

BACHELORARBEIT MIT DEM THEMA

UNTERDRÜCKUNG DES VERGRÖßERNS IN GEKOPPELTEN CAHN-HILLIARD MODELLEN

SUPPRESSION OF COARSENING IN COUPLED CAHN HILLIARD
MODELS

Jana Wrembel (E-Mail: j_wrem01@wwu.de)

Erstes Gutachten: Prof. Dr. Uwe Thiele

Zweites Gutachten: Priv.-Doz. Dr. Svetlana Gurevich

6. November 2019

Plagiatserklärung der / des Studierenden

Hiermit versichere ich, dass die vorliegende Arbeit über Unterdrückung des Vergräberns in gekoppelten Cahn-Hilliard Modellen selbstständig verfasst worden ist, dass keine anderen Quellen und Hilfsmittel als die angegebenen benutzt worden sind und dass die Stellen der Arbeit, die anderen Werken – auch elektronischen Medien – dem Wortlaut oder Sinn nach entnommen wurden, auf jeden Fall unter Angabe der Quelle als Entlehnung kenntlich gemacht worden sind.

01.08.2019, Jana Wemmel
(Datum, Unterschrift)

Ich erkläre mich mit einem Abgleich der Arbeit mit anderen Texten zwecks Auffindung von Übereinstimmungen sowie mit einer zu diesem Zweck vorzunehmenden Speicherung der Arbeit in eine Datenbank einverstanden.

01.08.2019, Jana Wemmel
(Datum, Unterschrift)

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	4
2	Konzepte der nichtlinearen Physik	6
2.1	Gewöhnliche und partielle Differentialgleichungen	6
2.1.1	Randbedingungen	7
2.2	Stationäre Zustände und ihre Stabilität	9
2.3	Bifurkationen	10
3	Das Cahn-Hilliard-Modell	12
3.1	Die Cahn-Hilliard-Gleichung	12
3.2	Herleitung	12
3.3	Vergrößerungen	16
3.4	Gekoppelte Cahn-Hilliard-Gleichungen	17
4	Methoden	19
4.1	Lineare Stabilitätsanalyse	19
4.2	Numerische Kontinuierung	21
4.3	Finite Elemente Methode und schwache Formulierung	23
4.4	Nebenbedingungen	25
4.5	Implementierung der Modellgleichungen und Vorgehen	28
5	Ergebnisse	30
5.1	Erhaltene Gradientendynamik	30
5.1.1	Lineare Stabilitätsanalyse im Fall der erhaltenen Gradientendynamik	31
5.1.2	Bifurkationsverhalten und lineare Stabilitätsanalyse des gekoppelten Systems	35
5.1.3	Abhängigkeit von der Kopplungsstärke α	39
5.1.4	Deformierter Vergrößerungsprozess	42
5.1.5	Ist eine lineare Unterdrückung des Vergrößerungsprozesses beobachtbar? . .	43
5.2	Gebrochene Gradientendynamik	45
5.2.1	Lineare Stabilitätsanalyse im Fall der gebrochenen Gradientendynamik . . .	46
5.2.2	Unterschiedlich starke Brechung der Gradientendynamik	47
5.2.3	Besonderheit bei $\varepsilon = -1$	49
5.2.4	Deformierter Vergrößerungsprozess bei gebrochener Gradientendynamik . .	51
5.2.5	Lineare Unterdrückung des Vergrößerungsprozesses	53
5.2.6	Nichtlineare Unterdrückung des Vergrößerungsprozesses	55
6	Fazit und Ausblick	60
	Literaturverzeichnis	63

1 Einleitung

In dieser Arbeit wird ein, auf unterschiedliche Art und Weise, gekoppeltes Cahn-Hilliard-Modell untersucht. Das Cahn-Hilliard-Modell beschreibt die Phasenseparation von binären Flüssigkeiten im zeitlichen Verlauf mithilfe der Cahn-Hilliard-Gleichung [1], [2]. Es wird nun die Auswirkung von unterschiedlich starker Kopplung zweier Teilsystemen, welche physikalisch durch zwei Felder repräsentiert werden, auf das Bifurkationsverhalten unterschiedlicher binärer Flüssigkeiten des Gesamtsystems untersucht. Dafür werden die stationären Zustände, welche das Gesamtsystem annimmt, analysiert und betrachtet, welche neuen stationären Zustände unter Temperaturerniedrigung beobachtet werden können und warum diese auftreten. Die Kopplung der beiden Felder kann dabei die Gradientendynamik brechend oder erhaltend sein. Den Gradientendynamik erhaltenden Fall kennzeichnet, dass für das gesamte System eine freie Energie definiert werden kann [2], [3], während dies im gebrochenen Fall nicht möglich ist aufgrund möglicher äußeren Zuflüsse wie zum Beispiel dem Teilchenstrom.

Die stationären Zustände des Gesamtsystems können stabil oder instabil gegenüber einer äußeren Störung sein. Dies ist relevant, da ein reales physikalisches System nur Zustände annimmt, welche stabil gegenüber ständig auftretender Störungen wie zum Beispiel Temperaturfluktuationen sind. Für das einfache, nicht gekoppelte Cahn-Hilliard-Modell ist charakteristisch, dass ein sogenannter Vergrößerungsprozess (engl. coarsening) bei Temperaturerniedrigung eintritt [4]. Dies bedeutet anschaulich, dass eine Separation in zwei Phasen der beiden Bestandteile der binären Flüssigkeit auftritt. Bei einer Mischung aus Wasser und Öl würde es beispielsweise bedeuten, dass sich im zeitlichen Verlauf eine Schicht aus Wasser und eine räumlich getrennte Schicht aus Öl bildet.

Es wird nun untersucht, ob bei bestimmten Bedingungen in dem gekoppelten Cahn-Hilliard-Modell eine Unterdrückung des Vergrößerungsprozesses auftritt und dieser somit nicht stattfindet. Dies wurde bereits in [5] im Fall einer gebrochenen Gradientendynamik untersucht, allerdings wird hier der Einfluss einer immer stärker werdenden Brechung der Gradientendynamik, sowie der Fall einer erhaltenen Gradientendynamik untersucht. Eine Unterdrückung kann auf unterschiedliche Art und Weise stattfinden. Zum Beispiel könnte einerseits der Zustand maximaler Phasenseparation bei hohen Temperaturen stabil sein, allerdings bei niedrigen Temperaturen an Stabilität verlieren und ein anderer periodischer Zustand dort an Stabilität gewinnen. Andererseits könnten mehrere Zustände zur selben Temperatur gleichzeitig stabil sein, dabei wird das Vergrößern nicht komplett unterdrückt. Es könnte auch eine Deformierung des Zustands maximaler Phasenseparation auftreten, wobei Konzentrationsschwankungen der Flüssigkeiten auf den Trennschichten existieren. Nicht zuletzt könnte der Vergrößerungsprozess an sich nicht mehr stabil sein, sondern ein anderer Zustand. Diese unterschiedlichen Arten der Unterdrückung des Vergrößerungsprozesses werden beobachtet und klassifiziert werden.

Das Gesamtsystem wird unter Verwendung zweier unterschiedlicher Arten der Kopplungen untersucht. Dabei wird die Kopplung einmal so eingeführt, dass die Gradientendynamik erhalten bleibt und einmal so, dass diese gebrochen wird. Im Fall der gebrochenen Gradientendynamik wird der Einfluss auf das Gesamtsystem bei immer stärker werdender Brechung betrachtet. Bei der Untersuchung des gekoppelten Cahn-Hilliard-Modell werden dann unter anderem der Einfluss der Art

der Flüssigkeiten, die Konzentration der Flüssigkeiten in beiden Feldern, aber auch die Stärke der Kopplung von beiden Feldern auf die stationären Zustände variiert. Dabei wird besonders auf ein mögliches Auftreten einer Unterdrückung des Vergröberns geachtet werden.

Zunächst wird die zum Verständnis notwendige Theorie hinter dieser Arbeit erläutert werden. Dabei wird begonnen bei den Konzepten der nichtlinearen Physik. Es wird darauf eingegangen, was stationäre Lösungen einer partiellen Differentialgleichung darstellen, welchen Einfluss Randbedingungen auf diese haben und warum deren Stabilität physikalisch von Interesse ist. Im nächsten Abschnitt wird auf das Cahn-Hilliard-Modell eingegangen, indem die Cahn-Hilliard-Gleichung betrachtet und hergeleitet wird. Außerdem wird auf den Vergrößerungsprozess und die beiden unterschiedlichen Arten der Kopplung eingegangen. Als nächstes werden die zur numerischen und mathematischen Untersuchung des Gesamtsystems notwendigen Methoden, wie zum Beispiel die lineare Stabilitätsanalyse, erläutert. Anschließend werden die Ergebnisse dieser Arbeit dargestellt werden und erläutert werden. Zum Schluss werden die Ergebnisse zusammengefasst und ein Ausblick auf weitere Aspekte gegeben.

2 Konzepte der nichtlinearen Physik

In diesem Abschnitt werden die grundlegenden Konzepte der nichtlinearen Physik erläutert, welche für diese Arbeit relevant sind.

2.1 Gewöhnliche und partielle Differentialgleichungen

Bei einer Differentialgleichung handelt es sich um eine Gleichung, die ein Feld, mathematisch eine Funktion von Variablen, beschreibt und in welcher Ableitungen des Feldes nach ihren Variablen auftreten. Eine gewöhnliche Differentialgleichung besitzt die Eigenschaft, dass nur Ableitungen nach einer Variable auftreten. Ein bekanntes Beispiel stellt dabei die eindimensionale Newton'sche Bewegungsgleichung

$$F = m \cdot \ddot{x} \quad (1)$$

dar, wobei F eine wirkende Kraft, m die Masse des betrachteten Objekts und $\ddot{x}$ die resultierende Beschleunigung darstellt [6]. Hängt die Kraft F nun nicht explizit von der Zeit ab, so ist die gewöhnliche Differentialgleichung zusätzlich autonom. Ein Beispiel hierfür stellt die Schwerkraft $F_g = m \cdot g$ mit Erdbeschleunigung $g \approx 9.81 \frac{\text{m}}{\text{s}^2}$ [6] dar. Durch Lösung der sich ergebenden Differentialgleichung

$$m \cdot g = m \cdot \ddot{r} \quad (2)$$

kann die Bewegung des Objekts bei bekannten Anfangsbedingungen bestimmt werden. Allgemein kann ein n -dimensionales autonomes gewöhnliches Differentialgleichungssystem durch

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{F}(\vec{x}, \mu) \quad (3)$$

beschrieben werden, wobei $\vec{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ ein Vektorfeld und $\vec{F} = (F_1, F_2, \dots, F_n)$ einen n -dimensionalen Vektor darstellt [7]. Die Gleichung (3) beschreibt eine gewöhnliche Differentialgleichung im Allgemeinen, da jede Differentialgleichung n -ter Ordnung auf ein n -dimensionales gewöhnliches Differentialgleichungssystem zurückgeführt werden kann [7]. Bei μ handelt es sich um einen sogenannten Kontrollparameter, welcher das System beeinflusst, aber unabhängig der Zeit t sein muss. Von besonderem Interesse sind nun Fixpunkte im System. Ein Fixpunkt $\vec{x}_f$ ist dadurch definiert, dass gilt

$$\vec{F}(\vec{x}_f, \mu) = 0. \quad (4)$$

Ein Fixpunkt besitzt nach Gleichung (3) keine Zeitdynamik und stellt im Phasenraum, aufgespannt durch die Komponenten x_i mit $i \in \{1, 2, \dots, n\}$, einen singulären Punkt dar [7].

Im Unterschied zu gewöhnlichen Differentialgleichungen kennzeichnen partielle Differentialgleichungen, dass sie partielle Ableitungen enthalten. Demnach wird eine Funktion betrachtet, welche von mehreren Variablen, wie zum Beispiel Ort und Zeit, abhängt. Ein Beispiel für eine partielle

Differentialgleichung stellt die eindimensionale Wärmeleitungsgleichung

$$\frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = a \frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial x^2} \quad (5)$$

[8] dar, wobei T die Temperatur und a den Temperaturleitfähigkeitskoeffizienten darstellt. Es handelt sich um eine partielle Differentialgleichung, da partielle Ableitungen nach dem Ort x und der Zeit t vorhanden sind. Mithilfe dieser Differentialgleichung kann die Ausbreitung der Wärme von einem gewissen Anfangszustand aus betrachtet werden.

Bei der gewöhnlichen Differentialgleichung waren Fixpunkte von besonderem Interesse. Ein Analogon zu diesen bilden bei partiellen Differentialgleichungen, welche nur Orts- und Zeitableitungen enthalten, auf die sich in dieser Arbeit beschränkt wird, die stationären Lösungen. Für diese verschwindet die partielle Zeitableitung (siehe [9])

$$a \frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial x^2} = 0, \quad (6)$$

was hier beispielsweise anhand der Wärmeleitungsgleichung (5) zu erkennen ist.

Auch die in dieser Arbeit untersuchte Cahn-Hilliard-Gleichung

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{1}{L^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(-\frac{\kappa^2}{L^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + a\phi + \phi^3 \right) \quad (7)$$

ist eine partielle Differentialgleichung. Die physikalische Bedeutung der einzelnen Terme wird in dem Abschnitt „3.1 Die Cahn-Hilliard-Gleichung“ diskutiert. Da es sich bei der Cahn-Hilliard-Gleichung um eine partielle Differentialgleichung handelt, wird in den folgenden Abschnitten besonders auf den Umgang mit partiellen Differentialgleichungen geachtet werden.

2.1.1 Randbedingungen

Randbedingungen, wie auch Anfangsbedingungen, haben einen Einfluss auf die Lösung einer partiellen Differentialgleichung. Dabei beschreiben Anfangsbedingungen Anforderungen an das System, welche zum Anfangszeitpunkt $t = 0$ gelten sollen. Randbedingungen stellen Anforderungen an das System am Rand der Domäne dar. Sie gelten zu jedem Zeitpunkt. Die Relevanz von Anfangs- und Randbedingungen kann anhand des physikalischen Beispiels einer Gitarrensaite verdeutlicht werden. Schwingungen von Saiten werden mithilfe der Wellengleichung

$$\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} = v^2 \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \quad (8)$$

beschrieben, wie in [10] gezeigt. Dabei repräsentiert $u(x, t)$ die Saite und v die Ausbreitungsgeschwindigkeit abhängig von der Zugkraft der Saite. Anfangsbedingungen beschreiben nun die Anfangsauslenkung $u(x, 0)$ und Anfangsgeschwindigkeit $\dot{u}(x, 0)$ der Saite. Bei der Anregung einer vorher unangeregten Saite $\dot{u}(x, 0) = 0$ kommt es auf die Anfangsauslenkung der Saite an, welcher Ton zu hören ist. Es ist ein unterschiedlicher Ton zu hören, wenn die Saite sich in der Nulllage befindet, als wenn an einer Stelle die Saite auf das Griffbrett gedrückt wird. Genauso können auch die Randbedingungen veranschaulicht werden: Hat die Gitarrensaite die Länge L , so ist sie

in einer Gitarre an den Enden eingespannt. Dies bedeutet, dass die Saite an beiden Rändern fest ist und zu jedem Zeitpunkt in der Nulllage verharrt, also $u(0, t) = u(L, t) = 0$. Ist die Saite beispielsweise nicht eingespannt, so gelten andere Randbedingungen und auch andere Schwingungen beziehungsweise Töne entstehen bei Anregung der Saite.

Es gibt unterschiedliche Arten von Randbedingungen. Die bekanntesten sind dabei Dirichlet-, Neumann- und periodische Randbedingungen. Das Einspannen der Gitarrensaite im obigen Beispiel entspricht Dirichlet-Randbedingungen, da die Werte der Lösung auf dem Rand festgelegt sind. Definiert man Werte der Ableitung der Lösung auf dem Rand, so spricht man von Neumann-Randbedingungen. Periodische Randbedingungen sind dadurch gekennzeichnet, dass an beiden Rändern des betrachteten Intervalls die Funktionswerte und die Funktionswerte aller Ableitung gleich sind. Dadurch ist es möglich, die Funktion periodisch über die gesamten reellen Zahlen fortzusetzen (vgl. [11]).

Randbedingungen führen zu einer Einschränkung der möglichen Lösungen, indem nur diskrete Schwingungsfrequenzen auftreten können. Betrachtet man beispielsweise eine Domäne, welche eine Länge von einer Einheit besitzt, sich also im Intervall $[-L_x, L_x]$ mit $L_x = \frac{1}{2}$ aufhält, so treten bei periodischen Randbedingungen nur Wellenzahlen mit $2n\pi$ mit $n \in \mathbb{Z}$ auf, wie im folgenden Absatz gezeigt wird. Auf einer so gewählten Domäne werden auch die gekoppelten Cahn-Hilliard-Gleichungen untersucht werden.

Eine Schwingung in Form einer ebenen Welle auf der betrachteten Domäne gegeben durch

$$f(x) = e^{ikx}, \quad (9)$$

wobei physikalisch sinnvoll lediglich der Realteil der Funktion ist. Aufgrund von periodischen Randbedingungen kann die Funktion f auf die gesamten reellen Zahlen $\mathbb{R}$ fortgesetzt werden. Dabei gilt für alle Orte $x \in \mathbb{R}$ dann die Bedingung:

$$f(x) = f(x + 2L_x). \quad (10)$$

Setzt man nun die Schwingung aus Gleichung (9) ein, so erkennt man, dass gerade nur bestimmte Wellenzahlen erlaubt sind:

$$e^{ikx} \stackrel{!}{=} e^{ik(x+2L_x)} \quad (11)$$

$$\Rightarrow 1 = e^{2ikL_x} \quad (12)$$

$$\Rightarrow 2kL_x = 2n\pi \quad \text{mit } n \in \mathbb{Z} \quad (13)$$

$$\Rightarrow k = \frac{2n\pi}{2L_x} \quad (14)$$

Setzt man nun $2L_x = 1$ ein, so erhält man eine Bedingung an die Wellenzahlen bei periodischen Randbedingungen

$$k_n = 2n\pi \quad \text{mit } n \in \mathbb{Z}. \quad (15)$$

2.2 Stationäre Zustände und ihre Stabilität

Wenn eine stationäre Lösung einer partiellen Differentialgleichung bekannt ist, ist es außerdem physikalisch von Interesse, ob diese Lösung stabil oder instabil gegenüber einer kleinen äußeren Störung ist.

Ein einfaches Beispiel, welches diese Thematik veranschaulicht, stellt das gedämpfte Stabpendel dar. Bei dem Pendel gibt es zwei Fixpunkte, welche in der folgenden Abbildung 1 dargestellt sind.

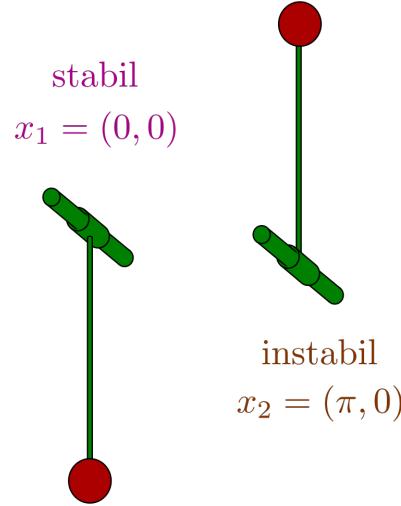


Abbildung 1: Hier sind die Gleichgewichtspositionen beim Stabpendel dargestellt. Die verwendeten Koordinaten stellen Winkel φ und Winkelgeschwindigkeit ω , angegeben als Tupel (φ, ω) , im Phasenraum dar [12].

Die beiden in der Abbildung 1 dargestellten Gleichgewichtspositionen x_1 und x_2 sind im mechanischen Gleichgewicht, da die Masse des Pendels keine Beschleunigung erfährt. Mathematisch wird das gedämpfte Pendel durch die Differentialgleichung

$$\begin{aligned}\dot{\omega} + \gamma\omega + \frac{g}{l}\sin(\theta) &= 0 \\ \dot{\theta} &= \omega\end{aligned}\tag{16}$$

[7] beschrieben. Um den Fixpunkt zu bestimmen, gilt nach Gleichung (4)

$$F(x_f) = 0 \quad \Rightarrow \quad -\frac{g}{l}\sin(\theta) \stackrel{!}{=} 0.\tag{17}$$

Aus der Definition vom Sinus ergeben sich dann die beiden Fixpunkte $x_1 = (0, 0)$ und $x_2 = (\pi, 0)$. Dies ist anschaulich dadurch erklärbar, dass die Gewichtskraft, die auf die Masse des Pendels wirkt, in der Abbildung 1 nach unten wirkt und da die Länge des Stabes konstant ist keine Bewegung des Pendels ausgelöst wird. Anhand dieses Beispiels erkennt man die Wichtigkeit der Stabilität der Gleichgewichtspositionen, da die instabile Lösung x_2 durch eine kleine Störung über Schwingungen in die Lösung x_1 übergehen würde, wohingegen eine Störung auf die stabile Lösung x_1 im zeitlichen Verlauf abklingen würde. Somit ist für die physikalische Anwendung die Stabilität

gefundenen Lösungen wichtig.

Eine Möglichkeit die Stabilität von Lösungen analytisch zu bestimmen, stellt die lineare Stabilitätsanalyse dar. Sie stellt damit ein wichtiges analytisches Werkzeug zur Auswertung der Ergebnisse dar. Die Grundzüge der linearen Stabilitätsanalyse werden im zugehörigen Kapitel „4.1 Lineare Stabilitätsanalyse“ anhand einer gewöhnlichen Differentialgleichung erläutert. Die Anwendung des Prinzips zur Analyse der Stabilität bei der gekoppelten Cahn-Hilliard-Gleichungen befindet sich in Kapitel „5.1.1 Lineare Stabilitätsanalyse im Fall der erhaltenen Gradientendynamik“.

2.3 Bifurkationen

Mithilfe der obigen Theorie ist es möglich von gewöhnlichen (partiellen) Differentialgleichungen ihre Fixpunkte (die stationäre Lösung) einschließlich ihrer Stabilität zu bestimmen. Nun ist es möglich, dass für andere Parameter in der zu untersuchenden Gleichung Lösungen ihre Stabilität ändern oder auch, dass neue Lösungen entstehen. Findet eine solche Änderung der Lösung statt, so wird das als Bifurkation bezeichnet und die zugehörigen Parameter bilden den Bifurkationspunkt (vgl [13]). Bifurkationen werden typischerweise in einem Bifurkationsdiagramm dargestellt. In diesem ist der variierte Parameter gegenüber einer Lösungsnorm dargestellt. Bei einer partiellen Differentialgleichung wird typischerweise eine L_p -Norm verwendet. Stabile Lösungen werden dadurch gekennzeichnet, dass eine Linie durchgezogen dargestellt ist, wohingegen instabile Lösungen gestrichelt dargestellt sind. Es gibt verschiedene Typen einer Bifurkation, welche die betrachtete Bifurkation charakterisieren. Zu den meistens auftretenden Bifurkationstypen zählen dabei die Pitchfork-, die Saddle-Node- und die Hopf-Bifurkation, sowie die transkritische Bifurkation. Die transkritische Bifurkation ist dadurch gekennzeichnet, dass sie die Stabilität zweier bekannter Lösungen vertauscht. Diese Bifurkation ist in der folgenden Abbildung (2) zu erkennen.

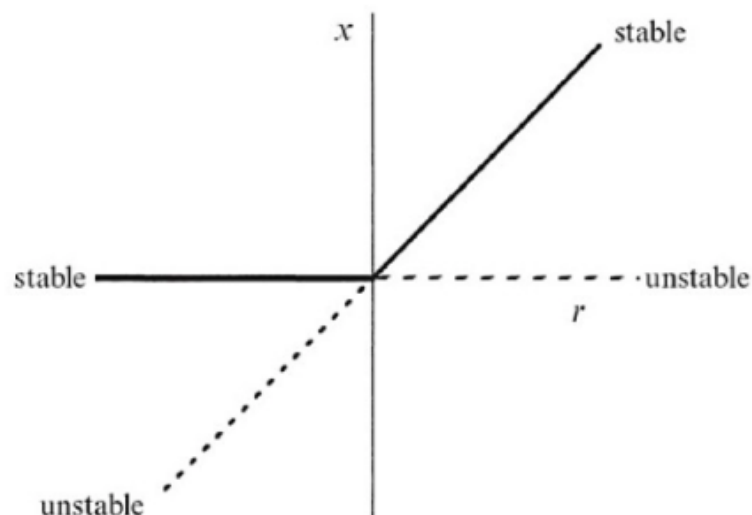


Abbildung 2: In dieser Abbildung ist beispielhaft eine transkritische Bifurkation dargestellt [13].

Die Saddle-Node-Bifurkation ist dadurch gekennzeichnet, dass eine bekannte Lösung ihre Stabilität ändert, was in der folgenden Abbildung 3 dargestellt ist.

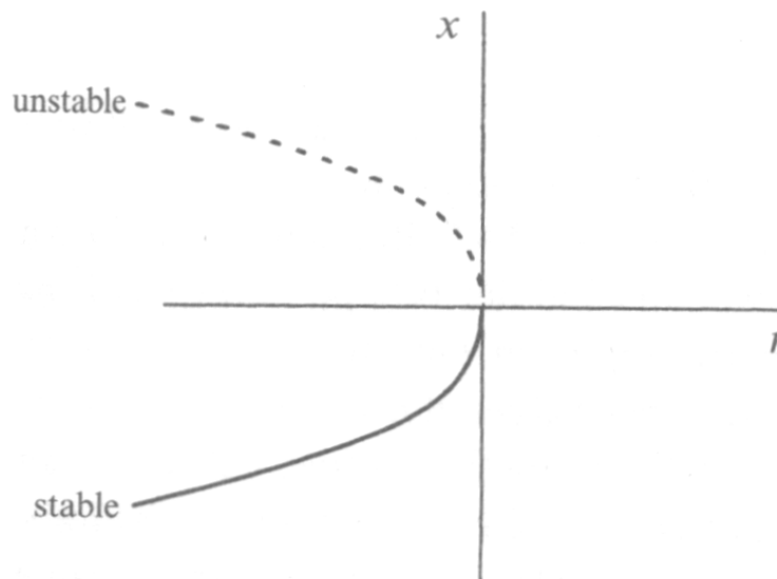


Abbildung 3: In dieser Abbildung ist beispielhaft eine Saddle-Node-Bifurkation dargestellt [13].

Bei der Pitchfork-Bifurkation entstehen zwei neue Lösungen gleicher Stabilität wie die vorherige Lösung, während die vorherige Lösung ihre Stabilität ändert. Diese Bifurkation sieht daher etwas wie eine Heugabel (engl. Pitchfork) aus, woher auch ihr Name stammt. Grundsätzlich wird bei diesen Bifurkationen zwischen subkritischer und superkritischer Bifurkation unterschieden. Sie unterscheiden sich in einer Vertauschung eines Vorzeichens in der betrachteten Differentialgleichung. In der folgenden Abbildung 4 erkennt man beispielhaft eine Pitchfork-Bifurkation.

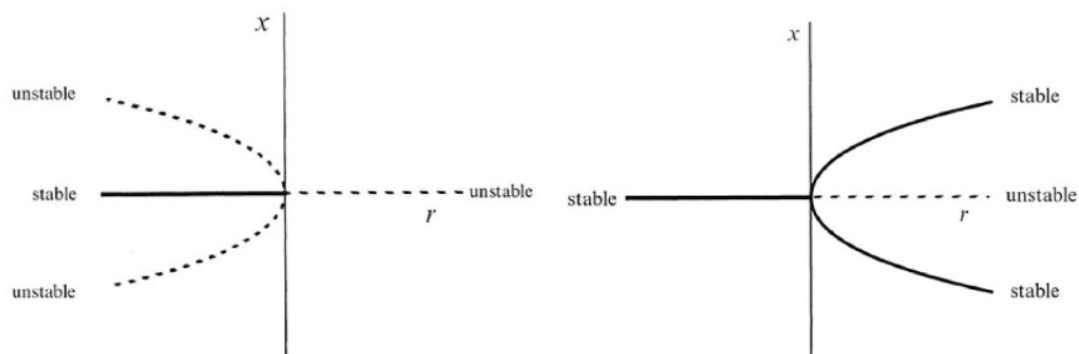


Abbildung 4: In dieser Abbildung ist beispielhaft eine Pitchfork-Bifurkation dargestellt. Links ist die subkritische Bifurkation zu erkennen und rechts die Superkritische [13].

Bei der Hopf-Bifurkation überquert ein Paar komplex konjugierter Eigenwerte die imaginäre Achse. Im Gegensatz zu den vorher beschriebenen Bifurkationen bei denen rein reelle Eigenwerte beteiligt sind, sorgt der Imaginärteil für zeitlich periodische Verhalten der Lösungen.

3 Das Cahn-Hilliard-Modell

In diesem Abschnitt wird der grundlegende Anwendungsbereich des Cahn-Hilliard-Modells, eine Herleitung der zugehörigen Cahn-Hilliard-Gleichung, besondere Eigenschaften dieser und die Anwendung auf die Untersuchung eines Gesamtsystems aus zwei Feldern dargestellt.

3.1 Die Cahn-Hilliard-Gleichung

Die Cahn-Hilliard-Gleichung beschreibt den Prozess der Phasenseparation von binären Flüssigkeiten und lautet im eindimensionalen, entdimensionalisierten Fall (siehe Gleichung (7))

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{1}{L^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(-\frac{\kappa^2}{L^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + a\phi + \phi^3 \right).$$

Es handelt sich dabei um eine partielle Differentialgleichung mit Ableitungen bis zur vierten Ordnung im Ort. Die Funktion ϕ wird dabei als Phasenfeld bezeichnet. Eine Phase ist ein räumlich abgegrenzter Bereich mit den selben physikalischen Eigenschaften. Diese Eigenschaft stellt das Phasenfeld dar und ist hier als Konzentration einer Flüssigkeit in einer Mischung interpretierbar (vgl. [2]). ϕ ist abhängig von Ort und Zeit, was ein einfaches Beispiel anhand einer Mischung aus Wasser und Öl in einem Glas verdeutlicht. Mischt man diese beiden Flüssigkeiten, so bildet sich zunächst eine Mischung aus beiden Flüssigkeiten innerhalb des Glases. Über die Zeit bilden sich allerdings zwei Schichten, eine aus Öl und eine aus Wasser. Es kommt zur Phasenseparation. Somit ist die Funktion ϕ vom Ort innerhalb des Glases und aber auch von der Zeit, da sich ein Gleichgewicht über die Zeit bildet, abhängig. Der Zustand der Phasenseparation ist dabei ein stabiler stationärer Zustand, da er im Limes unendlich langer Zeit erreicht wird.

Der Parameter a gibt die Temperaturabhängigkeit des Systems wieder. Die Temperatur im betrachteten System hat einen Einfluss auf die Stabilität von Zuständen im System. Es ist daher sinnvoll dem Parameter a eine Temperaturabhängigkeit zuzuordnen, da a die Stabilität homogener Lösungen ändert (wie im Abschnitt „3.3 Vergrößerungen“ erkennbar).

Der Term $\frac{\kappa^2}{L^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}$ stellt den Einfluss von der Bildung von Grenzflächen dar. Dies wird deutlich bei der Betrachtung der freien Energie in der Herleitung der Cahn-Hilliard-Gleichung im nächsten Abschnitt.

Eine weitere wichtige Eigenschaft der Cahn-Hilliard-Gleichung ist, dass sie eine konservierte Dynamik besitzt (vgl. [2]). Das bedeutet, dass die Masse $\frac{1}{V} \int \phi \, dx$ im System erhalten ist. Ohne einen äußeren Einfluss ist es nicht möglich, dass die Gesamtkonzentration der betrachteten Stoffen sich innerhalb des Systems ändert. Im obigen Beispiel würde das bedeuten, dass die gesamte Masse an Wasser und Öl konstant ist, es sei denn es wird beispielsweise mehr Wasser ins System hinzugefügt.

3.2 Herleitung

Bei der folgenden Herleitung der Cahn-Hilliard-Gleichung in ihrer gradientendynamischen Form wird mit einer Kontinuitätsgleichung begonnen. Da bei dem Modell der Cahn-Hilliard-Gleichung

Massenerhaltung gefordert ist, ist es sinnvoll, dass eine Kontinuitätsgleichung gelten muss, denn sie beschreibt anschaulich, dass die Variation der Dichte in einem Gebiet abhängig von dem Fluss durch das Gebiet ist. Mathematisch formuliert entspricht die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{j}, \quad (18)$$

wobei j die Flächenstromdichte, den „Fluss“, und ϕ den Ordnungsparameter, also die Masse, darstellt. Nimmt man analog zur theoretischen Mechanik an, dass die Stromdichte $\vec{j}$ proportional zu einer verallgemeinerten Kraft $\vec{f}$ mit Proportionalitätskonstante $K(\phi)$ ist, so ergibt sich

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\vec{\nabla} K(\phi) \vec{f} \quad (19)$$

[2]. Als nächstes kann die verallgemeinerte Kraft durch ihr zugehöriges Potential P ausgedrückt werden

$$\vec{f} = -\nabla P(\phi) \quad (20)$$

[2]. Dieses Potential P ist durch

$$P(\phi) = \frac{\delta F}{\delta \phi} \quad (21)$$

gegeben, wobei F die freie Energie darstellt [2]. Bei der freien Energie handelt es sich um die Zustandsgröße, welche in einem offenen thermodynamischen System ein Minimum anstrebt. Demnach ist die Funktionalableitung der freien Energie ein Maß für die Zeitentwicklung des Zustands. Wird F beispielsweise extremal, so ist $\frac{\delta F}{\delta \phi} = 0$ und ein stationärer Zustand ist erreicht. Setzt man Gleichung (21) und (20) nun in die Gleichung (19) ein, so erhält man

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \left(-K(\phi) \nabla \frac{\delta F}{\delta \phi} \right). \quad (22)$$

Als nächstes wird ein Ansatz für die freie Energie F getätigt. Dieser lautet

$$F = \int_V \frac{\kappa^2}{2L^2} (\nabla \phi)^2 + f(\phi) \, d^3\vec{r}. \quad (23)$$

Der Term $\frac{\kappa^2}{2L^2} (\nabla \phi)^2$ wird als „Oberflächenterm“ bezeichnet. Dieser Teil bewirkt, dass die Bildung von Schichtübergängen einen Beitrag zur freien Energie hat, da Grenzflächen durch eine hohe Steigung gekennzeichnet sind. Die Funktion $f(\phi)$ wird durch ein Doppelmuldenpotential angenähert. Also ist $f(\phi)$ von der Form

$$f(\phi) = \frac{a}{2} \phi^2 + \frac{1}{4} \phi^4. \quad (24)$$

Ein solche Funktion f ist in der folgenden Abbildung 5 dargestellt.

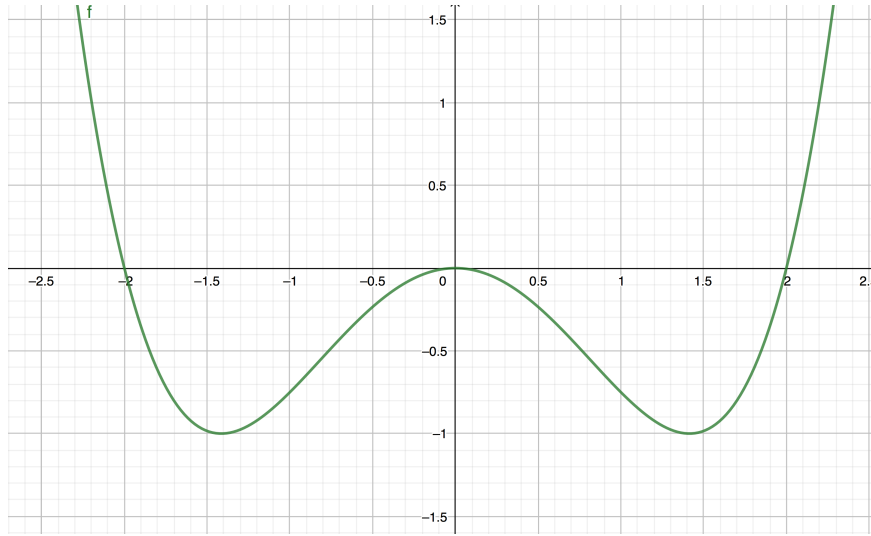


Abbildung 5: In dieser Abbildung ist beispielhaft ein Doppelmuldenpotential mit $a = -2$ dargestellt. Auf der Abzisse ist dabei ϕ und auf der Ordinate $f(\phi)$.

Die Annahme eines Doppelmuldenpotentials ist dabei sinnvoll, da man sich die beiden Minima als die beiden entstehenden Phasen bei Phasenseparation veranschaulichen kann. Somit stellt die Phasenseparation den Zustand minimaler Energie dar. Hieran kann man den Einfluss des Parameters a erkennen, da dieser beeinflusst, ob Phasenseparation auftritt, da wenn $a > 0$ ist keine Mulden existieren.

Wertet man nun die Funktionalableitung aus, so erhält man die gesuchte Cahn-Hilliard-Gleichung. Die Funktionalableitung ist gegeben durch

$$\int \frac{\delta F(\phi)}{\delta \phi} \psi \, dx = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{F[\phi(x) + h\psi(x)] - F[\phi(x)]}{h}, \quad (25)$$

wobei F ein Funktional, ϕ und ψ Funktionen und $h \in \mathbb{R}$ ist (vgl. [14]). Zur Auswertung der Funktionalableitung in Gleichung (22) wird die freie Energie in zwei Teile $F = \frac{\kappa^2}{L^2} F_1 + F_2$ aufgeteilt mit

$$F_1 = \int_V \frac{1}{2} (\nabla \phi)^2 \, d^3 \vec{r} \quad (26)$$

$$F_2 = \int_V f(\phi) \, d^3 \vec{r}. \quad (27)$$

Da die Funktionalableitung linear ist, siehe [15], gilt

$$\frac{\delta F}{\delta \phi} = \frac{\kappa^2}{L^2} \frac{\delta F_1}{\delta \phi} + \frac{\delta F_2}{\delta \phi}. \quad (28)$$

Als nächstes wird die Funktionalableitung von F_1 gebildet:

$$\int_V \frac{\delta F_1(\phi)}{\delta \phi} \psi \, d^3 \vec{r} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{F_1[\phi(x) + h\psi(x)] - F_1[\phi(x)]}{h} \quad (29)$$

$$= \lim_{h \rightarrow 0} \int_V \frac{(\nabla[\phi + h\psi])^2 - (\nabla\phi)^2}{2h} \, d^3 \vec{r}. \quad (30)$$

$$= \lim_{h \rightarrow 0} \int_V \frac{(\nabla\phi + h\nabla\psi)^2 - (\nabla\phi)^2}{2h} \, d^3 \vec{r}. \quad (31)$$

$$= \lim_{h \rightarrow 0} \int_V \frac{(2h\nabla\phi \cdot \nabla\psi + h^2(\nabla\psi)^2)}{2h} \, d^3 \vec{r}. \quad (32)$$

$$= \lim_{h \rightarrow 0} \int_V \nabla\phi \cdot \nabla\psi + \frac{h}{2}(\nabla\psi)^2 \, d^3 \vec{r}. \quad (33)$$

$$= \int_V \nabla\phi \cdot \nabla\psi \, d^3 \vec{r}. \quad (34)$$

Mithilfe von mehrdimensionaler partieller Integration (nach Gleichung (71)) ergibt sich

$$\int_V \nabla\phi \cdot \nabla\psi \, d^3 \vec{r} = \int_{\partial V} \nabla\phi \cdot \psi \vec{n} \, d\vec{f} - \int_V \Delta\phi \cdot \psi \, d^3 \vec{r}. \quad (35)$$

Da nun das Integral über den Rand aufgrund periodischer Randbedingungen null ist, folgt

$$\int_V \frac{\delta F_1(\phi)}{\delta \phi} \psi \, d^3 \vec{r} = - \int_V \Delta\phi \cdot \psi \, d^3 \vec{r}. \quad (36)$$

Aufgrund eines Komponentenvergleichs folgt nun der Wert von der gesuchten Funktionalableitung

$$\frac{\delta F_1(\phi)}{\delta \phi} = -\Delta\phi. \quad (37)$$

Ein analoges Vorgehen für den zweiten Ableitungsterm bezüglich F_2 liefert

$$\frac{\delta F_2(\phi)}{\delta \phi} = \frac{\partial f(\phi)}{\partial \phi}, \quad (38)$$

sodass durch Einsetzen in die Gleichung (22) folgt

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot K(\phi) \vec{\nabla} \left(-\frac{\kappa^2}{L^2} \Delta\phi + a\phi + \phi^3 \right). \quad (39)$$

Vereinfacht man die drei Dimensionen auf eine und setzt $K(\phi) = \frac{1}{L^2}$, so folgt die bereits genannte Cahn-Hilliard-Gleichung (siehe Gleichung (7))

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{1}{L^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(-\frac{\kappa^2}{L^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + a\phi + \phi^3 \right).$$

3.3 Vergrößerungen

Eine besondere Eigenschaft der Cahn-Hilliard-Gleichung ist das Auftreten von Vergrößerungen (engl. coarsening). Eine Erklärung dieser charakteristischen Eigenschaft ist anhand eines Bifurkationsdiagramm in Abbildung 6 möglich.

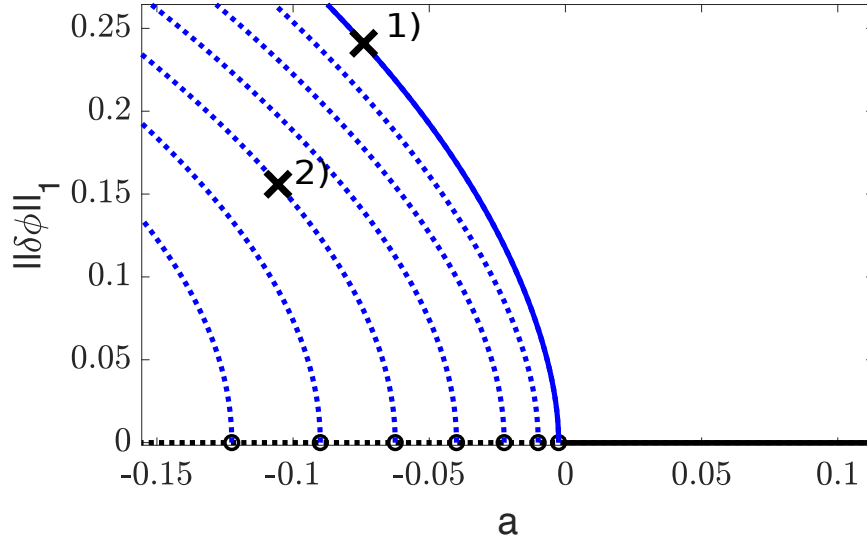


Abbildung 6: Bifurkationsdiagramm der Cahn-Hilliard-Gleichung mit a -Kontinuierung und Neumann-Randbedingungen. Dargestellt ist dabei das Bifurkationsdiagramm der Gleichung (7) mit $L = 2\pi$, $\kappa = 0.2$, $\delta = 0.0$ und Anfangslösung $\phi_0 = 0.0$.

In dieser Abbildung 6 erkennt man beispielhaft ein Bifurkationsdiagramm der Cahn-Hilliard-Gleichung. Die homogene Lösung, in schwarz dargestellt, ist bei hohem Parameter a stabil, während bei Temperaturerniedrigung ein Bifurkationspunkt auftritt und die homogene Lösung an Stabilität verliert. Auf den einzelnen Zweigen (blau) ausgehend vom homogenen Zweig (schwarz) befinden sich periodische Lösungen. Die einzelnen blauen Zweige unterscheiden sich dabei in der Anzahl an vorhanden Perioden in der stationären Lösung. In der folgenden Abbildung 7 erkennt man beispielhaft die stationären Lösungen an den mit einem Kreuz gekennzeichneten Positionen im Bifurkationsdiagramm (siehe Abbildung 6).

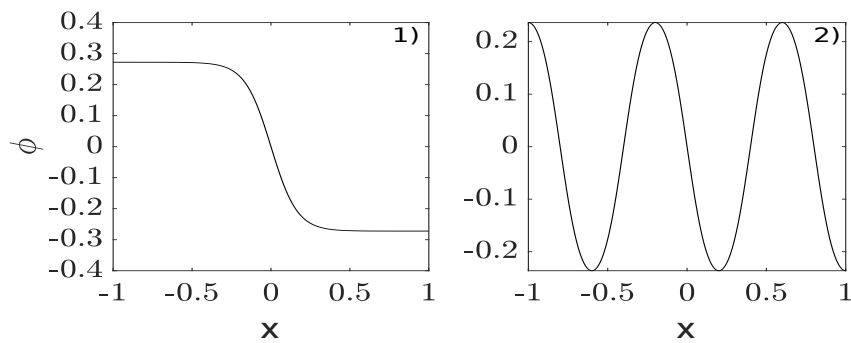


Abbildung 7: Lösungsprofile von der Cahn-Hilliard-Gleichung mit a -Kontinuierung und Neumann-Randbedingungen. Links erkennt man eine stabile Lösung auf dem Ast der ersten Bifurkation und rechts erkennt man eine instabile Lösung auf dem fünften Zweig. Zur Bestimmung wurde dabei Gleichung (7) mit $L = 2\pi$, $\kappa = 0.2$, $\delta = 0.0$ und Anfangslösung $\phi_0 = 0.0$ verwendet.

Man erkennt in dieser Abbildung 7 zwei stationäre Lösungen der Cahn-Hilliard-Gleichung. Links erkennt man eine Funktion, welche einem nach einer halben Periode abgebrochenen Sinus ähnlich sieht. Physikalisch stellt diese Lösung die Phasenseparation des Gemisches aus zwei Flüssigkeiten mit einer Grenzfläche bei $x = 0$ dar. Auf der rechten Seite der Abbildung 7 erkennt man eine periodische Abfolge der Flüssigkeiten. Aufgrund der vielen Grenzflächen ist diese Lösung allerdings nicht stabil. Ein solches Verhalten ist typisch für die Cahn-Hilliard-Gleichung, was im folgenden Abschnitt zusammenfassend dargestellt wird.

Die Kontinuierung wird begonnen bei einer homogenen stabilen Anfangslösung in der Abbildung 6 erkennbar als schwarze durchgezogene Linie. Erniedrigt man allerdings die Temperatur, so wird dieser homogene Zustand immer weniger stabil, bis er am ersten Bifurkationspunkt knapp unterhalb von null an Stabilität verliert (schwarze gestrichelte Linie). Stattdessen nimmt der Zustand mit zwei separierten Phasen (blau durchgezogene Linie) Stabilität an. Charakteristisch für die Vergrößerung ist, dass dieser Zustand stabil ist auch bei weiterer Erniedrigung der Temperatur. Es kommt niemals dazu, dass ein anderer periodischer Zustand auf den anderen Ästen an Stabilität gewinnt, sodass das System niemals diesen Zustand annimmt.

Von Interesse in dieser Arbeit ist nun, ob es in dem Modell von zwei gekoppelten Feldern zu einem Gesamtsystem beobachtbar ist, dass diese charakteristische Eigenschaft des Vergrößerns in dem Modell gekoppelter Systeme unterdrückt wird.

3.4 Gekoppelte Cahn-Hilliard-Gleichungen

Im Rahmen dieser Arbeit wird ein gekoppeltes System aus zwei einzelnen Cahn-Hilliard-Gleichungen untersucht, welches beispielsweise dazu dienen kann, zwei binäre, in Wechselwirkung stehende Flüssigkeiten zu beschreiben. Diese Kopplung wird hier auf zwei verschiedene Weisen eingeführt werden, welche in einen Gradientendynamik erhaltenden Fall und einem Gradientendynamik brechenden Fall aufgeteilt werden. Die erhaltende Gradientendynamik ist dadurch gekennzeichnet, dass die Kopplung so gegeben ist, dass eine freie Energie definiert werden kann. Das Modell lässt sich schreiben als

$$\begin{aligned} 1) \quad & \frac{\partial}{\partial t} \phi_1 = K_1 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \frac{\delta F}{\delta \phi_1} \\ 2) \quad & \frac{\partial}{\partial t} \phi_2 = K_2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \frac{\delta F}{\delta \phi_2} \end{aligned} \tag{40}$$

mit der freien Energie

$$F = \int \frac{\kappa_1}{2} (\nabla \phi_1)^2 + f(\phi_1) + \frac{\kappa_2}{2} (\nabla \phi_2)^2 + f(\phi_2) + G(\phi_1, \phi_2) \, dx . \tag{41}$$

Die freie Energie enthält Terme der beiden ungekoppelten Cahn-Hilliard-Felder ϕ_1 und ϕ_2 , sowie einen Kopplungsterm, für den die mathematisch einfachste mögliche und symmetrische Form

$$G(\phi_1, \phi_2) = \alpha \phi_1 \phi_2 \tag{42}$$

mit Kopplungsstärke α gewählt wird. Das Auswerten, der in Gleichung 40 auftretende Funktio-

nalableitungen, ergibt

$$\begin{aligned} 1) \quad & \frac{\partial}{\partial t} \phi_1 = K_1 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(-\kappa_1 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi_1 + a_1 \phi_1 + b_1 \phi_1^3 - \alpha \phi_2 \right) \\ 2) \quad & \frac{\partial}{\partial t} \phi_2 = K_2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(-\kappa_2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi_2 + a_2 \phi_2 + b_2 \phi_2^3 - \alpha \phi_1 \right), \end{aligned} \quad (43)$$

wie im vorherigen Abschnitt dargelegt. Alle Größen im gekoppelten Modell (Gleichung (43)) sind als dimensionsbehaftete Größen zu verstehen. Um die Lösungsstruktur des Modells in Abhängigkeit der effektiven Parameter zu analysieren, kann eine Entdimensionalisierung beider Felder, das heißt $\phi_1 = \hat{\phi}_1 \tilde{\phi}_1$ und $\phi_2 = \hat{\phi}_2 \tilde{\phi}_2$, sowie der Variablen $t = \tau \tilde{t}$ und $x = L \tilde{x}$ durchgeführt werden. Dann kann das entdimensionalisierte Modell geschrieben werden als

$$\begin{aligned} 1) \quad & \frac{\partial}{\partial \tilde{t}} \tilde{\phi}_1 = \frac{1}{L^2} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} \left(-\frac{\tilde{\kappa}_1}{L^2} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} \tilde{\phi}_1 + \tilde{a} \tilde{\phi}_1 + \tilde{\phi}_1^3 - \tilde{\alpha} \tilde{\phi}_2 \right) \\ 2) \quad & \frac{\partial}{\partial \tilde{t}} \tilde{\phi}_2 = \frac{Q}{L^2} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} \left(-\frac{\tilde{\kappa}_2}{L^2} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} \tilde{\phi}_2 + (\tilde{a} + \Delta T_c) \tilde{\phi}_2 + \tilde{\phi}_2^3 - \tilde{\alpha} \tilde{\phi}_1 \right), \end{aligned} \quad (44)$$

mit $Q = \frac{K_2}{K_1} \sqrt{\frac{b_2}{b_1}}$, $\tilde{a} = a_1 \left(\frac{b_2}{b_1} \right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\hat{\alpha}}$, $\tilde{a} + T_c = a_2 \left(\frac{b_1}{b_2} \right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\hat{\alpha}}$, $\tilde{\kappa}_1 = \frac{\kappa_1}{\hat{\alpha}} \left(\frac{b_2}{b_1} \right)^{\frac{1}{4}}$, $\tilde{\kappa}_2 = \frac{\kappa_2}{\hat{\alpha}} \left(\frac{b_1}{b_2} \right)^{\frac{1}{4}}$ und $\alpha = \hat{\alpha} \tilde{\alpha}$, wobei die Zeitskala $\tau = (K_1 \hat{\alpha})^{-1} \left(\frac{b_1}{b_2} \right)^{-\frac{1}{4}}$, sowie $\hat{\phi}_1 = (b_1^3 b_2)^{-\frac{1}{8}} \sqrt{\hat{\alpha}}$ und $\hat{\phi}_2 = (b_2^3 b_1)^{-\frac{1}{8}} \sqrt{\hat{\alpha}}$ verwendet wurden.

In allen folgenden Analysen dieses Modells werden stationäre Zustände betrachtet. Daher entfallen die zeitlichen Ableitungen in Gleichung (44) und durch passende Multiplikation kann man ein System aus symmetrischen gewöhnlichen Differentialgleichungen zur Bestimmung der stationären Zustände erhalten:

$$\begin{aligned} 1) \quad & 0 = \frac{1}{L_1^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(-\frac{\kappa^2}{L_1^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi_1 + a \phi_1 + \phi_1^3 - \alpha \phi_2 \right) \\ 2) \quad & 0 = \frac{1}{L_2^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(-\frac{\kappa^2}{L_2^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi_2 + (a + \Delta T_c) \phi_2 + \phi_2^3 - \alpha \phi_1 \right), \end{aligned} \quad (45)$$

wobei $\kappa = \sqrt{\kappa_1}$, $L_2 = \sqrt{\frac{\kappa_1}{\kappa_2}}$ und $L_1 = L$ definiert wurden und alle „ $\sim$ “ weggelassen wurden.

Bei der Wahl der Form der Parameter ist anzumerken, dass anstelle einer Unterscheidung in a_1 und a_2 eine Aufteilung in a und $a + \Delta T_c$ getätigt wird. Das liegt daran, dass der Parameter a eine Temperaturabhängigkeit darstellt und diese sich wohl möglich in beiden betrachteten Feldern gleichmäßig ändert. Da die Felder im Allgemeinen jedoch einen unterschiedlichen, temperaturunabhängigen Teil des Parameters des linearen Terms besitzen, wird in die zweite Gleichung eine kritische Temperaturdifferenz $\Delta T_c = T_{c1} - T_{c2}$ hinzuaddiert.

Der Fall der gebrochenen Gradientendynamik ist dadurch gekennzeichnet, dass keine allgemeine freie Energie für beide Gleichungen definiert werden kann. Es existiert also keine Funktion G , sodass die obige Eigenschaft in Gleichung (40) erfüllt ist. Im Rahmen dieser Arbeit wird ein Parameter ε eingeführt, der für $\varepsilon \neq 0$ die Gradientendynamik des gekoppelten Systems bricht. Dieser kann langsam erhöht werden, um die Gradientendynamik immer stärker zu brechen. Es wird ein

asymmetrischer Einfluss von ε in der Kopplungsstärke der beiden Felder gewählt. So lautet das gewöhnliche Differentialgleichungssystem für stationäre Lösungen der gebrochenen Gradientendynamik

$$\begin{aligned} 1) \quad 0 &= \frac{1}{L_1^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(-\frac{\kappa^2}{L_1^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi_1 + a\phi_1 + \phi_1^3 - (\alpha + \varepsilon)\phi_2 \right) \\ 2) \quad 0 &= \frac{1}{L_2^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(-\frac{\kappa^2}{L_2^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi_2 + (a + \Delta T_c)\phi_2 + \phi_2^3 - (\alpha - \varepsilon)\phi_1 \right). \end{aligned} \quad (46)$$

Alle folgenden Angaben von Parameterwerten im gekoppelten Modell beziehen sich auf Gleichung 45 im Fall der erhaltenen Gradientendynamik und auf Gleichung 46 im Fall der gebrochenen Gradientendynamik.

4 Methoden

In diesem Abschnitt werden die zur Untersuchung des gekoppelten Cahn-Hilliard-Modells notwendigen Methoden erläutert werden. Abschließend wird auch das Vorgehen bei der Bestimmung der Ergebnisse dargestellt.

4.1 Lineare Stabilitätsanalyse

Die nachfolgende Erläuterung der linearen Stabilitätsanalyse erfolgt nach [7]. Bei der linearen Stabilitätsanalyse wird die Auswirkung einer kleinen Störung $\delta\vec{x}(t)$ auf den Fixpunkt $\vec{x}_f$ betrachtet

$$\vec{x} = \vec{x}_f + \delta\vec{x}. \quad (47)$$

Dieser Ansatz wird in die gewöhnliche Differentialgleichung, siehe Gleichung (3), eingesetzt und für kleine Störungen linearisiert

$$\frac{d\vec{x}_f}{dt} + \frac{d\delta\vec{x}}{dt} = \vec{F}(\vec{x}_f, \mu) + \frac{d\vec{F}(\vec{x}_f, \mu)}{d\vec{x}} \cdot \delta\vec{x} + O(|\delta\vec{x}|^2), \quad (48)$$

wobei $\frac{d\vec{x}_f}{dt} = \vec{F}(\vec{x}_f, \mu) = 0$ ist, da $\vec{x}_f$ ein Fixpunkt ist. Vernachlässigt man noch die nichtlinearen Terme in $\delta\vec{x}$, so ergibt sich:

$$\frac{d\delta\vec{x}}{dt} = \frac{d\vec{F}(\vec{x}_f, \mu)}{d\vec{x}} \cdot \delta\vec{x}. \quad (49)$$

Dabei stellt $\frac{d\vec{F}(\vec{x}_f, \mu)}{d\vec{x}}$ die Jacobi-Matrix

$$\frac{d\vec{F}(\vec{x}_f, \mu)}{d\vec{x}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial x_1} & \frac{\partial F_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial F_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial F_2}{\partial x_1} & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial F_n}{\partial x_1} & \dots & \dots & \frac{\partial F_n}{\partial x_n} \end{pmatrix}_{(\vec{x}=\vec{x}_f)} \quad (50)$$

dar.

An dieser Stelle wird folgender Ansatz

$$\delta \vec{x}(t) = \vec{u} \cdot e^{\lambda t} \quad (51)$$

verwendet. Hiermit ergibt sich durch Einsetzen in Gleichung (49) eine Eigenwertgleichung

$$\frac{d\vec{F}(\vec{x}_f, \mu)}{d\vec{x}} \cdot \vec{u} \cdot e^{\lambda t} = \lambda \cdot \vec{u} \cdot e^{\lambda t} \quad (52)$$

mithilfe derer sich die Eigenwerte λ_i und die zugehörigen Eigenfunktionen $\vec{u}_i$ für den zu untersuchenden Fixpunkt bestimmt werden können. An dieser Stelle bemerkt man mit Vergleich mit dem Ansatz in Gleichung (51), dass im eindimensionalen Fall nun das Vorzeichen von λ über die Stabilität der Fixpunktes unter Störung entscheidet: Nach Gleichung (47) gilt nämlich

$$x = x_f + u \cdot e^{\lambda t}. \quad (53)$$

Ist $\lambda < 0$, so klingt die Störung δx über die Zeit bis $x = x_f$ ab, sodass der Fixpunkt stabil gegenüber kleinen Störungen ist. Für $\lambda > 0$ nimmt die Störung δx über die Zeit zu und der Fixpunkt ist instabil gegenüber Störungen. In dem Fall $\lambda = 0$ ist das System marginal stabil, das heißt, dass die in Gleichung (48) vernachlässigten nichtlineare Terme über die Stabilität des Systems entscheiden. Hat λ einen Imaginärteil, so erzeugt dieser nur eine Oszillation und ist somit irrelevant für die Stabilität der Lösung.

Im mehrdimensionalen Fall existieren Eigenwerte $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$, welche die Stabilität beeinflussen. Die allgemeine Lösung ist eine Linearkombination

$$\delta \vec{x} = \sum_{i=1}^n c_i \cdot \vec{u}_i \cdot e^{\lambda_i t}, \quad (54)$$

sodass der Fixpunkt nur stabil ist, wenn es bezüglich aller Eigenfunktionen $\vec{u}_i$ stabil ist.

Mithilfe der linearen Stabilitätsanalyse kann nun auch die Stabilität der Lösungen beim gedämpften Stabpendel begründet werden, welches anschaulich im Abschnitt „2.2 Stationäre Zustände und ihre Stabilität“ dargestellt wurde. Im eindimensionalen Fall der linearen Stabilitätsanalyse gilt:

$$\lambda = \frac{dF(x_f)}{dx} \stackrel{\text{Gl. (16)}}{=} -\frac{g}{l} \cos(\theta) \quad (55)$$

Durch Einsetzen der Fixpunkte ergibt sich für x_1 , dass $\lambda = -\frac{g}{l}$ ist und der Fixpunkt stabil ist und für x_2 , dass $\lambda = +\frac{g}{l}$ und somit der Fixpunkt instabil ist, was zu der anschaulich sinnvollen Stabilität im Beispiel oben passt.

Analog ist das Vorgehen bei der linearen Stabilitätsanalyse, wenn eine partielle Differentialgleichung betrachtet wird. Es wird analog ein Störansatz für die stationäre Lösung gemacht, dieser in die partielle Differentialgleichung eingesetzt, für kleinamplitudige Störungen genähert und Terme nichtlinearer Ordnung vernachlässigt. Um Umformung in eine Eigenwertgleichung durchzuführen, wird analog ein Ansatz für die Störung getätigt. Dieser zerlegt die zeit- und ortsabhängige Stör-

funktion in ein Produkt aus zeitabhängigen exponentiellen Verhalten mit Rate λ und räumliche Schwingungen mit Wellenzahl k .

Es kann so eine Eigenwertgleichung aufgestellt werden und eine Dispersionsrelation $\lambda(k)$ bestimmt werden. Diese Dispersionsrelation gibt nun die Stabilität der stationären Lösung an: Ist beispielsweise $\lambda < 0$ für alle k , so ist die stationäre Lösung stabil. Existiert allerdings ein k_c , sodass $\lambda(k_c) > 0$ ist, so folgt Instabilität bezüglich der Störung mit dieser kritischen Wellenzahl (vgl. [9]).

4.2 Numerische Kontinuierung

Das Ziel der Kontinuierung ist es eine stationäre Lösung einer partiellen Differentialgleichung im Phasenraum unter Variation eines Kontrollparameters zu verfolgen. Dabei kann die Stabilität der Lösungen untersucht werden. Außerdem ist es möglich an Bifurkationspunkten neue Lösungen zu finden und diese weiterzuverfolgen. Im Folgenden wird die Kontinuierung in ihren Grundzügen, bestehend aus zwei Schritten, erläutert und ist in der folgenden Abbildung 8 illustriert.

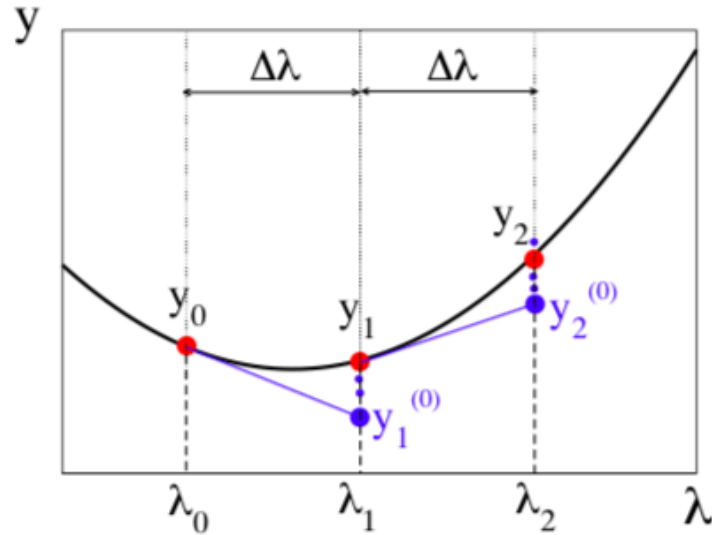


Abbildung 8: In dieser Skizze der Funktionsweise der Kontinuierung erkennt man die stationäre Lösung y dargestellt im Phasenraum. Diese wird numerisch an den Parametern λ_i mit $i \in \mathbb{N}_0$ bestimmt [16].

In dieser Abbildung 8 erkennt man die stationäre Lösung y dargestellt im Phasenraum. Zur Vereinfachung ist die eindimensionale Ordinate aufgetragen gegen den Kontrollparameter λ . Die Lösung soll an den Stellen λ_i mit $i \in \mathbb{N}_0$ und Abstand $\Delta\lambda$ numerisch approximiert werden. Diese Punkte der stationären Lösung werden mit y_i mit $i \in \mathbb{N}_0$ bezeichnet. Begonnen wird mit einer bekannten Lösung y_0 , welche beispielsweise mathematisch errechnet wurde. Im ersten Schritt wird ein Prädiktionsschritt $y_1^{(0)}$ für die stationäre Lösung y_1 bei λ_1 gefunden. Dafür wird die Tangente der stationären Lösung im Phasenraum an dem Punkt y_0 gebildet und der Funktionswert der Tangente an der Stelle λ_1 bildet diesen Wert $y_1^{(0)}$. Im zweiten Schritt wird mithilfe des Newtonverfahrens über mehrere Iterationen die stationäre Lösung y_1 bis zu einer Abbruchgenauigkeit bestimmt. Um weitere Punkte zu erhalten, geht man analog vor: Zunächst bestimmt man einen Startwert über die Tangente und als nächstes berechnet man daraus die Lösung über das Newtonverfahren (vgl.

[16]). Im Folgenden wird das genaue Vorgehen anhand einer gewöhnlichen Differentialgleichung erläutert.

Bei dem Newtonverfahren handelt es sich um eine Methode, bei der die Nullstellen einer Funktion numerisch bestimmt werden können. Dieses Verfahren kann verwendet werden zur Bestimmung von Fixpunkten, da eine autonome gewöhnliche Differentialgleichung mit Kontrollparameter λ nach Gleichung (3) gegeben ist durch

$$\frac{\partial \vec{y}}{\partial t} = \vec{G}(\vec{y}, \lambda)$$

und für Fixpunkte gilt dann nach Gleichung (4)

$$\vec{G}(\vec{y}, \lambda) = 0.$$

Demnach kann eine Methode zur Bestimmung von Nullstellen der Funktion $\vec{G}(\vec{y}, \lambda)$, wie das Newtonverfahren, verwendet werden, um Fixpunkte zu finden. Um die Nullstellen einer eindimensionalen Funktion $f(x)$ zu approximieren, wird beim Newtonverfahren wie folgt vorgegangen (vgl. [17]): Man wählt einen Startwert x_0 mit $f'(x_0) \neq 0$ und berechne die Schnittstelle x_1 der Tangente an x_0 mit der x -Achse. Dann ist $x_1 = x_0 + \Delta x$ mit irgendeinem noch unbekannten Abstand Δx . Um diesen zu berechnen, wird eine Taylorentwicklung von $f(x_0 + \Delta x)$ vorgenommen

$$f(x_1) = f(x_0 + \Delta x) \approx f(x_0) + f'(x_0) \cdot \Delta x \stackrel{!}{=} 0 \quad (56)$$

und diese anschließend gleich null gesetzt, da ja eine Nullstelle gesucht ist. Stellt man diese Formel nun nach dem unbekannten Abstand δx um, erhält man

$$\Delta x = -\frac{f(x_0)}{f'(x_0)}. \quad (57)$$

Es folgt insgesamt eine iterative Formel zur Bestimmung der Nullstelle der Funktion f :

$$x_i = x_{i-1} - \frac{f(x_{i-1})}{f'(x_{i-1})} \quad \Leftrightarrow \quad f'(x_{i-1}) \cdot \Delta x_i = f(x_{i-1}), \quad (58)$$

wobei $\Delta x_i = x_i - x_{i-1}$ ist (vergleiche [17]). Zur Bestimmung der Fixpunkte wird nun das mehrdimensionale Äquivalent des Newtonverfahrens verwendet. Dabei gilt

$$\vec{G}_{\vec{y}}(\vec{y}^{(i)}, \lambda) \cdot \Delta \vec{y}^{(i)} = \vec{G}(\vec{y}^{(i)}, \lambda), \quad (59)$$

wobei $\vec{G}_{\vec{y}}(\vec{y}^{(i)}, \lambda)$ die Jacobimatrix von $\vec{G}$

$$\vec{G}_{\vec{y}}(\vec{y}^{(i)}, \lambda) = \begin{pmatrix} \frac{\partial G_1}{\partial y_1} & \frac{\partial G_1}{\partial y_2} & \dots & \frac{\partial G_1}{\partial y_n} \\ \frac{\partial G_2}{\partial y_1} & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial G_n}{\partial y_1} & \dots & \dots & \frac{\partial G_n}{\partial y_n} \end{pmatrix} \quad (60)$$

darstellt (vgl. [16]).

Anhand des Newtonverfahrens ist es nun möglich, von einem bestimmten Startwert auf einen Fixpunkt für festen Parameter λ_1 zu schließen. Im nächsten Schritt soll allerdings der Kontrollparameter erhöht werden und bei diesem neuen Parameter $\lambda_2 = \lambda_1 + \Delta\lambda$ ein Fixpunkt bestimmt werden. Dafür muss die Tangentenrichtung $\frac{\partial \vec{y}}{\partial \lambda}$ bestimmt werden: Man bildet die partielle Ableitung nach λ unter Berücksichtigung der Kettenregel von der Funktion $\vec{G}(\vec{y}, \lambda)$. Dann gilt:

$$\frac{\partial \vec{G}}{\partial \vec{y}} \cdot \frac{\partial \vec{y}}{\partial \lambda} + \frac{\partial \vec{G}}{\partial \lambda} = 0, \quad (61)$$

wobei nach Gleichung (60) $\frac{\partial \vec{G}}{\partial \vec{y}}$ die Jacobimatrix darstellt. Das so erhaltene Gleichungssystem

$$\vec{G}_{\vec{y}} \cdot \frac{\partial \vec{y}}{\partial \lambda} = -\frac{\partial \vec{G}}{\partial \lambda} \quad (62)$$

kann nun zur Bestimmung der gesuchten Tangentensteigung $\frac{\partial \vec{y}}{\partial \lambda}$ genutzt werden. Daraus kann man den Startwert $y_{j+1}^{(0)}$ ausgehend von y_j allgemein über

$$y_{j+1}^{(0)} = y_j + \Delta\lambda \cdot \frac{\partial \vec{y}}{\partial \lambda}. \quad (63)$$

bestimmen (vgl. [16]).

4.3 Finite Elemente Methode und schwache Formulierung

Die Implementierung der Modellgleichungen erfolgt mittels der finiten Elemente Methode, die die schwache Formulierung der Differentialgleichung verwendet. Die in der Differentialgleichung betrachtete Funktion $\phi(x, t)$ ist auf einem Gebiet Ω definiert. Diese Domäne Ω wird nun in Teilmengen aufgeteilt $\Omega_1, \Omega_2, \dots, \Omega_N \subset \Omega$, welche als finite Elemente bezeichnet werden (vgl. [10]). Im Eindimensionalen kann man sich diesen Prozess als Bildung eines Gitters veranschaulichen. Als nächstes werden Testfunktionen $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$ definiert, welche nur auf einem Gitterpunkt ungleich null sind. Ein Beispiel für solche Testfunktionen sind im Eindimensionalen „Dreiecksfunktionen“, welche in der folgenden Abbildung 9 dargestellt ist.

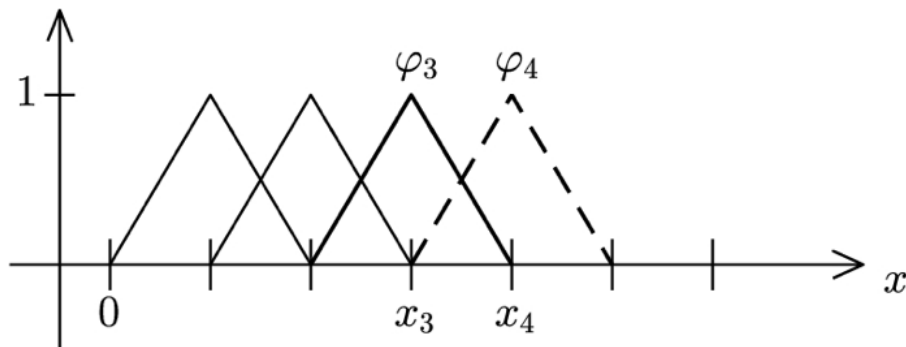


Abbildung 9: In dieser Skizze einer möglichen Testfunktion mit $\psi_j = \varphi_j$ [10].

Die zu untersuchende Funktion $\phi(x)$ wird nun in finite Elemente entwickelt: Die Funktion $\phi(x)$ ergibt sich dabei als Linearkombination aus Testfunktionen

$$\tilde{\phi} = \sum_j c_j \cdot \psi_j, \quad (64)$$

wobei die Koeffizienten gleich dem Wert der Funktion auf den Gitterpunkten ist, also $c_j = \phi_j$ gilt, wenn ψ_j normiert auf dem betrachteten Gitterpunkt ist.

Ableitungen werden nun mithilfe der schwachen Ableitung definiert. Mithilfe dieses Formalismus ist es auch möglich Funktionen eine Ableitung zuzuordnen, welche nicht stetig differenzierbar sind: Für eine Funktion ϕ auf einem abgeschlossenen Intervall $I = [a, b]$ und einer stetig differenzierbaren Testfunktion ψ auf einem kompakten Intervall gilt nach [10]

$$\int_I \frac{\partial \phi(x)}{\partial x} \cdot \psi(x) \, dx = - \int_I \phi(x) \cdot \psi'(x) \, dx. \quad (65)$$

Damit diese Bedingung gilt, werden hier periodische Randbedingungen verwendet, sodass der eine Summand der partiellen Integration wegfällt. Was das genau bedeutet, ist an einem Beispiel weiter unten zu erkennen. Eine gleiche Auswirkung hätten auch Neumann-Randbedingungen.

Da dieser Formalismus nun auf die finite Elemente angewandt werden muss, existieren Matrizen, welche diese Ableitungen darstellen. Dies stellt den Vorteil dieser Formulierung dar. Die Matrizen sind spezifisch für die untersuchte Differentialgleichung. Als Massenmatrix M wird diejenige Matrix bezeichnet, welche die Funktion ϕ auf finite Elemente entwickelt. K_x entwickelt auf Elemente und bildet die erste Ableitung. Die Steifheitsmatrix K entwickelt auch auf Elemente und bildet die zweite Ableitung (vgl. [10]).

Im folgenden Abschnitt wird anhand der K -Matrix gezeigt, wie diese die zweite Ableitung unter Verwendung periodischer Randbedingungen darstellt. Die Komponenten der K -Matrix sind gegeben über

$$K_{i,j} = \int \frac{\partial \psi_i}{\partial x} \cdot \frac{\partial \psi_j}{\partial x} \, dx \quad (66)$$

[10], sodass dann für den gesuchten Ausdruck gilt

$$(K \cdot \phi)_i = \int \frac{\partial \psi_i}{\partial x} \cdot \sum_j \frac{\partial \psi_j}{\partial x} \cdot \phi_j \, dx \quad (67)$$

$$= \int \frac{\partial \psi_i}{\partial x} \cdot \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x} \, dx. \quad (68)$$

Hierbei wurde verwendet, dass ϕ in der Basis $\psi_n(x)$ mit $n \in \{1, 2, \dots, N\}$ entwickelt wurde

$$\tilde{\phi} = \sum_j \phi_j \cdot \psi_j \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x} = \sum_j \phi_j \cdot \frac{\partial \psi_j}{\partial x}. \quad (69)$$

Um diesen Term weiter zu vereinfachen, muss im Allgemeinen mehrdimensionale partielle In-

egration durchgeführt werden. In einer Dimension gilt: Ist $\Omega = [a, b]$ ein Intervall und sind $f, g : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ stetig differenzierbare Funktionen, dann gilt für den Rand von dem betrachteten Intervall $\partial\Omega = \{a, b\}$ und es folgt

$$\int_{\Omega} f(x) \cdot \frac{\partial g(x)}{\partial x} dx = [f(x) \cdot g(x)]_{\partial\Omega} - \int_{\Omega} \frac{\partial f(x)}{\partial x} \cdot g(x) dx \quad (70)$$

[18]. Im Mehrdimensionalen gibt es eine analoge Regel: Betrachtet man eine Teilmenge $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ mit Rand $\partial\Omega$ und Orientierung in normierter $\vec{n}$ -Richtung, sowie ein stetig differenzierbares Vektorfeld $\vec{f}$ und ein stetig differenzierbares Skalarfeld g , dann gilt

$$\int_{\Omega} \vec{f}(\vec{x}) \cdot \vec{\nabla} g(\vec{x}) d\vec{x} = \int_{\partial\Omega} \vec{f}(\vec{x}) \cdot g(\vec{x}) \cdot \vec{n} df - \int_{\Omega} \vec{\nabla} \vec{f}(\vec{x}) \cdot g(\vec{x}) d\vec{x}. \quad (71)$$

[19]. Verwendet man nun die partielle Integration nach Gleichung (70) beziehungsweise im mehrdimensionalen Fall Gleichung (71) in Gleichung (68), dann gilt

$$(K \cdot \phi)_i = \int_{\Omega} \frac{\partial \psi_i}{\partial x} \cdot \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x} dx \quad (72)$$

$$= \int_{\partial\Omega} \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x} \cdot \psi_i \cdot \vec{n} df - \int_{\Omega} \frac{\partial^2 \tilde{\phi}}{\partial x^2} \cdot \psi_i dx \quad (73)$$

$$= - \int_{\Omega} \frac{\partial^2 \tilde{\phi}}{\partial x^2} \cdot \psi_i dx, \quad (74)$$

wobei die letzte Zeile aufgrund der periodischen Randbedingungen folgt.

Mithilfe der finiten Elemente Methode und der schwachen Formulierung ist es nun möglich Ersetzungsregeln für die Ableitungen in den Differentialgleichungen zu formulieren. Möchte man eine Funktion $f(\phi)$ auf Elemente entwickeln, so kann dies durch $M \cdot f(\phi)$ getätigt werden. Die erste beziehungsweise zweite Ableitung auf Elementen kann analog durch

$$\frac{\partial}{\partial x} \phi \Rightarrow K_x \phi \quad (75)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi \Rightarrow -K \phi \quad (76)$$

dargestellt werden.

4.4 Nebenbedingungen

Bei Nebenbedingungen handelt es sich um eine Gleichung, die zusätzlich zu der betrachteten Differentialgleichung erfüllt sein muss. Dabei handelt es sich streng genommen auch um Anfangs- und Randbedingungen, da diese auch eine Bedingung anhand einer Gleichung zusätzlich zur Differentialgleichung darstellen (siehe Abschnitt „2.1.1 Randbedingungen“).

Wie bereits oben erwähnt, werden zur Untersuchung des gekoppelten Cahn-Hilliard-Modells periodische Randbedingungen verwendet. Demnach ist der Funktionswert am Rand der Domäne im-

mer der Gleiche. Der Grund für die Verwendung von periodischen Randbedingungen liegt darin, dass aufgrund von nichtlinearen Effekten bei der Auswertung des partiellen Differentialgleichungssystems die Lösung zunehmend steiler wird. Dies ist beispielhaft in der folgenden Abbildung 10 dargestellt.

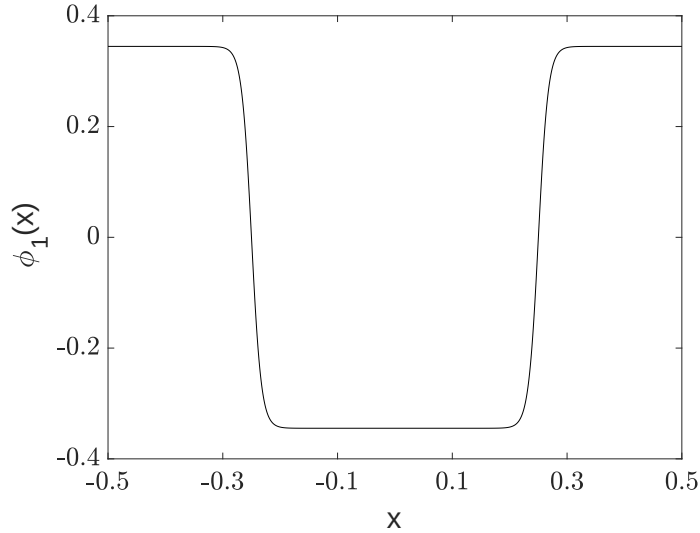


Abbildung 10: Beispiel eines Lösungsprofils hier auf dem Zweig ausgehend von der zweiten Bifurkation von dem gekoppelten Cahn-Hilliard-Modell im Gradientendynamik erhaltenden Fall mit a_1 -Kontinuierung und Neumann-Randbedingungen.

Der steile Anstieg in der Lösung, welcher in der Abbildung 10 erkennbar ist, ist problematisch bei numerischen Fehlern aufgrund der computergestützten Berechnung der Lösung. So kann sich der Ort des Anstiegs um ein kleines Stück δx verschieben, sodass eine neue verschobene Lösung $\tilde{u}(x) = u(x + \delta x)$ erkannt wird und demnach auch ein Bifurkationspunkt, obwohl tatsächlich die selbe Lösung mit dem selben Eigenwert beobachtet wurde. Periodische Randbedingungen, sowie die Einführung einer Nebenbedingung verhindern das Auftreten dieser Problematik. Wie diese Nebenbedingung aussehen muss, wird im folgenden Abschnitt dargestellt.

Mithilfe von einer Nebenbedingung soll das Auffinden einer neuen Lösung aufgrund von numerischen Fehlern verhindert werden. Bei dieser neuen Lösung $\tilde{u}(x) = u(x + \delta x)$ handelt es sich um eine Verschiebung der alten Lösung $u(x)$ um ein kleines Stück $\delta x \ll 1$. Um nun eine Bedingung herzuleiten, damit diese Erkennung als solche nicht auftritt, muss zunächst die Taylorreihe für die Näherung $\delta x \ll 1$ gebildet werden.

$$u(x + \delta x) \approx u(x) + \frac{\partial u}{\partial x} \cdot (x + \delta x - x) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \cdot (x + \delta x - x)^2 \quad (77)$$

Vereinfacht man diese Gleichung (77) und vernachlässigt nichtlineare Ordnungen in x , so erhält man

$$u(x + \delta x) \approx u(x) + \frac{\partial u}{\partial x} \cdot \delta x, \quad (78)$$

was äquivalent ist zu

$$u(x + \delta x) - u(x) = \frac{\partial u}{\partial x} \cdot \delta x. \quad (79)$$

Diese Gleichung (79) besagt, dass die Differenz aus neuer und alter Lösung Δu proportional ist zur örtlichen Ableitung der alten Lösung $\frac{\partial u}{\partial x}$. Um die Erkennung als neue Lösung zu verhindern, darf also diese Proportionalität nicht vorhanden sein. Dies verhindert man mithilfe der folgenden Nebenbedingung:

$$\Delta u \cdot \frac{\partial u}{\partial x} \stackrel{!}{=} 0. \quad (80)$$

Diese Bedingung kommt daher, dass Nichtproportionalität im Funktionenraum bedeutet, dass beide Funktionen orthogonal zueinander sind und demnach das Skalarprodukt zwischen beiden Funktionen null sein muss. Mithilfe dieser Nebenbedingung ist es demnach möglich, das Auffinden von Lösungen aufgrund numerischer Fehler zu unterdrücken. Außerdem kann diese Nebenbedingung verwendet werden, um stationären Lösungen eine Geschwindigkeit v zuzuordnen (siehe Gleichung (88)). So können bewegte stationäre Lösungen von den unbewegten unterschieden werden.

Eine weitere Nebenbedingung, unter welcher das gekoppelte System betrachtet wird, ist die Bedingung der Massenerhaltung: Die Cahn-Hilliard-Gleichung, dargestellt in Gleichung (7)

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{1}{L^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(-\frac{\kappa^2}{L^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + a\phi + \phi^3 \right),$$

hat stationäre Lösungen bei $\phi = c$ wobei $c \in \mathbb{R}$ aufgrund der mindestens zweifachen partiellen örtlichen Ableitung vor jedem Term. Das Ziel ist es nun, eine Lösung $\phi = 0$ mithilfe von Kontinuierung unter Variation eines Parameters beispielsweise a zu verfolgen und dabei möglicherweise neue Eigenschaften zu beobachten. Ist Massenerhaltung nicht gefordert, tritt allerdings ein Problem auf, welches anhand der folgenden Abbildung 11 erklärt wird.

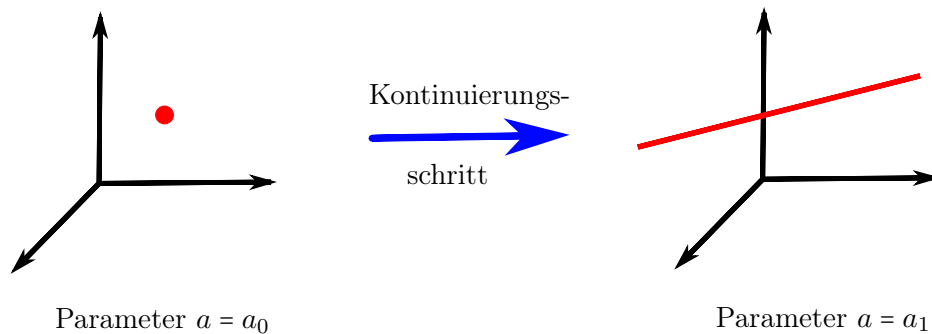


Abbildung 11: Skizze der auftretenden Problematik ohne Massenerhaltung. Links ist der Anfangspunkt $\phi = 0$ im (eigentlich unendlich dimensional) Phasenraum zu erkennen. Nach einem Kontinuierungsschritt kann man rechts eine Linie von stationären Lösungen erkennen.

In dieser Abbildung 11 ist links skizzenhaft die Anfangslösung $\phi = 0$ dargestellt. Diese stellt einen exakt bestimmbaren Punkt im unendlich dimensional Phasenraum dar. Nach einem Kontinu-

ierungsschritt erkennt man rechts eine Linie aus stationären Lösungen. Diese kommt daher, dass nun Lösungen beliebiger Masse auch Lösung sind, da $\phi = c$ mit $c \in \mathbb{R}$ für alle $a \in \mathbb{R}$ stationäre Lösung der Cahn-Hilliard-Gleichung ist. Diese Linie stationärer Lösungen ist problematisch, da so keine eindeutige Lösung vorhanden ist, von welcher aus der nächste Kontinuierungsschritt getätigt werden kann und so möglicherweise zwischen Lösungen mit unterschiedlichen Massen bei der weiteren Kontinuierung gesprungen wird.

Um aus dieser Linie stationärer Lösungen wieder nur einen Punkt zu betrachten, wird die Massenerhaltung gefordert. Es soll gelten

$$\int \phi \, dx - \phi_0 \stackrel{!}{=} 0 \quad (81)$$

für beide gekoppelten Systeme, wobei ϕ_0 die verwendete Anfangslösung darstellt. Im gekoppelten System aus ϕ_1 und ϕ_2 entspricht diese Forderung formal

$$\int \phi_1 \, dx - \phi_{1,0} \stackrel{!}{=} 0 \quad (82)$$

$$\int \phi_2 \, dx - \phi_{2,0} \stackrel{!}{=} 0, \quad (83)$$

wobei $\phi_{1,0}$ und $\phi_{2,0}$ die entsprechenden gemittelte Dichten der einzelnen Felder in den gekoppelten Systemen sind.

Beim Einfügen von Nebenbedingung müssen zusätzlich Lagrange-Multiplikatoren in das Gleichungssystem hinzugefügt werden. Dies liegt daran, dass durch die hier drei Nebenbedingungen drei Gleichungen mehr als Freiheitsgrade im Gleichungssystem für das Auffinden von stationären Lösungen vorhanden sind. Man sucht quasi ein Extremum unter Nebenbedingungen. Die hinzugefügten Lagrange-Multiplikatoren lauten c_1 und c_2 für die Massenerhaltung (siehe Gleichung (82) und (83)) und v für die Verschiebungstoleranz beziehungsweise Geschwindigkeit (siehe Gleichung (80)). Diese Parameter müssen zur Untersuchung des Gesamtsystems unter Nebenbedingungen hinzugefügt werden und werden an geeigneter Stelle beim Aufstellen des Gleichungssystems hinzugefügt.

4.5 Implementierung der Modellgleichungen und Vorgehen

Als Software zur Berechnung der Bifurkationsdiagramme wurde Matlab mit der pde2path Erweiterung verwendet. Diese Erweiterung ermöglicht mithilfe von numerischer Kontinuierung, Bifurkationsdiagramme zu bestimmen.

Es werden eindimensionale, gekoppelte Cahn-Hilliard-Gleichungen auf einer Domäne von $-L_x$ bis L_x mit $L_x = \frac{1}{2}$ unter periodischen Randbedingungen, also gleiche Funktionswerte am Rand, untersucht. Als Nebenbedingung wird Massenerhaltung in beiden Feldern und eine Verschiebungsnebenbedingung verwendet. Im Rahmen der finiten Elemente Methode werden die Funktionen statt auf der ganzen Domäne auf ein Gitter mit N Stützstellen reduziert. Ableitungen werden mithilfe der schwachen Formulierung implementiert, sodass nur maximal die zweite Ableitung in pde2path dargestellt werden kann. Untersucht wurde nun der Gradientendynamik erhaltende Fall,

dargestellt in Gleichung (45), und der Gradientendynamik brechende Fall, dargestellt in Gleichung (46). Da in diesen Gleichungen eine Ableitung der vierten Ordnung im Ort vorhanden ist, muss zur Implementierung in pde2path eine weitere Variable η eingeführt werden. Hier am Beispiel des Gradientendynamik erhaltenden Falls (Gleichung (45)) dargestellt:

$$\begin{aligned}
 1) \quad 0 &= \frac{1}{L_1^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \eta_1 \\
 2) \quad 0 &= \frac{\kappa^2}{L_1^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi_1 + a\phi_1 + \phi_1^3 - \alpha\phi_2 - \eta_1 \\
 3) \quad 0 &= \frac{1}{L_2^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \eta_2 \\
 4) \quad 0 &= \frac{\kappa^2}{L_2^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi_2 + (a + \Delta T_c)\phi_2 + \phi_2^3 - \alpha\phi_1 - \eta_2.
 \end{aligned} \tag{84}$$

Außerdem müssen die Lagrangeparameter c_1, c_2 und v aufgrund der Nebenbedingungen

$$q_1 := \int \phi_1 \, dx - \phi_{1,0} \stackrel{!}{=} 0 \tag{85}$$

$$q_2 := \int \phi_2 \, dx - \phi_{2,0} \stackrel{!}{=} 0 \tag{86}$$

$$q_3 := \Delta u \cdot \frac{\partial u}{\partial x} \stackrel{!}{=} 0 \tag{87}$$

hinzugefügt werden. Dies bedeutet in Gleichung (84), dass dieses Gleichungssystem zu

$$\begin{aligned}
 1) \quad 0 &= -\frac{1}{L_1^2} K \eta_1 + c_1 + v \cdot K_x \phi_1 \\
 2) \quad 0 &= -\frac{\kappa^2}{L_1^2} K \phi_1 + M \cdot (a\phi_1 + \phi_1^3 - \alpha\phi_2) - \eta_1 \\
 3) \quad 0 &= -\frac{1}{L_2^2} K \eta_2 + c_2 + v \cdot K_x \phi_2 \\
 4) \quad 0 &= -\frac{\kappa^2}{L_2^2} K \phi_2 + M \cdot ((a + \Delta T_c)\phi_2 + \phi_2^3 - \alpha\phi_1) - \eta_2
 \end{aligned} \tag{88}$$

unter Verwendung der Matrizen M, K_x und K für die Ableitungen wird. Außerdem ist ein zusätzlicher Minusfaktor hinzugefügt, da das für die Stabilitätsbestimmung mit pde2path notwendig ist. Die Stabilität der stationären Lösungen wird mithilfe der analytischen Jacobimatrix der linearen Stabilitätsanalyse bestimmt. Die Jacobimatrix ist hier gegeben über

$$J = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_{\phi_1}}{\partial \phi_1} & \frac{\partial f_{\phi_1}}{\partial \eta_1} & \frac{\partial f_{\phi_1}}{\partial \phi_2} & \frac{\partial f_{\phi_1}}{\partial \eta_2} & \frac{\partial f_{\phi_1}}{\partial c_1} & \frac{\partial f_{\phi_1}}{\partial c_2} & \frac{\partial f_{\phi_1}}{\partial v} \\ \frac{\partial f_{\eta_1}}{\partial \phi_1} & \frac{\partial f_{\eta_1}}{\partial \eta_1} & \frac{\partial f_{\eta_1}}{\partial \phi_2} & \frac{\partial f_{\eta_1}}{\partial \eta_2} & \frac{\partial f_{\eta_1}}{\partial c_1} & \frac{\partial f_{\eta_1}}{\partial c_2} & \frac{\partial f_{\eta_1}}{\partial v} \\ \frac{\partial f_{\phi_2}}{\partial \phi_1} & \frac{\partial f_{\phi_2}}{\partial \eta_1} & \frac{\partial f_{\phi_2}}{\partial \phi_2} & \frac{\partial f_{\phi_2}}{\partial \eta_2} & \frac{\partial f_{\phi_2}}{\partial c_1} & \frac{\partial f_{\phi_2}}{\partial c_2} & \frac{\partial f_{\phi_2}}{\partial v} \\ \frac{\partial f_{\eta_2}}{\partial \phi_1} & \frac{\partial f_{\eta_2}}{\partial \eta_1} & \frac{\partial f_{\eta_2}}{\partial \phi_2} & \frac{\partial f_{\eta_2}}{\partial \eta_2} & \frac{\partial f_{\eta_2}}{\partial c_1} & \frac{\partial f_{\eta_2}}{\partial c_2} & \frac{\partial f_{\eta_2}}{\partial v} \\ \frac{\partial q_1}{\partial \phi_1} & \frac{\partial q_1}{\partial \eta_1} & \frac{\partial q_1}{\partial \phi_2} & \frac{\partial q_1}{\partial \eta_2} & \frac{\partial q_1}{\partial c_1} & \frac{\partial q_1}{\partial c_2} & \frac{\partial q_1}{\partial v} \\ \frac{\partial q_2}{\partial \phi_1} & \frac{\partial q_2}{\partial \eta_1} & \frac{\partial q_2}{\partial \phi_2} & \frac{\partial q_2}{\partial \eta_2} & \frac{\partial q_2}{\partial c_1} & \frac{\partial q_2}{\partial c_2} & \frac{\partial q_2}{\partial v} \\ \frac{\partial q_3}{\partial \phi_1} & \frac{\partial q_3}{\partial \eta_1} & \frac{\partial q_3}{\partial \phi_2} & \frac{\partial q_3}{\partial \eta_2} & \frac{\partial q_3}{\partial c_1} & \frac{\partial q_3}{\partial c_2} & \frac{\partial q_3}{\partial v} \end{pmatrix} \tag{89}$$

und muss an der stationären Lösung ausgewertet werden. Dabei ist

$$f_{\phi_1} := -\frac{1}{L_1^2} K \eta_1 + c_1 + v \cdot K_x \phi_1 \quad (90)$$

$$f_{\eta_1} := \frac{\kappa^2}{L_1^2} K \phi_1 + M \cdot (a \phi_1 + \phi_1^3 - \alpha \phi_2) \quad (91)$$

$$f_{\phi_2} := -\frac{1}{L_2^2} K \eta_2 + c_2 + v \cdot K_x \phi_2 \quad (92)$$

$$f_{\eta_2} := \frac{\kappa^2}{L_2^2} K \phi_2 + M \left((a + \Delta T_c) \phi_2 + \phi_2^3 - \alpha \phi_1 \right). \quad (93)$$

Das Vorzeichen der Eigenwerte ist dabei das Maß für die Stabilität einer stationären Lösung. Somit ist es möglich anhand eines Vorzeichenwechsels in der Determinante der Jacobimatrix Bifurkationen zu detektieren. Bei periodischen Randbedingungen, allerdings wechseln in Bifurkationen, welche die Refektionssymmetrie erhalten, zwei Eigenwerte ihr Vorzeichen, sodass diese Bifurkationen nicht durch die Betrachtung der Determinante erkannt werden können. Stattdessen werden die Eigenwerte berechnet und die Stabilität als Anzahl der positiven Eigenwerte bestimmt.

5 Ergebnisse

Zunächst wird mit der Auswertung des Modells für das gekoppelte Cahn-Hilliard-Modell bei erhaltener Gradientendynamik begonnen. Anschließend werden die Ergebnisse im Fall der gebrochenen Gradientendynamik dargestellt.

5.1 Erhaltene Gradientendynamik

Das Modell aus zwei gekoppelten Feldern wird im Gradientendynamik erhaltenden Fall durch Gleichung (45)

$$\begin{aligned} 1) \quad 0 &= \frac{1}{L_1^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(-\frac{\kappa^2}{L_1^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi_1 + a \phi_1 + \phi_1^3 - \alpha \phi_2 \right) \\ 2) \quad 0 &= \frac{1}{L_2^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(-\frac{\kappa^2}{L_2^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi_2 + (a + \Delta T_c) \phi_2 + \phi_2^3 - \alpha \phi_1 \right) \end{aligned}$$

modelliert. Mithilfe des Matlab Pakets `pde2path` kann das Modell nun untersucht werden und Bifurkationsdiagramme für unterschiedliche Parameterwahl erstellt werden. Um die Bifurkationsdiagramme auszuwerten, wird die lineare Stabilitätsanalyse benötigt, welche im folgenden Abschnitt dargestellt ist.

5.1.1 Lineare Stabilitätsanalyse im Fall der erhaltenen Gradientendynamik

Zur Durchführung der linearen Stabilitätsanalyse der gekoppelten Cahn-Hilliard-Gleichungen im Gradientendynamik erhaltenden Fall (siehe Gleichung (45))

$$\begin{aligned} 1) \quad & \frac{\partial}{\partial t} \phi_1 = \frac{1}{L_1^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(-\frac{\kappa^2}{L_1^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi_1 + a\phi_1 + \phi_1^3 - \alpha\phi_2 \right) \\ 2) \quad & \frac{\partial}{\partial t} \phi_2 = \frac{1}{L_2^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(-\frac{\kappa^2}{L_2^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi_2 + (a + \Delta T_c)\phi_2 + \phi_2^3 - \alpha\phi_1 \right) \end{aligned}$$

wird eine stationäre Lösung $\phi_{1,0}$ des ersten Systems und $\phi_{2,0}$ des zweiten Systems angenommen. Für die zu untersuchenden gestörten Lösungen $\tilde{\phi}_1$ und $\tilde{\phi}_2$ wird folgender Ansatz gewählt

$$\begin{aligned} 1) \quad & \tilde{\phi}_1(x, t) = \phi_{1,0} + \varepsilon \phi_1(x, t) \\ 2) \quad & \tilde{\phi}_2(x, t) = \phi_{2,0} + \varepsilon \phi_2(x, t) , \end{aligned} \tag{94}$$

wobei $\phi_1(x, t)$ und $\phi_2(x, t)$ orts- und zeitabhängige Störungen darstellen, welche mit einem Kleinheitsparameter ε skaliert sind. Der Ansatz entspricht einer kleinen Störung, welche auf die bekannte stationäre Lösung addiert wird, um die Stabilität dieser stationären Lösung zu untersuchen.

Der in der Gleichung (94) dargestellte Ansatz wird nun in die gekoppelten Cahn-Hilliard-Gleichungen eingesetzt. Daraus ergibt sich dann:

$$\begin{aligned} 1) \quad & \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\phi}_1 = \frac{1}{L_1^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[-\frac{\kappa^2}{L_1^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (\phi_{1,0} + \varepsilon \phi_1(x, t)) + a(\phi_{1,0} + \varepsilon \phi_1(x, t)) \right. \\ & \quad \left. + (\phi_{1,0} + \varepsilon \phi_1(x, t))^3 - \alpha(\phi_{2,0} + \varepsilon \phi_2(x, t)) \right] \\ 2) \quad & \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\phi}_2 = \frac{1}{L_2^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[-\frac{\kappa^2}{L_2^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (\phi_{2,0} + \varepsilon \phi_2(x, t)) + (a + \Delta T_c)(\phi_{2,0} + \varepsilon \phi_2(x, t)) \right. \\ & \quad \left. + (\phi_{2,0} + \varepsilon \phi_2(x, t))^3 - \alpha(\phi_{1,0} + \varepsilon \phi_1(x, t)) \right] . \end{aligned} \tag{95}$$

Als nächstes werden die beiden Gleichungen des Gleichungssystems nach Potenzen von ε sortiert:

$$\begin{aligned} 1) \quad & \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\phi}_1 = \frac{1}{L_1^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(-\frac{\kappa^2}{L_1^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi_{1,0} + a\phi_{1,0} + \phi_{1,0}^3 - \alpha\phi_{2,0} \right) \\ & \quad + \frac{\varepsilon}{L_1^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(-\frac{\kappa^2}{L_1^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi_1 + a\phi_1 + 3\phi_{1,0}^2 \phi_1 - \alpha\phi_2 \right) \\ & \quad + \frac{\varepsilon^2}{L_1^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} 3\phi_{1,0} \phi_1^2 + \frac{\varepsilon^3}{L_1^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi_1^3 \\ 2) \quad & \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\phi}_2 = \frac{1}{L_2^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(-\frac{\kappa^2}{L_2^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi_{2,0} + (a + \Delta T_c)\phi_{2,0} + \phi_{2,0}^3 - \alpha\phi_{1,0} \right) \\ & \quad + \frac{\varepsilon}{L_2^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(-\frac{\kappa^2}{L_2^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi_2 + (a + \Delta T_c)\phi_1 + 3\phi_{2,0}^2 \phi_2 - \alpha\phi_1 \right) \\ & \quad + \frac{\varepsilon^2}{L_2^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} 3\phi_{2,0} \phi_2^2 + \frac{\varepsilon^3}{L_2^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi_2^3 . \end{aligned} \tag{96}$$

Die Terme nullter Ordnung in ε stellen in Gleichung (96) die gekoppelten Cahn-Hilliard-Gleichungen für die stationäre Lösung $(\phi_{1,0}, \phi_{2,0})$ dar. Da für die stationäre Lösung nach Voraussetzung die partielle zeitliche Ableitung null ist, fallen alle Terme in nullter Ordnung von ε weg. Dadurch ergibt sich in linearer Näherung

$$\begin{aligned} 1) \quad & \frac{\partial}{\partial t} \phi_1 = \frac{1}{L_1^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(-\frac{\kappa^2}{L_1^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi_1 + a \phi_1 + \phi_{1,0}^2 \phi_1 - \alpha \phi_2 \right) \\ 2) \quad & \frac{\partial}{\partial t} \phi_2 = \frac{1}{L_2^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(-\frac{\kappa^2}{L_2^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi_2 + (a + \Delta T_c) \phi_2 + \phi_{2,0}^2 \phi_2 - \alpha \phi_1 \right), \end{aligned} \quad (97)$$

Als Ansatz zur Lösung des linearen Gleichungssystems werden die Störfunktionen ϕ_1 und ϕ_2 als eine Superposition aus örtlichen Schwingungen dargestellt. Das wird mathematisch ausgedrückt durch die Fourierentwicklung

$$\begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix} = \int_{-\infty}^{\infty} \begin{pmatrix} a_{1k}(t) \\ a_{2k}(t) \end{pmatrix} \cdot e^{ikx} dk. \quad (98)$$

Zunächst werden Schwingungen beliebiger Wellenzahl k berücksichtigt. Einsetzen dieses Ansatzes in die Gleichung (97) führt auf

$$\begin{aligned} 1) \quad & \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} a_{1k}(t) \cdot e^{ikx} dk = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{-k^2}{L_1^2} \left[\left(\frac{k^2 \kappa^2}{L_1^2} + a + 3\phi_{1,0}^2 \right) a_{1k}(t) - \alpha a_{2k}(t) \right] e^{ikx} dk \\ 2) \quad & \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} a_{2k}(t) \cdot e^{ikx} dk = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{-k^2}{L_2^2} \left[\left(\frac{k^2 \kappa^2}{L_2^2} + (a + \Delta T_c) + 3\phi_{2,0}^2 \right) a_{2k}(t) - \alpha a_{1k}(t) \right] e^{ikx} dk. \end{aligned} \quad (99)$$

Um weitere Vereinfachungen vorzunehmen, werden beide Gleichungen des Gleichungssystems nun mit einer anderen Schwingung e^{iqx} multipliziert und anschließend über die betrachtete Domäne integriert. Hierdurch ergibt sich

$$\begin{aligned} 1) \quad & \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} a_{1k}(t) \cdot e^{ikx} \cdot e^{iqx} dk dx = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} -\frac{k^2}{L_1^2} \left[\left(\frac{k^2 \kappa^2}{L_1^2} + a + 3\phi_{1,0}^2 \right) a_{1k}(t) \right. \\ & \quad \left. - \alpha a_{2k}(t) \right] \cdot e^{ikx} \cdot e^{iqx} dk dx \\ 2) \quad & \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} a_{2k}(t) \cdot e^{ikx} \cdot e^{iqx} dk dx = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} -\frac{k^2}{L_2^2} \left[\left(\frac{k^2 \kappa^2}{L_2^2} + (a + \Delta T_c) + 3\phi_{2,0}^2 \right) \cdot a_{2k}(t) \right. \\ & \quad \left. - \alpha a_{1k}(t) \right] \cdot e^{ikx} \cdot e^{iqx} dk dx, \end{aligned} \quad (100)$$

was zunächst komplizierter aussieht, allerdings mithilfe der Orthogonalitätsrelation der Fourierbasis die gewünschte Vereinfachung ergibt. Es gilt:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{ik_1 x} \cdot e^{-ik_2 x} dx \sim \delta(k_1 - k_2). \quad (101)$$

Dies ist anschaulich sinnvoll, da es mathematisch einer Fouriertransformation einer komplexen Schwingung mit genau einer Wellenzahl k_1 entspricht. Demnach kann die Fouriertransformierte

nur eine Frequenz im Fourierraum enthalten, sodass es proportional zu einer Δ -Distribution ist. Für eine Δ -Distribution lässt sich das Integral unter Verwendung von

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \cdot \delta(x - x_0) \, dx = f(x_0) \quad (102)$$

einfach lösen.

Verwendet man also Gleichung (101), um die Gleichung (100) zu vereinfachen, so ergibt sich:

$$\begin{aligned} 1) \quad & \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} a_{1_k}(t) \delta(k - q) \, dk = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{-k^2}{L_1^2} \left[\left(\frac{k^2 \kappa^2}{L_1^2} + a + 3\phi_{1,0}^3 \right) a_{1_k}(t) - \alpha a_{2_k}(t) \right] \cdot \delta(k - q) \, dk \\ 2) \quad & \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} a_{2_k}(t) \delta(k - q) \, dk = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{-k^2}{L_2^2} \left[\left(\frac{k^2 \kappa^2}{L_2^2} + (a + \Delta T_c) + 3\phi_{2,0}^3 \right) a_{2_k}(t) - \alpha a_{1_k}(t) \right] \cdot \delta(k - q) \, dk. \end{aligned} \quad (103)$$

Es ergibt sich aufgrund von Gleichung (102)

$$\begin{aligned} 1) \quad & \frac{\partial}{\partial t} a_{1_q}(t) = \frac{-q^2}{L_1^2} \left[\left(\frac{q^2 \kappa^2}{L_1^2} + a + 3\phi_{1,0}^2 \right) a_{1_q}(t) - \alpha a_{2_q}(t) \right] \\ 2) \quad & \frac{\partial}{\partial t} a_{2_q}(t) = \frac{-q^2}{L_2^2} \left[\left(\frac{q^2 \kappa^2}{L_2^2} + (a + \Delta T_c) + 3\phi_{2,0}^2 \right) a_{2_q}(t) - \alpha a_{1_q}(t) \right]. \end{aligned} \quad (104)$$

Die Zeitabhängigkeit von $a_{1_q}(t)$ und $a_{2_q}(t)$ wird nun geschrieben als

$$\begin{pmatrix} a_{1_q}(t) \\ a_{2_q}(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_{1,\tilde{\lambda}} \\ b_{2,\tilde{\lambda}} \end{pmatrix} \cdot e^{\tilde{\lambda} t}, \quad (105)$$

da es sich bei der Gleichung (104) um eine gewöhnliche lineare Differentialgleichung erster Ordnung handelt. Dabei ist λ die Rate des zeitlichen exponentiellen Wachstums. Man setzt nun den Ansatz aus Gleichung (105) in die Gleichung (104) ein, kürzt die Exponentialfunktion und erhält

$$\begin{aligned} 1) \quad & \lambda b_{1,\lambda} = -\frac{q^2}{L_1^2} \left[\left(\frac{q^2 \kappa^2}{L_1^2} + a + 3\phi_{1,0}^2 \right) b_{1,\lambda} - \alpha b_{2,\lambda} \right] \\ 2) \quad & \lambda b_{2,\lambda} = -\frac{q^2}{L_2^2} \left[\left(\frac{q^2 \kappa^2}{L_2^2} + (a + \Delta T_c) + 3\phi_{2,0}^2 \right) b_{2,\lambda} - \alpha b_{1,\lambda} \right], \end{aligned} \quad (106)$$

was sich in eine Matrizengleichung der Form

$$\lambda \cdot \vec{v} = \underline{A} \cdot \vec{v}, \quad (107)$$

mit

$$\vec{v} = \begin{pmatrix} b_{1,\lambda} \\ b_{2,\lambda} \end{pmatrix}$$

$$\underline{A} = \begin{pmatrix} \frac{-q^2}{L_1^2} \left(\frac{q^2 \kappa^2}{L_1^2} + a + 3\phi_{1,0}^3 \right) & \frac{q^2}{L_1^2} \alpha \\ \frac{q^2}{L_1^2} \alpha & \frac{-q^2}{L_2^2} \left(\frac{q^2 \kappa^2}{L_2^2} + (a + \Delta T_c) + 3\phi_{2,0}^3 \right) \end{pmatrix} \quad (108)$$

schreiben lässt. Nach dem Determinantenkriterium

$$(\underline{A} - \lambda \cdot \mathbf{1}) \cdot \vec{v} = \vec{0} \quad (109)$$

lässt sich dann die Dispersionsrelation $\lambda(q)$ bestimmen:

$$\begin{aligned} \lambda_{1,2}(q) = & \frac{q^2}{2L_1 L_2} \cdot \left(-\frac{L_2}{L_1} \left[\frac{q^2 \kappa^2}{L_1^2} + a + 3\phi_{1,0}^2 \right] - \frac{L_1}{L_2} \left[\frac{q^2 \kappa^2}{L_2^2} + (a + \Delta T_c) + 3\phi_{2,0}^2 \right] \right) \\ & \pm \frac{1}{2L_1 L_2} \sqrt{\frac{q^4 L_2^2 \left[\frac{q^2 \kappa^2}{L_1^2} + a + 3\phi_{1,0}^2 \right]^2}{L_1^2} + \frac{q^4 L_1^2 \left[\frac{q^2 \kappa^2}{L_2^2} + (a + \Delta T_c) + 3\phi_{2,0}^2 \right]^2}{L_2^2}} \\ & \dots - 2q^4 \cdot \left(\frac{q^2 \kappa^2}{L_1^2} + a + 3\phi_{1,0}^2 \right) \left(\frac{q^2 \kappa^2}{L_2^2} + (a + \Delta T_c) + 3\phi_{2,0}^2 \right) + 4q^4 \alpha^2. \end{aligned} \quad (110)$$

Aus den Eigenwerten ergeben sich die Eigenvektoren $\vec{w} = \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \end{pmatrix}$ zu

$$\begin{aligned} w_{1(\lambda_1, \lambda_2)}(q) = & \frac{1}{2L_1^2 \alpha} \cdot \left(L_2^2 \left[\frac{q^2 \kappa^2}{L_1^2} + a + 3\phi_{1,0}^2 \right] - L_1^2 \left[\frac{q^2 \kappa^2}{L_2^2} + (a + \Delta T_c) + 3\phi_{2,0}^2 \right] \right) \\ & \pm \frac{1}{2L_1^2 \alpha} \sqrt{L_2^4 \left[\frac{q^2 \kappa^2}{L_1^2} + a + 3\phi_{1,0}^2 \right]^2 + L_1^4 \left[\frac{q^2 \kappa^2}{L_2^2} + (a + \Delta T_c) + 3\phi_{2,0}^2 \right]^2} \\ & \dots - 2L_1^2 L_2^2 \cdot \left(\frac{q^2 \kappa^2}{L_1^2} + a + 3\phi_{1,0}^2 \right) \left(\frac{q^2 \kappa^2}{L_2^2} + (a + \Delta T_c) + 3\phi_{2,0}^2 \right) + 4L_1^2 L_2^2 \alpha^2 \\ w_{2(\lambda_1, \lambda_2)}(q) = & 1 \end{aligned} \quad (111)$$

bezüglich der beiden Eigenwerte $\lambda_{1,2}$.

5.1.2 Bifurkationsverhalten und lineare Stabilitätsanalyse des gekoppelten Systems

Zu Beginn der Analyse des Lösungsverhaltens vom gekoppelten System

$$\begin{aligned} 1) \quad 0 &= \frac{1}{L_1^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(-\frac{\kappa^2}{L_1^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi_1 + a\phi_1 + \phi_1^3 - \alpha\phi_2 \right) \\ 2) \quad 0 &= \frac{1}{L_2^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(-\frac{\kappa^2}{L_2^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi_2 + (a + \Delta T_c)\phi_2 + \phi_2^3 - \alpha\phi_1 \right) \end{aligned}$$

für unterschiedliche Kopplungsstärke α ist in der Abbildung 12 ein Bifurkationsdiagramm exemplarisch dargestellt. Dabei dient a als primärer Kontinuierungsparameter und die restlichen Parameter sind $L_1 = L_2 = 2\pi$, $\kappa = 0.2$, $\Delta T_c = -0.5$, $\phi_{1,0} = 0.4$, $\phi_{2,0} = 0.2$ und $\alpha = 1.0$.

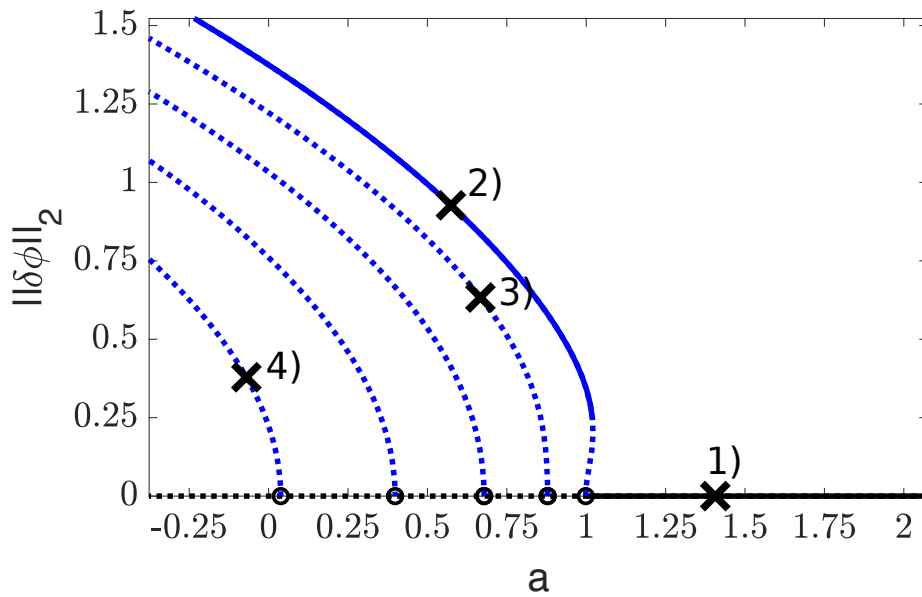


Abbildung 12: Bifurkationsdiagramm des gekoppelten Cahn-Hilliard-Modells (Gleichung (45)) im Gradientendynamik erhaltenden Fall mit a -Kontinuierung und periodischen Randbedingungen. Die verwendeten Parameter sind $L_1 = L_2 = 2\pi$, $\kappa = 0.2$, $\Delta T_c = -0.5$, $\alpha = 1.0$ und die gemittelten Dichten sind gesetzt auf $\phi_{1,0} = 0.4$ und $\phi_{2,0} = 0.2$. Die Profile der mit den Kreuzen gekennzeichneten stationären Lösungen sind in Abbildung 13 gezeigt.

Das in der Abbildung 12 dargestellte Bifurkationsdiagramm besitzt auf der Abzisse den primären Kontinuierungsparameter a und auf der Ordinate eine Norm $\|\delta\phi\|_2$. Bei dieser Norm handelt es sich um eine kombinierte L_2 -Norm, welche durch

$$\|\delta\phi\|_2 = \sqrt{\frac{1}{2L_x} \cdot \int_{-L_x}^{+L_x} (\phi_1 - \phi_{1,0})^2 + (\phi_2 - \phi_{2,0})^2 dx} \quad (112)$$

gegeben ist. Die in Abbildung 12 mit Kreuzen gekennzeichneten Profile der stationären Lösungen sind in der folgenden Abbildung 13 gezeigt.

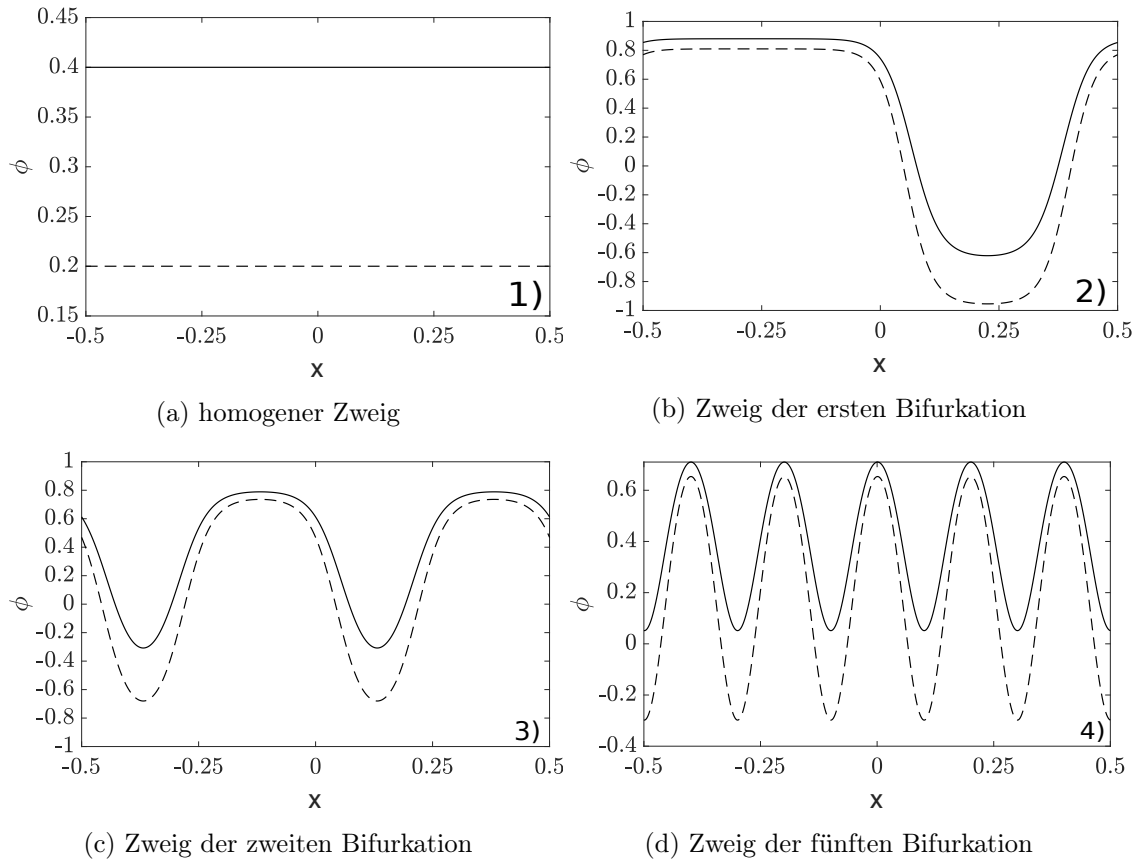


Abbildung 13: Dargestellt sind die stationären Lösungen an den in dem Bifurkationsdiagramm in der Abbildung 12 gekennzeichneten Positionen. Die durchgezogene Linie stellt jeweils das Feld $\phi_1(x)$ und die gestrichelte Linie das Feld $\phi_2(x)$ dar.

In dieser Abbildung 13 sind verschiedene Profile der stationären Lösung abgebildet, die im Bifurkationsverhalten in Abbildung 12 zu finden sind. Auf dem schwarz dargestellten trivialen Ast sind die Felder ϕ_1 und ϕ_2 homogen (siehe Abbildung 13a). Ausgehend vom trivialen Ast entstehen in Bifurkationen neue Äste (blau) von periodischen Zuständen (siehe Abbildung 13b bis 13d). Dabei nimmt die Wellenzahl der neuentstehenden Lösungen je Bifurkation zu, sodass die Lösung in Abbildung 13b und 13d 1-periodisch beziehungsweise 5-periodisch sind. Die Nebenbedingung der Massenerhaltung (siehe Kapitel „4.4 Nebenbedingungen“) sorgt dafür, dass jede der dargestellten Lösungen dieselbe gemittelte Dichte $\phi_{1,0}$ und $\phi_{2,0}$ besitzt.

Im Folgenden wird die Bifurkationsstruktur bei Variation des Kontrollparameters a anhand von der Abbildung 12 analysiert. Dabei sind linear stabile Zustände mit durchgezogenen Linien, linear instabile Zustände mit gestrichelten Linien gekennzeichnet. Für alle $a > 0.998529$ ist die homogene stationäre Lösung stabil. Bei $a \approx 0.998529$ tritt eine subkritische Pitchfork-Bifurkation auf, die die homogene Lösung destabilisiert. Verringert man a weiter, so treten weitere destabilisierende Bifurkationen auf. Dieses Verhalten ist mithilfe der linearen Stabilitätsanalyse (siehe Kapitel „5.1.1 Lineare Stabilitätsanalyse im Fall der erhaltenen Gradientendynamik“) erklärbar: Setzt man in die Dispersionsrelation $\lambda(q)$ (Gleichung (110)) die verwendeten festen Parameter ein, so vereinfacht sich die Gleichung und es ist möglich die Wachstumsrate für ein bestimmtes a zu zeichnen. Die Abbildung 14 zeigt die Dispersionsrelation für $a = 1.5$.

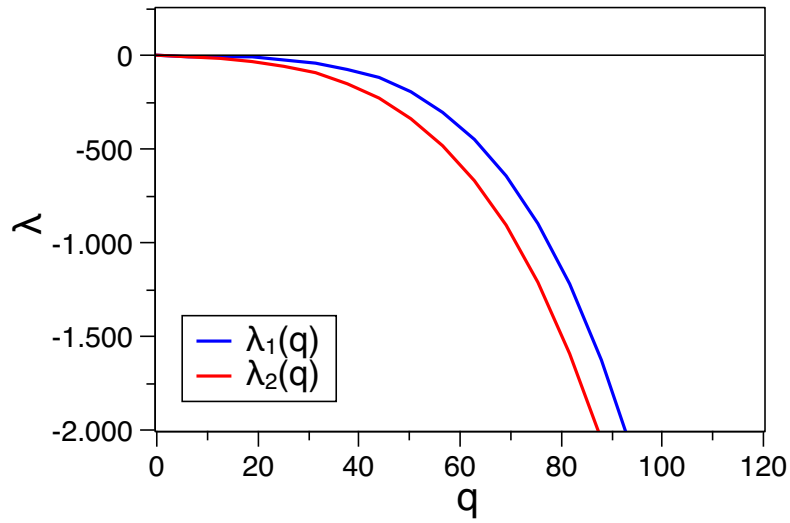


Abbildung 14: Dispersionsrelation (Gleichung (110)) mit $L_1 = L_2 = 2\pi$, $\kappa = 0.2$, $\Delta T_c = -0.5$, $\alpha = 1.0$, $a = 1.5$ und gemittelte Dichten $\phi_{1,0} = 0.4$ und $\phi_{2,0} = 0.2$.

Man erkennt in der Abbildung 14 die beiden Eigenwerte $\lambda_{1,2}$ in Abhängigkeit der Wellenzahl q . Es gilt $\lambda_{1,2} < 0$ für alle q . Damit Stabilität der Lösung folgt, müsste $\lambda(q)$ für alle möglichen q kleiner null sein. Da nun periodische Randbedingungen gelten, kann das System nicht alle Wellenzahlen $q \in \mathbb{R}$ annehmen, sondern nach Gleichung (10) nur diskrete Werte

$$q_n = 2n\pi \quad \text{mit } n \in \mathbb{Z}.$$

Also müssen die Eigenwerte nur an diesen Wellenzahlen nach ihren Vorzeichen untersucht werden. Existiert ein q_n , sodass λ_1 oder λ_2 größer als null ist, so folgt Instabilität der homogenen Lösung. In der folgenden Abbildung 15 ist die Dispersionsrelation eingeschränkt auf die möglichen Wellenzahlen q_n dargestellt.

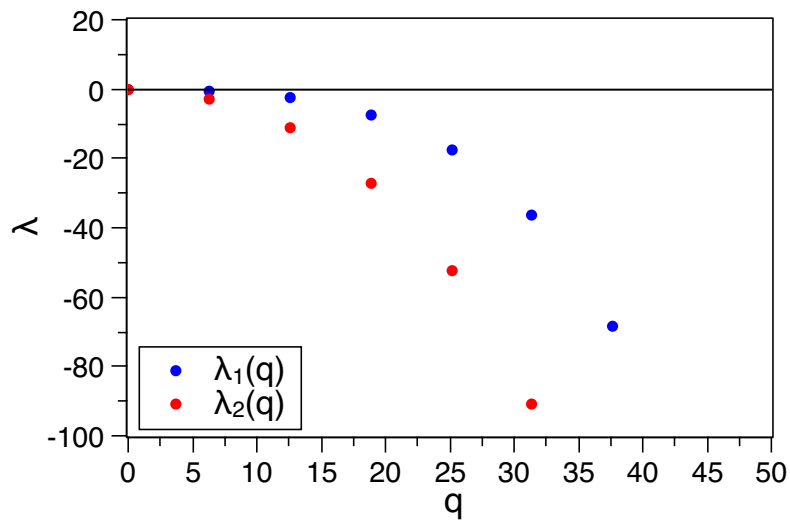


Abbildung 15: Dispersionsrelation nach Gleichung (110) mit $L_1 = L_2 = 2\pi$, $\kappa = 0.2$, $\Delta T_c = -0.5$, $\alpha = 1.0$, $a = 1.5$ und gemittelte Dichten $\phi_{1,0} = 0.4$ und $\phi_{2,0} = 0.2$ ausgewertet an den diskreten Wellenzahlen q_n .

Man kann der Abbildung 15 entnehmen, dass für alle Wellenzahlen q_n , $\lambda_{1,2} < 0$ gilt (da die Funktion monoton fallend ist), weshalb Stabilität der homogenen Lösung bei $a = 1.5$ folgt. Bei $a \approx 0.998529$ kommt es zu einer Bifurkation, indem $\lambda_1(q = 2\pi) = 0$ und für kleinere a positiv wird. Dadurch wird die homogene Lösung instabil und es entsteht eine stabile, sinusförmige Lösung über eine Periode (siehe Abbildung 13b), da die Instabilität bezüglich einer Sinusschwingung mit $q = 2\pi$ aufgetreten ist. Es ist anhand der Dispersionsrelation aus der linearen Stabilitätsanalyse auch möglich, diesen numerisch erhaltenen ersten Bifurkationspunkt bei $a = 0.9985$ analytisch zu bestimmen. Dafür setzt man in die Dispersionsrelation (Gl. (46)) nun die Werte der festen Parameter und $q = 2\pi$ ein, so vereinfacht sich die Gleichung zu

$$\lambda_1 = 0.99853 - a \quad (113)$$

$$\lambda_2 = -1.17853 - a \quad (114)$$

und man kann die kritischen Parameter $a_{c_1} = 0.99853$ und $a_{c_2} = -1.17853$ ablesen, bei denen $\lambda(2\pi)$ die Null kreuzen.

Der Punkt auf dem homogenen Ast bei a_{c_1} stellt also den ersten Bifurkationspunkt dar, allerdings ist a_{c_2} nicht der zweite Bifurkationspunkt. Das liegt daran, dass die Schwingung bezüglich λ_1 bei der nächsthöheren Anregung mit $q = 4\pi$ für einem höheren Wert von a an Stabilität verliert. An dieser Stelle befindet sich dann der zweite Bifurkationspunkt. Analog kann für $q = 4\pi$ der kritische Wert von a berechnet werden und auch für höhere Wellenzahlen. So erklären sich die höheren Bifurkationen und die periodischen Lösungen, dargestellt in Abbildung 13c und 13d, in den neu entstehenden Zweigen. In der folgenden Abbildung 16 bestätigt sich die eben dargestellte Erklärung.

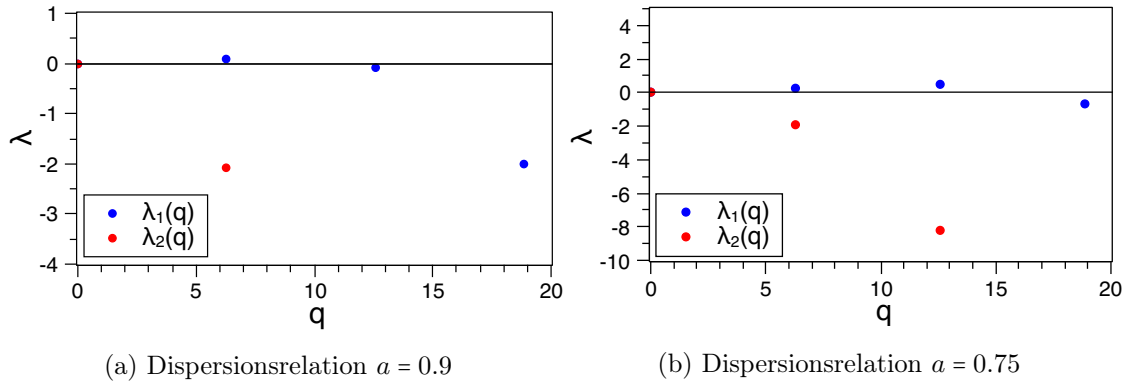


Abbildung 16: Dargestellt ist ein Zoom der Dispersionsrelation auf die kleinsten Wellenzahlen für unterschiedlichen Werten von a nach Gleichung (110) mit $L_1 = L_2 = 2\pi$, $\kappa = 0.2$, $\Delta T_c = -0.5$, $\alpha = 1.0$ und gemittelte Dichten $\phi_{1,0} = 0.4$ und $\phi_{2,0} = 0.2$.

Man erkennt in der Abbildung 16a, dass für einen Wert von a zwischen dem ersten und dem zweiten Bifurkationspunkt (siehe Abbildung 12) gerade nur die Störung mit der Wellenzahl $q = 2\pi$ instabil ist. Analog sind bei einem Wert von a zwischen der zweiten und dritten Bifurkation auf dem trivialen Ast die ersten beiden Wellenzahlen bezüglich λ_1 instabil, was in Abbildung 16b erkennbar ist.

5.1.3 Abhängigkeit von der Kopplungsstärke α

Als nächstes wird die Abhängigkeit der Lösungsstruktur von der Kopplungsstärke der Felder untersucht. Die Abbildung 17 zeigt Bifurkationsdiagramme für $L_1 = L_2 = 2\pi$, $\kappa = 0.2$, $\Delta T_c = -0.5$, $\phi_{1,0} = 0.4$ und $\phi_{2,0} = 0.2$ und unterschiedliche Kopplungsstärken $\alpha \in \{2.0, 0.5, -0.2, -1.0\}$.

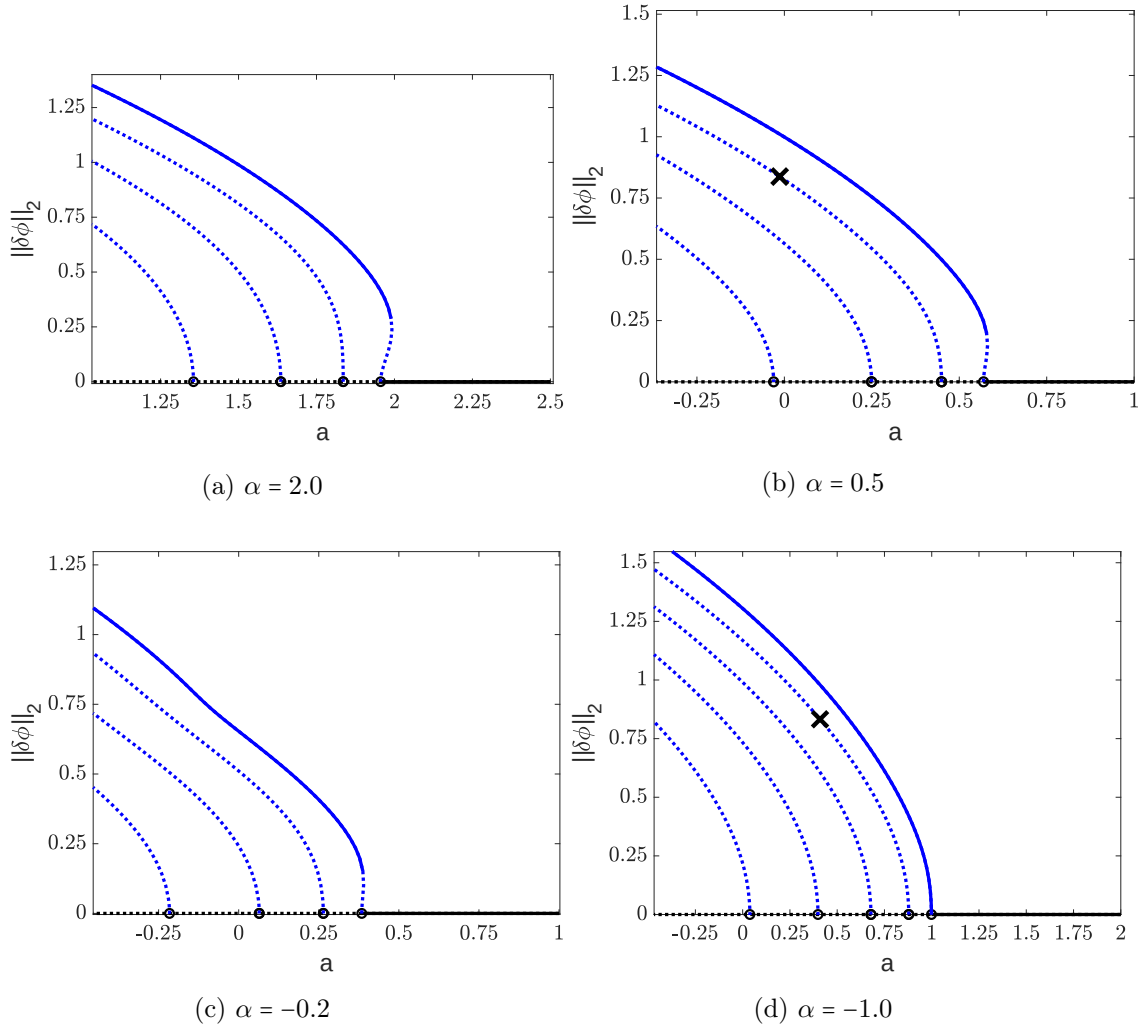


Abbildung 17: Bifurkationsdiagramme für dieselben Parameter wie in der Abbildung 12 bei unterschiedlichen Kopplungsstärken α . Die Profile der mit einem Kreuz markierten stationären Lösungen sind in Abbildung 19 dargestellt.

In dieser Abbildung sind Bifurkationsdiagramme für das gekoppelte Cahn-Hilliard-Modell im Fall der erhaltenen Gradientendynamik dargestellt. Man erkennt, dass im betrachteten Parameterbereich keine weiteren Lösungen durch unterschiedliche Wahl der Kopplung entstehen. Allerdings verschiebt sich der erste Bifurkationspunkt für betragsmäßig kleinere Werte von α in negative Richtung. Das heißt, dass eine stärkere Kopplung den homogenen Zustand bei höheren Temperaturen destabilisiert.

Es ist außerdem erkennbar, dass bei kleiner werdender Kopplung der instabile Teil des Zweiges der ersten Bifurkation immer kleiner wird. Insgesamt kommt es aber zu einem Übergang von su-

perkritisches Bifurkationen im Fall der einfachen Cahn-Hilliard-Gleichung zu einem subkritischen Bifurkationsverhalten. Diese Instabilität löst ein Hystereseverhalten der vom System angenommenen Zustände bei Temperaturveränderung aus, was in der folgenden Abbildung 18 illustriert ist.

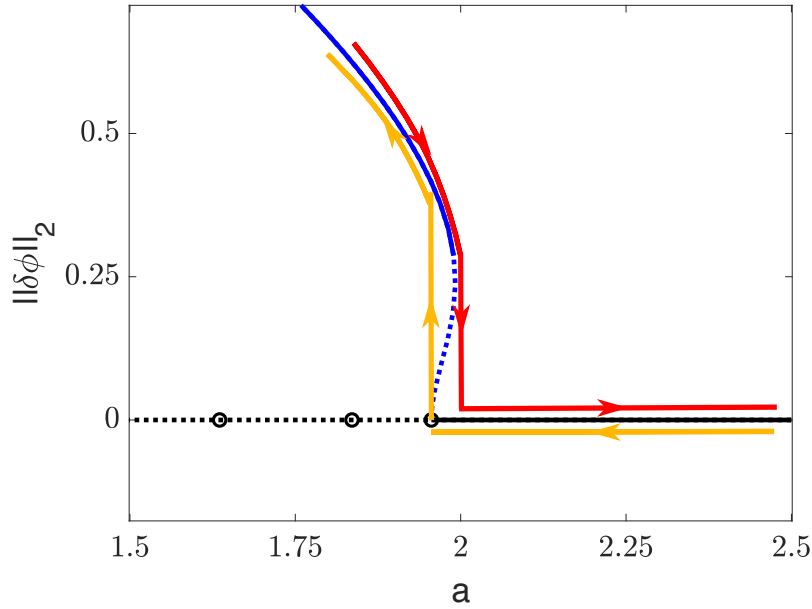


Abbildung 18: Vereinfachtes Bifurkationsdiagramm der Abbildung 17a mit a -Kontinuierung und periodischen Randbedingungen um das Hystereseverhalten darzustellen. In gelb ist der Verlauf bei Temperaturerniedrigung und in rot der bei Temperaturerhöhung zu erkennen.

Das System nimmt den Zustand an, welcher zu der betrachteten Temperatur stabil ist. Existieren zwei stabile Zustände bei der selben Temperatur, so nimmt das System den Zustand an, welcher bei einer vorherigen Temperatur vorhanden war. Das bedeutet, wenn man eine stationäre Lösung auf dem homogenen Zweig betrachtet und erniedrigt die Temperatur, so bleibt die homogene Lösung bis zur ersten Bifurkation stabil, erst bei weiterer Erniedrigung der Temperatur bildet sich die periodische Lösung. Erhöht man an dieser Stelle die Temperatur wieder, so ist die periodische Lösung bei höheren Temperaturen als bei dem ersten Bifurkationspunkt stabil aufgrund der Faltung des instabilen Bereiches. Dadurch entsteht ein Hystereseverhalten. Wie man in der Abbildung 17 erkennen kann, wird diese Hysterese immer kleiner für kleiner werdendes α , bis sie bei $\alpha = -1.0$ nicht mehr vorhanden ist. Bei $\alpha = -1.0$ ist die erste Bifurkation nun superkritisch statt subkritische wie bei den anderen höheren α . Dadurch ähnelt das Bifurkationsdiagramm für kleiner werdendes α immer mehr dem Bifurkationsdiagramm der einfachen Cahn-Hilliard-Gleichung. Für $\alpha = 0$ sollte das Bifurkationsverhalten dem von zwei einfachen Cahn-Hilliard-Gleichungen mit unterschiedlichen kritischen Temperaturen entsprechen, da keine Kopplung vorhanden ist.

Außerdem existiert ein Unterschied in den stationären Lösungen zwischen positiven und negativen Kopplungskoeffizienten. Um diesen Unterschied zu verstehen, werden beispielhaft für $\alpha = 0.2$ und $\alpha = -1.0$ die stationären Lösungen auf dem Zweig der zweiten Bifurkation in der folgenden Abbildung 19 dargestellt.

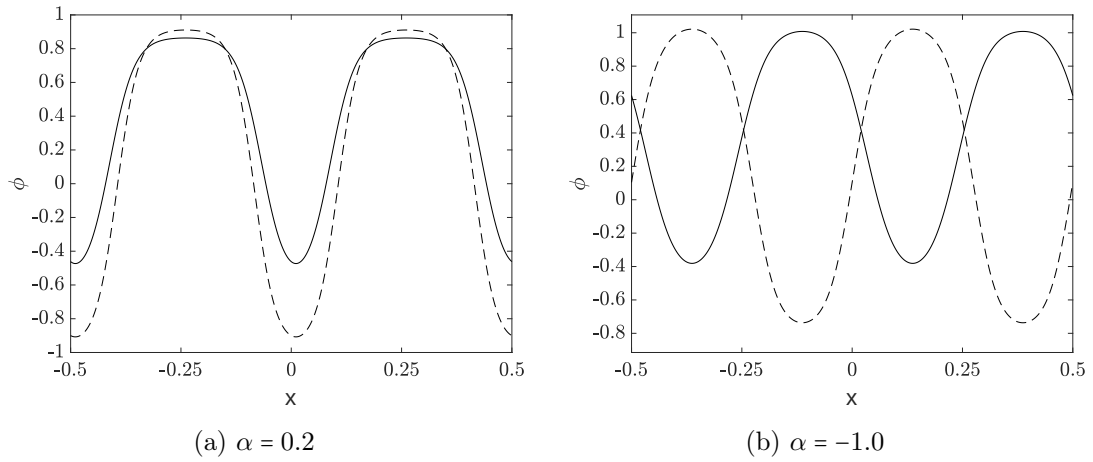


Abbildung 19: Profile der stationären Lösungen an den in den Bifurkationsdiagrammen in der Abbildung 17 gekennzeichneten Positionen. Die durchgezogene Linie stellt jeweils das Feld $\phi_1(x)$ und die gestrichelte Linie das Feld $\phi_2(x)$ dar.

Man erkennt in dieser Abbildung 19b, dass die stationären Lösungen der beiden Felder für $\alpha = -1.0$ die selbe räumliche Periodizität aufweisen. Die räumliche Schwingung verläuft dabei allerdings gegenphasig. Im Gegensatz dazu ist die räumliche Schwingung der Felder für positive Kopplungen gleichphasig (siehe Abbildung 19a). Andersherum ist in Abbildung 19a die stationäre Lösung für $\alpha = -0.2$ dargestellt, wo die Lösungen der beiden Felder in Phase schwingen.

Auch hier liefert die lineare Stabilitätsanalyse die Erklärung für diese Beobachtung. Betrachtet man den Eigenvektor der zweiten Instabilitätsmode ($q = 4\pi$), so zeigt sich eine gleich- beziehungsweise gegenphasige Schwingung anhand von gleichem beziehungsweise unterschiedlichen Vorzeichen der Komponenten. Die Eigenvektoren der betrachteten Instabilitätsmoden, die zu den räumlichen Profilen der stationären Lösungen in Abbildung 19 wurden über die Gleichung (123) mit $q = 4\pi$ berechnet und sind

$$\vec{w}_{\alpha=0.2} = \begin{pmatrix} 0.221181 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \vec{w}_{\alpha=-1.0} = \begin{pmatrix} -0.658531 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (115)$$

Die Komponenten geben also, wie oben erläutert, das Phasenverhalten der stationären Lösungen wieder.

Als nächstes wird betrachtet, ob aus einer Kopplung mit negativen α folgt, dass die Lösungen gegenphasig zueinander sind und andersrum gilt, dass bei einer Kopplung mit positiven α die Lösungen in Phase sind. Dafür werden die Eigenvektoren für beliebiges α bei denselben Parametern wie oben bestimmt. Es folgt

$$\vec{w}_{\lambda_1} = \begin{pmatrix} \frac{-0.43 + 2\sqrt{0.046225 + 0.25\alpha^2}}{\alpha} \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \vec{w}_{\lambda_2} = \begin{pmatrix} \frac{-0.43 - 2\sqrt{0.046225 + 0.25\alpha^2}}{\alpha} \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (116)$$

Der Eigenvektor $\vec{w}_{\lambda_1}$ bezüglich des Eigenwerts λ_1 ist entscheidend für die Phasenbeziehung der Felder der strukturierten stationären Lösungen der primären Äste (siehe Abschnitt „5.1.2 Bifur-

kationsverhalten und lineare Stabilitätsanalyse des gekoppelten Systems“). Das Vorzeichen der ersten Komponente der Vektoren ist von Interesse. Es gilt

$$\operatorname{sgn}(w_{1_{\lambda_1}}) = \begin{cases} +1 & \text{für } \alpha \text{ positiv} \\ -1 & \text{für } \alpha \text{ negativ} \end{cases}, \quad (117)$$

da $-0,43 + 2 \cdot \sqrt{0,046225 + 0,25\alpha^2} > 0$ ist für $\alpha \in \mathbb{R}_0$. Demnach gilt, dass für stationären Lösungen $\alpha > 0$ bedeutet, dass die Funktion räumlich in Phase zueinander sind und für $\alpha < 0$, dass sie gegenphasig sind.

Insgesamt wurde bisher erkannt, dass die Stärke der Kopplung einen Einfluss auf die Stabilität des homogenen Zustands hat, denn eine stärkere Kopplung destabilisiert den homogenen Zustand bei höheren Temperaturen. Außerdem hat das Vorzeichen der Kopplungsstärke α einen Einfluss auf die räumliche Phasenbeziehung der beiden Felder. Allerdings tritt wie im einfachen Cahn-Hilliard-Modell der Vergrößerungsprozess unverändert auf.

5.1.4 Deformierter Vergrößerungsprozess

Für andere Parameter im Gesamtsystem ist es möglich eine Unterdrückung des Vergrößerungsprozesses zu beobachten. So wird in diesem Abschnitt das Auftreten von einem deformierten Zustand der Vergrößerungsmode untersucht. Dabei wurde der Vergrößerungsprozess des gekoppelten Cahn-Hilliard-Modells im Gradientendynamik erhaltenden Fall nach Gleichung (45) mit den Parametern $L_1 = L_2 = 2\pi$, $\kappa = 0,2$, $\Delta T_c = -0,5$, $\alpha = 1,0$ und gemittelte Dichten $\phi_{1,0} = 1,0$ und $\phi_{2,0} = -0,5$ analysiert. In der Abbildung 20 ist das sich ergebende Bifurkationsdiagramm dargestellt.

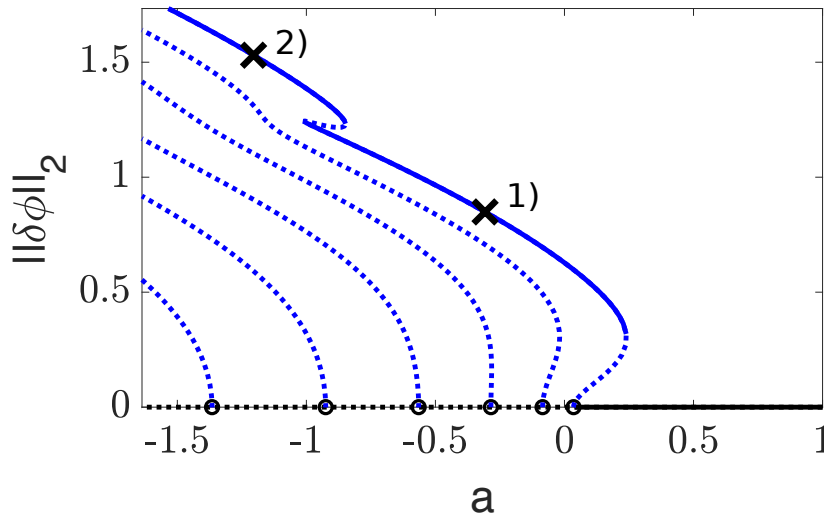


Abbildung 20: Bifurkationsdiagramm des gekoppelten Cahn-Hilliard-Modells (Gleichung (45)) im Gradientendynamik erhaltenden Fall mit a -Kontinuierung und periodischen Randbedingungen. Die verwendeten Parameter sind $L_1 = L_2 = 2\pi$, $\kappa = 0,2$, $\Delta T_c = -0,5$, $\alpha = 1,0$ und gemittelte Dichten $\phi_{1,0} = 1,0$ und $\phi_{2,0} = -0,5$. Die räumlichen Profile der mit den Kreuzen gekennzeichneten stationären Lösungen sind in der unten dargestellten Abbildung 21 illustriert.

Das Bifurkationsverhalten, dargestellt in Abbildung 20, ähnelt dem Verhalten im vorherigen Kapitel (vergleiche Abbildung 17). Ein entscheidender Unterschied ist allerdings, dass ein weiterer instabiler Bereich auf dem Zweig der phasenseparierten Lösungen auftritt. Der Ast durchläuft zwei Foldpunkte bei $a \approx 0.25$ und $a \approx -0.8$. Diese Foldpunkte verbinden beide stabile Bereiche des Astes mit einem einfach instabilen Teilstück. In diesem Bereich tritt ebenfalls wie im vorherigen Kapitel beschrieben ein Hystereseverhalten auf. In der folgenden Abbildung 21 sind die Zustände dargestellt, zwischen welchen die Hysterese an dem oberen instabilen Bereich stattfindet.

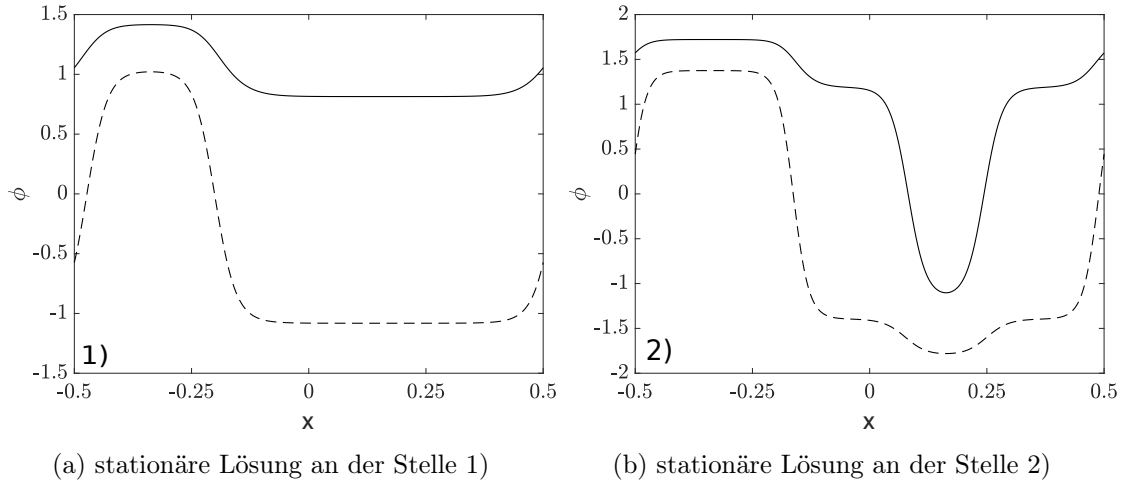


Abbildung 21: Die Profile der stationären Lösungen, welche in dem Bifurkationsdiagramm in der Abbildung 20 gekennzeichneten Positionen sich befinden. Die durchgezogene Linie stellt jeweils das Feld $\phi_1(x)$ und die gestrichelte Linie das Feld $\phi_2(x)$ dar.

In der Abbildung 21a ist das Profil der stationären Lösung vor dem zweiten instabilen Bereich dargestellt. Das Lösungsprofil hat die selbe Form wie typische Lösungen auf dem Zweig der ersten Bifurkation (vergleiche Abbildung 13b). Jedoch unterscheidet sich das Lösungsprofil in Abbildung 21b von der erwarteten sinusförmigen Schwingung, da ein weiteres Minimum ungefähr bei $x = 0.20$ entsteht. Da die Funktion verschieden ist zu der erwarteten Phasenseparation, wird der Vergrößerungsprozess hier als deformiert bezeichnet.

Bei der Beobachtung in diesem Abschnitt handelt es sich um eine schwache Unterdrückungen des Vergrößerungsprozesses, da es zwar zur Bildung des Vergrößerungszustandes kommt, allerdings dieser hier in einer deformierten Form stabil ist. Insbesondere ist der deformierte phasenseparierte Zustand ab $a \approx 0.8$ die einzige stabile Lösung des Systems.

5.1.5 Ist eine lineare Unterdrückung des Vergrößerungsprozesses beobachtbar?

In den bisher betrachteten Ergebnissen wurde immer das für die einfache Cahn-Hilliard-Gleichung typische Auftreten des Vergrößerungsprozesses beobachtet. Es wurden deformierte Lösungen bei der Vergrößerung gefunden, allerdings wurde niemals das Vergrößern unterdrückt.

Für die bisher gewählten Parameter ist die Vergrößerungsmode ($q_1 = 2\pi$) stets die erste Mode, die den homogenen Zustand destabilisiert. Dies führt zum Auftreten des phasenseparierten Zustands, der nach eventuellem Durchlaufen von Foldbereichen der einzige stabile Zustand des

Systems ist. Dass gerade eine Störung mit $q_1 = 2\pi$ zuerst die homogene Lösung destabilisiert, ist mathematisch mithilfe der Dispersionsrelation der einfachen Cahn-Hilliard-Gleichung erklärbar. Die Dispersionsrelation ist von der Form

$$\lambda(q) = b \cdot q^2 - q^4, \quad (118)$$

wobei $b \in \mathbb{R}$ gilt. Dies hat zur Folge, dass für positive b und kleine q der quadratische Term gegenüber dem quartischen Term überwiegt und die Eigenwerte dort positiv sind. Ist b groß genug, so ist es möglich, dass sich der positive Bereich bis hin zu $q = 2\pi$ ausdehnt und eine Instabilitätsmode mit dieser Wellenzahl auftritt. Bei steigendem b kommt es zu weiteren Instabilitäten mit konsekutiv steigender Wellenzahl. Die bisher gewählten Parametersätze änderten dieses lineare Verhalten auch im gekoppelten System nicht. Eine lineare Unterdrückung des Vergrößerungsprozess meint hier, dass die erste Bifurkation mit einer Instabilitätsmode mit $q = 4\pi$ stattfindet und so die periodische Lösung mit zwei Perioden der neue stabile Zustand ist. Eine solche Unterdrückung kann in der Dispersionsrelation erkannt werden und wird deshalb lineare Unterdrückung des Vergrößerns genannt.

Nun wird überprüft, ob bei einem Gesamtsystem mit bestimmten Parametern im Gradientendynamik erhaltenden Fall eine lineare Unterdrückung des Vergrößerns auftreten kann und die Dispersionsrelation die in der Abbildung 22 dargestellten Formen besitzen kann.

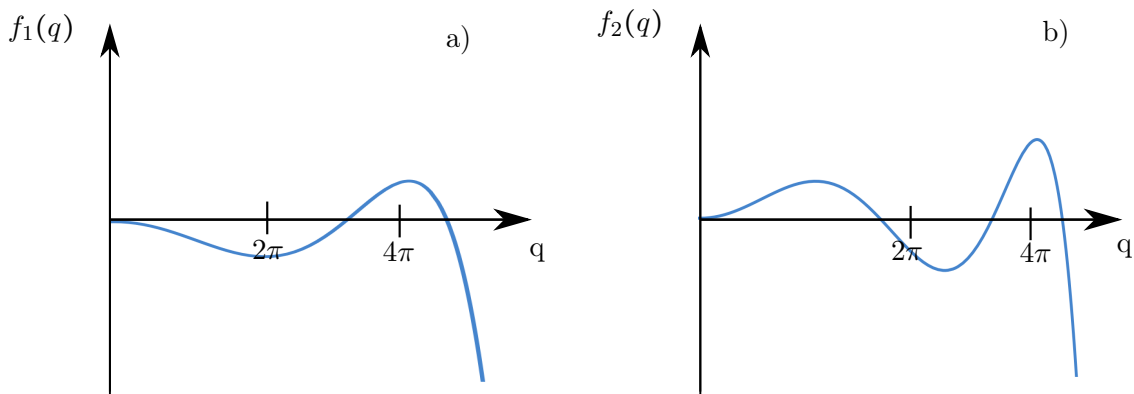


Abbildung 22: Dargestellt sind mögliche Formen von Dispersionsrelation, welche zu einer linearen Unterdrückung des Vergrößerns führen. In der Abbildung a) ist eine Funktion von der Form $f_1(q) = rq^2 + sq^4 + tq^6$ mit $r < 0$, $s > 0$ und $t < 0$ dargestellt. Die Funktion der Abbildung b) hat die Form $f_2(q) = rq^2 + sq^4 + tq^6 + uq^8$, wobei gilt $r > 0$, $s < 0$, $t > 0$ und $u < 0$.

Man erkennt in Abbildung 22, dass die Dispersionsrelation mindestens Potenzen der sechsten Ordnung enthalten muss, damit eine lineare Unterdrückung auftreten kann. Es handelt sich dabei um ein notwendiges Kriterium.

Um zu überprüfen, ob es im gekoppelten Cahn-Hilliard-Modell zu einer linearen Unterdrückung des Vergrößerungsprozesses kommen kann, wird zunächst die Dispersionsrelation in Potenzen von q betrachtet. Dafür wird eine Taylorentwicklung um $q = 0$ der berechneten Dispersionsrelation (siehe Gleichung (110)) für λ_1 durchgeführt. Dabei ergibt sich:

$$\lambda_{1,2}(q) = r_{1,2}q^2 + s_{1,2}q^4 + tq^6 + uq^8 + O(q^{10}) \quad (119)$$

mit den Koeffizienten

$$\begin{aligned} r_{1,2} &= -\frac{1}{2L_1^2L_2^2} \cdot \left(a(L_1^2 + L_2^2) + L_1^2\Delta T_c + 3L_2^2\phi_{1,0}^2 + 3L_1^2\phi_{2,0}^2 \pm \sqrt{\Omega} \right) \\ s_{1,2} &= -\frac{1}{2}\kappa^2 \cdot \left(\frac{1}{L_1^4} + \frac{1}{L_2^4} \pm \frac{(L_1^4 - L_2^4)\chi}{L_1^4L_2^4\sqrt{\Omega}} \right) \\ t &= -\frac{(L_1^4 - L_2^4)^2\alpha^2\kappa^4}{L_1^4L_2^4\Omega^{\frac{3}{2}}} \\ u &= \frac{\alpha^2\kappa^6(L_1^4 - L_2^4)^3\chi}{L_1^6L_2^6\Omega^{\frac{5}{2}}} \end{aligned} \quad (120)$$

wobei die Abkürzungen

$$\begin{aligned} \Omega &:= a^2L_2^4 + 4L_1^2L_2^2\alpha^2 + 6aL_2^4\phi_{1,0}^2 + 9L_2^4\phi_{1,0}^4 - 2L_1^2L_2^2(a + 3\phi_{1,0})(a + \Delta T_c + 3\phi_{2,0}^2) \\ &\quad + L_1^4(a + \Delta T_c + 3\phi_{2,0}^2)^2 \\ \chi &:= a(L_1 - L_2)(L_1 + L_2) - 3L_2^2\phi_{1,0}^2 + L_1^2(\Delta T_c + 3\phi_{2,0}^2) \end{aligned} \quad (121)$$

verwendet wurden. Man erkennt in Gleichung (119), dass mindestens sechs Potenzen vorhanden sind, falls $\kappa \neq 0$, $\alpha \neq 0$ und $L_1 \neq L_2$ gilt. Damit sind genug Potenzen vorhanden damit eine lineare Unterdrückung beobachtet werden könnte. Als nächstes müssen die Koeffizienten in Gleichung (120) nach ihren Vorzeichen untersucht werden. Dies sieht zunächst nach sehr vielen Fallunterscheidungen aus, allerdings kann man erkennen, dass t immer negativ ist, da es nur aus geraden Potenzen und $\Omega^{\frac{3}{2}}$ besteht. Da $t < 0$ ist, kann der Fall b) aus der Abbildung 22 nicht eintreten. Also müssen nur die Vorzeichen aus Fall a) überprüft werden. Es ist möglich $r_1 < 0$ zu erhalten, wenn alle Parameter positiv gewählt werden. Die Frage ist nun noch, ob es möglich ist $s_1 > 0$ zu erhalten. Eine numerische Untersuchung ergibt, dass wenn $r_{1,2} < 0$ ist auch $s_{1,2} < 0$ folgt und demnach auch der Fall a) nicht auftreten kann.

Es wurde im Rahmen dieser Arbeit also schlussendlich keine lineare Unterdrückung des Vergrößerungsprozesses im Gradientendynamik erhaltenden Fall gefunden. Auch andere Formen der Unterdrückung neben der Deformierung des stabilen phasenseparierten Zustands wurden nicht beobachtet.

5.2 Gebrochene Gradientendynamik

Als nächstes wird nun der andere Fall der Kopplung, nämlich die gebrochenen Gradientendynamik, untersucht daraufhin, ob hier weitere Formen wie die lineare Unterdrückung oder die später als nichtlineare Unterdrückung des Vergrößerungsprozesses bezeichnete Unterdrückung beobachtet werden können. Dieser Fall wird anhand der Gleichung (46)

$$\begin{aligned}
 1) \quad 0 &= \frac{1}{L_1^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(-\frac{\kappa^2}{L_1^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi_1 + a\phi_1 + \phi_1^3 - (\alpha + \varepsilon)\phi_2 \right) \\
 2) \quad 0 &= \frac{1}{L_2^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(-\frac{\kappa^2}{L_2^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi_2 + (a + \Delta T_c)\phi_2 + \phi_2^3 - (\alpha - \varepsilon)\phi_1 \right),
 \end{aligned}$$

modelliert. Von Interesse ist nun das Lösungsverhalten im Fall der gebrochenen Gradientendynamik und außerdem wie sich das System verhält, je stärker die Gradientendynamik durch Erhöhung von ε gebrochen wird. Zunächst wird analog zum Kapitel „5.1 Erhaltene Gradientendynamik“ die zur Auswertung der Stabilität des homogenen Zustands verwendete lineare Stabilitätsanalyse im nächsten Abschnitt durchgeführt.

5.2.1 Lineare Stabilitätsanalyse im Fall der gebrochenen Gradientendynamik

Die lineare Stabilitätsanalyse wird nach Kapitel „4.1 Lineare Stabilitätsanalyse“ durchgeführt. Da dabei die Schritte aufgrund der Ähnlichkeit der Gleichung analog wie in Abschnitt „5.1.1 Lineare Stabilitätsanalyse im Fall der erhaltenen Gradientendynamik“ sind, wird hier nur das Ergebnis angegeben.

Die Dispersionsrelation $\lambda(q)$ ist gegeben durch

$$\begin{aligned}
 \lambda_{1,2}(q) &= \frac{q^2}{2L_1L_2} \cdot \left(-\frac{L_2}{L_1} \left[\frac{q^2\kappa^2}{L_1^2} + a + 3\phi_{1,0}^2 \right] - \frac{L_1}{L_2} \left[\frac{q^2\kappa^2}{L_2^2} + (a + \Delta T_c) + 3\phi_{2,0}^2 \right] \right) \\
 &\pm \frac{1}{2L_1L_2} \sqrt{ \frac{q^4L_2^2 \left[\frac{q^2\kappa^2}{L_1^2} + a + 3\phi_{1,0}^2 \right]^2}{L_1^2} + \frac{q^4L_1^2 \left[\frac{q^2\kappa^2}{L_2^2} + (a + \Delta T_c) + 3\phi_{2,0}^2 \right]^2}{L_2^2} } \\
 &\dots - 2q^4 \cdot \left(\frac{q^2\kappa^2}{L_1^2} + a + 3\phi_{1,0}^2 \right) \left(\frac{q^2\kappa^2}{L_2^2} + (a + \Delta T_c) + 3\phi_{2,0}^2 \right) + 4q^4(\alpha^2 - \varepsilon^2).
 \end{aligned} \tag{122}$$

Aus den Eigenwerten ergeben sich die zugehörigen Eigenvektoren $\vec{w} = \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \end{pmatrix}$ über

$$\begin{aligned}
 w_{1(\lambda_1, \lambda_2)}(q) &= \frac{1}{2(\alpha - \varepsilon)} \cdot \left(-\left[\frac{q^2\kappa^2}{L_1^2} + a + 3\phi_{1,0}^2 \right] + L_1^2 \left[\frac{q^2\kappa^2}{L_2^2} + (a + \Delta T_c) + 3\phi_{2,0}^2 \right] \right) \\
 &\pm \frac{L_1}{2L_2(\alpha - \varepsilon)} \sqrt{ \frac{L_2^2 \left[\frac{q^2\kappa^2}{L_1^2} + a + 3\phi_{1,0}^2 \right]^2}{L_1^2} + \frac{L_1^2 \left[\frac{q^2\kappa^2}{L_2^2} + (a + \Delta T_c) + 3\phi_{2,0}^2 \right]^2}{L_2^2} } \\
 &\dots - 2 \cdot \left(\frac{q^2\kappa^2}{L_1^2} + a + 3\phi_{1,0}^2 \right) \left(\frac{q^2\kappa^2}{L_2^2} + (a + \Delta T_c) + 3\phi_{2,0}^2 \right) + 4L_1^2L_2^2(\alpha^2 - \varepsilon^2) \\
 w_{2(\lambda_1, \lambda_2)}(q) &= 1.
 \end{aligned} \tag{123}$$

Dabei ist $\vec{w}_{\lambda_i}$ der zum Eigenwert λ_i zugehörige Eigenvektor.

5.2.2 Unterschiedlich starke Brechung der Gradientendynamik

Zunächst wird ein gekoppeltes System mit ähnlichen Parametern wie im Abschnitt „5.1.2 Bifurkationsverhalten und lineare Stabilitätsanalyse des gekoppelten Systems“ mit unterschiedlich stark gebrochener Gradientendynamik untersucht, um dessen Einfluss zu untersuchen. Das System wird mit Gleichung (46) beschrieben und die Parameter $L_1 = L_2 = 2\pi$, $\kappa = 0.2$, $\Delta T_c = -0.5$, $\alpha = 1.0$ und gemittelte Dichten $\phi_{1,0} = 0.4$ und $\phi_{2,0} = 0.2$ wurden verwendet. Die Abbildung 23 zeigt Bifurkationsdiagramme für unterschiedlich stark gebrochene Gradientendynamik, wobei $\varepsilon \in \{0.0, 0.5, 1.0, 2.0\}$ verwendet wurde.

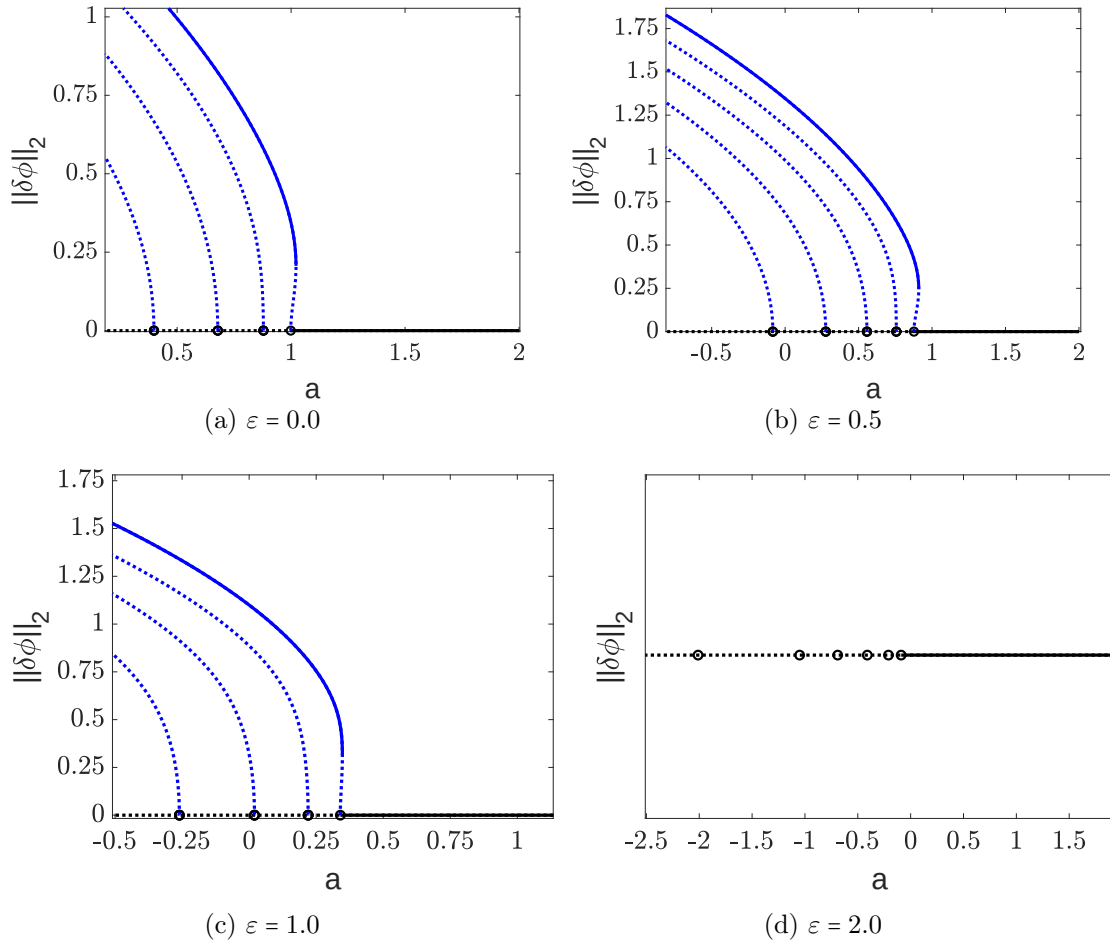


Abbildung 23: Bifurkationsdiagramme des gekoppelten Cahn-Hilliard-Modells (Gleichung (46)) mit periodischen Randbedingungen und gleichen Parametern wie in der Abbildung 12 nämlich $L_1 = L_2 = 2\pi$, $\kappa = 0.2$, $\Delta T_c = -0.5$, $\alpha = 1.0$ und gemittelte Dichten $\phi_{1,0} = 0.4$ und $\phi_{2,0} = 0.2$ bei unterschiedlich starker Brechung der Gradientendynamik erstellt wurden. Die Bifurkationen, welche nicht verfolgt wurden, stellen Hopf-Bifurkationen dar.

Man erkennt in der Abbildung 23, dass das Bifurkationsverhalten dem Verhalten derer im Gradientendynamik erhaltenden Fall (siehe Abbildung 17) sehr ähnelt und ebenfalls die Hysterese zu beobachten ist. Entsprechend sind im betrachteten Parameterbereich keine weiteren Lösungen durch die Brechung der Gradientendynamik zu erkennen. Allerdings verschiebt sich die Bifurkationen für wachsendes ε zu kleineren Werten von a . Eine stärkere Brechung der Gradientendynamik

destabilisiert also den homogenen Zustand bei niedrigeren Temperaturen.

Im Verhältnis zu den anderen Bifurkationsdiagrammen in Abbildung 23 ist in der Abbildung 23d mit $\varepsilon = 2.0$ nur der homogene Zweig dargestellt. Der Grund ist, dass es sich bei den auftretenden Bifurkationen um Hopf-Bifurkationen handelt und um diese zu verfolgen eine andere Programmierung notwendig ist. Hopf-Bifurkationen wurden daher im Rahmen dieser Arbeit nicht weiter verfolgt. Das Auftreten dieser ist allerdings mithilfe der linearen Stabilitätsanalyse zu begründen: Zeichnet man die Dispersionsrelation für $\varepsilon = 1.0$ beziehungsweise $\varepsilon = 2.0$ mit einem a , sodass bereits eine Bifurkation aufgetreten ist, so erhält man eine Grafik, welche in der Abbildung 24 dargestellt ist.

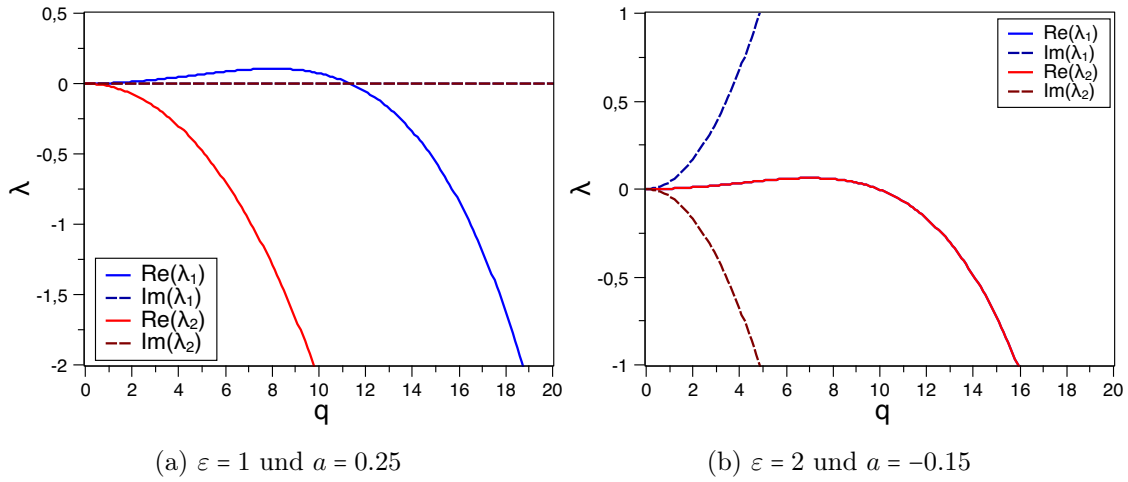


Abbildung 24: Dispersionsrelation nach Gleichung (122) mit $L_1 = L_2 = 2\pi$, $\kappa = 0.2$, $\Delta T_c = -0.5$, $\alpha = 1.0$ und gemittelte Dichten $\phi_{1,0} = 0.4$ und $\phi_{2,0} = 0.2$ für unterschiedliche ε . Außerdem sind alle Wellenzahlen $q \in \mathbb{R}$ dargestellt und nicht nur die bei periodischen Randbedingungen physikalisch sinnvollen.

Man erkennt in der Abbildung 24a eine Dispersionsrelation analog zu den vorherigen (siehe beispielsweise Abbildung 14): Der Imaginärteil der beiden Eigenwerte ist null und der Realteil von beiden unterscheidet sich. Für größere ε jedoch treten, wie man in der Abbildung 24b erkennen kann, allerdings komplexwertige Eigenwerte auf. Ändern die Realteile dieser komplex-konjugierter Eigenwerte ihr Vorzeichen, so kommt es zu einer Hopf-Bifurkation (siehe Abschnitt „3.1 Bifurkationen“).

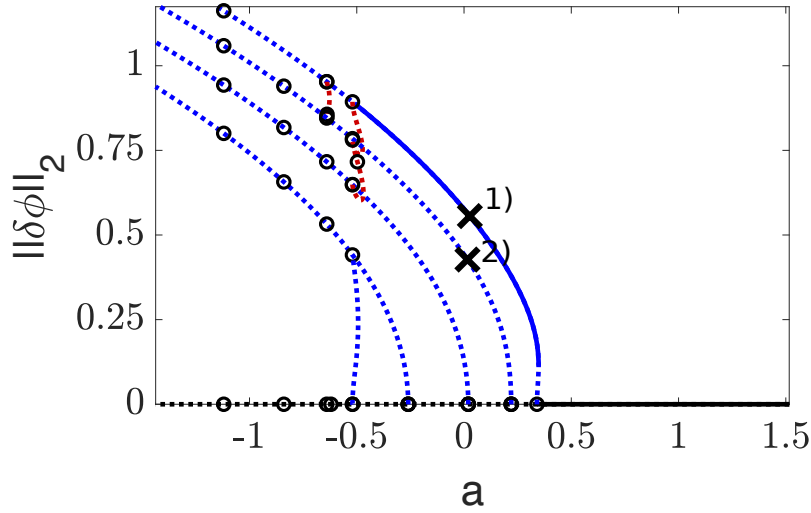
Mathematisch kann nun berechnet werden, ab welchem ε Hopf-Bifurkationen auftreten. Dafür werden die Variablen $L_1 = L_2 = 2\pi$, $\kappa = 0.2$, $\Delta T_c = -0.5$, $\alpha = 1.0$ und gemittelte Dichten $\phi_{1,0} = 0.4$ und $\phi_{2,0} = 0.2$ in die Dispersionsrelation $\lambda(q)$ eingesetzt. Es ergibt sich:

$$\lambda_{1,2}(q) \approx -0.000025664q^2 \cdot (49.348 + 986.96a + q^2 \pm 123.37 \cdot \sqrt{75.8336 - 64\varepsilon^2}). \quad (124)$$

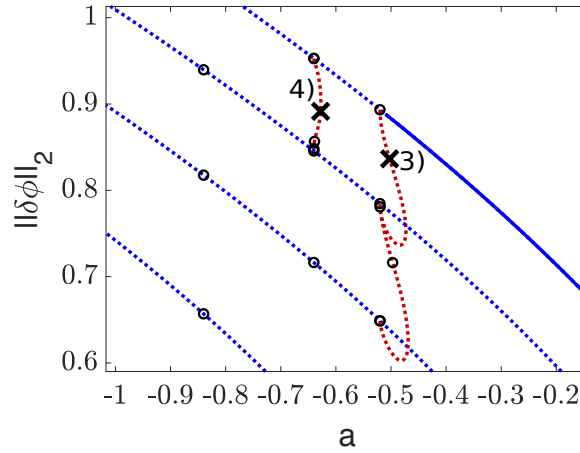
Gesucht ist nun das ε , ab dem die Wurzel negativ wird. Dadurch sind die Imaginärteile der beiden Eigenwerte komplex konjugiert zueinander und die beiden Eigenwerte haben den selben Realteil. Somit treten Hopf-Bifurkationen auf, wenn $|\varepsilon| > 1.08853$ ist. Interessant ist hierbei, dass für alle $\lambda_{1,2}(q)$ der Übergang von reellen zu komplexen Eigenwerten bei demselben ε unabhängig von der Wellenzahl q erfolgt.

5.2.3 Besonderheit bei $\varepsilon = -1$

Es ist aufgefallen, dass für ein System modelliert mit $\varepsilon = -1.0$ ein unterschiedliches Verhalten des Gesamtsystems hervorruft. Diese Besonderheit wird anhand eines Bifurkationsdiagramms in der Abbildung 25 erläutert.



(a) Bifurkationsdiagramm



(b) detaillierte Darstellung des Bifurkationsdiagrammes

Abbildung 25: Bifurkationsdiagramm des gekoppelten Cahn-Hilliard-Modells im Gradientendynamik gebrochenen Fall mit a -Kontinuierung und periodischen Randbedingungen. Dargestellt ist hier das Diagramm bezüglich der Gleichung (45) mit $L_1 = L_2 = 2\pi$, $\kappa = 0.2$, $\Delta T_c = -0.5$, $\alpha = 1.0$, $\varepsilon = -1.0$ und gemittelte Dichten $\phi_{1,0} = 0.4$ und $\phi_{2,0} = 0.2$. Die mit den Kreuzen gekennzeichneten stationäre Lösungen sind in der unten dargestellten Abbildung 28 illustriert. Es sind die neuen Lösungen bei einigen höheren Bifurkationen zur besseren Übersicht nicht dargestellt.

Anders als bei der Abbildung 23 erkennt man in dieser Abbildung bezüglich $\varepsilon = -1.0$, dass auf allen Zweigen der Bifurkationen des homogenen Zweigs zusätzlich mehrere Bifurkationen auftreten. Außerdem wird für niedrige Temperaturen auch der Zweig der ersten Bifurkation destabilisiert.

Betrachtet man zusätzlich die stationären Lösungen an den markierten Stellen, welche in der nachfolgenden Abbildung 26 dargestellt sind, so ist dieses Verhalten mithilfe der linearen Stabilitätsanalyse erklärbar.

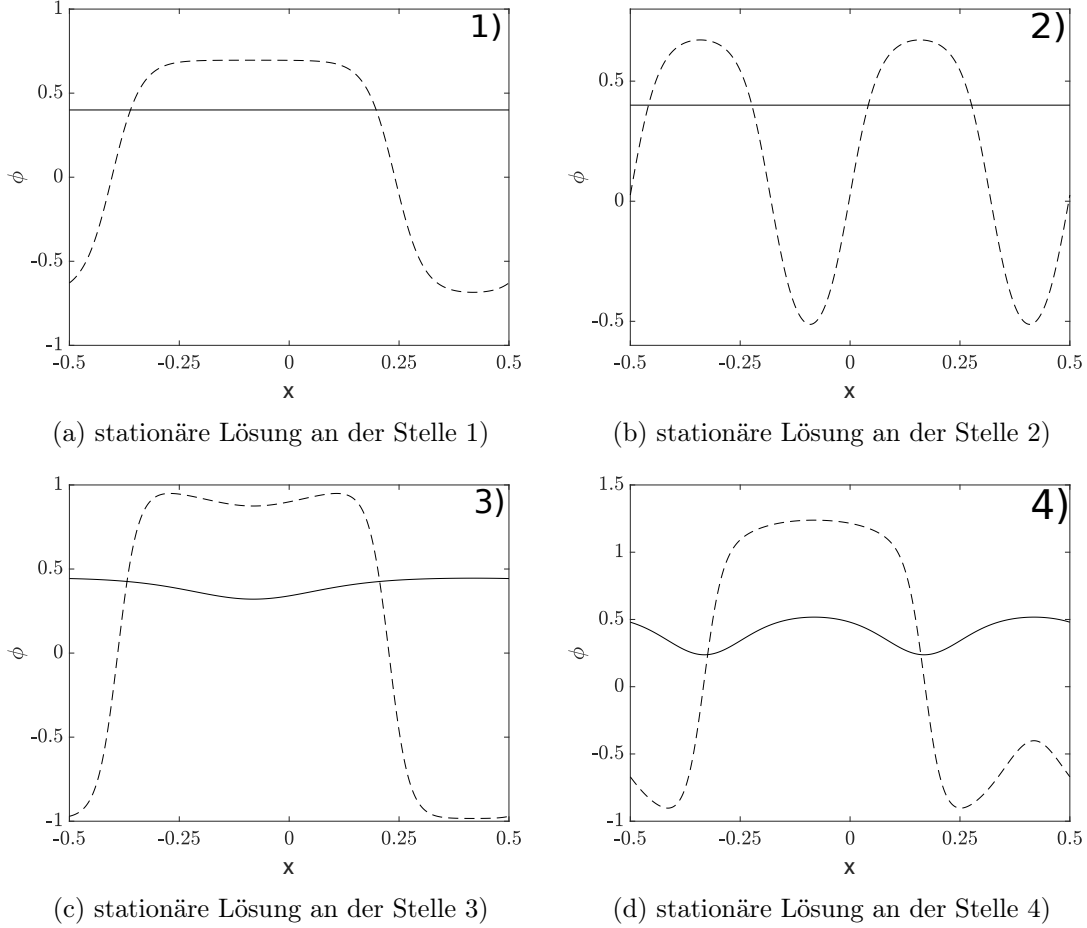


Abbildung 26: Die Profile der stationären Lösungen an den in dem Bifurkationsdiagramm in der Abbildung 25 gekennzeichneten Positionen. Die durchgezogene Linie stellt jeweils das Feld $\phi_1(x)$ und die gestrichelte Linie das Feld $\phi_2(x)$ dar.

Die stationären Lösungen auf den Zweig der ersten und zweiten Bifurkation in Abbildung 26a und 26b sind jeweils nur im Feld ϕ_2 periodisch. Das andere Teilsystem bezüglich ϕ_1 ist weiterhin homogen. Damit ist ein anderer Zustand des Gesamtsystems stabil als bei anderen ε . In den höheren Bifurkationen auf diesen Zweigen nimmt auch das Feld ϕ_1 einen periodischen Zustand an, während das ϕ_2 deformiert wird, wie man in den Abbildungen 26c und 26d erkennen kann. Dieses Verhalten ist wie bereits erwähnt mithilfe der linearen Stabilitätsanalyse erklärbar, denn der Eigenvektor ist nach Gleichung (123) mit $L_1 = L_2 = 2\pi$, $\kappa = 0.2$, $\Delta T_c = -0.5$, $\alpha = 1.0$, $\varepsilon = -1.0$, $\phi_{1,0} = 0.4$, $\phi_{2,0} = 0.2$ und $q = 2\pi$ gegeben durch:

$$\vec{w}_{\lambda_1} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \vec{w}_{\lambda_2} = \begin{pmatrix} 0.43 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (125)$$

Dies bedeutet gerade, dass an den beiden Zweigen ausgehend von der homogenen Lösung gerade das Feld ϕ_1 homogen ist, da die Komponente im Eigenvektor null ist. Bei Betrachtung der verwendeten Parameter fällt auch ein physikalischer Grund für diese Beobachtung auf: Aufgrund von $\varepsilon = -1.0$ und $\alpha = 1.0$ findet nur in dem ersten Teilsystem bezüglich ϕ_1 keine Kopplung statt, daher finden die Bifurkationen der beiden Felder unabhängig voneinander statt und es ist das Bifurkationsverhalten wie in der Abbildung 25a zu erkennen.

5.2.4 Deformierter Vergrößerungsprozess bei gebrochener Gradientendynamik

Im Vergleich zu dem Fall der erhaltenden Gradientendynamik wird nun die sich ergebende Veränderung bei Brechnung der Gradientendynamik für einen Zustand ähnlich zu dem im Abschnitt „5.1.4 Deformierter Vergrößerungsprozess“ untersucht. Es wurden die Parameter $L_1 = L_2 = 2\pi$, $\kappa = 0.2$, $\Delta T_c = -1.0$, $\alpha = 1.0$, $\varepsilon = 1.0$ und gemittelte Dichten $\phi_{1,0} = 1.0$ und $\phi_{2,0} = -0.5$ verwendet. Das sich ergebende Bifurkationsdiagramm ist in der folgenden Abbildung 27 dargestellt.

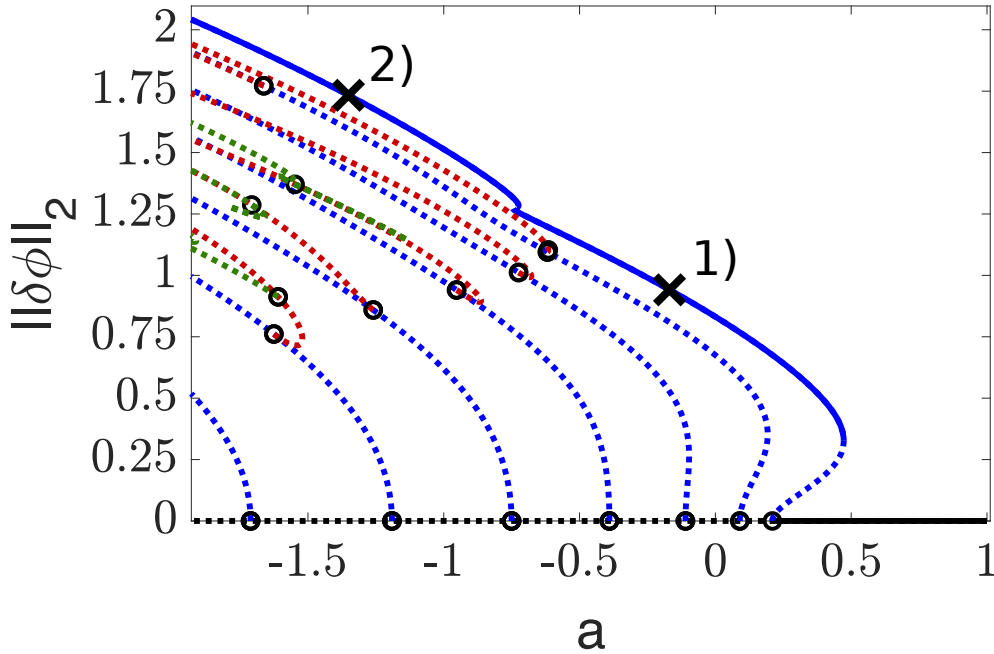


Abbildung 27: Bifurkationsdiagramm des gekoppelten Cahn-Hilliard-Modells im Gradientendynamik gebrochenen Fall (Gleichung(46)) mit a -Kontinuierung und periodischen Randbedingungen. Die verwendeten Parameter sind $L_1 = L_2 = 2\pi$, $\kappa = 0.2$, $\Delta T_c = -1.0$, $\alpha = 1.0$, $\varepsilon = 1.0$ und gemittelte Dichten $\phi_{1,0} = 1.0$ und $\phi_{2,0} = -0.5$. Die Profile der mit den Kreuzen gekennzeichneten stationäre Lösungen sind in der unten dargestellten Abbildung 28 illustriert.

Man erkennt in dieser Abbildung 27 das Bifurkationsdiagramm mit ähnlichen Parametern wie bei dem deformierten Vergrößerungsprozess im Gradientendynamik erhaltenden Fall (siehe Abbildung 20 nur ΔT_c ist variiert). Auf dem Zweig der ersten Bifurkation befinden sich zwei instabile Bereiche, in denen ein Hystereseverhalten auftritt. Auch die Lösungen zeigen ein ähnliches Verhalten wie im anderen Fall, worauf im Rahmen der Abbildung 28 eingegangen wird. Eine Besonderheit, welche hier im Gradientendynamik gebrochenen Fall auftritt, sind die Bifurkationen, welche auf

dem Zweigen der höheren Bifurkationen des homogenen Zweiges auftreten. Allerdings sind all diese neuen Lösungen aufgrund der Bifurkationen instabil, sodass solche Zustände des Gesamtsystems nicht auftreten können. Interessant sind diese Bifurkationen dennoch, da möglicherweise bei einer anderen Parameterwahl eine Stabilisierung dieser Zustände auftreten könnte. Dies würde eine nichtlineare Unterdrückung des Vergrößerungsprozesses bedeuten. Wie es möglich wäre eine solche Parameterwahl zu finden und ob eine nichtlineare Unterdrückung des Vergrößerens gefunden werden konnte, ist dem Abschnitt „5.2.6 Existiert eine nichtlineare Unterdrückung des Vergrößerungsprozesses?“ zu entnehmen.

In der folgenden Abbildung 28 sind die Profile der stationären Lösungen an den im Bifurkationsdiagramm markierten Stellen dargestellt.

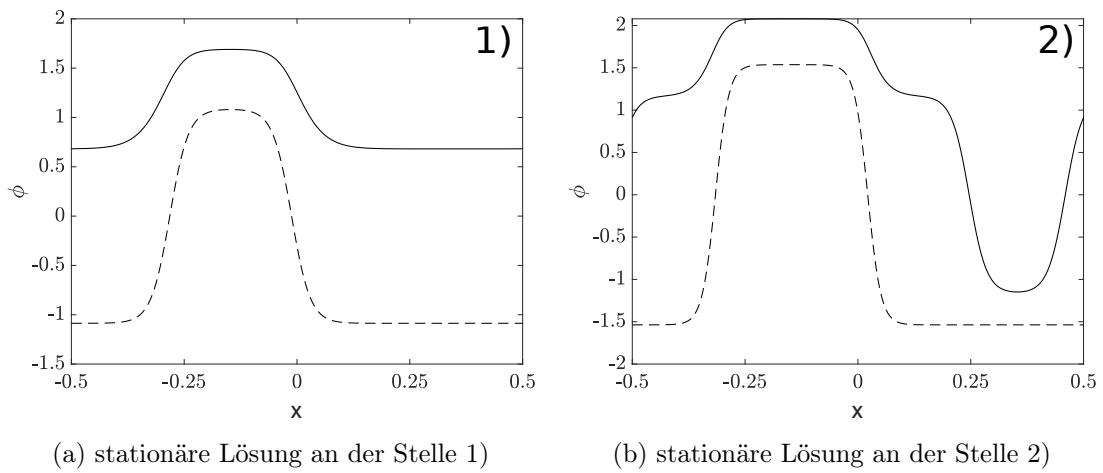


Abbildung 28: Die Profile der stationären Lösungen, welche in dem Bifurkationsdiagramm an den in Abbildung 27 gekennzeichneten Positionen sich befinden. Die durchgezogene Linie stellt jeweils die Funktion $\phi_1(x)$ und die gestrichelte Linie die Funktion $\phi_2(x)$ dar.

Die zu erwartende Form der Zustände des gekoppelten Systems auf dem Zweig der ersten Bifurkation sind in der Abbildung 28a zu erkennen. Sie ist ähnlich zu den Zuständen in der Abbildung 21a. Interessant wird es allerdings, wenn man die deformierten Lösungen im Gradientendynamik erhaltenden Fall (siehe Abbildung 21b) und dem hier in Abbildung 28b dargestellten Gradientendynamik brechenden Fall vergleicht. In beiden Fällen tritt eine Deformation in der Lösung ϕ_1 auf allerdings nur im Gradientendynamik erhaltenden Fall auch in ϕ_2 . Interessant wäre, ob es an der Variation der kritischen Temperatur ΔT_c liegt, auch wenn das nicht vermutet wird. Die Lösungsfunktion von ϕ_2 ist im Vergleich von Abbildung 28a zu 28b nur ähnlicher einer Rechteckfunktion geworden, was ohne Deformation aufgrund nichtlinearer Terme zu erwarten ist.

Insgesamt kann man also sagen, dass auch im Fall der gebrochenen Gradientendynamik eine Unterdrückung des Vergrößerungsprozesses durch Deformation der Lösungen stattfindet.

5.2.5 Lineare Unterdrückung des Vergrößerungsprozesses

Als nächstes wird überprüft, ob im Fall der gebrochenen Gradientendynamik eine lineare Unterdrückung des Vergrößerungsprozesses auftritt. Bei der linearen Unterdrückung handelt es sich um einen Effekt sichtbar in der linearen Stabilitätsanalyse: Die erste Bifurkation tritt bei $q = 4\pi$ auf anstelle wie für das Vergrößern charakteristisch bei $q = 2\pi$. Genauer dazu ist dem Abschnitt „5.1.5 Ist eine lineare Unterdrückung des Vergrößerungsprozesses beobachtbar?“ zu entnehmen. Bei den bisher untersuchten Parametersätzen ist keine lineare Unterdrückung vorhanden, da nur eine Längenskala mit $L_1 = L_2$ verwendet wurde. Die zugehörige Taylorreihe der Dispersionsrelation $\lambda(q)$ um $q = 0$ hat in diesem Fall nur Terme bis zur maximal vierten Ordnung, sodass die erste Bifurkation immer bei $q = 2\pi$ auftritt. Setzt man allerdings $L_1 \neq L_2$, so sind wie auch in Gleichung (119) höhere gerade Ordnungen in q vorhanden. Anstelle nun weiter mathematisch zu argumentieren, stellt das folgende Beispiel dar, dass eine lineare Unterdrückung des Vergrößerens möglich ist: Berechnet wird die Dispersionsrelation nach Gleichung (122) unter Verwendung der Parameter $L_1 = 2\pi$, $L_2 = 6\pi$, $\kappa = 1.5$, $\Delta T_c = -3.0$, $\alpha = 0.0$, $\varepsilon = 3.0$ und gemittelte Dichten $\phi_{1,0} = 0.0$ und $\phi_{2,0} = 0.0$. Die Ergebnisse sind in den folgenden Abbildung 29 und 30 dargestellt.

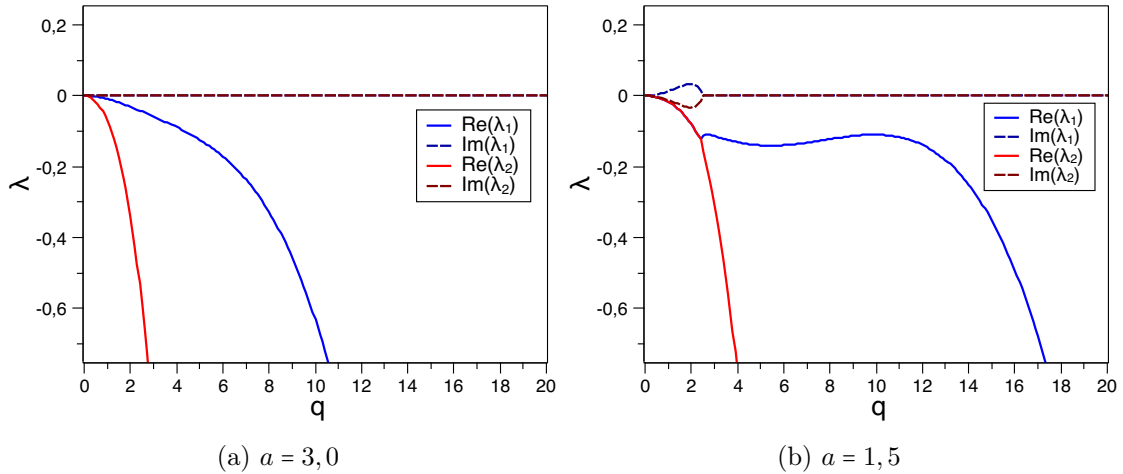


Abbildung 29: Dispersionsrelation nach Gleichung (122) mit $L_1 = 2\pi$, $L_2 = 6\pi$, $\kappa = 1.5$, $\Delta T_c = -3.0$, $\alpha = 0.0$, $\varepsilon = 3.0$ und gemittelte Dichten $\phi_{1,0} = 0.0$ und $\phi_{2,0} = 0.0$ für unterschiedliche a . Außerdem sind alle Wellenzahlen $q \in \mathbb{R}$ dargestellt und nicht nur die bei periodischen Randbedingungen physikalisch sinnvollen.

Man erkennt in Abbildung 29 die Dispersionsrelation für unterschiedliche primäre Kontinuierungsparameter a . In der linken Abbildung 29a ist die Dispersionsrelation für $a = 3.0$ dargestellt. Für große a sind beide Eigenwerte $\lambda_{1,2}$ kleiner null für alle Wellenzahlen q . Dieses Diagramm sieht ähnlich zu der Dispersionsrelation im Gradientendynamik erhaltenen Fall in der Abbildung 16 aus, da der Imaginärteil der Eigenwerte gleich null ist und die Form der dargestellten Kurven sich ähnelt. Die rechte Abbildung 29b stellt die Dispersionsrelation für $a = 1.5$ dar. Man erkennt, dass die Eigenwerte auf einem kleinem Intervall einen Imaginärteil besitzen und wichtiger, dass sich ein lokales Maximum bei ungefähr $q = 12$ bildet. Dieses Maximum verschiebt sich bei weiterer Verkleinerung von a nach oben, sodass eine Instabilität entsteht und nicht zuletzt die Schwingung

bezüglich der Wellenzahl $q = 4\pi$ instabil wird. Dieses Verhalten ist in der Abbildung 30 dargestellt.

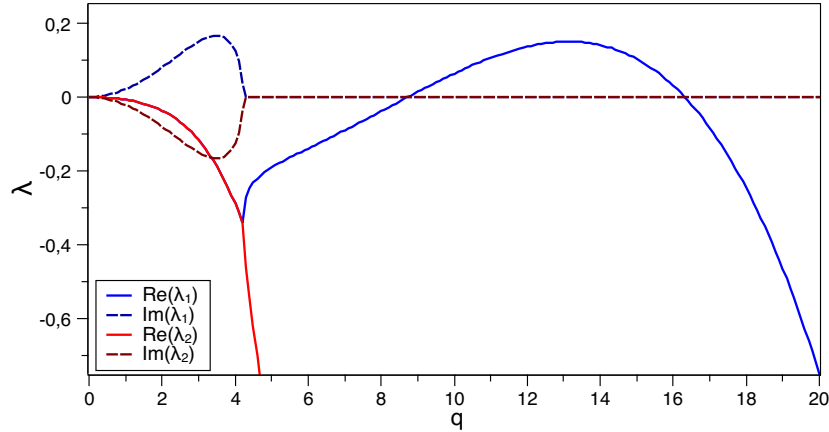


Abbildung 30: Dispersionsrelation nach Gleichung (122) mit $a = 0.75$, $L_1 = 2\pi$, $L_2 = 6\pi$, $\kappa = 1.5$, $\Delta T_c = -3.0$, $\alpha = 0.0$, $\varepsilon = 3.0$ und gemittelte Dichten $\phi_{1,0} = 0.0$ und $\phi_{2,0} = 0.0$. Außerdem sind alle Wellenzahlen $q \in \mathbb{R}$ dargestellt und nicht nur die bei periodischen Randbedingungen physikalisch sinnvollen.

In Abbildung 30 ist die Dispersionsrelation für $a = 0.75$ dargestellt. Man erkennt, dass für diesen Wert des primären Kontinuierungsparameters gerade die Störung mit der Wellenzahl $q = 2\pi$ stabil ist, während eine Instabilitätsmode mit $q = 4\pi$ auftritt. Insgesamt könnte also eine lineare Unterdrückung des Vergrößerungsprozesses in der Dispersionsrelation beobachtet werden.

Bei den verwendeten Parametern wird nun eine numerische Kontinuierung durchgeführt, um die Auswirkung einer linearen Unterdrückung des Vergrößerungsprozesses zu untersuchen. Das sich ergebende Bifurkationsdiagramm ist in der folgenden Abbildung 31 dargestellt.

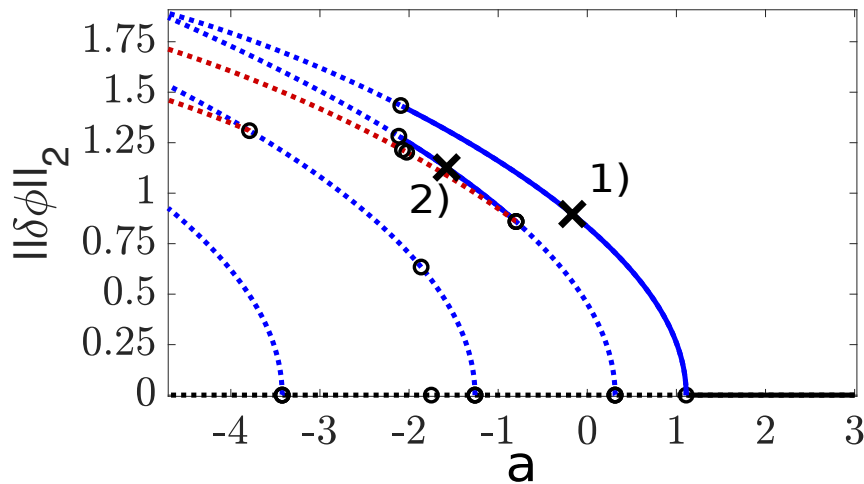


Abbildung 31: Bifurkationsdiagramm des gekoppelten Cahn-Hilliard-Modells im Gradientendynamik erhaltenden Fall (Gleichung (46)) mit a -Kontinuierung und periodischen Randbedingungen. Die verwendeten Parameter sind $L_1 = 2\pi$, $L_2 = 6\pi$, $\kappa = 1.5$, $\Delta T_c = -3.0$, $\alpha = 0.0$, $\varepsilon = 3.0$, $\phi_{1,0} = 0.0$ und $\phi_{2,0} = 0.0$. Die mit den Kreuzen gekennzeichneten stationäre Lösungen sind in Abbildung 32 illustriert. Die Bifurkationen, welche nicht verfolgt wurden, stellen Hopf-Bifurkationen dar.

In Abbildung 31 kann man erkennen, dass der homogene Zweig bei ungefähr $a = 1.0$ an Stabilität verliert. Bei der dort auftretenden Bifurkation handelt es sich um eine superkritische Pitchfork-Bifurkation. Demnach ist der dort neu auftretende Zweig zunächst stabil. Bei niedrigerer Temperatur verliert dieser allerdings auch an Stabilität, nachdem eine Hopf-Bifurkation aufgetreten ist. Interessant ist außerdem, dass der sonst instabile Zweig der zweiten Bifurkation in einem kleinen Temperaturbereich stabil ist.

In der linearen Unterdrückung des Vergrößerungsprozesses sind gerade nicht die 1-periodischen Lösungen, also die Trennung in zwei Phasen, stabil, sondern mehrperiodische Zustände. Aufgrund dessen werden zum Überprüfen, ob eine lineare Unterdrückung hier stattfindet die stationären Lösungen an den markierten Stellen betrachtet. Diese sind in der Abbildung 32 zu erkennen.

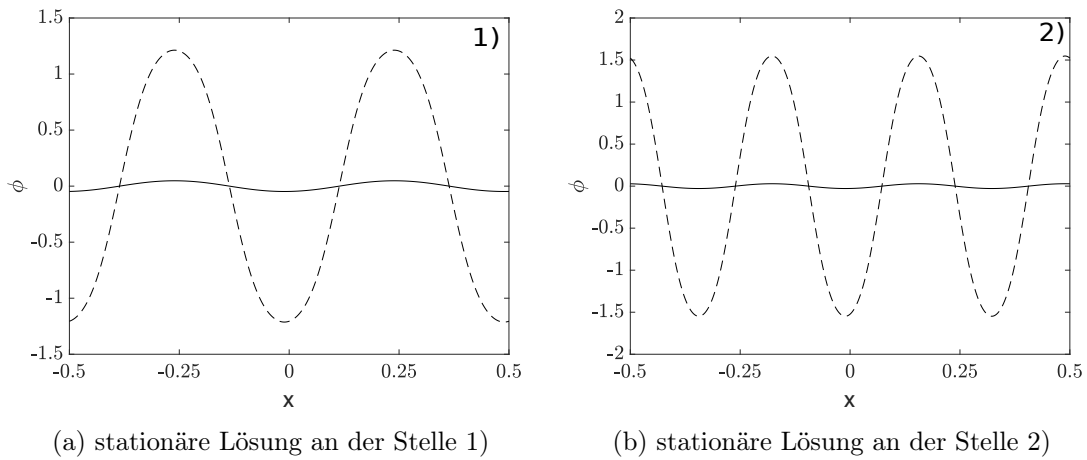


Abbildung 32: Die Profile der stationären Lösungen, welche in dem Bifurkationsdiagramm an den in Abbildung 31 gekennzeichneten Positionen sich befinden. Die durchgezogene Linie stellt jeweils das Feld $\phi_1(x)$ und die gestrichelte Linie das Feld $\phi_2(x)$ dar.

In dieser Abbildung 32 erkennt man die stabilen stationären Lösungen auf der ersten beziehungsweise zweiten Bifurkation. In der Abbildung 32a erkennt man den Effekt der linearen Unterdrückung des Vergrößerungsprozesses, denn die stabile Lösung der ersten Bifurkation ist nicht wie bei dem einfachen Cahn-Hilliard-Modell 1-periodisch, sondern aufgrund der Instabilität bezüglich der Störung mit Wellenzahl $q = 4\pi$ sind zwei Perioden zu erkennen. In Abbildung 32b ist die stabile Lösung auf dem zweiten Zweig gezeigt. Es handelt sich dabei um eine Lösung mit drei Perioden.

Im Fall der gebrochenen Gradientendynamik konnte neben der Deformation der Vergrößerungs-mode zusätzlich die hier als lineare Unterdrückung des Vergrößerungsprozesses bezeichnete Form der Unterdrückung beobachtet werden.

5.2.6 Nichtlineare Unterdrückung des Vergrößerungsprozesses

Als letztes wird diskutiert, ob eine weitere Form der Unterdrückung des Vergrößerungsprozesses im gekoppelten Cahn-Hilliard-Modell stattfinden kann. Hier wird getestet, ob der Vergrößerungszustand bei hohen Temperaturen stabil sein kann, allerdings bei niedrigen Temperaturen an Stabilität verlieren und ein anderer periodischer Zustand dort an Stabilität gewinnen kann. Diese

Form der Unterdrückung wird hier als nichtlineare Unterdrückung des Vergrößerungsprozesses bezeichnet.

Das Auffinden einer nichtlinearen Unterdrückung des Vergrößerungsprozesses ist ein schwieriges Verfahren, da es nicht möglich ist, dieses Phänomen mithilfe der Dispersionsrelation der linearen Stabilitätsanalyse zu finden. Die Frage ist deshalb, ob eine instabile stationäre Lösung auf der Zweig der zweiten Bifurkation wie zum Beispiel in Abbildung 27 bei bestimmten Parametern an Stabilität gewinnt.

Da in dem Bifurkationsdiagramm in Abbildung 31 ein stabiler Bereich auf dem zweiten Zweig aufgetreten ist, wird nun versucht die Parameter so zu verändern, dass diese Stabilität erhalten bleibt, allerdings die lineare Unterdrückung des Vergrößerungsprozesses nicht stattfindet. Eine Veränderung von den gemittelte Dichten $\phi_{1,0}$ und $\phi_{2,0}$ ruft anstelle einer lineare Unterdrückung des Vergrößerungsprozesses Hopf-Bifurkationen hervor, welche hier im Rahmen dieser Arbeit nicht verfolgt werden. Aus diesem Grund wird ε variiert. Unter Verwendung der Parameter $L_1 = 2\pi$, $L_2 = 6\pi$, $\kappa = 1.5$, $\Delta T_c = -3.0$, $\alpha = 0.0$, $\varepsilon = 1.0$ und gemittelte Dichten $\phi_{1,0} = 0.0$ und $\phi_{2,0} = 0.0$ wurde das in der Abbildung 33 dargestellte Bifurkationsdiagramm erstellt.

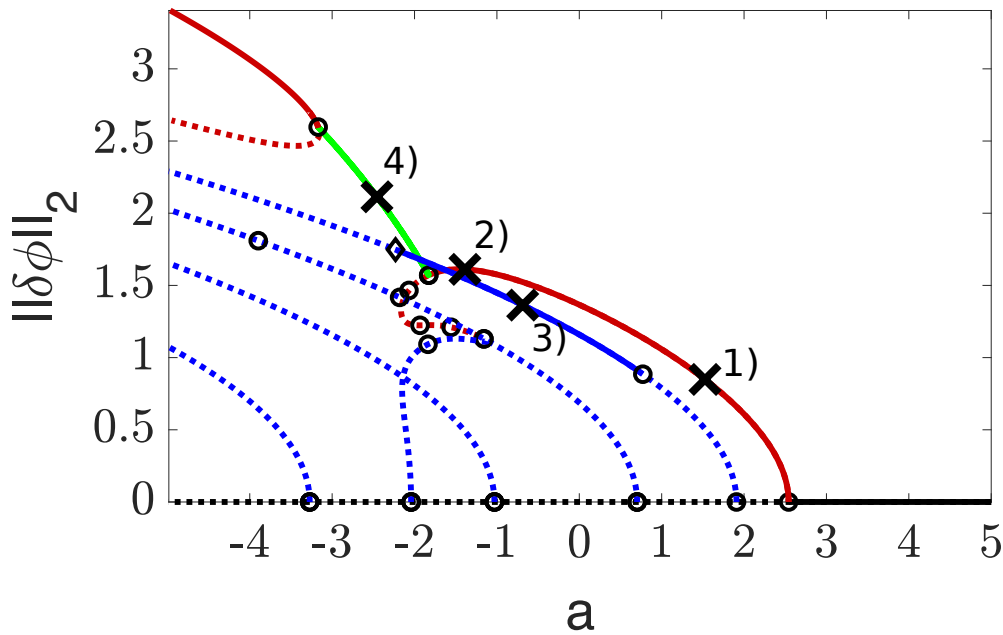


Abbildung 33: Bifurkationsdiagramm des gekoppelten Cahn-Hilliard-Modells im Gradientendynamik erhaltenden Fall (Gleichung (46)) mit a -Kontinuierung und periodischen Randbedingungen. Als Parameter wurden $L_1 = 2\pi$, $L_2 = 6\pi$, $\kappa = 1.5$, $\Delta T_c = -3.0$, $\alpha = 0.0$, $\varepsilon = 1.0$ und gemittelte Dichten $\phi_{1,0} = 0.0$ und $\phi_{2,0} = 0.0$ verwendet. Die mit den Kreuzen gekennzeichneten stationäre Lösungen sind in der unten dargestellten Abbildung 34 illustriert. Hopf-Bifurkationen sind mittels einer Raute gekennzeichnet.

In dem in der Abbildung 33 dargestellten Bifurkationsdiagramm ist erkennbar, dass in dem gekoppelten System eine nichtlineare Unterdrückung des Vergrößerungsprozesses auftreten kann, was auf im Folgenden erläutert wird: Die ersten Bifurkation des homogenen Zweiges ist eine superkritische Pitchfork-Bifurkation und der phasenseparierte Zustand (rot) zweigt stabil ab. Die-

ser wird bei $a \approx -1.8$ durch eine Drift-Pitchfork-Bifurkation destabilisiert und eine neue stabile aber bewegte Lösungen (grüner Zweig) entstehen. Auch auf den grünen Zweig tritt eine Drift-Pitchfork-Bifurkation auf, sodass wieder eine stabile (rot, durchgezogen) und instabile (rot, gestrichelt) nichtbewegte Lösung mit einer Periode entstehen. Genauer zu diesem Verhalten wird mithilfe der Abbildung 35 erklärt. Interessant ist nun der zweite Bifurkationszweig des homogenen Zweiges, da die anfängliche Instabilität über eine subkritische Bifurkation verschwindet. In einem Temperaturintervall von $[-1.828, 0.771]$ sind die Zustände der roten und blauen Linie bistabil. Für $-1.828 > a > -2.235$ ist nur die Lösung des zweiten Bifurkationszweiges stabil. Um dies genauer zu untersuchen, werden die markierten Lösungen in der nächsten Abbildung 34 betrachtet.

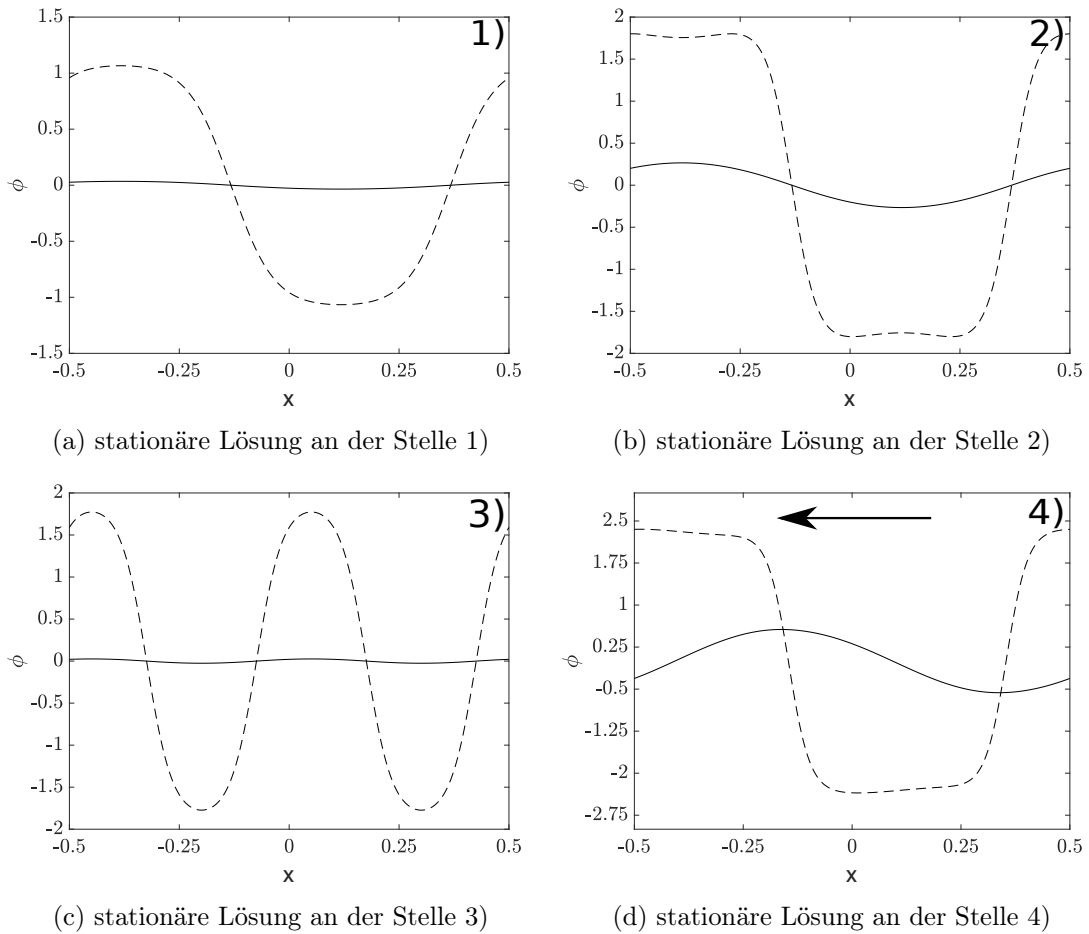


Abbildung 34: Profile der stationären Lösungen, welche in dem Bifurkationsdiagramm an den in Abbildung 33 gekennzeichneten Positionen sich befinden. Die durchgezogene Linie stellt jeweils das Feld $\phi_1(x)$ und die gestrichelte Linie das Feld $\phi_2(x)$ dar.

In den Abbildungen 34a und 34b erkennt man die Profile einer stabilen stationären Lösung auf dem Zweig der ersten Bifurkation. Während die stationäre Lösung in der Abbildung 34a den zu erwartende Verlauf darstellt, ist in der Abbildung 34b eine etwas deformierte stabile Lösung, da sich zwei Nebenmaxima bilden, auf dem selben Zweig bei niedrigerer Temperatur dargestellt. Außerdem ist in der Abbildung 34c beispielhaft eine stabile stationäre Lösung auf dem zweiten Bifurkationszweig zu erkennen. Dies bedeutet, dass in dem Bereich mit $-1.828 > a > -2.235$ eine

Lösung mit keiner maximalen Phasenseparation stabil ist, da die Lösung auf dem zweiten Bifurkationszweig im stabilen Bereich zwei Perioden besitzt. Bei den anderen stabilen, in der Abbildung 33 grün dargestellten, Lösungen handelt es sich um bewegte Zustände. Dieser bewegte Zustand ist in der Abbildung 34d dargestellt und läuft mit konstanter Geschwindigkeit von $v = -0.555$. Dabei ist die Bewegungsrichtung mittels eines Pfeiles markiert. Bei diesem stabilen Zustand des Gesamtsystems handelt es sich um keinen stationären Zustand mit maximaler Vergrößerung. Für ihn ist eine äußere Energiezufuhr notwendig, was im Fall der gebrochenen Gradientendynamik existieren kann, da keine allgemeine freie Energie für das Gesamtsystem existiert. Dass es sich bei diesen Lösungen tatsächlich um eine bewegte Lösungen handelt, stellt die folgende Abbildung 35 dar.

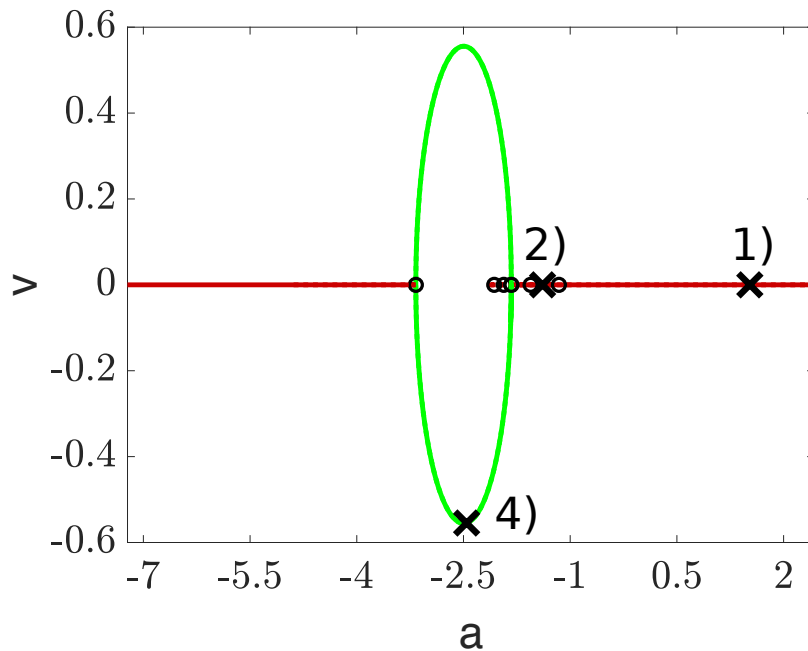


Abbildung 35: Dargestellt ist die Geschwindigkeit der einperiodischen Zustände aus der Abbildung 33. Die mit den Kreuzen gekennzeichneten stationäre Lösungen sind in der Abbildung 34 illustriert.

In dieser Abbildung 35 ist die Geschwindigkeit der Zustände auf der Zweig der ersten Bifurkation dargestellt. Man erkennt, dass lediglich die in der Abbildung 33 grün dargestellten Zustände eine Geschwindigkeit besitzen und somit laufende Wellen darstellen. Alle anderen Lösungen in der Abbildung 33 dargestellten Zustände sind stationäre Zustände und haben eine Geschwindigkeit gleich null. Daher wurde in dieser Abbildung 35 der einfacheren Sichtbarkeit halber nur die „roten“ Zustände dargestellt. Betrachtet man diese Abbildung, so sind außerdem die Drift-Pitchfork-Bifurkationen nicht erkennbar. Dies liegt daran, dass auf den instabilen Zweigen nach einigen Kontinuierungsschritten ein Foldpunkt sich befindet, sodass der instabile Zweig wieder aus dem Kreis herausläuft. Die Drift-Pitchfork-Bifurkationen sind genauer in der Abbildung 36 zu erkennen.

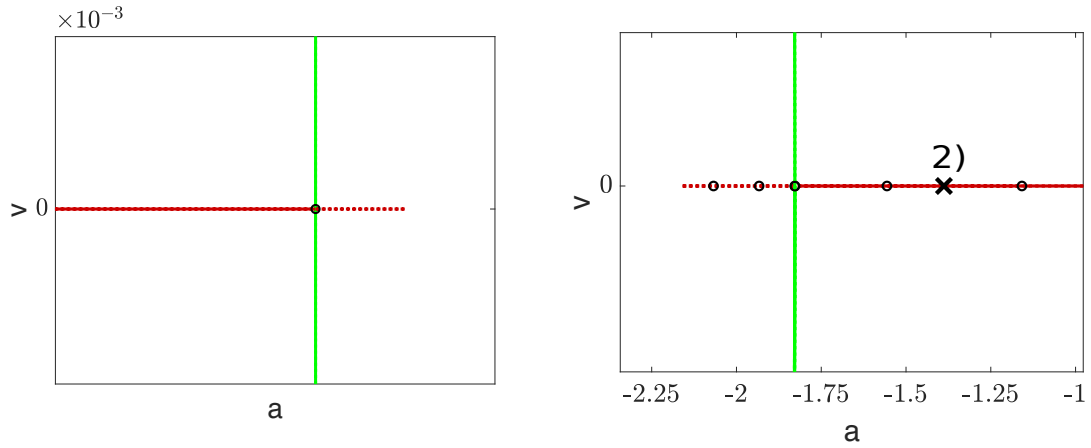


Abbildung 36: Dargestellt sind die in der Abbildung 35 aufgrund der Skalierung kaum zu erkennende Drift-Pitchfork-Bifurkationen.

Insgesamt findet also eine nichtlineare Unterdrückung des Vergrößerungsprozesses auf dem Temperaturintervall $[-1.828, -2.235]$ statt, da hier lediglich der 2-periodische, nicht maximal phasen-separierte Zustand und ein bewegter 1-periodischer Zustand stabil sind, welcher aufgrund der Geschwindigkeit auch keinen stationären Zustand mit maximaler Vergrößerung darstellt. Demnach tritt kein in dem Bereich kein Vergrößerungsprozess auf und eine nichtlineare Unterdrückung des Vergrößerungsprozesses wurde beobachtet.

Der Bereich, wo eine nichtlineare Unterdrückung des Vergrößerns stattfinden könnte, ist allerdings um einiges größer wie die Abbildung 37 darstellt. Möglicherweise ist mit anderen Parametern im Fall der gebrochenen Gradientendynamik möglich über eine größere Temperaturspanne eine nichtlineare Unterdrückung der maximalen Phasenseparation zu erhalten.

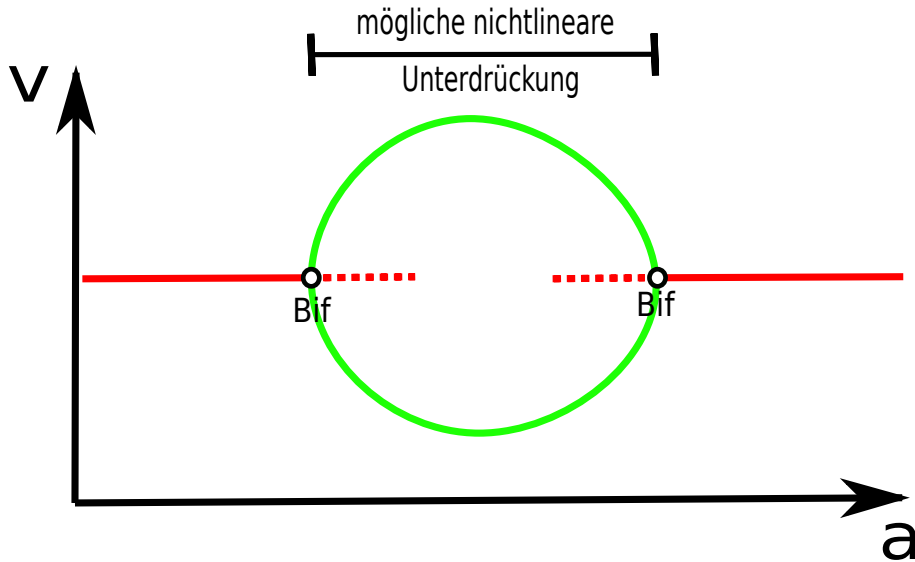


Abbildung 37: Skizzenhafte Darstellung der Abbildung 35, um den Bereich zu markieren, wo möglicherweise eine nichtlineare Unterdrückung des Vergrößerungsprozesses stattfinden kann.

6 Fazit und Ausblick

In dieser Arbeit wurden die Zustände, die das gekoppelte Cahn-Hilliard-Modell bei unterschiedlichen Temperaturen annimmt, untersucht. Dabei wurden zwei Arten der Kopplung unterschieden. Eine Form, die die Gradientendynamik erhält im ersten Fall beziehungsweise eine, die diese bricht im zweiten Fall. Bei der Auswertung wurde besonderes Augenmerk darauf gelegt, ob in dem gekoppelten Modell der Vergrößerungsprozess, welcher charakteristisch für das einfache Cahn-Hilliard-Modell ist, unterdrückt wird.

Zunächst wurde das Bifurkationsverhalten im Gradientendynamik erhaltenden Fall untersucht. Dafür wurde das gekoppelte Cahn-Hilliard-Modell mithilfe der gekoppelten Cahn-Hilliard-Gleichungen in Gleichung (45) simuliert. Mithilfe von numerischer Kontinuierung wurde zunächst ein Bifurkationsdiagramm bezüglich der Systemparametern $L_1 = L_2 = 2\pi$, $\kappa = 0.2$, $\Delta T_c = -0.5$, $\alpha = 1.0$ und gemittelte Dichten $\phi_{1,0} = 0.4$ und $\phi_{2,0} = 0.2$ erstellt. Dieses ist in der Abbildung 12 dargestellt. Man erkennt, dass trotz der verwendeten Kopplung das Bifurkationsverhalten für das gekoppelte Cahn-Hilliard-Modell ähnlich zu dem Verhalten des Einfachen, dargestellt in Abbildung 6, ist. In beiden Modellen ist jeweils die homogene Lösung bei hohem Parameter a stabil, während bei Temperaturerniedrigung ein Bifurkationspunkt auftritt und die homogene Lösung über eine Pitchfork-Bifurkation an Stabilität verliert. Auf den einzelnen neu entstehenden Zweigen ausgehend vom homogenen Zweig befinden sich periodische Lösungen. Die einzelnen neuen Zweige unterscheiden sich dabei in der Anzahl an vorhanden Perioden in der stationären Lösung. Bei dem gekoppelten Cahn-Hilliard-Modell findet diese Periodenbildung in beiden Feldern statt. Ein erster Unterschied ist außerdem zu erkennen, da der erste Bifurkationspunkt im gekoppelten Modell eine subkritische Pitchfork-Bifurkation darstellt, wodurch ein Hystereseverhalten der stabilen Lösung bei Temperaturveränderung entsteht, während im einfachen Modell dies eine superkritische Bifurkation ist. Zum Verständnis der Position der Bifurkationen wurde ihre Position mithilfe der Linearen Stabilitätsanalyse ausgewertet. Dabei wurde erkannt, dass die Bifurkationspunkte auftreten, wenn in der Dispersionrelation die Eigenwerte an den Wellenzahlen $q_n = 2n\pi$ mit $n \in \mathbb{N}$ aufgrund der periodischen Randbedingungen positiv werden. Dadurch tritt eine Instabilität bezüglich dieser Wellenzahl auf und die periodische Störung charakterisiert die neu entstehende Lösung.

Weitergehend wurde der Einfluss der Kopplungsstärke α der beiden Felder auf das Gesamtsystem untersucht. Die erhaltenen Bifurkationsdiagramme sind in der Abbildung 17 dargestellt. Man erkennt, dass im betrachteten Parameterbereich keine weiteren Lösungen durch unterschiedliche Wahl der Kopplung entstehen. Allerdings verschiebt sich der erste Bifurkationspunkt für betragsmäßig kleinere Werte von α in negative Richtung. Das heißt, dass eine stärkere Kopplung den homogenen Zustand bei höheren Temperaturen destabilisiert. Für positive Kopplungsstärken sind die stationären Lösungen auf den Bifurkationszweigen in Phase zueinander und für Negative sind sie gegenphasig. Außerdem wird für kleiner werdende Kopplungsstärke die subkritische Bifurkation wieder zu einer Superkritischen wie im Fall der einfachen Cahn-Hilliard-Gleichung. In einer weitergehenden Analyse wäre hierbei interessant, wie die Phasenbeziehung sich für alle weiteren Bifurkationen verhält und ab welcher kritischen Kopplungsstärke der Übergang von der superkri-

tischen Bifurkation in die subkritische Bifurkation stattfindet.

Als nächstes wurde im Gradientendynamik erhaltenden Fall das Auftreten einer möglichen Unterdrückung des Vergrößerungsprozesses untersucht. Dabei wurden deformierte Vergrößerungszustände für eine Parameterwahl von $L_1 = L_2 = 2\pi$, $\kappa = 0.2$, $\Delta T_c = -0.5$, $\alpha = 1.0$ und gemittelte Dichten $\phi_{1,0} = 1.0$ und $\phi_{2,0} = -0.5$ gefunden. An diesen Profilen der stationären Lösungen, welche dargestellt sind in der Abbildung 21 und zugehörig zu dem Bifurkationsdiagramm in der Abbildung 20 sind, erkennt man, dass die Phasenseparation nicht vollständig in zwei homogene Phasen stattgefunden hat. Diese schwache Art der Unterdrückung des Vergrößerungsprozesses ist allerdings die einzige Art der Unterdrückung, welche im Fall der erhaltenen Gradientendynamik gefunden wurde. Bei der Ungleichheit zwischen L_1 und L_2 wurde mathematisch untersucht, ob eine lineare Unterdrückung des Vergrößerungsprozesses stattfinden kann. Es konnte dabei numerisch ausgeschlossen werden, dass diese möglich ist. Vermutlich ist es außerdem sinnvoll noch weitere Systemparameterkombinationen nach besonderem Verhalten zu untersuchen, vielleicht kann dennoch eine nichtlineare Unterdrückung gefunden werden. Auch wenn dies unwahrscheinlich ist, da im Rahmen dieser Arbeit keine gefunden wurde.

Im zweiten Teil der Untersuchung des gekoppelten Cahn-Hilliard-Modells wurde der Fall der gebrochenen Gradientendynamik untersucht. Dieser wird mithilfe der Gleichung (46) modelliert. Dabei wurde zunächst der Einfluss einer unterschiedlich starken Brechung der Gradientendynamik bei konstanter Wahl von $\alpha = 1.0$ untersucht. Es wurden ansonsten die selben Parameter wie bei der Untersuchung des Verhaltens bei unterschiedlicher Kopplungsstärke im Gradientendynamik erhaltenden Fall verwendet. Die Ergebnisse der Kontinuierung sind in der Abbildung 23 dargestellt. Man erkennt, dass das Bifurkationsverhalten sehr ähnlich dem Verhalten im Gradientendynamik erhaltenden Fall (siehe Abbildung 17) ist: Es sind keine neue Lösungen entstanden und die Hysterese aufgrund der subkritischen Bifurkation ist auch vorhanden. Für wachsendes ε verschiebt sich das Bifurkationsdiagramm in negative Richtung. Das heißt, dass eine stärkere Brechung der Gradientendynamik den homogenen Zustand bei niedrigeren Temperaturen destabilisiert. Außerdem treten Hopf-Bifurkationen für $|\varepsilon| > 1.08853$ auf, da die Eigenwerte in der Dispersionsrelation einen Imaginärteil besitzen (vgl. Abbildung 24b). Diese Lösungen wurden im Rahmen dieser Arbeit nicht weiter untersucht. Um das Verhalten des Gesamtsystems genauer zu verstehen, ist es in einer weiteren Auswertung daher sinnvoll, diese Hopf-Bifurkationen zusätzlich zu verfolgen.

Ein noch nicht zuvor gesehenes Verhalten tritt für $\varepsilon = -1.0$ ein und wurde daher gesondert betrachtet. Auf dem Bifurkationszweigen der homogenen Lösung in dem Bifurkationsdiagramm in der Abbildung 25a ist jeweils der Zustand des Teilsystems bezüglich ϕ_1 homogen, während der Zustand des Teilsystems zu ϕ_2 wie vorher periodisch ist. Außerdem treten im Bifurkationsdiagramm auf den Bifurkationszweigen der homogenen Lösung weitere Bifurkationen auf, wobei periodische Zustände im Teilsystem ϕ_1 entstehen. Dieses Verhalten der stationären Lösungen ist in der Abbildung 26 dargestellt. Eine Erklärung dieses Verhaltens liefert wiederum die lineare Stabilitätsanalyse, denn die erste Komponente der Eigenvektoren bezüglich ihrer Eigenwerte ist jeweils gleich null, während die zweite Komponente ungleich null ist. Da die Komponenten zu den Feldern ϕ_1 und ϕ_2 korrespondieren, bedeutet das, dass der Zustand von ϕ_1 homogen und der von ϕ_2 periodisch ist. Bei Betrachtung der verwendeten Parameter fiel auch ein physikalischer Grund für diese Beobachtung auf: Aufgrund von $\varepsilon = -1.0$ und $\alpha = 1.0$ findet nur in dem ersten Teilsystem

bezüglich ϕ_1 keine Kopplung statt, daher finden die Bifurkationen der beiden Felder unabhängig voneinander statt und es ist das Bifurkationsverhalten wie in der Abbildung 25a zu erkennen. Bei einer weiteren Auswertung könnte die Lösungen der zusätzlichen auftretenden Bifurkationen genauer betrachtet werden und bei anderer Parameterwahl nach Stabilitäten gesucht werden.

Als nächstes wurde der deformierte Vergrößerungszustand aus dem Gradientendynamik erhaltenen Fall unter gebrochener Gradientendynamik untersucht. Das sich ergebende Bifurkationsdiagramm ist in der Abbildung 27 dargestellt. Man erkennt, dass auf den höheren Bifurkationszweigen weitere Bifurkationen mit instabilen Lösungen auftreten. Die Zustände auf dem Zweig mit der maximalen Phasenseparation sind immernoch ähnlich deformiert, wie man in der Abbildung 28 erkennen kann. Unterschiedlich ist jedoch, dass nur ein Zustand der beiden Felder deformiert ist. Unter Umständen könnte bei einer weiteren Auswertung eine Stabilisierung der Bifurkationen auf dem von der homogenen Lösung abgehenden Zweigen gefunden werden. Um diese zu finden, kann eine Kontinuierung beispielsweise in ε von einer instabilen Lösung auf dem jeweiligen Zweig durchgeführt werden.

Zum Abschluss wurde versucht eine lineare und eine nichtlineare Unterdrückung des Vergrößerungsprozesses zu finden. Hierfür wurde zunächst wieder die Taylorentwicklung der Dispersionsrelation der gebrochenen Gradientendynamik betrachtet. Dabei wurde herausgefunden, dass wieder eine Ungleichheit zwischen L_1 und L_2 vorhanden sein muss, da sonst keine lineare Unterdrückung des Vergrößerns stattfinden kann. Es konnten damit Parameter, nämlich $L_1 = 2\pi$, $L_2 = 6\pi$, $\kappa = 1.5$, $\Delta T_c = -3.0$, $\alpha = 0.0$, $\varepsilon = 3.0$, $\phi_{1,0} = 0.0$ und $\phi_{2,0} = 0.0$, gefunden werden, sodass eine lineare Unterdrückung des Vergrößerns stattgefunden hat. Dies kann man an der Dispersionsrelation (siehe Abbildung 29, 29b und 29a) erkennen. Das sich ergebende Bifurkationsdiagramm ist in der Abbildung 31 zu erkennen und die Profile der markierten Lösungen sind in der Abbildung 32 dargestellt. Anhand dessen kann man erkennen, dass der Zustand des ersten Bifurkationszweiges zunächst stabil ist, ab einer bestimmten Temperatur zusätzlich ein Zustand auf dem zweiten Bifurkationszweig stabil wird. Bei höheren Temperaturen ist kein stabiler Zustand zu erkennen, demnach muss ein Zweig einer höheren Bifurkation stabil werden. Dieser Zustand auf dem Zweig der ersten Bifurkation ist aufgrund der linearen Unterdrückung allerdings nicht 1-periodisch sondern besitzt zwei Perioden, sodass keine maximale Phasenseparation erreicht wird. Außerdem ist erkennbar, dass es einen stabilen Bereich auf dem Zweig der zweiten Bifurkation gibt, wo Zustände mit drei Perioden vorhanden sind.

Deshalb wurde versucht, die Parameter so zu variieren, dass die Stabilität auf dem Zweig der zweiten Bifurkation erhalten bleibt, allerdings keine lineare Unterdrückung auftritt. Eine Veränderung von den gemittelte Dichten $\phi_{1,0}$ und $\phi_{2,0}$ ruft anstelle einer linearen Unterdrückung des Vergrößerungsprozesses Hopf-Bifurkationen hervor, welche hier im Rahmen dieser Arbeit nicht verfolgt werden. Das Verhalten dieser könnte auch von Interesse sein, da vielleicht hier eine nichtlineare Unterdrückung des Vergrößerungsprozesses stattfinden könnte. Schlussendlich wurde in ε variiert. Unter Verwendung der Parameter $L_1 = 2\pi$, $L_2 = 6\pi$, $\kappa = 1.5$, $\Delta T_c = -3.0$, $\alpha = 0.0$, $\varepsilon = 1.0$ und gemittelte Dichten $\phi_{1,0} = 0.0$ und $\phi_{2,0} = 0.0$ wurde das Bifurkationsdiagramm in der Abbildung 33 dargestellt. Dabei ist eine nichtlineare Unterdrückung des Vergrößerns erkennbar: Bei der ersten Bifurkation auf dem homogenen Zweig handelt es sich um eine superkritische Bifurkation. Auf dem entstehenden Zweig tritt bei niedrigerer Temperatur eine Drift-Pitchfork-Bifurkation auf.

Das heißt die phasenseparierte Lösung wird instabil und es entstehen zwei neue stabile, bewegte Lösungen, welche in der Abbildung grün dargestellt sind. Auch auf dem grünen Zweig tritt eine Drift-Pitchfork-Bifurkation auf, sodass wieder eine stabile, nichtbewegte Lösung mit einer Periode entsteht. Dies kann der Abbildung 35 entnommen werden. Interessant daran ist nun der zweite Bifurkationszweig des homogenen Zweiges, da die anfängliche Instabilität über eine subkritische Bifurkation verschwindet. In einem Temperaturintervall von $[-1.828, 0.771]$ sind die Zustände der roten und blauen Linie bistabil. Für $-1.828 > a > -2.235$ ist die Lösung des zweiten Bifurkationszweiges stabil, sodass eine nichtlineare Unterdrückung des Vergrößerungsprozesses stattfindet, da es sich bei dem weiteren stabilen Zustand um einen bewegten Zustand handelt, welcher kein stationärer Zustand mit maximaler Vergrößerung ist. In der Abbildung 37 erkennt man nun, dass der Bereich für eine mögliche nichtlineare Unterdrückung allerdings viel größer ist, als der hier gefundene Bereich der nichtlinearen Unterdrückung. Möglicherweise ist es demnach möglich andere Parameterkonstellationen zu finden, sodass der Bereich, wo eine nichtlineare Unterdrückung des Vergrößerens stattfindet, sich über eine größere Temperaturspanne sich erstreckt. Fraglich ist außerdem, ob auch für Gleichheit von L_1 und L_2 auch eine nichtlineare Unterdrückung des Vergrößerungsprozesses beobachtet werden kann.

Literatur

- [1] J.W.Cahn. *Phase separation by spinodal decomposition in isotropic systems*. The Journal of Chemical Physics, nr.42, S. 93-99, 1965.
- [2] F.H. Busse and M. Bestehorn. *Hydrodynamik und Strukturbildung: Mit einer kurzen Einführung in die Kontinuumsmechanik*. Springer-Lehrbuch. Springer Berlin Heidelberg, 2006.
- [3] J.W. Cahn und J.E. Hilliard. *Free energy of nonuniform system (1. Interfacial free energy)*. The Journal of Chemical Physics, nr.28, S. 258-267, 1958.
- [4] J.S.Langer. *An introduction to the kinetics of first-order phase transitions*. C. Godrèche (ed). Solids far from Equilibrium, S. 297-363, Cambridge University Press,, 1992.
- [5] D. Schüler, S. Alonso, A. Torcini, and M. Bär. Spatio-temporal dynamics induced by competing instabilities in two asymmetrically coupled nonlinear evolution equations. *Chaos*, 24:043142, 2014.
- [6] M. Basler, P.A. Tipler, R. Dohmen, G. Mosca, C. Heinisch, A. Schleitzer, M. Zillgitt, J. Wagner, and C. Kommer. *Physik: für Wissenschaftler und Ingenieure*. Springer Berlin Heidelberg, 2014.
- [7] Prof. Dr. Uwe Thiele. *Skript der Vorlesung im WS17/18 „Theoretische nichtlineare Physik 1“ Kapitel 5*.
- [8] C. Gerthsen and D. Meschede. *Gerthsen Physik*. Springer-Lehrbuch. Springer Berlin Heidelberg, 2010.

- [9] Prof. Dr. Uwe Thiele. *Skript der Vorlesung im SS18 „Theoretische nichtlineare Physik 2“ Kapitel 3*.
- [10] D. Langemann and C. Reisch. *So einfach ist Mathematik – Partielle Differenzialgleichungen für Anwender*. Springer Berlin Heidelberg, 2018.
- [11] M. Bartelmann, B. Feuerbacher, T. Krüger, D. Lüst, A. Rebhan, and A. Wipf. *Theoretische Physik*. Springer Berlin Heidelberg, 2014.
- [12] *Mathematisches Pendel* (https://de.wikipedia.org/wiki/Mathematisches_Pendel Zugriff am 06.09.2019 um 14:59 Uhr). Wikipedia, die frei Enzyklopädie.
- [13] S.H. Strogatz. *Nonlinear Dynamics and Chaos: With Applications to Physics, Biology, Chemistry, and Engineering*. Studies in Nonlinearity. Avalon Publishing, 2014.
- [14] R.M. Dreizler and C.S. Lüdde. *Theoretische Physik 4: Statistische Mechanik und Thermodynamik*. Historical & Cultural Astronomy. Springer Berlin Heidelberg, 2016.
- [15] R.G. Parr and Y. Weitao. *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules*. International Series of Monographs on Chemistry. Oxford University Press, 1994.
- [16] Prof. Dr. Uwe Thiele. *Folien zum Vortrag mit dem Thema: Numerical Continuation - A step by step introduction Prelude to Münsteranian Tutorials at <https://www.uni-muenster.de/-CeNoS/Lehre/Tutorials/continuation.html>*. Universität Münster, November 2018.
- [17] M. Richter. *Grundwissen Mathematik für Ingenieure*. Vieweg+Teubner Verlag, 2008.
- [18] H. Triebel. *Analysis und mathematische Physik*. Birkhäuser Basel, 2013.
- [19] J. Frochte. *Finite-Elemente-Methode: Eine praxisbezogene Einführung mit GNU Octave/MATLAB*. Carl Hanser Verlag GmbH & Company KG, 2016.