wärmekapazitäten von Eis beziehungsweise des porösen Mediums sind. Am Gefrierpunkt eines Feststoffes kann man dem Material eine gewisse Menge an Energie zufügen, ohne dass sich dabei die Temperatur erhöht. Damit ergibt sich für flüssiges Wasser ein affiner Verlauf der inneren Energie

$$e_l = C_v u + L$$

mit der latenten Wärme L . Die klassischen Terme der freien Energie erhält man nun über die Definition der Freien Energie $\psi = e - us$ und der Helmholtz-Beziehung $s = -\frac{\partial \psi}{\partial u}$. Durch Lösen der daraus resultierenden gewöhnlichen Differentialgleichung

$$e_a = \psi_a + u s_a = \psi_a - u \frac{\partial \psi_a}{\partial u} = C_v u + L^a$$

mit

$$L^a = \begin{cases} 0 & \text{für } a = i \\ 1 & \text{für } a = l \end{cases}$$

ergibt sich

$$\begin{aligned}\psi_l(\mathcal{E}) &= -\rho\beta_l \frac{L}{u_c}(u - u_c) - \rho C_v \beta_l u \ln u \\ \psi_i(\mathcal{E}) &= -\rho C_v \beta_i u \ln u\end{aligned}$$

wenn die Integrationskonstante Null gesetzt wird. Analog erhält man für das poröse Medium die freie Energie

$$\psi_m(\mathcal{E}) = -\rho_m C_m \beta_m u \ln u.$$

A.2.3 Subgradienten von I_M und Beweis zu Satz 2.1

Reaktionen im Subgradienten von I_M

Sei $(R_{al}, R_{ai}, 0) \in \partial I_M(\beta_l, \beta_i, \beta_m)$ mit der Indikatorfunktion I_M auf der Menge

$$M := \{\beta_l, \beta_i, \beta_m \mid 0 \leq \beta_l, \beta_i \leq 1 - \beta_m \text{ und } \beta_l + \beta_i = 1 - \beta_m\}.$$

Dann gilt nach Definition A.2 für jedes $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \beta_m) \in \mathbb{R}^3$

$$I_M(\boldsymbol{\alpha}) \geq R_{al}(\alpha_1 - \beta_l) + R_{ai}(\alpha_2 - \epsilon + \beta_l), \quad (\text{A.3})$$

da $I_M(\beta_l, \beta_i, \beta_m) = 0$ und somit $\beta_i = \epsilon - \beta_l$ ist.

Falls $\boldsymbol{\alpha} \notin M$ liegt, so ist $I_M(\boldsymbol{\alpha}) = \infty$ und die Ungleichung (A.3) ist trivialerweise erfüllt. Liegt jedoch $\boldsymbol{\alpha} \in M$, so gilt $\alpha_1 + \alpha_2 = \epsilon$ mit $0 \leq \alpha_1, \alpha_2 \leq \epsilon$ und $I_M(\boldsymbol{\alpha}) = 0$. Damit folgt für Ungleichung (A.3)

$$0 \geq R_{al}(\alpha_1 - \beta_l) - R_{ai}(\alpha_1 - \beta_l) = (\alpha_1 - \beta_l)(R_{al} - R_{ai}).$$

Wir führen nun eine Fallunterscheidung für β_l durch.

Ist $\beta_l = 0$, so ist die Ungleichung

$$0 \geq \alpha_1 R_{al} - \alpha_1 R_{ai} = \underbrace{\alpha_1}_{\geq 0} (R_{al} - R_{ai})$$

zu erfüllen. Das ist genau dann der Fall, wenn $R_{ai} \geq 0$ und $R_{al} - R_{ai} \leq 0$ gilt.

Ist $\beta_l = \epsilon$, dann liefert dies die Ungleichung

$$0 \geq (\alpha_1 - \epsilon)R_{al} - (\alpha_1 - \epsilon)R_{ai} = \underbrace{(\alpha_1 - \epsilon)}_{\leq 0} (R_{al} - R_{ai}),$$

da $\boldsymbol{\alpha}$ in M liegt. Sie wird genau dann erfüllt, wenn $R_{al} \geq 0$ und $R_{al} - R_{ai} \geq 0$.

Schließlich betrachten wir noch den Fall $0 < \beta_l < \epsilon$, für den die Ungleichung

$$0 \geq (\alpha_1 - \beta_l)(R_{al} - R_{ai})$$

zu erfüllen ist. Da α_1 und β_l innerhalb des Intervalls $(0, \epsilon)$ frei wählbar sind, ist diese Ungleichung nur dann wahr, wenn $R_{al} = R_{ai}$.

Beweis zu Satz 2.1 über die Reaktionen auf die inneren Nebenbedingungen

In diesem Abschnitt erfolgt der Beweis zu Satz 2.1 in Anlehnung an den Beweis zu Theorem 11.1 in [23].

Wir beweisen zunächst die zweite Ungleichung für die Reaktionen eines Materiepunktes \mathbf{x} aus Eis.

Sei $(R_{il}, R_{ii}, 0) \in \partial I_M(\beta_l(\mathbf{x}, t), \beta_i(\mathbf{x}, t), \beta_m)$. Dann gilt für ein positives Zeitinkrement h

$$\begin{aligned} & I_M(\beta_l(\mathbf{x}, t-h), \beta_i(\mathbf{x}, t-h), \beta_m) \\ & \geq I_M(\beta_l(\mathbf{x}, t-h), \beta_i(\mathbf{x}, t-h), \beta_m) \\ & \quad + \langle (\beta_l(\mathbf{x}, t-h) - \beta_l(\mathbf{x}, t), \beta_i(\mathbf{x}, t-h) - \beta_i(\mathbf{x}, t), 0), (R_{il}, R_{ii}, 0) \rangle \\ & = I_M(\beta_l(\mathbf{x}, t-h), \beta_i(\mathbf{x}, t-h), \beta_m) \\ & \quad + R_{il} (\beta_l(\mathbf{x}, t-h) - \beta_l(\mathbf{x}, t)) + R_{ii} (\beta_i(\mathbf{x}, t-h) - \beta_i(\mathbf{x}, t)). \end{aligned}$$

Da die inneren Nebenbedingungen erfüllt sind, sind die Indikatorfunktionen in der obigen Ungleichung Null. Nach Division durch h und Grenzwertbildung $h \rightarrow 0$ folgt also

$$\frac{\partial \beta_l}{\partial t} R_{il} + \frac{\partial \beta_i}{\partial t} R_{ii} \geq 0,$$

wobei es sich hier um linksseitige Ableitungen handelt.

Der Beweis für die andere Ungleichung erfolgt analog. Dabei wird für die materielle Ableitung der Grenzwert für die Differenz bezüglich der Orts-Zeit-Punkte $(\mathbf{x}(t-h), t-h)$ und $(\mathbf{x}(t), t)$ betrachtet. \square

A.2.4 Entropieproduktionsrate H ausgehend von der Energieerhaltung

Zum Aufstellen der konstitutiven Gesetze bestimmen wir zunächst die Entropieproduktionsrate H aus Abschnitt 2.2.1 ausgehend von der Energieerhaltungsgleichung (2.9)

$$\frac{d^l e_l}{dt} + \frac{\partial e_i}{\partial t} + \frac{\partial e_m}{\partial t} + e_l \operatorname{div} \mathbf{U}_l = -p \operatorname{div} \mathbf{U}_l - \operatorname{div} \mathbf{q}.$$

Mit der thermodynamischen Beziehung $e_a = \psi_a + u s_a$ gilt für die substantielle Ableitung der inneren Energie

$$\frac{d^a e_a}{dt} = \frac{d^a \psi_a}{dt} + s_a \frac{d^a u}{dt} + u \frac{d^a s_a}{dt}.$$

Damit lautet die Gleichung für die Energieerhaltung

$$\begin{aligned} & \frac{d^l \psi_l}{dt} + \frac{\partial \psi_i}{\partial t} + \frac{\partial \psi_m}{\partial t} + \psi_l \operatorname{div} \mathbf{U}_l + s_l \frac{d^a u}{dt} + s_i \frac{\partial u}{\partial t} + s_m \frac{\partial u}{\partial t} \\ & + u \left(\frac{d^l s_l}{dt} + \frac{\partial s_i}{\partial t} + \frac{\partial s_m}{\partial t} + s_l \operatorname{div} \mathbf{U}_l \right) = -p \operatorname{div} \mathbf{U}_l - \operatorname{div} \mathbf{q}. \end{aligned}$$

Da die freie Energie von den Zustandsgrößen der Variablen $\boldsymbol{\varepsilon}$ abhängt, gilt mit der Kettenregel

$$\frac{\partial \psi_a}{\partial t} = \frac{\partial \psi_a}{\partial \beta_l} \frac{\partial \beta_l}{\partial t} + \frac{\partial \psi_a}{\partial \beta_i} \frac{\partial \beta_i}{\partial t} + \frac{\partial \psi_a}{\partial \beta_m} \frac{\partial \beta_m}{\partial t} + \frac{\partial \psi_a}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial t}$$

und für die substantielle Ableitung von ψ_l

$$\frac{d^l \psi_l}{dt} = \frac{\partial \psi_l}{\partial \beta_l} \frac{d^l \beta_l}{dt} + \frac{\partial \psi_l}{\partial \beta_i} \frac{d^l \beta_i}{dt} + \frac{\partial \psi_l}{\partial \beta_m} \frac{d^l \beta_m}{dt} + \frac{\partial \psi_l}{\partial u} \frac{d^l u}{dt}.$$

Im Frémondschen Modell wird die Porosität als konstant angenommen, sodass sämtliche Terme mit Ableitungen des Volumenanteils β_m verschwinden. Unter Verwendung der Helmholtz-Beziehung (2.14) $s_a = -\frac{\partial \psi_a}{\partial u}$ erhalten wir also

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \psi_l}{\partial \beta_l} \frac{d^l \beta_l}{dt} + \frac{\partial \psi_l}{\partial \beta_i} \frac{d^l \beta_i}{dt} + \frac{\partial \psi_i}{\partial \beta_l} \frac{\partial \beta_l}{\partial t} + \frac{\partial \psi_i}{\partial \beta_i} \frac{\partial \beta_i}{\partial t} + \frac{\partial \psi_l}{\partial u} \frac{du}{dt} + \frac{\partial \psi_i}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial \psi_m}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial t} + \psi_l \operatorname{div} \mathbf{U}_l \\ & - \frac{\partial \psi_l}{\partial u} \frac{du}{dt} - \frac{\partial \psi_i}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial \psi_m}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial t} + u \left(\frac{d^l s_l}{dt} + \frac{\partial s_i}{\partial t} + \frac{\partial s_m}{\partial t} + s_l \operatorname{div} \mathbf{U}_l \right) \\ & = -p \operatorname{div} \mathbf{U}_l - \operatorname{div} \mathbf{q}, \end{aligned}$$

und damit

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \psi_l}{\partial \beta_l} \frac{d^l \beta_l}{dt} + \frac{\partial \psi_l}{\partial \beta_i} \frac{d^l \beta_i}{dt} + \frac{\partial \psi_i}{\partial \beta_l} \frac{\partial \beta_l}{\partial t} + \frac{\partial \psi_i}{\partial \beta_i} \frac{\partial \beta_i}{\partial t} + \psi_l \operatorname{div} \mathbf{U}_l \\ & + u \left(\frac{d^l s_l}{dt} + \frac{\partial s_i}{\partial t} + \frac{\partial s_m}{\partial t} + s_l \operatorname{div} \mathbf{U}_l \right) = -p \operatorname{div} \mathbf{U}_l - \operatorname{div} \mathbf{q}. \end{aligned}$$

Einsetzen der Bilanzgleichung für die Entropie

$$\frac{d^l s_l}{dt} + \frac{\partial s_i}{\partial t} + \frac{\partial s_m}{\partial t} + s_l \operatorname{div} \mathbf{U}_l = -\operatorname{div} \frac{\mathbf{q}}{u} + H$$

liefert mit

$$\operatorname{div} \mathbf{q} = u \operatorname{div} \frac{\mathbf{q}}{u} + \frac{\mathbf{q}}{u} \nabla u$$

die Entropieproduktionsrate, die gegeben ist durch die Beziehung

$$uH = -\frac{\partial \psi_l}{\partial \beta_l} \frac{d^l \beta_l}{dt} - \frac{\partial \psi_l}{\partial \beta_i} \frac{d^l \beta_i}{dt} - \frac{\partial \psi_i}{\partial \beta_l} \frac{\partial \beta_l}{\partial t} - \frac{\partial \psi_i}{\partial \beta_i} \frac{\partial \beta_i}{\partial t} - \psi_l \operatorname{div} \mathbf{U}_l - \frac{\mathbf{q}}{u} \cdot \nabla u - p \operatorname{div} \mathbf{U}_l.$$

A.2.5 Materialgleichung mit Ersatz-Reaktionsfunktion

Im Folgenden werden wir die Zahl der konstitutiven Gleichungen, in denen die Reaktionen auf die inneren Nebenbedingungen (2.2) enthalten sind, auf eine einzelne Gleichung reduzieren. Die Reaktionsterme werden dann nicht mehr explizit, sondern nur noch über eine Ersatz-Reaktionsfunktion \tilde{R} betrachtet.

Die vier konstitutiven Gesetze (2.37) - (2.40) können durch Addition der Gleichungen (2.38) und (2.40) und gleichzeitiger Subtraktion der Gleichungen (2.37) und (2.39) zur Gleichung

$$-\rho \frac{L}{u_c}(u - u_c) + \rho u \left(\beta_l \frac{\partial h_l}{\partial \beta_l} + h_l + \beta_i \frac{\partial h_i}{\partial \beta_l} - \beta_l \frac{\partial h_l}{\partial \beta_i} - h_i - \beta_i \frac{\partial h_i}{\partial \beta_i} \right) + R_{ll} - R_{li} + R_{il} - R_{ii} = 0$$

zusammengefasst werden, die in die Gleichung

$$\rho \frac{L}{u_c}(u - u_c) = \rho u \left(\frac{\partial (h_l \beta_l + h_i \beta_i)}{\partial \beta_l} - \frac{\partial (h_l \beta_l + h_i \beta_i)}{\partial \beta_i} \right) + (R_{ll} - R_{li}) + (R_{il} - R_{ii}) \quad (\text{A.4})$$

umgeformt werden kann.

Da β_i sich auf Grund der konstanten Porosität durch β_l ausdrücken lässt, ist es möglich, die beiden Interaktionsfunktionen h_l und h_i zu einer gemeinsamen Funktion zusammenzufassen, die nur von β_l abhängt. Mit dieser Interaktionsfunktion $h_w(\beta_l) = h_l \beta_l + h_i \beta_i$ gilt wegen $\beta_i = \epsilon - \beta_l$ demnach

$$\frac{\partial h_w(\beta_l)}{\partial \beta_l} = \frac{\partial (h_l \beta_l + h_i \beta_i)}{\partial \beta_l} + \frac{\partial (h_l \beta_l + h_i \beta_i)}{\partial \beta_i} \frac{\partial \beta_i}{\partial \beta_l} = \frac{\partial (h_l \beta_l + h_i \beta_i)}{\partial \beta_l} - \frac{\partial (h_l \beta_l + h_i \beta_i)}{\partial \beta_i}.$$

Eingesetzt in Gleichung (A.4) liefert dies

$$\rho \frac{L}{u_c}(u - u_c) = \rho u \frac{\partial h_w(\beta_l)}{\partial \beta_l} + \underbrace{(R_{ll} - R_{li}) + (R_{il} - R_{ii})}_{\tilde{R}(\beta_l)},$$

wobei $\tilde{R}(\beta_l) = (R_{ll} - R_{li}) + (R_{il} - R_{ii})$ als eine von β_l abhängige Ersatz-Reaktionsfunktion betrachtet werden kann.

A.2.6 Positivität der absoluten Temperatur

In diesem Abschnitt zeigen wir mit Hilfe von Fallunterscheidung bezüglich β_l und dem Maximumsprinzip, dass für das betrachtete Frémondsche Modell die absolute Temperatur u stets positiv ist.

Sei $h_w(\beta_l) := h_l \beta_l + h_i \beta_i$ aus Experimenten gegeben mit einem Verlauf wie in Abbildung 2.1. Dann ist

$$\frac{\partial h_w}{\partial \beta_l} \leq 0, \quad h_w \geq 0 \quad \text{und} \quad \frac{\partial h_w(\epsilon)}{\partial \beta_l} = 0.$$

Da für jede mögliche Evolution die Materialgesetze (2.36) - (2.41) erfüllt sind, können wir diese wie in Abschnitt A.2.5 zusammenfassen zu

$$\rho \frac{L}{u_c}(u - u_c) = \rho u \frac{\partial h_w(\beta_l)}{\partial \beta_l} + \tilde{R}(\beta_l) \quad (\text{A.5})$$

mit $\tilde{R}(\beta_l) = (R_{ll} - R_{li}) + (R_{il} - R_{ii})$, wobei für die Gefriertemperatur $u_c > 0$ vorausgesetzt wird.

Wie in Abschnitt A.2.3 können wir für die Reaktionen bezüglich β_l drei Fälle unterscheiden. Mit den Gleichungen (A.5) und (2.21) ergeben sich dann für diese drei Fälle mehrere Folgerungen:

Für $\beta_l = \epsilon$ ist $\tilde{R}(\beta_l) \geq 0$ und $\frac{\partial h_w(\epsilon)}{\partial \beta_l} = 0$. Damit resultiert aus (A.5) $\rho \frac{L}{u_c}(u - u_c) = \tilde{R}(\beta_l) \geq 0$ und somit $u \geq u_c > 0$.

Liegt β_l im Intervall $(0, \epsilon)$, dann ist $\tilde{R}(\beta_l) = 0$ und $\frac{L}{u_c}(u - u_c) = u \frac{\partial h_w(\beta_l)}{\partial \beta_l}$, wobei $\frac{\partial h_w(\beta_l)}{\partial \beta_l} \leq 0$ ist.

Falls $u \geq u_c > 0$ ist, dann ist die linke Seite positiv, sodass auf der rechten Seite $u \leq 0$ folgt. Dies steht jedoch im Widerspruch zu der gemachten Annahme.

Im Fall $u < u_c$ liefert dies auf der rechten Seite $u \geq 0$. Der Fall $u = 0$ kann jedoch ausgeschlossen werden, da die latente Wärme L eine positive Konstante ist und somit $-L = 0$ nicht erfüllbar ist. Folglich gilt auch für $\beta_l \in (0, \epsilon)$ die Positivität von u .

Falls $\beta_l = 0$ gilt $\tilde{R}(\beta_l) \leq 0$ und $\frac{\partial h_w(\beta_l)}{\partial \beta_l} \leq 0$. Das heißt, (A.5) lässt sich in die Ungleichung $\frac{L}{u_c}(u - u_c) \leq u \frac{\partial h_w(\beta_l)}{\partial \beta_l}$ umformen.

Wie im vorhergehenden Fall liefert $u \geq u_c > 0$ für diese Ungleichung mit $u \leq 0$ einen Widerspruch zur Annahme.

Allerdings sind für $u < u_c$ bei der Betrachtung der Ungleichung negative Temperaturen u möglich. Daher muss dieser Teilfall genauer untersucht werden.

Aus Experimenten geht hervor, dass es eine Temperatur $\tilde{u} > 0$ gibt, sodass das Wasser für alle $u \leq \tilde{u}$ vollständig gefroren ist, das heißt $\beta_l \equiv 0$ und damit $\frac{\partial \beta_l}{\partial t} = 0$ und $\mathbf{U}_l = \mathbf{0}$. In diesem Fall vereinfacht sich die Energieerhaltungsgleichung so, dass u die Lösung der Wärmeleitungsgleichung

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \hat{c}^2 \Delta u = 0$$

ist mit $\hat{c}^2 = \kappa / (\rho_m C_m \beta_m + \rho \epsilon C_v)$ und Anfangswerten $u(\mathbf{x}, 0) = \hat{u}^0(\mathbf{x})$ für $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$. Dabei kann der Anfangswert \hat{u}^0 so gewählt werden, dass $0 < \gamma_0 \leq \hat{u}^0 \leq \tilde{u}$ stetig auf \mathbb{R}^n ist. Es ist bekannt, dass die Poisson-Formel

$$u(\mathbf{x}, t) = (2\hat{c}\sqrt{\pi t})^{-n} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2/4\hat{c}^2 t} \hat{u}^0(\mathbf{y}) d\mathbf{y}$$

die eindeutige Lösung dieses Cauchy Problems ist und man zeigen kann, dass

$$\inf_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \hat{u}^0(\mathbf{x}) \leq u(\mathbf{x}, t) \leq \sup_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \hat{u}^0(\mathbf{x})$$

ist (Maximumsprinzip), vgl. [18]. Da $\hat{u}^0(\mathbf{x})$ durch ein positives γ_0 nach unten beschränkt ist folgt also $u > 0$. \square

A.2.7 Diskrete Partielle Integration

In diesem Abschnitt führen wir die diskrete partielle Integration aus Abschnitt 4.2.8 durch. Es gilt für $\xi \in H^1(0, T; H^1(\Omega))$

$$\begin{aligned}
 \int_0^T \int_{\Omega} \partial_t^{-h} (b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, t))) \xi(\mathbf{x}, t) \, d\mathbf{x} \, dt &= \int_0^T \int_{\Omega} \frac{b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, t)) - b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, t-h))}{h} \xi \, d\mathbf{x} \, dt \\
 &= \frac{1}{h} \int_0^T \int_{\Omega} b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, t)) \xi(\mathbf{x}, t) \, d\mathbf{x} \, dt - \frac{1}{h} \int_0^T \int_{\Omega} b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, t-h)) \xi(\mathbf{x}, t) \, d\mathbf{x} \, dt \\
 &= \frac{1}{h} \int_0^T \int_{\Omega} b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, t)) \xi(\mathbf{x}, t) \, d\mathbf{x} \, dt - \frac{1}{h} \int_{-h}^{T-h} \int_{\Omega} b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, t)) \xi(\mathbf{x}, t+h) \, d\mathbf{x} \, dt \\
 &= -\frac{1}{h} \int_0^{T-h} \int_{\Omega} b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, t)) (\xi(\mathbf{x}, t+h) - \xi(\mathbf{x}, t)) \, d\mathbf{x} \, dt \\
 &\quad + \frac{1}{h} \int_{T-h}^T \int_{\Omega} b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, t)) \xi(\mathbf{x}, t) \, d\mathbf{x} \, dt - \frac{1}{h} \int_0^h \int_{\Omega} b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, t-h)) \xi(\mathbf{x}, t) \, d\mathbf{x} \, dt \\
 &= -\int_0^{T-h} \int_{\Omega} b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, t)) \partial_t^h (\xi(\mathbf{x}, t)) \, d\mathbf{x} \, dt + \frac{1}{h} \int_{T-h}^T \int_{\Omega} b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, t)) \xi(\mathbf{x}, t) \, d\mathbf{x} \, dt \\
 &\quad - \frac{1}{h} \int_0^h \int_{\Omega} b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, 0)) \xi(\mathbf{x}, t) \, d\mathbf{x} \, dt.
 \end{aligned}$$

Wenn ξ stetig ist, so konvergiert

$$-\frac{1}{h} \int_0^h \int_{\Omega} b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, 0)) \xi(\mathbf{x}, t) \, d\mathbf{x} \, dt$$

für $h \rightarrow 0$ gegen

$$-\int_{\Omega} b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, 0)) \xi(\mathbf{x}, 0) \, d\mathbf{x}.$$

Weil $b(\bar{u}_N)$ konvergent in $L^1(0, T, V)$ ist, gilt zudem

$$\frac{1}{h} \int_{T-h}^T \int_{\Omega} b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, t)) \xi(\mathbf{x}, t) \, d\mathbf{x} \, dt \rightarrow \int_{\Omega} b(\bar{u}_N(\mathbf{x}, T)) \xi(\mathbf{x}, T) \, d\mathbf{x} \quad \text{für } h \rightarrow 0.$$

Anhang B

Symbolverzeichnis

\cdot	Skalarprodukt
$\subset\subset$	Kompakte Teilmenge; Abschnitt 4.2
$\sum_{i=m}^n a_i$	Summe über a_i für den Laufindex i von m bis n . Ist $m > n$ so gilt für die leere Summe $\sum_{i=m}^n a_i = 0$.
$A : B$	$A : B = \sum_{j,k=1}^n a_{jk} b_{jk}$ für $A = (a_{jk})_{jk}$, $B = (b_{jk})_{jk}$ mit $j, k = 1, \dots, n$; Abschnitte 2.1.3, A.2.1
$f _S$	Einschränkung von f auf eine Menge S : $f _S = \chi_S f$; Abschnitt 4.2
$ \cdot $	Betrag eines Vektors \mathbf{v} , $ \mathbf{v} = \sqrt{\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}}$ bzw. Lebesgue-Maß eines Gebiets $ \Omega $
$\ \cdot\ _B$	Norm bzgl. des Raums B
∇	Nabla-Operator $\nabla = (\frac{\partial}{\partial x_j})_j$ für $j = 1, \dots, n$
Δ	Laplace-Operator $\Delta = \operatorname{div} \nabla$
$\langle \cdot, \cdot \rangle$	Duale Paarung auf $X^* \times X$ für einen Banachraum X
a, a_1, a_2	Allgemeiner Parameter für ein Material, $a \in \{l = \textit{liquid}, i = \textit{ice}, m = \textit{matrix}\}$; Kapitel 2
\mathcal{A}	Menge von Lösungen; Abschnitt 4.2
A	Operator in Abschnitt 4.2.3
β_a	Volumenanteil β_a eines Materials a an einem Volumenelement; Kapitel 2
$\beta_l, \beta_i, \beta_m, \beta_w$	Volumenanteil des flüssigen Wassers β_l , des Eises β_i , des porösen Mediums β_m und der gesamten Wasserkomponente β_w ; Kapitel 2
b	Nichtlineare Funktion der Temperatur, Herleitung in Abschnitt 3.2; Definition s. (3.10)
b_1, b_2	Linearer und monotoner Term von b ; Abschnitt 4.2.5
B	Parabolischer Energieterm $B(u) := \Psi(b(u))$; Abschnitt 4.2, Definition in (4.2)
$B_r(\mathbf{y})$	Offene Kugel mit Radius r um \mathbf{y} ; Abschnitt 4.2

χ_M	Charakteristische Funktion: $\chi_M f(z) = f(z)$ für $z \in M$ und $\chi_M f(z) = 0$ für $z \notin M$
c	Konstante $c := \rho C_v \epsilon - \rho_m C_m \beta_m$; Abschnitt 3.1, Gleichung (3.4)
C_m, C_v	Spezifische Wärmekapazität des porösen Mediums (C_m) und von Wasser (C_v); Abschnitt 2.2.3
C, \tilde{C}, C_1, C_2	Konstanten, die während der Arbeit als Integrationskonstanten oder bei Abschätzungen verwendet werden
C_δ, C_ϵ	Konstanten, die während der Arbeit als Integrationskonstanten oder bei Abschätzungen verwendet werden und von Größen wie δ oder ϵ abhängen
δ_{jk}	Kronecker-Delta: $\delta_{jk} = 1$ für $j = k$ und $\delta_{jk} = 0$ für $j \neq k$
$\partial_v, \partial_{e_n^j}$	Richtungsableitung in Richtung v , im Speziellen in Richtung e_n^j
∂_t^{kh}	Vorwärts-Zeitdifferenzenquotient mit Zeitdifferenz kh : $\partial_t^{kh} f(\tau) = (f(\tau + kh) - f(\tau)) / kh$; Abschnitt 4.2
Δ_x, Δ_τ	Terme in Gleichungen, die später gesondert betrachtet werden; Abschnitt 4.2.6
$\frac{d^a \phi}{dt}$	Materielle Ableitung einer physikalischen Größe ϕ bezüglich des Materials a ; Definition (2.3)
D^j	$D^j := B_{r^j}(\mathbf{y}^j)$; Abschnitt 4.2.7
$\text{dist}(\cdot, \cdot)$	Abstand zwischen zwei Punkten oder zwei Mengen
div	Divergenzoperator, $\text{div} = \sum_j \partial_{x_j}$
ϵ	Porosität $\epsilon = 1 - \beta_m$; Kapitel 2
η^j	Element einer Partition der Eins, als Koeffizient bei der Darstellung von u verwendet; Abschnitt 4.2.7
η_j	Basisvektor des $H^1(\Omega)$ bzw. des S_m ; Abschnitt 5.1
e, e_l, e_i, e_m	Spezifische innere Energie, im Speziellen die inneren Energien des flüssigen Wassers e_l , des Eises e_i und des porösen Mediums e_m ; Abschnitt 2.1.3
e_i^j	j -ter Basisvektor des lokalen, euklidischen Koordinatensystems; Abschnitt 4.2.7
\mathcal{E}	Zustandsvariable $\mathcal{E} = (\beta_l, \beta_i, \beta_m, u)$; Kapitel 2
$\delta \mathcal{E}$	Vektor der Geschwindigkeitsterme und des Temperaturgradienten; Abschnitt 2.2.5 und (2.24)
\hat{E}	(Rand-)Kante der Triangulierung in Abschnitt 5.1
f^j	Lokale Darstellung des Randes Γ in U^j ; Abschnitt 4.2.7
f	Dichte der äußeren Volumenkräfte; Abschnitt 2.1.2

\mathbf{F}^d	Vektor dissipativer Kräfte; Abschnitt 2.2.5 und (2.27)
\mathbf{F}_{reac}	Vektor der reaktiven Kräfte; Abschnitt 2.2.5 und (2.25)
γ	Wärmedurchgangskoeffizient; Abschnitt 3.2
Γ	Gebietsrand $\Gamma := \partial\Omega$; Abschnitt 3.2.1
Γ_T	Rand des Raum-Zeit-Zylinders $\Gamma_T := \Gamma \times [0, T]$; Abschnitt 3.2.1
g	Positive Randfunktion, repräsentiert den Kühlungsverlauf von außen; Abschnitt 3.2
\mathcal{G}^d	Subgradient $\mathcal{G}^d = (\mathcal{G}_1^d, \dots, \mathcal{G}_6^d, \mathcal{G}_7^d)^T$ des Pseudopotentials der Dissipation; Abschnitt 2.2.6
\mathcal{G}_{reac}^d	Reaktiver, nicht dissipativer Part $\mathcal{G}_{reac}^d = (\mathcal{G}_1^d, \dots, \mathcal{G}_6^d, 0)^T$ von \mathcal{G}^d ; Abschnitt 2.2.6
\mathcal{G}^{dd}	Dissipativer Part $\mathcal{G}^{dd} = (0, \dots, 0, \mathcal{G}_7^d)^T$ von \mathcal{G}^d ; Abschnitt 2.2.6
h	Zeitschritt $h := T/N$; Abschnitt 4.2
\mathbf{h}	Raum-Zeit-Inkrement; Abschnitt 4.2.6
$h_w(\beta_l)$	Interaktionsfunktion $h_w(\beta_l) = h_l\beta_l + h_i\beta_i$ beschreibt die Interaktion von Wasser mit der Porenwand; Abschnitt 2.2.2
$h_l(\beta_l), h_i(\beta_i)$	Interaktionsfunktionen h_l bzw. h_i , die jeweils Interaktionen beschreiben, die lediglich von flüssigem Wasser bzw. von Eis mit der Porenwand herühren; Abschnitt 2.2.2
h^j	Im Beweis zur Konvergenz auf dem Rand ein Radius für Umgebungsbeobachtung; Abschnitt 4.2.7
H	Entropieproduktionsrate; Abschnitt 2.2
H_{reac}	Reaktive Entropieproduktionsrate; Abschnitt 2.2.5 und (2.26)
$H^1(\Omega)$	Sobolev-Raum $H^1(\Omega) = W^{1,2}(\Omega)$ mit Norm $\ u\ _{H^1(\Omega)} = \left(\ u\ _{L^2(\Omega)}^2 + \ \nabla u\ _{L^2(\Omega)}^2 \right)^{1/2}$
H	Heaviside Funktion; Definition s. (5.15) Abschnitt 5.2
\mathbb{I}	Einheitsmatrix; Abschnitt 2.1.2
I_1, I_2, I_3	Integrationsterme in Gleichungen, die später gesondert betrachtet werden; Abschnitt 4.2.5
I_M	Indikatorfunktion einer Menge M ; Definition A.1
∂I_M	Subdifferential der Indikatorfunktion I_M ; Definition A.2 und Abschnitt 2.2.4
\mathcal{J}	Funktional der schwachen Formulierung des zeitdiskreten Problems; Definition (5.6) in Abschnitt 5.1

$D\mathcal{J}$	Gâteaux-Ableitung von \mathcal{J} ; Definition (5.10) in Abschnitt 5.1
κ	Wärmeleitfähigkeit; Abschnitt 2.2.6
\mathbb{K}	Körper, \mathbb{R} oder \mathbb{C}
λ	Reaktionen auf die Abhängigkeit der Geschwindigkeiten der Volumenanteile durch die Massenerhaltung; Abschnitt 2.2.6
L	Latente Wärme; Abschnitt 2.2.3
$L^p(\Omega)$	Lebesgue-Raum der p -integrierbaren Funktionen auf Ω zusammen mit der Norm $\ u\ _{L^p(\Omega)} = (\int_{\Omega} u ^p)^{1/p}$ für $1 \leq p < \infty$
$L^\infty(\Omega)$	Lebesgue-Raum der wesentlich beschränkten Funktionen auf Ω zusammen mit der Norm $\ u\ _{L^\infty(\Omega)} = \text{ess sup}_{x \in \Omega} u(x) $
μ, μ_w, μ_m	Massendichte, im Speziellen Massendichte von Wasser μ_w und Massendichte des porösen Mediums μ_m ; Abschnitt 2.1
M	Menge der Volumenanteile, die den inneren Nebenbedingungen (2.2) genügen; Abschnitt 2.2.3 In Kapitel 5 Dimension des Approximationsraums S_m
M_{Γ}^e	Elementmassenmatrix für eine Randkante \hat{E} ; Gleichung (5.14)
ΔM_w	Gleichung für die Massenerhaltung des Wassers; Abschnitt 2.1.1
ν	Äußerer Einheitsnormalenvektor; Abschnitt 2.1.2
n	Allgemeine Raumdimension
N	Anzahl der Zeitschritte; Abschnitt 4.2
$\Omega, \bar{\Omega}$	Gebiet Ω und sein Abschluss $\bar{\Omega}$; Kapitel 2
Ω_T	Raum-Zeit-Zylinder $\Omega_T := \Omega \times [0, T]$ und sein Abschluss $\bar{\Omega}_T$; Abschnitt 3.2
$\tilde{\Omega}$	Kompakte Teilmenge in Ω ; Abschnitt 4.2
Ω^j	$\Omega^j := \Omega \cap U^j$; Abschnitt 4.2.7
ϕ	Dichte einer physikalischen Größe; Kapitel 2
φ, φ_y	Funktion, die den Volumenanteil β_l in Abhängigkeit von der Temperatur u beschreibt und ihre Ableitung $\varphi_y(y) := \frac{d\varphi(y)}{dy}$, Definition in (3.2)
ψ	Spezifische Dichte der freien Energie; Abschnitt 2.2
$\psi_l, \psi_i, \psi_w, \psi_m$	Spezifische Dichte der freien Energie des flüssigen Wassers ψ_l , des Eises ψ_i , der Wasserkomponente ψ_w und des porösen Mediums ψ_m ; Abschnitt 2.2
$\bar{\psi}_l, \bar{\psi}_i, \bar{\psi}_m$	Spezifische Dichte der erweiterten freien Energien des flüssigen Wassers $\bar{\psi}_l$, des Eises $\bar{\psi}_i$ und des porösen Mediums $\bar{\psi}_m$; Abschnitt 2.2.3
Φ^d	Pseudopotential der Dissipation; Abschnitt 2.2.6

Φ	Stammfunktion bzw. Potential der nichtlinearen Funktion b ; Abschnitt 4.2
Φ^*, Φ^{**}	Konvex konjugierte und bikonjugierte Funktion von Φ
$\partial\Phi$	Subdifferential von Φ ; Abschnitt 4.2
$\partial\Phi^d$	Subdifferential des Pseudopotentials der Dissipation; Abschnitt 2.2.6
Ψ, Ψ^*	Konvex konjugierte Funktion zu Φ , $\Psi = \Phi^*$ und ihre konvex Konjugierte Ψ^* ; Abschnitt 4.2 und Definition A.3
$\partial\Psi$	Subdifferential von Ψ ; Abschnitt 4.2
p, p_0	Druck; Abschnitt 2.1.3 und 2.2.8
\tilde{p}	Variation des Drucks beim schwachkompressiblen Modell; Abschnitt 2.2.8
\mathbf{q}	Wärmefluss; Abschnitt 2.1.3
ρ, ρ_m, ρ_0	Massendichten von flüssigem Wasser und Eis (ρ) bzw. des porösen Mediums (ρ_m); Kapitel 2 und für ρ_0 Abschnitt 2.2.8
$\tilde{\rho}$	Variation der Massendichte beim schwachkompressiblen Modell; Abschnitt 2.2.8
r	Wärmeproduktionsrate; Abschnitt 2.1.3
r^j	Im Beweis zur Konvergenz auf dem Rand ein Radius für Umgebungsbeobachtung; Abschnitt 4.2.7
$R_{al}, R_{ai}, R_{a_1a_2}$	Reaktionen auf die inneren Nebenbedingungen mit variablen Materialindizes $a, a_1, a_2 \in \{l, i\}$; Abschnitt 2.2.4
$R_{ll}, R_{li}, R_{il}, R_{ii}$	Reaktionen auf die inneren Nebenbedingungen; Abschnitt 2.2.4
\tilde{R}	Ersatz-Reaktionsfunktion $\tilde{R}(\beta_l) := (R_{ll} - R_{li}) + (R_{il} - R_{ii})$; Abschnitt 3.1
$\bar{\sigma}$	Cauchyscher Spannungstensor; Abschnitt 2.1.2, A.2.1
s, s_l, s_i, s_m	Spezifische Dichte der Entropie, im Speziellen die Entropiedichte s_l des flüssigen Wassers, s_i des Eises und s_m des porösen Mediums; Abschnitt 2.2
dS	$dS := d\mathcal{H}^{n-1}$ Flächenelement bzgl. dem $(n-1)$ -dimensionalen Hausdorff-Maß \mathcal{H}^{n-1} auf Γ ; Definition in (4.20)
S, S_k	Kompakte Teilmenge des Raum-Zeit-Zylinders, bzw. Folge kompakter Teilmengen des Raum-Zeit-Zylinders
S_m	Endlich dimensionaler Teilraum des $H^1(\Omega)$ (Approximationsraum); Abschnitt 5.1
$\operatorname{sgn} x$	Signumfunktion, $\operatorname{sgn} x = \frac{x}{ x }$ für $x \neq 0$ und $\operatorname{sgn} x = 0$ für $x = 0$
t	Zeit; Kapitel 2
t_N^k	k -ter Zeitschritt; Abschnitt 4.2

T	Endzeitpunkt der Beobachtung beziehungsweise der Simulation des Gefriervorgangs
\hat{T}	Element der Triangulierung in Abschnitt 5.1
u	Absolute Temperatur (in Kelvin) und gesuchte Lösung; Kapitel 2
u_N^k	Folge zeitdiskreter Lösungen, also die Lösung im k -ten Zeitschritt; Abschnitt 4.2
\bar{u}_N, \bar{u}_{N_i}	Folge stückweise konstanter Zeitinterpolanten von u_N^k bzw. eine Teilfolge davon; Abschnitt 4.2
u_m^k	Galerkin-Approximation von u_N^k bezüglich der Basis $\{\eta_1, \dots, \eta_M\}$ mit $u_m^k = \sum_{j=1}^M u_j \eta_j$; Abschnitt 5.1 und Gleichung (5.4)
u_0	Anfangstemperatur; Abschnitt 3.2
u_c	Gefriertemperatur, im Verlauf der Arbeit wird für Wasser die Gefriertemperatur 273 K verwendet; Abschnitt 2.2.3
\mathbf{U}, \mathbf{U}_a	Geschwindigkeit \mathbf{U} und Geschwindigkeit eines allgemeinen Materials \mathbf{U}_a ; Kapitel 2
$\mathbf{U}_l, \mathbf{U}_i, \mathbf{U}_w$	Geschwindigkeiten des flüssigen Wassers \mathbf{U}_l , des Eises \mathbf{U}_i und der Wasserkomponente \mathbf{U}_w ; Kapitel 2
\mathbf{U}_m	Geschwindigkeit des porösen Mediums \mathbf{U}_m ; Kapitel 2
U^j	Mengen zur offenen Überdeckung von Γ ; Abschnitt 4.2.7
v_ϑ	Zur Auswertung des Differenzenquotienten um ϑ verschobenes v (analog w_ϑ); Abschnitt 4.2.7
$V_0, V(t)$	Volumen, bei der Modellierung auch als Referenz- bzw. materielles Volumen verwendet; Kapitel 2; Abschnitt 2.1
$\partial V(t)$	Rand des Materiellen Volumens $V(t)$; Abschnitt 2.1
dV, dV_a	Volumenelement dV und Partialvolumen dV_a eines Materials a ; Kapitel 2
w_ϑ	analog v_ϑ ; Abschnitt 4.2.7
w^k	Newton-Korrektur im k -ten Newtonschritt, Definition in (5.9)
$W^{k,p}(\Omega)$	Sobolev-Raum; ist Raum der lokal summierbaren Funktionen f , deren schwache Ableitungen $D^\alpha f$ mit Ordnung $ \alpha \leq k$ existieren und in $L^p(\Omega)$ liegen
\mathcal{W}	Geschwindigkeitsvektor, bei der Bestimmung von \mathcal{G}^d benötigt; Abschnitt 2.2.6
ξ	Testfunktion
\mathbf{x}	Ort; Kapitel 2

$\mathbf{x}_{,n}^j$	Ortsvektor im lokalen, euklidischen Koordinatensystem ohne die n -te Komponente; Abschnitt 4.2.7
x_i^j	Koordinaten des Punktes \mathbf{x} im lokalen, euklidischen Koordinatensystem; Abschnitt 4.2.7
$d\mathbf{x}$	Differentielles Volumenelement
X, X^*	Banachraum X mit zugehörigem Dualraum X^*
\mathbf{X}	Position eines Materieteilchens; Abschnitt 2.1
\mathbf{y}	Raum-Zeit-Variable $\mathbf{y} = (\mathbf{x}, t)$; Abschnitt 4.2.6
\mathbf{y}^j	Referenzpunkt in U^j ; Abschnitt 4.2.7
ζ	Orts-Inkrement; Abschnitt 4.2.6

Literaturverzeichnis

- [1] ALBERTY, JOCHEN; CARSTENSEN, CARSTEN; FUNKEN, STEFAN A.: *Remarks around 50 lines of Matlab: short finite element implementation*. Numerical Algorithms **20** (1999), pp. 117-137.
- [2] ALT, HANS WILHELM: *Lineare Funktionalanalysis*. 5. Auflage, Berlin, Springer, 1999.
- [3] ALT, HANS WILHELM; LUCKHAUS, STEPHAN: *Quasilinear Elliptic-Parabolic Differential Equations*. Mathematische Zeitschrift **183** (1983), pp. 311-341.
- [4] AMLER, THOMAS GEORG: *Detection of particles transported in weakly compressible fluids: mathematical models, analysis, and simulations*. Dissertation, Technische Universität München, 2011.
- [5] ARDENNE, MANFRAD VON; MUSIOL, GERHARD; KLEMRADT, UWE: *Effekte der Physik und ihre Anwendungen*. 3. Auflage, Frankfurt am Main, Verlag Harri Deutsch, 2005.
- [6] BAUMGARTNER, ALBERT; LIEBSCHER, HANS-JÜRGEN: *Lehrbuch der Hydrologie Bd. 1: Allgemeine Hydrologie - Quantitative Hydrologie*. 2. Auflage, Gebrüder Borntraeger, Berlin-Stuttgart, 1996
- [7] BLANCHARD, DOMINIQUE; FRÉMOND, MICHEL: *The stefan problem: Computing without the free boundary*. International Journal for Numerical Methods in Engineering **20** (1984), pp. 757-771.
- [8] BOTKIN, NIKOLAI D.; HOFFMANN, KARL-HEINZ; TUROVA, VARVARA L.: *Optimal control of ice formation in living cells during freezing*. Applied Mathematical Modelling **35** (2011), pp. 4044-4057.
- [9] BRAESS, DIETRICH: *Finite Elemente*. 3. Auflage, Berlin, Springer, 2003.
- [10] BRÉZIS, HAÏM: *Analyse Fonctionnelle. Théorie et applications*. 2. Auflage, Paris, Masson, 1983.
- [11] BROKATE, MARTIN: *Konvexe Analysis*. Vorlesungsmitschrift TUM, Sommersemester 2008.
- [12] CAGINALP, GUNDUZ: *An Analysis of a Phase Field Model of a Free Boundary*. Archive for Rational Mechanics and Analysis **92** (3) (1986), pp. 205-245.

- [13] COLLI, PIERLUIGI; FRÉMOND, MICHEL; KLEIN, OLAF: *Global existence of a solution to a phase field model for supercooling*. *Nonlinear Analysis: Real World Applications* **2** (2001), pp. 523-539.
- [14] DAY, JOHN G.; MCLELLAN, MARK R.: *Cryopreservation and Freeze-Drying Protocols*. Totowa, Humana Press, 1995
- [15] DAY, JOHN G.; STACEY, GLYN N.: *Cryopreservation and Freeze-Drying Protocols, Second Edition*. Totowa, Humana Press, 2007
- [16] DONEA, JEAN; HUERTA, ANTONIO: *Finite Element Methods for Flow Problems*. Chichester, Wiley, 2003.
- [17] ECK, CHRISTOPH; GARCKE, HARALD; KNABNER, PETER: *Mathematische Modellierung*. 2. Auflage, Heidelberg, Springer, 2011.
- [18] EGOROV, YURI V.; SHUBIN, MIKHAIL A.: *Partial Differential Equations 1*. Berlin, Springer, 1992.
- [19] EHLERS, WOLFGANG: *Poröse Medien*. Habilitationsschrift, Universität-Gesamthochschule-Essen, 1989.
- [20] EKELAND, IVAR; TEMAM, ROGER: *Convex Analysis and Variational Problems*. North Holland, Amsterdam 1976; Nachdruck und Update: SIAM, Philadelphia 1999.
- [21] EVANS, LAWRENCE C.: *Partial Differential Equations*. Providence, Rhode Island, American Mathematical Society, 2002.
- [22] FERMUM, UWE: *Nichtlineare elliptisch-parabolische Gleichungen mit zeitabhängigen Hindernissen*. Diplomarbeit, Rheinische Friedrich-Wilhelms Universität Bonn, 2005.
- [23] FRÉMOND, MICHEL: *Non-smooth Thermodynamics*. Berlin, Springer, 2001.
- [24] FRÉMOND, MICHEL; GORMAZ, RAÚL; SAN MARTÍN, JORGE ALONSO: *A New Mathematical Model for Supercooling*. *Journal of Mathematical Analysis and Applications* **261** (2001), pp. 578-603.
- [25] FRÉMOND, MICHEL; NICOLAS, PIERRE: *Macroscopic thermodynamics of porous media*. *Continuum Mechanics and Thermodynamics* **2** (1990), pp. 119-139.
- [26] GREVE, RALF: *Kontinuumsmechanik*. Heidelberg, Springer, 2003.
- [27] GURTIN, MORTON E.: *An Introduction to Continuum Mechanics*. Elsevier, Academic Press, 2003.
- [28] HANSEN, INGA: *Analytische Behandlung eines Modells für Phasenübergänge in porösen Medien*. Dissertation, Technische Universität München, 2000.

-
- [29] HOFFMANN, KARL-HEINZ; BOTKIN, NIKOLAI D.: *Optimal control in cryopreservation of cells and tissues*. Advances in Mathematical Sciences and Applications **29** (2008), pp. 177-200.
- [30] HOFFMANN, KARL-HEINZ; LISHANG, JIANG: *Optimal control of a phase field model for solidification*. Numerical Functional Analysis and Optimization **13** (1&2) (1992), pp. 11-27.
- [31] KAČUR, JOZEF: *Method of Rothe in Evolution Equations*. Leipzig, Teubner, 1985.
- [32] KNABNER, PETER; ANGERMANN, LUTZ: *Numerik partieller Differentialgleichungen*. Berlin, Springer, 2000.
- [33] KUFNER, ALOIS; JOHN, OLDŘICH; FUČIK, SVATOPLUK: *Function Spaces*. Academia, Prague and Noordhoff, Leyden, 1977.
- [34] LANDAU, LEV D.; LIFSCHITZ, EVGENIJ M.: *Lehrbuch der Theoretischen Physik, Band VI Hydrodynamik*. 5. Auflage, Berlin, Akademie Verlag, 1991.
- [35] MAZUR, PETER: *Freezing of living cells: mechanisms and implications*. American Journal of Physiology **247** (Cell Physiology 16)(1984), pp. C125-C142.
- [36] MAZUR, PETER: *Principles of Cryobiology*. in „Life in the Frozen State“ (Fuller, Barry J; Lane, Nick; Benson, Erica E.) pp. 3-65, Boca Raton, CRC Press, 2004.
- [37] MIKKOLA, MARTTI J.; HARTIKAINEN, JUHA: *Mathematical model of soil freezing and its numerical implementation*. International Journal for Numerical Methods in Engineering **52** (2001), pp. 543-557.
- [38] MORTON, KEITH WILLIAM: *Numerical Solution of Convection-Diffusion Problems*. London, Chapman & Hall, 1996.
- [39] NICOLAS, PIERRE: *Modélisation mathématique et numérique des transferts d'humidité en milieu poreux*. Dissertation, Laboratoire Central des Ponts et Chaussées, Paris, 1992.
- [40] PETERSEN, ANSGAR: *Grundlagen der elektrisch induzierten Eiskeimbildung und ihre Anwendung in der Kryobiologie*. Dissertation, RWTH Aachen, 2007.
- [41] RADVAN, JENS: *Thermische Prozeßführung beim Einfrieren und Wiedererwärmen humaner Erythrozyten mit Hydroxyethylstärke*. Dissertation, RWTH Aachen, 2004.
- [42] ROUBÍČEK, THOMÁŠ: *Nonlinear Partial Differential Equations with Applications*. Basel, Birkhäuser, 2005.
- [43] RŮŽIČKA, MICHAEL: *Nichtlineare Funktionalanalysis*. Berlin, Springer, 2004.

- [44] SOLANO, BELEN P.; GALLANT, ANDREW J.; WOOD, DAVID: *Design and Optimization of a Microgripper: Demonstration of Biomedical Applications Using the Manipulation of Oocytes*. Design, Test, Integration and Packaging of MEMS/MOEMS, 1-3 April 2009, Rome, pp. 61-65.
- [45] TONER, MEHMET; ELMOAZZEN, HEIDI Y.; TOTH, THOMAS L.; HEO, YUNSEOK; LEE HO-JOON; CHAKRABORTY, NILAY: *Methods For The Cryopreservation Of Mammalian Cells*. WO 2011/047380 A2, 2011.
- [46] VISINTIN, AUGUSTO: *Models of Phase Transition*. Boston, Birkhäuser, 1996.
- [47] WARNECKE, GERALD: *Analytische Methoden in der Theorie der Erhaltungsgleichungen*. Stuttgart, Teubner, 1999.
- [48] WRIGGERS, PETER: *Nichtlineare Finite-Elemente-Methoden*. Berlin, Springer, 2001.
- [49] XU, YING; McDONOUGH, JAMES M.; TAGAVI, KAVEH A.; GAO, DAYONG: *Two-dimensional phase-field model applied to freezing into supercooled melt*. Cell Preservation Technology **2** (2) (204), pp. 113-124.
- [50] ZHMAKIN, ALEXANDER I.: *Physical aspects of cryobiology*. Physics-Uspekhi **51** (3) (2008), pp. 231-252.