

Bachelorarbeit
im Fachbereich
Physik
im Rahmen des Studiengangs Physik, 1-Fach-Bachelor

**Modellierung der Dynamik von eindimensionalen
Entmischungsfronten**

Modelling of the dynamics of one dimensional demixing fronts

Vorgelegt von
Alexander Kirchhoff
am 4. September 2017

Erstgutachter:
Prof. Dr. Uwe Thiele
Zweitgutachterin:
Dr. Svetlana Gurevich

Westfälische Wilhelms-Universität Münster



Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
1.1. Aufbau dieser Arbeit	2
2. Hintergründe zur Cahn-Hilliard-Gleichung	3
2.1. Skalierung	5
3. Zeitlich konstante Lösungen	5
3.1. Langzeitverhalten der vereinfachten Cahn-Hilliard-Gleichung	7
3.2. Übertragung auf eine mechanische Bewegungsgleichung	7
3.3. Der Einfluss des aktiven Terms auf die Gleichgewichtswerte	9
3.4. Bifurkationsdiagramm	12
4. Frontpropagation in instabile Zustände	14
4.1. Sattelpunktsnäherung	15
4.2. Geschwindigkeit und Wellenzahl der ersten Front	16
4.3. Stabilität von Fronten	18
4.4. Nichtlineare Aspekte und die zweite Front	20
5. Methoden der Zeitsimulation und der Auswertung	20
5.1. Zeitentwicklung	20
5.2. Wahl der Ortsdiskretisierung	21
5.3. Wahl der Anfangsbedingungen	22
5.4. Bestimmung von Geschwindigkeit und Wellenzahl	23
6. Resultate	25
6.1. Vereinfachte Cahn-Hilliard-Gleichung	25
6.1.1. Vergleich mit den Ergebnissen des Kontinuierungsverfahrens	27
6.2. Erweiterte Cahn-Hilliard-Gleichung	29
7. Zusammenfassung und Ausblick	34
A. Anhang	35
A.1. Anwendung der Cardanoischen Formeln zur Bestimmung der Gleichgewichtslösungen	35
A.2. Bisektionsverfahren	36
A.3. Koeffizienten der Runge-Kutta-4-5-Fehlberg-Methode und Finite Differenzen	36
A.4. Dispersionsrelation der Differenzengleichung	38
A.5. Technik: Numerische Integration	38
B. Verzeichnisse	39
B.1. Literaturverzeichnis	39

1. Einleitung

Das Thema dieser Bachelorarbeit ist die numerische Untersuchung eindimensionaler Entmischungsfronten in einer vereinfachten Variante der Cahn-Hilliard-Gleichung hinsichtlich ihrer Ausbreitungsgeschwindigkeit und der Periodenlänge des Musters, das sie hinterlassen. Die zugrunde liegende Differentialgleichung lautet [1]:

$$\partial_t c = \partial_{xx} \left(-\partial_{xx} c - c + c^3 \right). \quad (1.1)$$

Dabei ist $c(x, t)$ eine reelle Funktion von Ort ($x \in \mathbb{R}$) und Zeit und könnte physikalisch für eine Konzentration eines Stoffes stehen. Die Ermittlung der oben angesprochenen Eigenschaften der Entmischungsfronten erfolgt durch eine Zeitsimulation. Dabei wird Gl. (1.1) auf einer begrenzten, festen Domäne entwickelt. Es werden Randbedingungen gewählt, die keinen Fluss durch den Rand erlauben, was in diesem Fall dem Verschwinden der ersten und dritten räumlichen Ableitung von c auf dem Rand entspricht.

Des Weiteren werden dieselben Untersuchungen an einer erweiterten Form obiger Gleichung durchgeführt [2]:

$$\partial_t c = \partial_{xx} \left(-\partial_{xx} c - c + c^3 + \lambda (\partial_x c)^2 \right). \quad (1.2)$$

Die Cahn-Hilliard-Gleichung wurde ursprünglich zur Beschreibung von Phasentrennung in binären Mischungen eingeführt und ist seitdem in vielen physikalischen Modellen zu finden [1]. Im Bilde eines Flüssigkeitsgemischs aus zwei Stoffen ist die Konzentration eines Stoffes zu Beginn räumlich homogen, und nimmt im Zuge der Entmischung an einigen Stellen größere, an anderen Stellen kleinere Werte an. Dort, wo die Konzentration des einen Stoffes sinkt, steigt zwangsweise die des anderen Stoffes an.

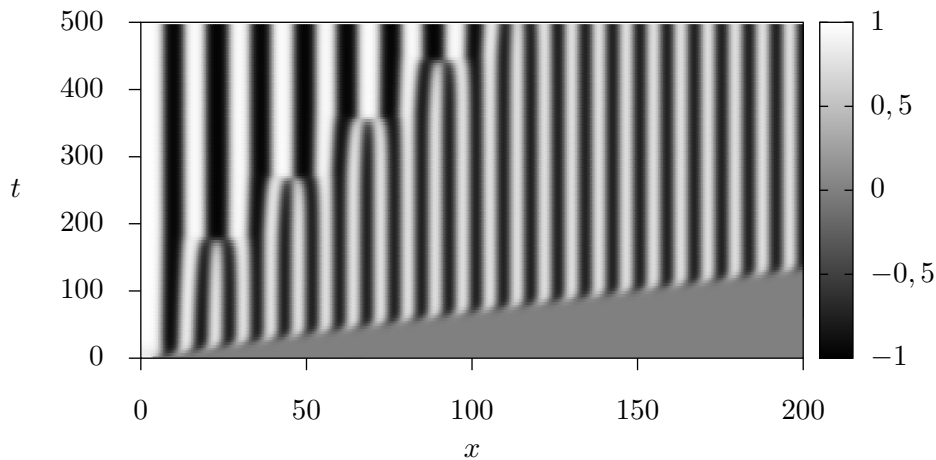


Abbildung 1: Die Zeit-Ort-Darstellung einer Zeitsimulation von Gl. (1.1) zeigt die Entmischungsfront, die sich in diesem Fall von einer kleinen, initialen Störung am rechten Rand von rechts nach links ausbreitet. Es ist zu erkennen, dass sich auf dem periodischen Muster, das die erste Front hinterlässt, eine zweite Front ausbreitet, die ihrerseits ein Muster mit einer größeren Periodenlänge bildet.

Auch die Gleichungen (1.1) und (1.2) sorgen für die Bildung solcher Entmischungsmuster [3]. Homogene Lösungen mit $|c| < \frac{1}{\sqrt{3}}$ sind instabil und kleinste Perturbationen führen zur Bildung eines Wellenmusters begrenzter Amplitude. Sind die anfänglichen Perturbationen räumlich lokalisiert, so geschieht die Entmischung zunächst am Ort der initialen Störung selbst, und erst dann in ihrer Nachbarschaft. Aus diesem Grund kann von einer räumlichen Ausbreitung der Entmischung oder auch von einer Entmischungsfront gesprochen werden [4]. Dies ist in

Abbildung 1 durch eine Zeitsimulation von Gl. (1.1) illustriert. Zu sehen ist, dass sich auf einer homogenen Lösung eine Entmischungsfrent von rechts nach links ausbreitet. Charakteristisch für die Cahn-Hilliard-Gleichung ist zudem die Bildung einer zweiten Front, die der ersten folgt und für eine Zunahme der Periodenlänge des Wellenmusters sorgt [1]. Man nennt sie aufgrund dieser Eigenschaft auch *Coarsening-Frent*.

Die erweiterte Cahn-Hilliard-Gleichung (Gl. (1.2)) findet bei der Modellierung aktiver Medien Anwendung [2]. Unter einem aktiven Medium ist beispielsweise eine Nährlösung einer Bakterienkultur zu verstehen. Die Bakterien tragen dabei durch die Umsetzung chemischer in kinetische Energie aktiv zur Dynamik des Mediums bei. Während sich Gl. (1.1) noch aus einem Funktional ableiten lässt, ist dies durch den zusätzlichen, nichtlinearen Term $\lambda (\partial_x c)^2$ nicht mehr möglich, der zudem die Invarianz der Differentialgleichung unter Vorzeichenvertauschung von c zunichtemacht. Mithilfe der Simulationen soll eine qualitative Aussage über den Einfluss des Parameters λ auf die Entmischungsfrenten gemacht werden.

1.1. Aufbau dieser Arbeit

Die Arbeit ist wie folgt strukturiert: Begonnen wird mit einer Beleuchtung des physikalischen Hintergrunds und der Herkunft der Cahn-Hilliard-Gleichung nach [5, 6]. Daraufhin wird gezeigt, wie die allgemeine Form der Gleichung durch eine Vereinfachung und eine anschließende Skalierung in die Form aus Gl. (1.1) gebracht werden kann (vgl. [3, 7]).

In Abschnitt 3 wird zunächst das statische Problem, d.h. $\partial_t c = 0$, betrachtet. Ein Blick auf die zeitlich konstanten Lösungen ist für die Untersuchung von Entmischungsfrenten sehr wichtig, weil die Muster, die sie hinterlassen, auf begrenzten Zeitskalen durch solche Lösungen beschrieben werden können [1]. Ferner soll dieser Abschnitt das Verhalten der Cahn-Hilliard-Gleichung im Kontext der Entmischung herleiten. Dazu werden verschiedene Herangehensweisen präsentiert: Zunächst wird aus den allgemeinen Eigenschaften und stark vereinfachenden Annahmen im Rahmen des *Langzeitverhaltens* der Differentialgleichung eine Methode zur Bestimmung der maximalen Amplitude des Wellenmusters gezeigt. Dies wird sowohl für die vereinfachte Cahn-Hilliard-Gleichung in (1.1) nach [4, 8] als auch für die erweiterte Gleichung in (1.2) nach [2] gemacht. Ferner wird die Transformation des stationären Problems in ein mechanisches, anschaulicheres Problem vorgestellt, mit dessen Hilfe qualitativ Muster erklärt werden können, die sich nicht aus der Betrachtung des Langzeitverhaltens ergeben. Als dritte Möglichkeit der Bestimmung zeitlich konstanter Lösungen werden Ergebnisse eines Kontinuierungsverfahrens vorgestellt (vgl. [9, 10]). Diese Ergebnisse werden bei der Diskussion der numerischen Resultate benötigt.

In Abschnitt 4 wird die Dynamik von Fronten in linearer Näherung diskutiert. Es wird gezeigt, wie die Geschwindigkeit einer in einen räumlich homogenen Zustand propagierenden Front und die Wellenzahl des Musters, das sie hinterlässt, berechnet werden können (nach [11, 12]). Basierend auf [13] werden zudem Aspekte der Frontstabilität vorgestellt.

Abschnitt 5 befasst sich mit numerischen und technischen Themen zu dieser Arbeit und soll einen möglichst präzisen, zugleich aber selektiven Einblick in die Generierung der Ergebnisse dieser Arbeit gewähren. Der Schwerpunkt liegt dabei nicht auf der Numerik selbst, sondern auf eventuelle Besonderheiten und Schwierigkeiten, die sich bei der Simulation der Cahn-Hilliard-Gleichung ergeben und die teilweise mit der Theorie aus Abschnitt 4 erklärt werden können.

In Abschnitt 6 werden die numerischen Resultate präsentiert und interpretiert. Ein Großteil dieses Kapitels widmet sich der Diskussion der Gültigkeit der Ergebnisse und der Verifikation der numerischen Resultate anhand eines Vergleichs mit den Lösungen des Kontinuierungsverfahrens.

2. Hintergründe zur Cahn-Hilliard-Gleichung

John W. Cahn und John E. Hilliard entwickelten 1958 ein Modell zur Beschreibung Spinodaler Phasenseparation in Legierungen [1]. Seitdem findet dieses Modell jedoch auch bei der Beschreibung der Phasentrennung in Flüssigkeitsgemischen, Gläsern oder gar biologisch komplexeren Systemen Anwendung [14]. Der Term „spinodal“ kennzeichnet eine Form der Entmischung, die aus der Dynamik des Systems selbst entstehen kann und keine stochastischen Elemente zur Beschreibung benötigt. Ein recht einfaches Modell, mit dessen Hilfe die Untersuchung von zu spinodaler Entmischung fähigen System in einem thermodynamischen Kontext motiviert werden kann, ist das Van-der-Waals-Gas. Bekannt ist, dass die Isotherme, also der Druck p als Funktion des Volumens V bei konstanter Temperatur T , unterhalb einer kritischen Temperatur T_c auf einem von T abhängigen Intervall monoton steigend ist [15, 16]. Auf diesem Intervall für das Volumen gilt $\frac{\partial p}{\partial V} > 0$, was physikalisch nicht sinnvoll ist. Die Menge aller Intervalle für alle $T \in (0, T_c]$ macht den spinodalen Bereich aus. Zustände innerhalb dieses Bereiches sind instabil und es kommt zur Phasentrennung. Dieses Prinzip geht nicht verloren, wenn zu komplexeren Systemen übergegangen wird [5, 6]. Betrachtet werde ein Gemisch aus Öl und Wasser, welches bei hohen Temperaturen auf einer makroskopischen Skala gut durchmischt und nahezu homogen ist. Wird die Mischung abgekühlt, so wird der homogene Zustand instabil und die Stoffe entmischen sich, d.h. es bilden sich Gebiete, in denen mehr Wasser ist und solche, in denen mehr Öl ist. Da die Präparation von instabilen Zuständen praktisch kaum möglich ist, tritt Spinodale Entmischung in der Natur folglich dann auf, wenn ein zu Beginn stabiler Zustand erst durch eine Änderung eines äußeren Parameters, beispielsweise durch Temperaturabfall, instabil wird [14].

Vor dem Hintergrund eines Flüssigkeitsgemischs aus zwei Stoffen A und B soll die Cahn-Hilliard-Gleichung nun phänomenologisch abgeleitet werden, wobei die wesentlichen Anhaltspunkte der nun folgenden Argumentation [4] und [7] entnommen sind. Die Konzentration jedes Stoffes sei an jedem Ort $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$ und zu jeder Zeit $t \in \mathbb{R}$ durch eine ausreichend oft stetig differenzierbare Funktion $c_A(\mathbf{x}, t)$ bzw. $c_B(\mathbf{x}, t)$ gegeben. Die Gesamtkonzentration $c_A + c_B$ sei räumlich konstant, sodass zur vollständigen Beschreibung des Systems nur eine Konzentration ausreicht. Man wähle $c_A = c$. Die Masse des Systems,

$$m := \int_V c \, d\mathbf{x}, \quad (2.1)$$

soll zeitlich erhalten bleiben. Wird die Kontinuitätsgleichung für die Konzentration aufgestellt, so folgt, dass die zeitliche, partielle Ableitung von c zur Divergenz einer Stromdichte \mathbf{j} proportional ist [3]:

$$\partial_t c = -\nabla \cdot \mathbf{j}. \quad (2.2)$$

Dabei müssen die Randbedingungen so gewählt sein, dass sie keinen Fluss durch den Rand erlauben, d.h.

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{j} \Big|_{\partial V} = 0, \quad (2.3)$$

wobei \mathbf{n} den Normalenvektor auf dem Rand ∂V des Volumens V bezeichnet. Der Strom \mathbf{j} ist über eine Mobilität M zum negativen Gradienten des chemischen Potentials μ proportional [7]:

$$\mathbf{j} = -M \nabla \mu, \quad M > 0. \quad (2.4)$$

Die Mobilität kann im Allgemeinen von der Konzentration abhängen, wird hier jedoch als Konstante angenommen. Das chemische Potential selbst wird durch die Variation der aus der Thermodynamik bekannten freien Energie F nach der Konzentration, $\frac{\delta F}{\delta c}$, ermittelt [4]. Die freie Energie kann als Funktional von c berechnet werden und ist folgendermaßen definiert [7]:

$$F[c(\mathbf{x}, t)] = \int_V \left[f(c(\mathbf{x}, t)) + \frac{K}{2} (\nabla c(\mathbf{x}, t))^2 \right] d\mathbf{x}. \quad (2.5)$$

Der Integrand besteht hierbei aus einer lokalen freien Energiedichte f , die allein von c abhängt, und einem Term, der den Gradienten der Konzentration beinhaltet. Die freie Energiedichte f als Funktion von c ist im Modell von Cahn und Hilliard ein Doppelmuldenpotential, d.h. es existieren zwei Konzentrationen, an denen f lokal minimal wird [17]. Liegt die mittlere Konzentration zwischen diesen Minimalwerten, so kann die freie Energie abnehmen, wenn die Konzentration gegen diese Minimalwerte strebt. Diese Aussage ist rein qualitativ zu verstehen und kann durch einige Rechnungen noch weiter präzisiert werden.

Der zweite Term berücksichtigt den Energiebeitrag aller Phasengrenzen. Eine Phasengrenze ist gleichbedeutend mit einer räumlichen Änderung von c oder auch mit einem nicht verschwindenden Konzentrationsgradienten. Damit ihr Beitrag zur Energie auch tatsächlich positiv ist, muss der in Gl. (2.5) neu eingeführte Koeffizient K größer Null sein [4]. Der zweite Term sorgt für eine Begünstigung der Zunahme der charakteristischen Längenskala¹, da im thermodynamischen Kontext die freie Energie stets minimiert wird. Unter der Zunahme der Längenskala ist beispielsweise zu verstehen, dass sich kleinere Tropfen zu einem größeren vereinen. Wird die Variation von F ,

$$\frac{\delta F}{\delta c} = \left(\frac{\partial}{\partial c} - \nabla \frac{\partial}{\partial (\nabla c)} \right) \left[f(c) + \frac{K}{2} (\nabla c)^2 \right] = \frac{\partial f}{\partial c} - K \Delta c, \quad (2.6)$$

für μ in Gl. (2.4) eingesetzt und der sich daraus ergebende Ausdruck für den Strom in Gl. (2.2) verwendet, so folgt die partielle Differentialgleichung:

$$\partial_t c = M \Delta \left(\frac{\partial f}{\partial c} - K \Delta c \right). \quad (2.7)$$

In einem physikalischen Kontext ist die zeitlich monotone Abnahme der freien Energie F von höchstem Interesse. Da es sich bei dem Funktional in Gl. (2.5) um ein *Lyapunov*-Funktional handelt, ist dies stets gewährleistet [4]:

$$\begin{aligned} \frac{dF}{dt} &= \int_V \left[\frac{\partial f}{\partial c} \partial_t c + K (\nabla c) (\nabla \partial_t c) \right] dx \\ &= \int_V \left[\frac{\partial f}{\partial c} \partial_t c - K (\Delta c) (\partial_t c) \right] dx + K \int_{\partial V} (\nabla c) (\partial_t c) \cdot d\mathbf{n} \end{aligned} \quad (2.8a)$$

$$= \int_V \left[\left(\frac{\partial f}{\partial c} - K (\Delta c) \right) M \Delta \left(\frac{\partial f}{\partial c} - K (\Delta c) \right) \right] dx \quad (2.8b)$$

$$= \int_{\partial V} \left[-\frac{\delta F}{\delta c} \mathbf{j} \right] \cdot d\mathbf{n} - M \int_V \left[\nabla \frac{\delta F}{\delta c} \right]^2 dx \leq 0. \quad (2.8c)$$

Dabei wurde in den Gleichungen (2.8a) und (2.8c) partiell integriert und der Gaußsche Integralsatz [18] in Kombination mit den Randbedingungen aus Gl. (2.3) verwendet. In Gl. (2.8b) wurde die Differentialgleichung aus (2.7) eingesetzt.

Im Rahmen dieser Arbeit soll die Cahn-Hilliard-Gleichung in einer Dimension behandelt werden. Aus dem Vektor \mathbf{x} wird dann die Variable $x \in \mathbb{R}$ und das Volumen V ist ein Intervall auf der x -Achse. Mit Gl. (2.7) folgt:

$$\partial_t c = M \partial_{xx} \left(\frac{\partial f}{\partial c} - K \partial_{xx} c \right). \quad (2.9)$$

In einer Dimension lautet der Strom nach Gl. (2.4):

$$j = -M \partial_x \frac{\delta F}{\delta c} \stackrel{(2.6)}{=} M \left(K \partial_{xxx} c - \frac{\partial^2 f}{\partial c^2} \partial_x c \right). \quad (2.10)$$

¹Bei periodischen Mustern für eine Zunahme der Periodenlänge.

Im Falle eines begrenzten Intervalls $[0, L]$ wird das Verschwinden des Stroms auf dem Rand für beliebige K und f demnach durch folgende Randbedingungen gewährleistet:

$$\partial_x c \Big|_{0,L} = 0 \quad , \quad \partial_{xxx} c \Big|_{0,L} = 0. \quad (2.11)$$

Um die in der Einleitung genannte Differentialgleichung (1.1) zu erhalten, muss die Funktion $f(c)$ konkretisiert und Gl. (2.9) skaliert werden. Dies soll im Folgenden geschehen.

2.1. Skalierung

Das Doppelmuldenpotential für die freie Energiedichte $f(c)$ soll der Einfachheit durch ein Polynom vierten Grades beschrieben werden [7]. Dies entspricht der Approximation der Energiedichte durch ihre Taylorentwicklung bis zur vierten Ordnung. Um die zu untersuchende Differentialgleichung (2.9) zu vereinfachen, kommt es zu Gute, dass durch die äußere Ableitung nach dem Ort auf der rechten Seite dieser Gleichung prinzipiell alle konstanten Terme der Ableitung der Energiedichte irrelevant werden. Konstante Terme oder Terme der Ordnung c^1 in f müssen also nicht berücksichtigt werden: $f(c) = a_4 c^4 + a_3 c^3 + a_2 c^2$. Zunächst wird der Term in dritter Ordnung von c durch eine lineare Verschiebung der Konzentration, $c \rightarrow c - \frac{a_3}{4a_4}$, eliminiert, damit die Energiedichte symmetrisch bezüglich Vorzeichenvertauschung von c ist [3]. Die Differentialgleichung lautet dann:

$$\partial_t c = M \partial_{xx} \left(a c^3 + b c - K \partial_{xx} c \right) \quad (2.12)$$

mit $a = 4a_4$ und $b = 2 \left(a_2 - \frac{3a_3^2}{8a_4} \right)$. Im ersten Schritt der Skalierung sollen die Koeffizienten der Terme von $\frac{\partial f}{\partial c}$ den Betrag 1 erhalten. Mit $c = \gamma \tilde{c}$ folgt die Gleichung $|b| = \gamma^2 |a|$ und damit:

$$\gamma \partial_t \tilde{c} = M \partial_{xx} \gamma |b| \left(\tilde{c}^3 + \frac{b}{|b|} \tilde{c} - \frac{K}{|b|} \partial_{xx} \tilde{c} \right). \quad (2.13)$$

Im zweiten Schritt werden Ort und Zeit mit $x = \sqrt{\frac{K}{|b|}} \tilde{x}$ und $t = \frac{K}{Mb^2} \tilde{t}$ skaliert. Der Koeffizient a ist sicher positiv, da es physikalisch nur Sinn ergibt, wenn die Energiedichte für beliebig hohe Konzentrationen ansteigt. Damit sich auch effektiv ein Doppelmuldenpotential ergibt, muss b negativ sein. Es bleibt

$$\partial_{\tilde{t}} \tilde{c} = \partial_{\tilde{x}\tilde{x}} \left(\tilde{c}^3 - \tilde{c} - \partial_{\tilde{x}\tilde{x}} \tilde{c} \right) \quad (2.14)$$

zu untersuchen, was eben genau der eingangs gezeigten Gl. (1.1) entspricht. Die lineare Verschiebung und die Skalierung zeigen, dass Gl. (2.14) äquivalent zur Cahn-Hilliard-Gleichung mit beliebigen Polynomen 4. Ordnung ist, die die Form eines nach oben geöffneten Doppelmuldenpotentials besitzen. Im Folgenden werden die Tilden stets weggelassen. Der Term „Konzentration“ wird zur Bezeichnung der Größe c beibehalten, obwohl es sich im allgemeinen Sinne eher um einen „Ordnungsparameter“ handelt [16].

3. Zeitlich konstante Lösungen

Für die Untersuchung der Dynamik eines Entmischungsmusters hinter einer Front sind Lösungen, die $\partial_t c = 0$ lösen, von Belang. Dies gilt sowohl für die vereinfachte Cahn-Hilliard-Gleichung aus Gl. (1.1) als auch für ihre erweiterte Form aus Gl. (1.2). Offensichtlich ist jede konstante Konzentrationsverteilung Lösung der beiden Differentialgleichungen. Um stabile homogene Zustände von instabilen unterscheiden zu können, wird eine räumlich und zeitlich homogene Lösung c_0 versehen mit einer Perturbation kleiner Amplitude ϵ betrachtet: $c(x, t) = c_0 + \epsilon e^{rt+ikx}$. Wird

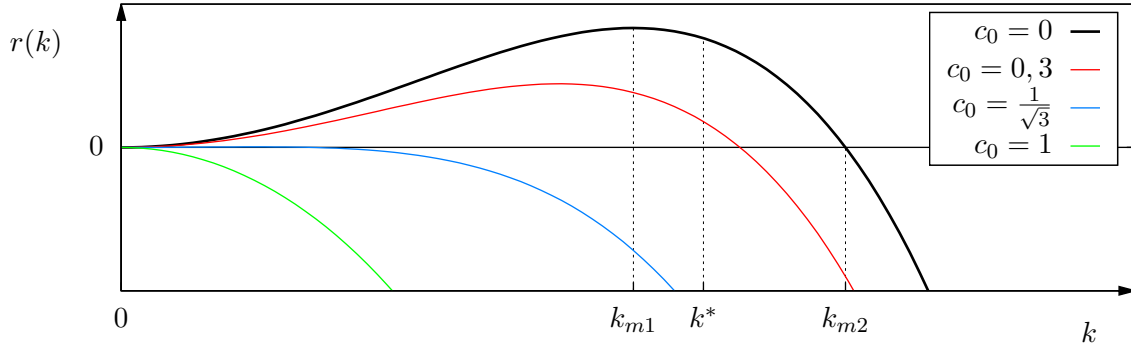


Abbildung 2: Zu sehen ist die Wachstumsrate r in Abhängigkeit der Wellenzahl k aus Gl. (3.2) für verschiedene mittlere Konzentrationen c_0 . Für die Linie mit $c_0 = 0$ sind einige wichtige Wellenzahlen eingezeichnet. Die größte Wellenzahl aller wachsenden Fouriermoden ist k_{m2} , die Wellenzahl der in linearer Näherung am stärksten wachsenden Mode ist k_{m1} und die Wellenzahl des Musters, dass die in räumlich homogene Zustände einfallende Front hinterlässt, ist k^* .

dieser Ansatz exemplarisch in die erweiterte Cahn-Hilliard-Gleichung (1.2) eingesetzt, so folgt:

$$\epsilon r e^{rt+ikx} = \partial_{xx} \left[c_0^3 + 3c_0^2 \epsilon e^{rt+ikx} + \mathcal{O}(\epsilon^2) - c_0 - \epsilon e^{rt+ikx} + \epsilon k^2 e^{rt+ikx} - \lambda k^2 \epsilon^2 e^{rt+ikx} \right]. \quad (3.1)$$

Da ϵ klein ist, können Terme der Ordnung zwei oder höher in ϵ vernachlässigt werden. Wegen $(\partial_x c)^2 \sim \mathcal{O}(\epsilon^2)$ folgt, dass das sich aus Gl. (3.1) ergebende Resultat sowohl für die vereinfachte als auch für die erweiterte Cahn-Hilliard-Gleichung gilt:

$$r(k) = -k^2 \left(k^2 - \left(1 - 3c_0^2 \right) \right). \quad (3.2)$$

Die Größe $r(k)$ hat hierbei die Funktion einer zeitlichen Wachstumsrate und k ist eine Wellenzahl. Gleichung (3.2) erlaubt es, zu identifizieren, welche Fouriermoden in erster Ordnung wachsen würden, d.h. instabil sind. Dazu wird r als Funktion von k betrachtet, wie sie in Abb. 2 dargestellt ist. Wegen $r|_{k \rightarrow \infty} \rightarrow -\infty$ werden beliebig hohe Fouriermoden unterdrückt und im Einklang mit der Massenerhaltung ist $r(k=0) = 0$. Positive r existieren im Intervall $0 < k < \sqrt{1 - 3c_0^2} =: \sqrt{\alpha}$. Das bedeutet aber auch, dass **nur** auf homogenen Zuständen mit $|c_0| < \frac{1}{\sqrt{3}} \approx 0,577$ Perturbationen wachsen können, d.h. dass nur unter dieser Bedingung für die Anfangskonzentration Phasentrennung stattfinden kann. Das Intervall $[-\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}}]$ ist im allgemeinen Sinn als der spinodale Bereich der vereinfachten, skalierten Cahn-Hilliard-Gleichung zu verstehen.

Die Größe $\sqrt{\alpha}$ entspricht der maximalen Fouriermode k_{m2} , die zeitliches Wachstum verspricht. Ferner kann die Mode bestimmt werden, die im Rahmen der linearen Näherung am schnellsten wächst. Sie wird erhalten aus $\frac{dr}{dk}(k_{m1}) = 0 \Rightarrow k_{m1} = \sqrt{\frac{\alpha}{2}}$. Nichtsdestotrotz ist k_{m1} nicht diejenige Wellenzahl, die sich auf einer langen Zeitskala durchsetzt. Wie die Theorie der Frontpropagation in Abschnitt 4.2 zeigen wird, liegt die sich am Ende bildende Wellenzahl $k = k^*$ zwischen k_{m1} und k_{m2} (siehe hierzu Abb. 2). Die Rechnungen dazu erfordern u.a. komplexe Wellenzahlen, da eine Entmischungsfrent schließlich lokalisiert werden kann und daher auch eine Abhängigkeit der Einhüllenden des Wellenmusters vom Ort gegeben sein sollte. Ferner wird die Größe r nicht weiter verwendet, sondern an ihrer Stelle die *Dispersionsrelation* $\omega(k) = ir(k) = -ik^2(k^2 - \alpha)$.

Das in diesem Abschnitt beschriebene Wachstum der Fouriermoden gilt natürlich nur in linearer Näherung und ist in Wahrheit begrenzt. Des Weiteren können wegen $\partial_t m = 0$ mit m aus Gl. (2.1) räumlich homogene Lösungen nicht auf der kompletten betrachteten Domäne anwachsen oder sich absenken. Stattdessen strebt die Konzentration gegen zwei verschiedene Gleichgewichtswerte

$c_{h1,2}$, die die mittlere Konzentration c_0 einschließen. Es wurde bereits diskutiert, dass diese im Zusammenhang mit der Existenz von zwei lokalen Minima der Energiedichte f stehen. Wie jedoch im folgenden gezeigt werden soll, ist es nicht allgemein gültig, dass die Gleichgewichtswerte mit den Minima $c_{m1,2}$ übereinstimmen.

3.1. Langzeitverhalten der vereinfachten Cahn-Hilliard-Gleichung

In diesem Abschnitt wird sich auf die Berechnung der Gleichgewichtswerte der Cahn-Hilliard-Gleichung ohne aktiven Term beschränkt. Um allgemeine Doppelmuldenpotentiale für die freie Energiedichte f diskutieren zu können und um sich nicht auf Polynome 4. Ordnung für die Energiedichte beschränken zu müssen, wird noch einmal Gl. (2.9) betrachtet. Die zentralen Ideen der nun folgenden Rechnung sind [4] und [8] entnommen worden.

Das System befinde sich in einem Zustand zu späten Zeiten, sodass die Entmischung schon größtenteils stattgefunden hat. Neben der zeitlichen Ableitung von c verschwindet im Gleichgewicht zudem die Stromdichte \mathbf{j} . Die sich bei der Integration des Stroms aus Gl. (2.10) ergebende Konstante kann als das chemische Potential verstanden werden:

$$\mu = \frac{\partial f}{\partial c} - K \partial_{xx} c. \quad (3.3)$$

Aufgrund der Massenerhaltung kann die Konzentration in einem System mit beliebigem m (Gl. (2.1)) nicht im gesamten Bereich auf eine der beiden Gleichgewichtslösungen abfallen oder ansteigen. Es wird also immer einen kleinen Bereich geben, in dem die Konzentration zwischen c_{h1} und c_{h2} übergeht. Im Idealfall existiert dann nur noch eine Phasengrenze zwischen den beiden Gleichgewichtswerten, wie in Abb. 3a dargestellt. In den Randgebieten, in der Abbildung mit x_a und x_b bezeichnet, seien die räumlichen Ableitungen von c vernachlässigbar klein und die Konzentration selbst hat eine der beiden Gleichgewichtswerte c_{h1} oder c_{h2} angenommen. Damit folgt für Gl. (3.3) ausgewertet an diesen Stellen:

$$\mu = \frac{\partial f(c_{h2})}{\partial c} = \frac{\partial f(c_{h1})}{\partial c}. \quad (3.4)$$

Eine weitere Bedingung zur Bestimmung der Gleichgewichtswerte ergibt sich, wenn Gl. (3.3) mit $\partial_x c$ multipliziert und über die x -Achse durch die Phasengrenze integriert wird. Aufgrund der Konstanz von μ ergibt sich dann:

$$\mu(c_{h2} - c_{h1}) = f(c_{h2}) - f(c_{h1}) - \frac{K}{2} (\partial_x c)^2 \Big|_0^L. \quad (3.5)$$

Der hintere Term entfällt in Gl. (3.5) wieder. Der übrig bleibende Ausdruck definiert zusammen mit den beiden Relationen in Gl. (3.4) die drei Unbekannten μ , c_{h2} und c_{h1} . Die erhaltenen Gleichungen sind geometrisch zu verstehen als die Konstruktion einer Doppeltangente an das Doppelmuldenpotential f , wie sie in Gl. (3b) gezeigt wird. Die Minima c_{m1} und c_{m2} von f und die Gleichgewichtslösungen c_{h1} und c_{h2} fallen also nicht zwangsweise zusammen. Im Falle der sich durch die Skalierung ergebende, mit c symmetrischen Energiedichte $f(c) = \frac{1}{4}c^4 - \frac{1}{2}c^2$ sind sie jedoch identisch und lauten $c_{h1,2} = c_{m1,2} = \pm 1$. Das chemische Potential μ ist Null.

3.2. Übertragung auf eine mechanische Bewegungsgleichung

Wo nun die räumlich homogenen Gleichgewichtslösungen diskutiert wurden, stellt sich die Frage, was über die räumlich inhomogenen Lösungen des stationären Problems der Cahn-Hilliard-Gleichung aus Gl. (2.9) ausgesagt werden kann. Aufgrund der Massenerhaltung wird nach der Argumentation aus dem vorangehenden Abschnitt mindestens eine Phasengrenze gefordert. Eine mögliche Herangehensweise an das stationäre Problem besteht darin, Gl. (3.3) mit einem

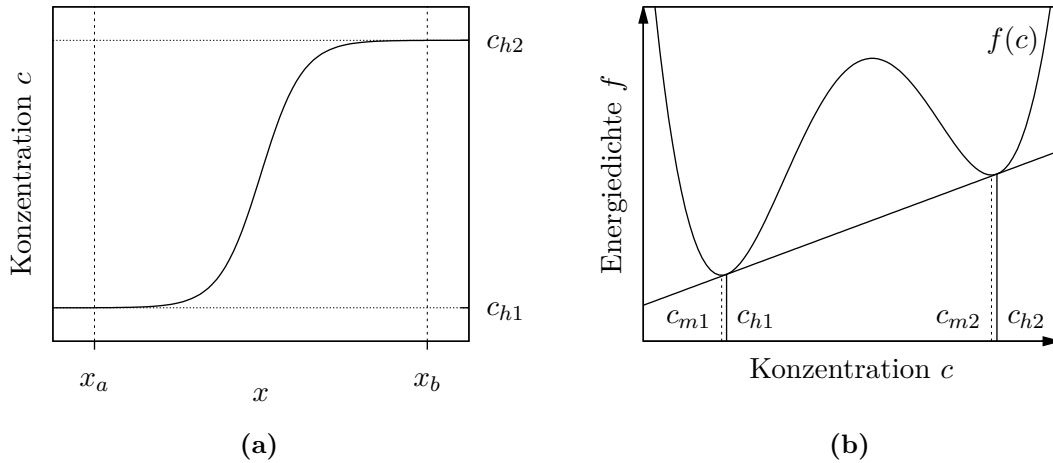


Abbildung 3: (a) Im hier dargestellten Fall einer einzelnen Phasengrenze, bei der die Konzentration zwischen den beiden Gleichgewichtsphasen c_{h2} und c_{h1} übergeht, sind die räumlichen Ableitungen von c am Rand, hier dargestellt durch x_a und x_b , vernachlässigbar.

(b) Die Doppeltangente an einem asymmetrischen Doppelmuldenpotential berührt die Kurve $f(c)$ in den Punkten $c_{h1,2}$, wohingegen die leicht links davon liegenden Punkte $c_{m1,2}$ die Minima von f markieren.

mechanischen Beispiel zu vergleichen, wenn c die Position eines Teilchens und $\frac{x}{\sqrt{K}} = \tilde{t}$ die Zeit ist [2]. Gleichung (3.3) lässt sich dann wie folgt schreiben:

$$-\frac{\partial}{\partial c}(\mu c - f(c)) = K \partial_{xx} c = \frac{\partial^2 c}{\partial(x/\sqrt{K})^2} = \frac{\partial^2 c}{\partial \tilde{t}^2} =: \ddot{c}. \quad (3.6)$$

Die Schreibweise in Gl. (3.6) erinnert an eine Newtonsche Bewegungsgleichung eines Teilchens im Potential $\mu c - f(c)$. Dieses Potential besitzt zwei Maxima, die $\mu = \frac{\partial f}{\partial c} = f'(c)$ erfüllen² und nach Gl. (3.4) sind dies gerade $c_{h1,2}$. Stabile Lösungen sind Oszillationen des „Ortes“ c des Teilchens mit der Zeit zwischen diesen Werten. Würde sich das Teilchen zu irgend einem Zeitpunkt außerhalb des Intervalls $[c_{h1}, c_{h2}]$ befinden, würde es bis ins Unendliche abdriften. Dieses durch den mechanischen Analogieschluss qualitativ ermittelte Verhalten von Gl. (3.6) soll nun noch einmal formal festgehalten werden. Dazu wird das Problem in ein System aus zwei gewöhnlichen, nichtlinearen Differentialgleichungen überführt:

$$\dot{c} = s \quad , \quad \dot{s} = \frac{\partial f}{\partial c} - \mu. \quad (3.7)$$

Die Fixpunkte des Systems in Gl. (3.7) lassen sich bestimmen zu $c_{h1,2,3}$, wobei c_{h3} zwischen c_{h1} und c_{h2} liegt und $f'(c_{h3}) = \mu$ erfüllt. Die Eigenwerte der Jacobi-Matrix

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ f''(c) & 0 \end{pmatrix}$$

mit $f''(c) = \frac{\partial^2 f}{\partial c^2}$ ausgewertet an diesen Fixpunkten lauten $\pm \sqrt{f''(c_{h1,2,3})}$. Laut Annahme hat f zwei lokale Minima und ein lokales Maximum, sodass $f''(c_{h3}) < 0$ und $f''(c_{h1,2}) > 0$ gelten soll. Demnach sind die Eigenwerte der Jacobi-Matrix am Fixpunkt c_{h3} rein imaginär und bei den anderen Fixpunkten c_{h1} und c_{h2} handelt es sich jeweils um einen Sattel. Um die Eigenvektoren der

²Beide Schreibweisen der Ableitung einer beliebigen Funktion $f(x)$ als $f'(x) = \frac{df}{dx}$ werden verwendet.

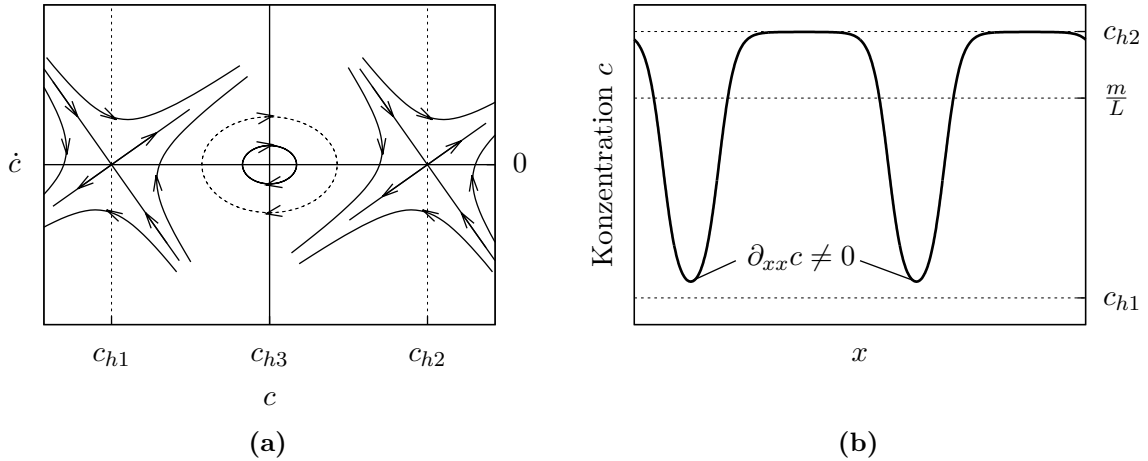


Abbildung 4: (a) Das Phasenraumportrait des Systems aus Gl. (3.7) enthält zwei Sattelpunkte bei $c_{h1,2}$ und ein Zentrum bei c_{h3} . Der gestrichelte Orbit ist einer von vielen Grenzyklen und stellt eine periodische Lösung dar. (b) Lösungen mit beliebiger Amplitude stehen nicht im Widerspruch zum Langzeitverhalten, wenn $\partial_{xx}c$ an den Stellen maximaler Amplitude nicht verschwindet. In dieser Abbildung bezieht sich diese Aussage auf die Minima der zeitlich konstanten Lösung mit Mittelwert $c_0 = \frac{m}{L}$, die nicht auf c_{h1} liegen.

Jacobi-Matrix ausgewertet an den Sattelpunkten und damit die stabile Richtung zum negativen Eigenwert bzw. die instabile Richtung zum positiven Eigenwert zu berechnen, muss das homogene Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} \pm\sqrt{f''(c_{h1,2})} & 1 \\ |f''(c_{h1,2})| & \pm\sqrt{f''(c_{h1,2})} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c \\ s \end{pmatrix} = 0 \quad (3.8)$$

gelöst werden, wobei im Falle der positiven Vorzeichen in Gl. (3.8) der Eigenwert der stabilen Richtung, im Falle des negativen Vorzeichens derjenige der instabilen Richtung eingesetzt worden ist. Aus Gl. (3.8) wird ersichtlich, dass die Winkel, die die stabilen Richtungen an beiden Fixpunkten im c - s -Phasenraum mit der c -Achse einschließen, dasselbe Vorzeichen haben. Im Falle der stabilen Eigenwerte ergibt sich beispielsweise

$$s = -\sqrt{f''(c_{h1,2})} c.$$

Das bedeutet, dass c und s in dieser Gleichung unterschiedliche Vorzeichen haben, **unabhängig** davon, welcher der beiden Fixpunkte c_{h1} oder c_{h2} betrachtet wird. Dies wird anschaulicher in Abb. 4a, wo das Phasenraumportrait dargestellt ist. Demnach existieren beliebig viele Grenzyklen um den Punkt $(c, s) = (0, 0)$, d.h. im stationären Fall „pendelt“ die Konzentration über dem Ort zwischen beliebigen Werten, die zwischen den Gleichgewichtslösungen c_{h1} und c_{h2} liegen. Diese Wellenmuster mit beliebig kleiner Amplitude existieren, sofern die Wellenlänge klein genug ist. Dies steht nicht im Widerspruch mit den Erkenntnissen aus dem vorherigen Kapitel, da bei kleinen Wellenlängen die zweite Ableitung $\partial_{xx}c$ nicht mehr an den Stellen vernachlässigbar ist, wo die Amplitude maximal wird (siehe Abb. 4b), und sich folglich Gl. (3.4) nicht mehr herleiten lässt.

3.3. Der Einfluss des aktiven Terms auf die Gleichgewichtswerte

Wie in der Einleitung erwähnt, soll zusätzlich die Cahn-Hilliard-Gleichung, bei der das chemische Potential um einen aktiven Term $\lambda(\partial_x c)^2$ erweitert wurde, untersucht werden. Anstelle von Gl.

(3.3) gilt es nun

$$\mu = \frac{\partial f}{\partial c} - K \partial_{xx} c + \lambda (\partial_x c)^2 \quad (3.9)$$

zu betrachten. Um den Einfluss des aktiven Terms auf die Gleichgewichtswerte von c im Langzeitverhalten zu ermitteln, wird zunächst im mechanischen Bild des vorigen Abschnitts verblieben, allerdings werden die Energiedichte $f(c) = \frac{1}{4}c^4 - \frac{1}{2}c^2$ und $K = 1$ aus der skalierten Gleichung (2.14) schon eingesetzt. Der zusätzliche Term entspricht dann einer geschwindigkeitsabhängigen Kraft und es wird anschaulich klar, dass sich für $\lambda > 0$ auch die Gleichgewichtswerte zu größeren Werten verschieben [2]. Es kann sich auf $\lambda > 0$ beschränkt werden, da sich für negative λ die gleichen Lösungen für $c_{h1,2}$ und μ mit umgekehrtem Vorzeichen ergeben.

Die Fixpunkte des Systems aus Gl. (3.9) sind immer noch durch $s = 0$ und $c = c_{h1,2,3}$ gegeben. Das bedeutet, dass Gl. (3.4) immer noch gilt. Aufgrund des aktiven Terms kann die Gleichung allerdings nicht integriert werden, um die Relation aus Gl. (3.5) zu erhalten, die zur Doppeltangentenkonstruktion geführt hat. Das bedeutet, dass $\mu \neq 0$ möglich ist. Effektiv muss das Teilchen sich jedoch immer noch in einem Doppelmuldenpotential bewegen, welches durch $f(c) - \mu c$ gegeben ist. Um zu untersuchen, für welche μ dies erfüllt ist, kann derjenige Wert für μ bestimmt werden, für den die Funktion $f - \mu c$ einen Sattelpunkt hat. Die Wendepunkte dieses Polynoms ergeben sich aus $f''(c) = 0$ und lauten $c = \pm \frac{1}{\sqrt{3}}$. Sollen diese gleichzeitig Extrempunkte sein, so muss $f'(\pm \frac{1}{\sqrt{3}}) = \mu$ gelten. Daraus folgt zunächst $\mu = \pm \frac{2}{3\sqrt{3}}$ für einen Sattelpunkt. Die Funktion f hat zwei lokale Minima bei $c = \pm 1$, wobei $f(1) = f(-1)$ gilt. Der zusätzliche lineare Term $-\mu c$ sorgt für eine Absenkung des einen Minimums und für ein Anheben des anderen. Zudem verschiebt sich die Lage der Minima. Für kleine μ bleibt allerdings immer noch die Form eines Doppelmuldenpotentials erhalten. Daraus wird geschlossen, dass die Funktion $f - \mu c$ für $|\mu| < \frac{2}{3\sqrt{3}}$ stets zwei Minima und ein Maximum hat.

Zur Bestimmung der Gleichgewichtswerte wird eine nichtlineare Substitution $w(c) = s^2(c)$ in Gl. (3.9) durchgeführt, sodass folgt [2]:

$$\frac{dw}{dc}(c) = 2s(c) \frac{ds}{dc} = 2\dot{c} \frac{ds}{d\tilde{t}} \frac{d\tilde{t}}{dc} = 2\dot{s} = 2(c^3 - c - \mu) + 2\lambda w(c). \quad (3.10)$$

In dieser Gleichung ist $\tilde{t} = x$ (mit $K = 1$) wie im vorangehenden Kapitel und es wurde ausgenutzt, dass c im stationären Problem nur noch von x , nicht aber von t abhängt. Gleichung (3.10) ist eine inhomogene, gewöhnliche Differentialgleichung erster Ordnung für $w(c)$ und lässt sich durch Variation der Konstanten lösen. Einsetzen des Ansatzes $A(c; \mu, \lambda)e^{2\lambda c}$ in Gl. (3.10) gibt für $A(c; \mu, \lambda)$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial A}{\partial c}(c; \mu, \lambda) &= 2(c^3 - c - \mu) e^{-2\lambda c} \\ \Rightarrow A(c; \mu, \lambda) &= \left[-\frac{3}{4\lambda^4} \left(1 + 2\lambda c + 2\lambda^2 c^2 + \frac{4}{3}\lambda^3 c^3 \right) + \frac{1}{2\lambda^2} (1 + 2\lambda c) + \frac{\mu}{\lambda} \right] e^{-2\lambda c} + C \\ &=: P(c; \mu, \lambda) e^{-2\lambda c} + C. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Die Konstante C auf der rechten Seite ist durch die Anfangsbedingung der Differentialgleichung (3.10) gegeben. Die Lösung für $w(c)$ lautet in ihrer kompletten Form:

$$w(c; \mu, \lambda) = P(c; \mu, \lambda) + C e^{2\lambda c}.$$

Die Gleichgewichtslösungen müssen nun die notwendige Bedingung $w(c_{h1,2}) = 0$ erfüllen, weil dann auch $s = \partial_x c$ verschwindet. Dies resultiert in die Gleichung

$$h(c_{h1}; \mu, \lambda) = h(c_{h2}; \mu, \lambda) = C \quad \text{mit} \quad h(c; \mu, \lambda) = P(c; \mu, \lambda) e^{-2\lambda c}. \quad (3.12)$$

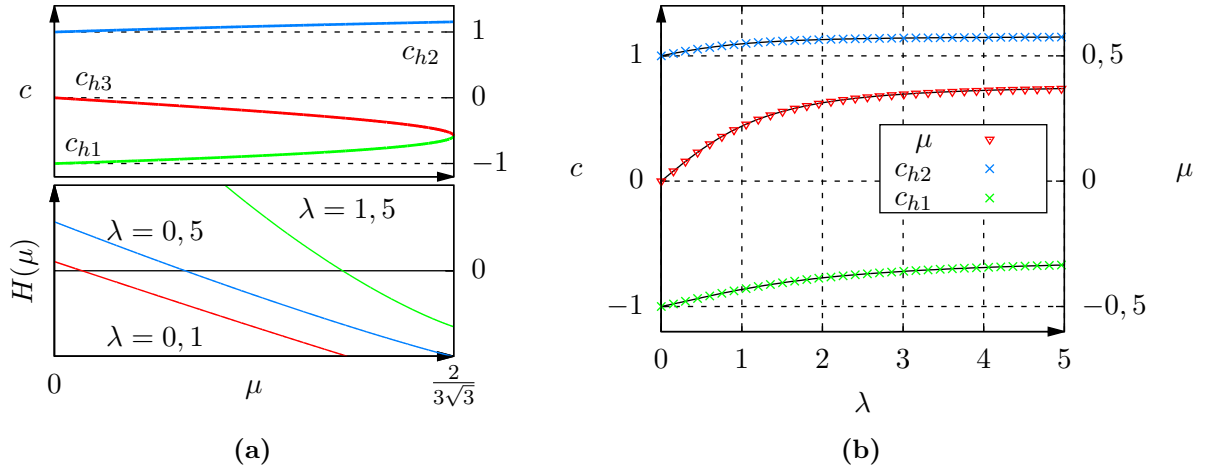


Abbildung 5: (a) Oben: Grafische Darstellung der Nullstellen von $c^3 - c - \mu$ in Abhängigkeit von μ , welche die Zuordnung zu den jeweiligen Fixpunkten ermöglicht. Unten: Die Funktion $H(\mu)$ aus Gl. (3.15) für verschiedene λ , deren Nullstelle es zu bestimmen gilt.
 (b) Zu sehen sind die durch lösen von Gl. (3.15) erhaltenen Werte für $c_{h1,2}$ und μ in Abhängigkeit von λ . Die schwarze Linie hinter den einzelnen Punkten ist eine Referenzkurve, die mithilfe eines Kontinuierungsprogramms bestimmt wurde.

Die Größe h als Funktion von c ist eine exponentiell abfallende Kurve multipliziert mit einem Polynom dritten Grades, sodass sich maximal drei Extremstellen ergeben können. Die Ableitung von h nach c ausgewertet an den Gleichgewichtswerten ergibt:

$$\left. \frac{\partial h}{\partial c} \right|_{c_{h1,2}} = \left[\frac{\partial P}{\partial c} - 2\lambda P \right] e^{-2\lambda c} \Big|_{c_{h1,2}} \stackrel{(3.11)}{=} 2(c^3 - c - \mu) e^{-2\lambda c} \Big|_{c_{h1,2}}. \quad (3.13)$$

Da Gl. (3.4) gilt, ist der Ausdruck in Gl. (3.13) Null und die Stellen $c_{h1,2}$ sind demnach auch die Extremstellen von $h(c; \mu, \lambda)$. Die Lösungen der Gleichung $\frac{\partial f}{\partial c} = \mu$ bzw. die Nullstellen von $c^3 - c - \mu$ lassen sich durch die Cardanoischen Formeln [19] in Abhängigkeit von μ ausdrücken:

$$c_{h1} = -\frac{2}{\sqrt{3}} \cos\left(\frac{\alpha - \pi}{3}\right), \quad c_{h2} = \frac{2}{\sqrt{3}} \cos\left(\frac{\alpha}{3}\right), \quad c_{h3} = -\frac{2}{\sqrt{3}} \cos\left(\frac{\alpha + \pi}{3}\right) \quad (3.14)$$

mit $\alpha = \arccos\left(\frac{3\sqrt{3}}{2}\mu\right)$. Teile der Berechnung dieser Nullstellen sind in Anhang A.1 zu finden. Die Zuordnung der drei Lösungen aus den Cardanoischen Formeln zu den drei Fixpunkten kann durch eine grafische Darstellung der Nullstellen ganz leicht nachvollzogen werden (siehe Abb. 5a, oben). Die Problemstellung ist nun die Folgende: in Abhängigkeit von μ können die Gleichgewichtswerte $c_{h1,2}$ berechnet werden und für ein gegebenes λ muss dieses μ so gewählt werden, dass Gl. (3.12) erfüllt ist. Dies ist äquivalent zum Lösen der Gleichung

$$H(\mu) := h(c_{h2}(\mu), \mu; \lambda) - h(c_{h1}(\mu), \mu; \lambda) = 0. \quad (3.15)$$

Die Funktion H ist exemplarisch für einige λ in Abb. 5a, unten, als Funktion von μ gezeichnet. Da das Intervall, aus dem μ stammt, bekannt ist, liegt eine Lösung der Gleichung mittels Bisektionsverfahren nahe (siehe Anhang A.2). Diese Lösungen sind in Abb. 5b für verschiedene λ dargestellt. Zusätzlich sind dort Kurven eingezeichnet, die mit einem Kontinuierungsprogramm berechnet wurden. Details zu diesem Programm werden im folgenden Abschnitt genannt. Der Vergleich bestätigt die Gültigkeit obiger Rechnungen. Es sei noch einmal darauf hingewiesen, dass diese Gleichgewichtswerte wieder nur im Langzeitverhalten auf **ausreichend großen Domänen**

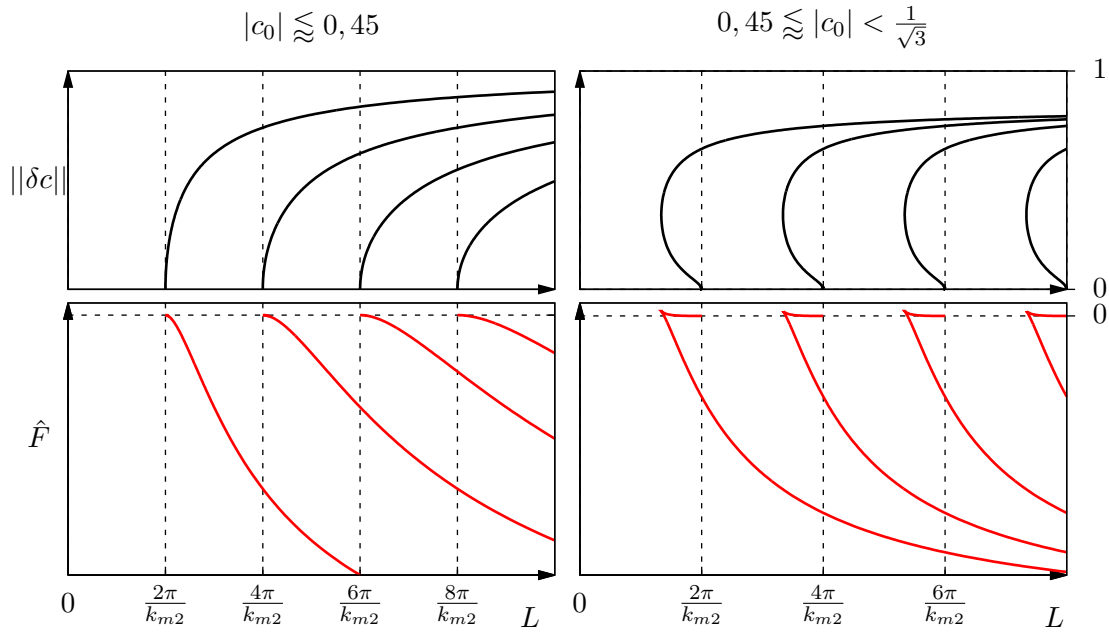


Abbildung 6: In den oberen Abbildungen ist die L_2 -Norm nach Gl. (3.16) zeitlich konstanter Lösungen in Abhängigkeit der Länge der Domäne L aufgetragen. In den unteren Abbildungen ist \hat{F} aus Gl. (3.17) zu sehen.

angestrebt werden. Auch hier sind periodische Muster mit deutlich kleinerer Amplitude möglich, wenn die Periodenlänge klein ist. Eine tiefere Diskussion anhand des mechanischen Analogons ähnlich zu Abschnitt 3.2 ist in [2] gegeben.

3.4. Bifurkationsdiagramm

Ein Möglichkeit zur Verifikation der Ergebnisse der Zeitsimulation ist der Vergleich mit Resultaten eines Kontinuierungsverfahrens. Hierzu wurde das Programm „auto-07p“ verwendet [9, 10, 20]. Es sucht im Prinzip Fixpunkte durch ein verallgemeinertes Newton-Verfahren und kann dadurch auch **instabile** Fixpunkte ausfindig machen. Zu jeder Lösung kann die L_2 -Norm

$$\|\delta c\| = \sqrt{\frac{1}{L} \int_0^L (c(x) - c_0)^2 dx}. \quad (3.16)$$

berechnet und mit der L_2 -Norm der Lösungen der Zeitsimulation verglichen werden. In Abb. 6 sind schematisch die Resultate des Kontinuierungsverfahrens dargestellt, wobei hier wieder die skalierte Form der vereinfachten Cahn-Hilliard-Gleichung aus Gl. (2.14) verwendet wurde. Hierbei werden die zeitlich konstanten Lösungen in Abhängigkeit der Längenskala L , auf der die Differentialgleichung betrachtet wird, mit periodischen Randbedingungen gesucht. Damit entspricht die L -Achse in den oberen Grafiken immer der konstanten Lösung $c = c_0$, die erst ab der kritischen Länge $L_{m2} = \frac{2\pi}{k_{m2}}$ instabil wird. Für größere L kommt es zur Phasentrennung, wobei der erste Ast, der bei L_{m2} startet, für ein Muster mit einem Minimum und einem Maximum steht, d.h. die Länge der Domäne entspricht der Periodenlänge der Lösung und mit periodischen Randbedingungen hat diese zwei Phasengrenzen. Wird die Länge der Domäne vergrößert, so existiert ab $2L_{m2}$ ein zweiter Ast, der einem Muster mit zwei Minima und Maxima entspricht, d.h. die Länge der Domäne entspricht der doppelten Periodenlänge des Musters und die Lösung hat entsprechend vier Phasengrenzen. Für dieses Muster ist ein anschauliches Beispiel in Abschnitt 3.2

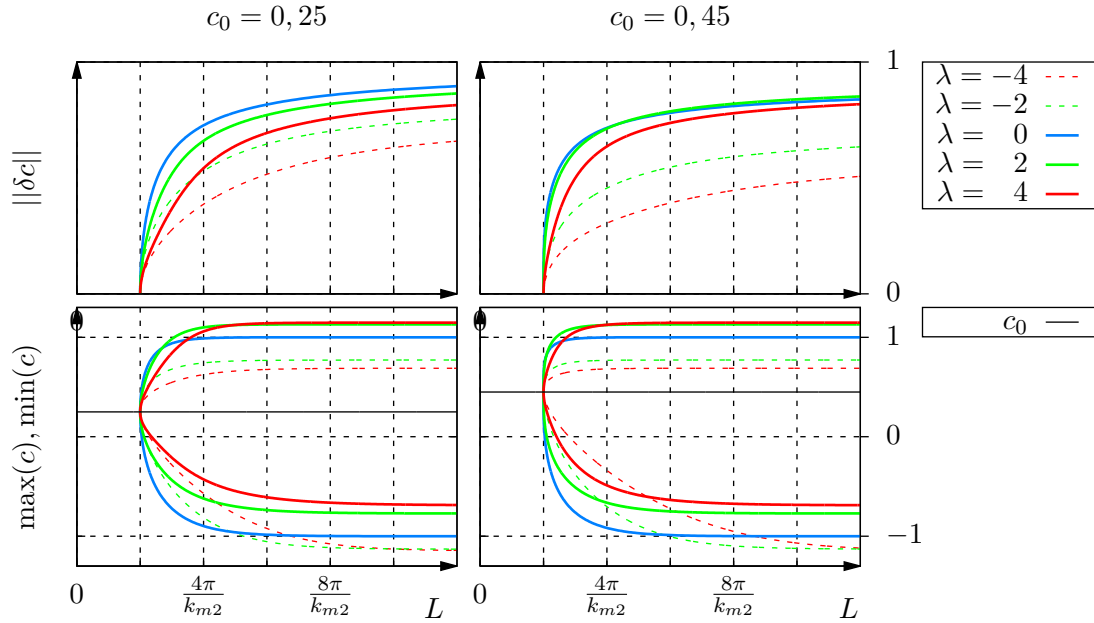


Abbildung 7: Diese Abbildungen sollen den Einfluss des λ -Terms in der aktiven Cahn-Hilliard-Gleichung auf die L_2 -Norm der konstanten Lösungen (oben) und den Maximal- bzw. Minimalwerte der Konzentration (unten) zeigen.

in Abb. 4b zu finden. Da in diesem Fall die Lösungen mehr Phasengrenzen hat, ist der Zustand ungünstiger. Dies korrespondiert auch mit den Ergebnissen der Energie pro Längeneinheit. Im unteren Teil der Abbildung ist die auf L normierte Differenz des Lyapunov-Funktional (vgl. Gl. (2.5)) und der Energie einer konstanten Konzentrationsverteilung auf der Höhe der mittleren Konzentration c_0 ,

$$\hat{F} = \frac{1}{L} [F[c(x)] - F[c_0]] , \quad (3.17)$$

dargestellt. Aus dem Diagramm wird ersichtlich, dass mit zunehmender Länge der Domäne immer mehr Äste existieren und die Bifurkationspunkte an den Stellen $n \frac{2\pi}{k_{m2}}$, $n \in \mathbb{N}$, liegen.

Die Muster, die die Fronten hinterlassen, nähern sich laut [1] einer kurzwelligen, zeitlich konstanten Lösung an. Dies beinhaltet auf dem ersten Blick einen Widerspruch in Anbetracht der Existenz einer zweiten Front. Die Ursache für diese ist, dass die Muster der Invasionsfronten instabil sind. Bevor die Muster demnach vollständig relaxieren, werden sie durch die Coarsening-Fronten, entstanden aus minimalen Störungen, wieder verändert. Ein Blick ins Bifurkationsdiagramm zeigt, dass eine Zunahme der Periodenlänge für eine Abnahme der Energie sorgt, was die Tendenz zur Vergrößerung der charakteristischen Längenskala begründet.

Es wird festgestellt, dass für eine mittlere Konzentration von $c_0 \lesssim 0,45$ die Bifurkationen an den Vielfachen von L superkritisch sind, und für größere L subkritisch. Beide Fälle sind in der Abbildung festgehalten. Im Falle einer subkritischen Bifurkation existieren Lösungen mit Energien, die größer sind als diejenigen der konstanten Konzentrationsverteilung (in der Abbildung leicht oberhalb der L -Achse, links der Markierungen an den Vielfachen der kritischen Periodenlänge zu sehen.).

Die Normen der Lösungen der erweiterten Cahn-Hilliard-Gleichung über der Periodenlänge sind in Abb. 7 dargestellt. Da hier die Energie nicht mehr über das Funktional berechnet werden kann, werden stattdessen die maximalen und minimalen Werte der Konzentrationsverteilung gezeigt. Den Abbildungen ist zu entnehmen, dass der aktive Term **in der Nähe** der kritischen Länge

$\frac{2\pi}{k_{m2}}$ mit steigendem $|\lambda|$ für immer geringere Amplituden sorgt. Haben λ und c_0 unterschiedliche Vorzeichen, so ist die Bifurkation für große c_0 nicht länger subkritisch. Die Darstellung der Minimal- und Maximalwerte in Abhängigkeit von der Periodenlänge des Musters in Abb. 7 bestätigt zudem die Existenz von Lösungen mit beliebig kleiner Amplitude und Periodenlänge, wobei natürlich $L > \frac{2\pi}{k_{m2}}$ gelten muss. In Abschnitt 3.2 wurden solche Lösungen qualitativ anhand der Diskussion des Phasenraumportraits vorausgesagt. Inwiefern auch die zeitlich konstanten Lösungen der erweiterten Cahn-Hilliard-Gleichung mit den Mustern hinter den Entmischungsfrenten übereinstimmen, wird sich in Abschnitt 6.2 zeigen.

4. Frontpropagation in instabile Zustände

Bisher wurde nur das statische Problem diskutiert. Nun soll es um die Beschreibung der Entmischungsfrent gehen, die sich auf einer homogenen Konzentrationsverteilung bewegt bzw. in diese „einfällt“.

Die Bewegung einer Front mit einer konstanten Geschwindigkeit legt eine Transformation in ein mitbewegtes Bezugssystem nahe. Die Geschwindigkeit dieses Systems werde mit v bezeichnet. Wenn $c(x, t)$ die Funktion im Laborsystem ist, so lautet die zugehörige Funktion im mitbewegten System $c(x - vt, t) =: c(\xi, t)$. Bezeichnen $\partial_{1,2}$ die Ableitungen nach dem ersten bzw. zweiten Argument von $c(\xi, t)$, dann gilt für die Zeitableitung ∂_t im **Laborsystem** dieser Funktion:

$$\partial_t c(\xi, t) = \partial_1 c(\xi, t) \partial_t \xi + \partial_2 c(\xi, t) \partial_t t = -v \partial_2 c(\xi, t) + \partial_1 c(\xi, t). \quad (4.1)$$

Analog folgt, etwas leichter nachzurechnen, für die Ortsableitung im Laborsystem $\partial_x c(\xi, t) = \partial_1 c(\xi, t)$. Wie aus Gl. (4.1) geschlussfolgert werden kann, stimmen die zeitlichen Differentialoperatoren ∂_t im ruhenden und im mitbewegten System nicht überein. Da in diesem Abschnitt die Konzentrationsverteilung ausschließlich im mitbewegten System betrachtet wird, wird ∂_1 durch ∂_ξ und ∂_2 durch die Schreibweise ∂_t ersetzt, im Hinterkopf behaltend, dass es sich nicht um den zeitlichen Differentialoperator im Laborsystem handelt. Mit dieser Konvention wird die erweiterte Cahn-Hilliard-Gleichung (Gl. (1.2)) im mitbewegten Bezugssystem formuliert [1, 11]:

$$\partial_t c = \partial_{\xi\xi} (c^3 - c - \partial_{\xi\xi} c + \lambda (\partial_\xi c)^2) + v \partial_\xi c. \quad (4.2)$$

Wie zu Beginn von Abschnitt 3 wird wieder als Lösungsansatz eine zeitlich konstante Lösung c_0 , versehen mit einer kleinen Störung $\epsilon e^{i(k\xi - \tilde{\omega}t)}$, in (4.2) eingesetzt. In einer zu Gl. (3.1) völlig analogen Rechnung wird jetzt im mitbewegten Bezugssystem folgende Dispersionsrelation erhalten:

$$\tilde{\omega}(k) = -ik^2(k^2 - \alpha) - vk = \omega(k) - vk, \quad (4.3)$$

wobei $\omega(k) = ir(k)$ mit $r(k)$ aus Gl. (3.2) die Dispersionsrelation der linearisierten Cahn-Hilliard-Gleichung im ruhenden System und $\alpha = 1 - 3c_0^2$ ist. Analog wie in Abschnitt 3 trägt der aktive Term nicht zur linearisierten Gleichung bei und folglich ergibt sich dasselbe Ergebnis für die vereinfachte Cahn-Hilliard-Gleichung (1.1). Aus diesem Grund gelten alle in diesem Abschnitt erarbeiteten Erkenntnisse für beide Modelle.

In einem linearen System erfüllt jede Linearkombination aller bekannten Lösungen die Differentialgleichung. Folglich kann im Rahmen der Gültigkeit der linearen Näherung die Lösung von Gl. (4.2) als Fourierintegral notiert werden [11]:

$$c(\xi, t) - c_0 = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{c}(k) e^{ik\xi - i(\omega(k) - vk)t} dk. \quad (4.4)$$

Die Funktion $\hat{c}(k)$ ist bis auf einige Vorfaktoren die Fouriertransformierte der Anfangsbedingung. Diese sei eine hinreichend gut lokalisierte Perturbation um einen homogenen Zustand. Was „gut lokalisiert“ bedeutet, wird später noch in Abschnitt 4.3 diskutiert. Von dieser Perturbation ausgehend breitet sich eine Front aus, deren Geschwindigkeit im Limes $t \rightarrow \infty$ gegen einen konstanten Wert v^* konvergiert [12]. Mit dieser Annahme kann Gl. (4.4) für den Grenzfall sehr großer Zeiten durch die *Sattelpunktsnäherung* gelöst werden. Diese mathematische Technik soll im Folgenden kurz vorgestellt werden [21], [22].

4.1. Sattelpunktsnäherung

Seien $f, g : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ zwei holomorphe Funktionen und C ein Weg in der komplexen Ebene mit folgenden Eigenschaften:

- (i) Der Realteil von f werde an den Randpunkten des Weges C beliebig negativ. Falls C ein unbeschränkter Weg ist und für diesen eine Parametrisierung $C : p \in \mathbb{R} \mapsto C(p) \in \mathbb{C}$ existiert, so gilt $\lim_{p \rightarrow \pm\infty} \Re[f] \Big|_C \rightarrow -\infty$.
- (ii) $\Re[f] =: f_r$ hat entlang eines Weges \tilde{C} , dessen Randpunkte mit C übereinstimmen, an einer Stelle $z_0 = \tilde{C}(p_0) \in \mathbb{C}$ ein Maximum. Sei φ die Phase der Ableitung des Weges am Ort des Maximums, d.h. $\left. \frac{d\tilde{C}}{dp} \right|_{p_0} = |\tilde{C}'(p_0)| e^{i\varphi}$, so gilt

$$\Re \left[\left. \frac{d^2 f}{dz^2} \right|_{\tilde{C}} \right] \Big|_{z_0} = \Re [f''(z_0) e^{i2\varphi}] = \left. \frac{\partial^2 f_r}{\partial z_r^2} \right|_{z_0} \cos(2\varphi) + \left. \frac{\partial^2 f_r}{\partial z_r \partial z_i} \right|_{z_0} \sin(2\varphi) < 0. \quad (4.5)$$

Hierbei wurden die Cauchy-Riemannschen Differentialgleichungen ausgenutzt sowie Real- bzw. Imaginärteil durch tiefgestellte Indizes r und i markiert.

- (iii) f hat an der Stelle z_0 einen Sattelpunkt, es gilt also $\left. \frac{df}{dz} \right|_{z_0} = 0$.
- (iv) An den Randzonen von C bzw. \tilde{C} wird das Verhalten der Funktion $g(z)e^{tf(z)}$ durch die Exponentialfunktion dominiert, wobei t eine reelle Konstante ist.

Dann lässt sich das Integral $\int_C g e^{tf} dz$ zunächst aufgrund des Cauchyschen Integralsatzes durch das Integral über \tilde{C} ersetzen und dann im Grenzfall sehr großer t durch folgenden Ausdruck approximieren:

$$\int_{\tilde{C}} g(z) e^{tf(z)} dz \approx g(z_0) e^{tf(z_0)} e^{-i\varphi} \sqrt{\frac{2\pi}{-tf''(z_0)}}. \quad (4.6)$$

Grundlage dieser Näherung ist das Ersetzen der Funktion f durch ihre Taylorentwicklung zweiter Ordnung um den Punkt z_0 mit der Idee, dass aufgrund der Multiplikation mit der sehr großen Zahl t und des Exponenzierens lediglich Punkte in der Umgebung von z_0 maßgeblich zum Integral beitragen. Hierfür ist es aber eben wichtig, dass der Winkel φ , unter dem der Weg \tilde{C} durch den Sattelpunkt z_0 verläuft, korrekt gewählt wird, und zwar so, dass $\Re [f''(z_0) e^{i2\varphi}]$ minimal wird (Punkt (ii)). Aufgrund der Cauchy-Riemannschen Differentialgleichungen fallen bei holomorphen Funktionen die Kurven, auf denen sich der Realteil f_r maximal ändert, mit den Äquipotentiallinien des Imaginärteils $\Im[f] =: f_i$ zusammen. Das bedeutet, dass f_i um den Punkt z_0 auf \tilde{C} konstant ist und daher sich auch die Phase der Exponentialfunktion nicht ändert. Die Approximation des Betrages des Integrals durch $|g|e^{tf_r}$ ist demnach gerechtfertigt. Wenn der Integrand an den Randpunkten von C und \tilde{C} verschwindet (Punkte (i) und (iv)), so kann der Weg durch den Punkt z_0 auch gleich durch eine Gerade approximiert werden und übrig bleibt ein Gauß-Integral. Punkt (iii) folgt daraus, dass f_r bei z_0 ein Maximum hat. Existieren

mehrere Sattelpunkte auf \tilde{C} , so müssen die Gaußintegrale ausgewertet an jedem Sattelpunkt addiert werden.

4.2. Geschwindigkeit und Wellenzahl der ersten Front

Um das Fourierintegral in Gl. (4.4) durch die Sattelpunktsnäherung zu lösen, wird $\hat{c}(k)e^{ik\xi}$ mit $g(z)$ aus Gl. (4.6) und $-i(\omega(k) - vk) = -i\tilde{\omega}(k)$ mit $f(z)$ identifiziert. Dann folgt aus Punkt (iii) der Sattelpunktsnäherung: $\frac{d}{dk}(\omega(k') - vk') = 0 \Leftrightarrow v = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k'}$. Hierbei ist k' die Stelle, an der $\tilde{\omega}$ einen Sattelpunkt hat. Wird verlangt, dass die Geschwindigkeit v reell ist, so lässt sich diese Bedingung in Real- und Imaginärteil separieren und es ergeben sich zwei getrennte, zu erfüllende Gleichungen.

Eine dritte Bedingung ergibt sich aus der erneuten Betrachtung des Fourierintegrals in Gl. (4.4). Die Geschwindigkeit v und die Stelle k' des Sattelpunkts von $\tilde{\omega}$ sollen so gewählt sein, dass sich die Einhüllende der Front zeitlich nicht mehr ändert. Demnach wird $\Im[\omega(k') - vk'] = 0$ gefordert. Zusammengefasst lauten die drei Gleichungen zur Bestimmung der Invasionsfrontgeschwindigkeit und der dominanten Wellenzahl im Rahmen der linearen Näherung [11, 12]:

$$v = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k'} \quad (4.7a), \quad \Im \left[\left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k'} \right] = 0 \quad (4.7b), \quad v = \frac{\omega_i(k')}{k'_i} \quad (4.7c).$$

Hierbei bezeichnen tiefgestellte Indizes r und i wieder den Real- bzw. Imaginärteil. Um diese Gleichungen auf die Dispersionsrelation $\omega(k) = -ik^2(k^2 - \alpha)$ anzuwenden, müssen zunächst Real- und Imaginärteil von ω und $\frac{d\omega}{dk}$ berechnet werden:

$$\omega_i = \alpha(k_r^2 - k_i^2) + 6k_r^2k_i^2 - k_r^4 - k_i^4, \quad (4.8a)$$

$$\omega_r = 2k_rk_i(2k_r^2 - 2k_i^2 - \alpha), \quad (4.8b)$$

$$\Re \left[\left. \frac{d\omega}{dk} \right| \right] = 2k_i(6k_r^2 - 2k_i^2 - \alpha), \quad (4.8c)$$

$$\Im \left[\left. \frac{d\omega}{dk} \right| \right] = 2k_r(6k_i^2 - 2k_r^2 + \alpha). \quad (4.8d)$$

Mit Gl. (4.8d) lässt sich $k_r'^2 = 3k_i'^2 + \frac{\alpha}{2}$ in den übrigen Gleichungen eliminieren und sodann $\frac{\omega_i(k')}{k'_i}$ mit Gl. (4.8c) gleichsetzen:

$$2\alpha k_i'^2 + \frac{\alpha^2}{4} + 8k_i'^4 = 32k_i'^4 + 4\alpha k_i'^2 \quad \Rightarrow \quad k_i' = \sqrt{\frac{\alpha}{24}(\sqrt{7} - 1)}, \quad (4.9a)$$

$$k_r' = \pm \sqrt{\frac{\alpha}{8}(\sqrt{7} + 3)}. \quad (4.9b)$$

Die Festlegung des Vorzeichens von k_i' hängt mit der Festlegung des Vorzeichens von v zusammen. Der Term $2\alpha k_i'^2 + \frac{\alpha^2}{4} + 8k_i'^4$ auf der linken Seite von Gl. (4.9a) entspricht ω_i und ist offensichtlich immer größer oder gleich Null. Mit Gl. (4.7c) wird dann klar, dass v und k_i' dieselben Vorzeichen haben müssen.

Die Ergebnisse können wiederum in Gl. (4.7a) oder Gl. (4.7c) eingesetzt werden und es ergibt sich die Lösung für die Geschwindigkeit [6]:

$$v = v^* = \frac{2\sqrt{\sqrt{7} - 1}(2 + \sqrt{7})}{3\sqrt{6}}\alpha^{3/2}. \quad (4.10)$$

Während die Lösung für k_i' (Gl. (4.9a)) direkt mit dem kritischen exponentiellen Abfall der

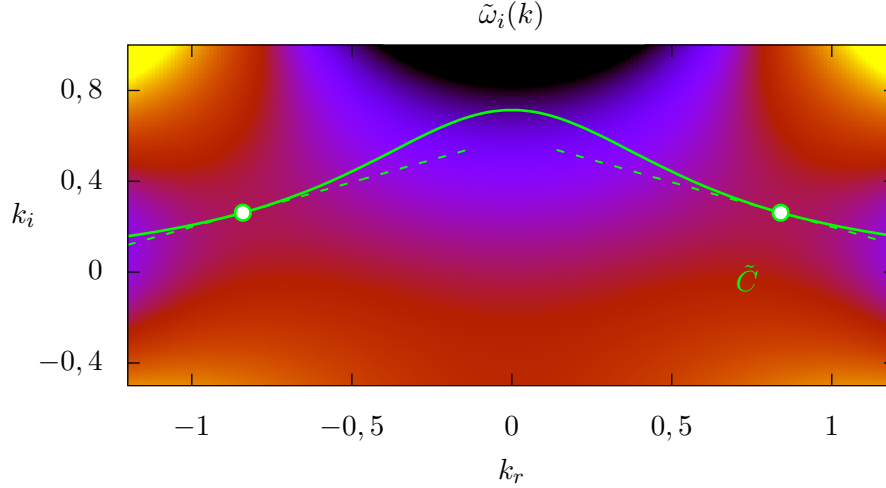


Abbildung 8: In der Sattelpunktsapproximation des Fourier-Integrals in Gl. (4.4) ist im Limes $t \rightarrow \infty$ der Realteil von $-i\tilde{\omega}(k)$ von Interesse. Dieser ist gleich $\tilde{\omega}_i$ und hat in der komplexen k -Ebene zwei relevante Sattelpunkte $\pm k'_r + ik'_i$, die hier als weiße Kreise eingezeichnet sind. Ein möglicher Integrationsweg \tilde{C} aus der Sattelpunktsnäherung ist hier auch dargestellt. Entlang der gestrichelten Linien wird $\tilde{\omega}_i''(k')$ minimal.

Einhüllenden der Front in Verbindung steht, ist k'_r (Gl. (4.9b)) nicht die Wellenzahl k^* des Musters hinter der Front. Warum dies so ist, soll durch folgende Argumentation plausibel gemacht werden: Die Ausbreitung der Front, die die Cahn-Hilliard-Gleichung (2.14) erzeugt, ist dadurch definiert, dass an einer Stelle ein Wellenberg wächst und danach neben ihm ein zweiter, sich diese Wellenberge jedoch nicht über die x -Achse bewegen. Propagiert die Front im Laborsystem nach rechts, so ist im mitbewegten Bezugssystem eine mit der Geschwindigkeit v^* nach links laufende Welle mit in ξ -Richtung exponentiell abfallender Amplitude zu sehen. Die Unbeschränktheit der Amplitude folgt hier natürlich nur aus der linearen Näherung. Die am meisten beitragende Frequenz ist aufgrund der Sattelpunktsnäherung durch $\tilde{\omega}$ ausgewertet an $k' = k'_r + ik'_i$ mit den Werten aus Gl. (4.9) gegeben. Die Form der ebenen Welle lautet aufgrund des Fourieransatzes $e^{i(k\xi - \tilde{\omega}t)}$. Aus diesem Grund gilt [1]:

$$k^* = \left| \frac{\tilde{\omega}_r}{v^*} \right| = \frac{3(\sqrt{7} + 3)}{8\sqrt{(\sqrt{7} - 1)(\sqrt{7} + 2)}} \alpha^{1/2}. \quad (4.11)$$

An dieser Stelle kann noch diskutiert werden, inwiefern alle Kriterien der Sattelpunktsnäherung erfüllt werden. Die Minimierung des Ausdrucks aus Gl. (4.5) gibt für den Winkel φ , unter dem die Kurve \tilde{C} durch den Punkt (k'_r, k'_i) verlaufen muss, folgenden Wert:

$$\varphi = \frac{1}{2} \left\{ \begin{array}{ll} \pi + \arccos \left(\frac{\partial_{rr}\tilde{\omega}_r}{\sqrt{(\partial_{rr}\tilde{\omega}_r)^2 + (\partial_{ri}\tilde{\omega}_r)^2}} \right) & \text{falls } \partial_{ri}\tilde{\omega}_r \geq 0 \\ \pi - \arccos \left(\frac{\partial_{rr}\tilde{\omega}_r}{\sqrt{(\partial_{rr}\tilde{\omega}_r)^2 + (\partial_{ri}\tilde{\omega}_r)^2}} \right) & \text{falls } \partial_{ri}\tilde{\omega}_r < 0 \end{array} \right\} \approx -0,12\pi. \quad (4.12)$$

Hierbei soll ∂_{rr} die zweifache Ableitung nach k_r bezeichnen und ∂_{ri} für die Ableitung $\frac{\partial^2}{\partial k_r \partial k_i}$ stehen. Der gesamte Weg \tilde{C} muss an den Rändern gegen $k_i = 0$ und $k_r \rightarrow \pm\infty$ laufen und könnte daher aussehen wie in Abb. 8 dargestellt. Es stellt sich heraus, dass aufgrund der Symmetrie zur imaginären k -Achse über beide Sattelpunkte $\pm k'_r + ik'_i$ integriert werden muss.

4.3. Stabilität von Fronten

Der Ausdruck in Gl. (4.10) definiert die Geschwindigkeit der linearen Dynamik. Eine Front kann nicht langsamer propagieren als mit v^* [12]. Es ist jedoch wohl möglich, dass die Front sich schneller ausbreitet. Dies muss nicht unbedingt aus der nichtlinearen Dynamik der Gleichung folgen, die bei größer werdender Amplitude der Perturbationen mehr und mehr Einfluss auf die Entwicklung des Systems nimmt. Schnellere Fronten können auch durch geeignete Wahl von Anfangsbedingungen erzeugt werden. Die Erkenntnisse des vorangehenden Abschnitts setzen voraus, dass die Anfangsbedingungen „gut lokalisiert“ sind. Nun soll dieser Term durch eine Betrachtung der Stabilität von in erster Näherung exponentiell abfallenden Fronten genauer erläutert werden. Die Argumentation ist dabei wie in [13].

Die Beschreibung einer Wellenfront mit einer Exponentialfunktion legt eine nichtlineare Transformation der Form $c(x, t) = e^{-u(x, t)}$ nahe. Daraus folgt eine Gleichung der Form $\partial_t u = -d(\partial_x u, \partial_{xx} u, \dots)$, wobei d eine Funktion der räumlichen Ableitungen von u ist, nicht jedoch von u selbst abhängt³. Im mit einer Geschwindigkeit v bewegten Bezugssystem folgt wieder mit analogen Überlegungen wie oben:

$$\partial_t u = v \partial_\xi u - d(\partial_\xi u, \partial_{\xi\xi} u, \dots). \quad (4.13)$$

Würde diese linearisierte Gleichung wieder im Rahmen der Sattelpunktsnäherung als eine ebene Welle geschrieben werden, so ist $\partial_\xi u = -ik$, alle höheren Ableitungen von u entfallen und die Funktion d geht in die Dispersionsrelation $r = -i\omega$ über. Wird verlangt, dass sich die Frontposition im bewegten System nicht ändert, so darf sich die Einhüllende der ebenen Welle $e^{-u(\xi, t)}$ zeitlich nicht ändern und entsprechend muss $\Re[\partial_t u] = \Re[i(\omega - vk)] = 0$ gelten. Hiermit sind keine neuen Erkenntnisse gewonnen worden, weil dies auch aus dem Fourieransatz klar war (siehe Gl. (4.7c)). Um die Stabilität dieser Front in linearer Näherung zu untersuchen, wird die ebene Welle mit einer kleinen Störung versehen, d.h. $u(\xi, t) = -ik\xi + \delta(\xi, t)$ mit $\delta \sim e^{-l\xi}$ und $l = \text{const}$. Für eine nach rechts propagierende Welle, die durch $v > 0$ ausgezeichnet werden kann, müssen auch die „störenden“ Perturbationen nach rechts hin abfallen. Es muss also $\Re[l] > 0$ gelten. Eine Entwicklung der Funktion d um die Lösung der Front mit konstanter Einhüllenden, d.h. $\partial_\xi u = -ik$, ergibt:

$$d(\partial_\xi u, \partial_{\xi\xi} u, \dots) = d(-ik, 0, \dots) + \left. \frac{\partial d}{\partial(\partial_\xi u)} \right|_{\partial_\xi u = -ik} \partial_\xi \delta + \text{T.h.O.} \quad (4.14)$$

Die Terme höherer Ordnung enthalten sowohl höhere Potenzen von $\partial_\xi u \sim l$ als auch höhere Ableitungen wie $\partial_{\xi\xi} u \sim l^2$. Das Weglassen dieser Terme ist für kleine l gerechtfertigt. In Gl. (4.13) eingesetzt ergibt dies:

$$\partial_t \delta \approx i(\omega(k) - vk) + \left[v - \frac{d\omega}{dk} \right] \partial_\xi \delta. \quad (4.15)$$

Soll die Front stabil sein, so ist es notwendig, dass der Realteil der zeitlichen Abhängigkeit dieser Störungen (Gl. (4.15)) kleiner Null ist:

$$\Re \left[\frac{\partial_t \delta}{\delta} \right] = - \left[v - \Re \left[\frac{d\omega}{dk} \right] \right] l_r - \Im \left[\frac{d\omega}{dk} \right] l_i < 0. \quad (4.16)$$

Real- und Imaginärteil der Störung l sind unabhängig voneinander. Hieraus wird in [11, 13] gefolgert: $\Im \left[\frac{d\omega}{dk} \right] = 0$. Dies entspricht Gl. (4.7b) und gibt k_r als eine Funktion von k_i . Wie in Gl.

³Wer es exakt ausrechnet, kommt auf $d(\partial_x u, \partial_{xx} u, \dots) = -(\partial_x u)^4 + 6(\partial_x u)^2 \partial_{xx} u - 3(\partial_{xx} u)^2 - 4\partial_x u \partial_{xxx} u + \partial_{xxxx} u - \alpha(\partial_x u)^2 + \alpha \partial_{xx} u$, was für eine von x unabhängige Ableitung $\partial_x u = -ik$ in $d = -i\omega = r$ aus Gl. (3.2) übergeht.

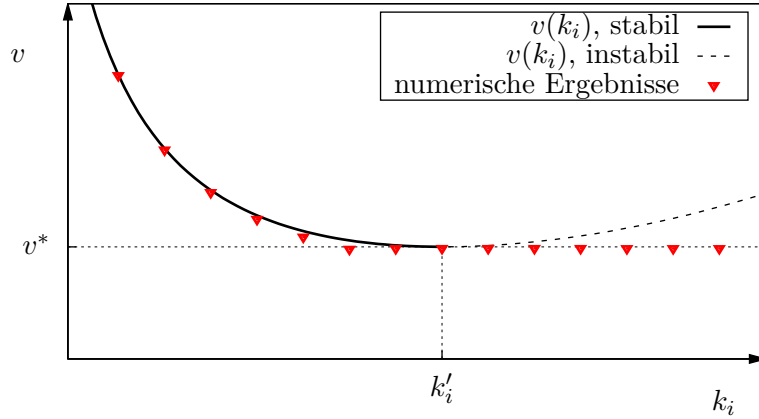


Abbildung 9: Eingezeichnet ist die Geschwindigkeit der Front v als Funktion der Rate des exponentiellen Abfalls k_i gemäß Gl. (4.17). Ist der exponentielle Abfall der Front kleiner als der kritische Wert k'_i , so breitet sich die Front schneller als mit v^* aus. Ist die Abnahme der Einhüllenden der Front stärker, so wären die Fronten, die sich mit $v(k_i)$ ausbreiten würden, instabil. Die Frontgeschwindigkeit beträgt dann v^* , wie die eingezeichneten numerischen Ergebnisse zeigen.

(4.9) ausgenutzt, lautet dieser Zusammenhang $k_r^2 = 3k_i^2 + \frac{\alpha}{2}$. Zusammen mit der Stationarität der Front folgt, dass die Geschwindigkeit v als eine Funktion des Imaginärteils von k , der den exponentiellen Abfall der Front charakterisiert, dargestellt werden kann:

$$v(k_i) = \frac{\omega_i}{k_i} \Big|_{k_r^2 = 3k_i^2 + \frac{\alpha}{2}} = \frac{\alpha^2}{4k_i} + 2\alpha k_i + 8k_i^3. \quad (4.17)$$

Wegen $l_r > 0$ folgt aus Gl. (4.16) für stabile Fronten:

$$v > \Re \left[\frac{d\omega}{dk} \right] = \Re \left[-i \frac{\partial \omega}{\partial k_i} \right] = \frac{\partial \omega_i}{\partial k_i} \Leftrightarrow \frac{dv}{dk_i} \stackrel{(4.7c)}{=} \left(\frac{\partial \omega_i}{\partial k_i} - \frac{\omega_i}{k_i} \right) \frac{1}{k_i} = \left(\frac{\partial \omega_i}{\partial k_i} - v \right) \frac{1}{k_i} < 0. \quad (4.18)$$

Dieses Ergebnis ist so zu interpretieren, dass die stabilen Fronten durch eine exponentielle Abnahme charakterisiert sind, bei der die Geschwindigkeit als Funktion von k_i (siehe Gl. (4.17)) monoton fallend ist.

Das Verschwinden der Ableitung von $v(k_i)$ bedingt die Gleichheit von v und $\frac{\partial \omega_i}{\partial k_i} = \Re \left[\frac{d\omega}{dk} \right]$, was der einzigen, bei der Betrachtung der Stabilität noch nicht aufgetauchten Bedingung aus Gl. (4.7a) aus der Sattelpunktsnäherung entspricht. In diesem Fall ist $v = v^*$.

Zur Veranschaulichung ist $v(k_i)$ aus Gl. (4.17) in Abb. 9 dargestellt. Diese Funktion ist monoton fallend für $k_i \leq k'_i$. Entsprechend sind Fronten, die räumlich schwächer abfallen als mit dem kritischen Wert k'_i , stabil und ihre Geschwindigkeit entspricht dem Wert $v(k_i)$ aus der linearen Näherung. Diese Erkenntnis wird in der Abbildung mit numerischen Ergebnissen untermauert. Sie stellen die Geschwindigkeiten von simulierten Fronten mit $c_0 = 0$ mit verschiedenen räumlichen exponentiellen Abfallraten dar. Für die Details der Simulation und die Bestimmung der Geschwindigkeit wird auf Abschnitt 5 verwiesen. Die Besonderheit der Simulation, mithilfe derer die in Abb. 9 dargestellten Ergebnisse produziert wurden, ist, dass die exponentielle Abfallrate der Front durch die Wahl der Anfangsbedingungen kontrolliert wurde. Für diese wurde im Wesentlichen eine auf einem begrenzten Intervall beschränkte Exponentialfunktion $e^{-ik_i x}$ gewählt. Diese wurde mit einer Kosinusfunktion multipliziert, damit die anfängliche Auslenkung differenzierbar ist. Wie genau dies zu verstehen ist, wird in Abschnitt 5.3 noch einmal thematisiert.

Fronten mit einer stärkeren räumlichen Abnahme, d.h. $k_i > k'_i$, sind im Rahmen obiger Betrachtungen zur Stabilität instabil. Die numerischen Ergebnisse zeigen, dass in diesem Fall die

Frontgeschwindigkeit v^* beträgt, und nicht $v(k_i)$.

Initiale Perturbationen sind also „gut lokalisiert“, falls sie in Richtung der Frontausbreitung mindestens genauso schnell abnehmen wie eine Exponentialfunktion mit $e^{-k_i'x}$. Eine Gaußfunktion oder eine auf einem endlichen Intervall begrenzte anfängliche Störungen erfüllen diese Bedingung auch [12]. Wichtig dabei ist, dass die Fouriertransformierte dieser Funktionen keine Polstellen in der komplexen Ebene hat. Wird sich Gl. (4.4) und Punkt (iv) aus Abschnitt 4.1 in Erinnerung gerufen, so wird klar, dass in einem solchen Fall der Integrationsweg \tilde{C} nicht beliebig gewählt werden kann. Verläuft er zu nahe an der Polstelle, so ist ihr Beitrag zum Integral nicht zu vernachlässigen [12].

4.4. Nichtlineare Aspekte und die zweite Front

In den vorangehenden Abschnitten zur Frontpropagation wurde stets in linearer Näherung gerechnet. Das nichtlineare Verhalten ist deutlich schwerer zu untersuchen und deswegen sollen hier nur einige Aspekte qualitativ vorgestellt werden.

Wird das Verhalten von c für kleine Perturbationen um c_0 durch das lineare Verhalten der Differentialgleichung dominiert, so kann das nichtlineare Verhalten erst seine Auswirkung zeigen, wenn die Perturbationen genügend groß angewachsen sind. In der Zeit, in der dies geschieht, ist die Front aber schon weiter gewandert und folglich können die Nichtlinearitäten keinen Einfluss auf die Frontpropagation nehmen. Die Geschwindigkeit ist durch v^* gegeben und man spricht von „gezogenen“ Fronten. Bisweilen existieren jedoch Gleichungen, in denen nichtlineares Wachstum schon bei kleinen Perturbationen eine Rolle spielt. Falls diese Fronten erzeugen, die mit einer Geschwindigkeit $v > v^*$ unterwegs sind, so bewegt sich die gesamte Front auch bei korrekt gewählten Anfangsbedingungen schneller und es handelt sich um eine „geschobene“ Front [12]. Um welche Art von Fronten es sich bei der Cahn-Hilliard-Gleichung handelt, werden die Zeitsimulationen zeigen.

Wie bereits in [1] thematisiert, ist das Muster, dass die erste Front hinterlässt, instabil, sodass es sich bei der Coarsening-Front auch um eine Invasionsfront handelt, die lediglich in ein periodisches Muster einfällt und nicht in einen homogenen Zustand. Die Berechnung der zweiten Front erfordert demnach eine Linearisierung der Differentialgleichung um die inhomogenen Zustände anstatt um eine räumlich homogenen Lösung c_0 . Auf die zweite Front können im allgemeinen noch weitere Folgen, die ihrerseits wieder ein Muster immer größerer Periodenlänge hinterlassen. Die Beschreibung ist um Einiges komplexer als im Falle der erst Front, weswegen sich im Rahmen dieser Arbeit auf eine phänomenologische Untersuchung der Coarsening-Fronten beschränkt wird

5. Methoden der Zeitsimulation und der Auswertung

In diesem Abschnitt soll die numerische Methode zum Lösen der vereinfachten Cahn-Hilliard-Gleichung (1.1) und ihrer erweiterten Form in Gl. (1.2) vorgestellt werden. Der Schwerpunkt dieses Abschnitts liegt allerdings nicht auf der Numerik, sondern auf einigen technischen Aspekten, die es bei der Auswertung der numerischen Daten zu berücksichtigen gilt. Alle hier genannten Punkte betreffen sowohl die Untersuchung der vereinfachten als auch die der erweiterten Cahn-Hilliard-Gleichung.

5.1. Zeitentwicklung

Die Entwicklung der Differentialgleichung erfolgt auf einem begrenzten Intervall mit $L = 1500$. Für die Zeitentwicklung wird die Runge-Kutta-4-5-Fehlberg-Methode mit adaptiver Zeitschrittweitenregulierung [23, 24] verwendet. Details zum verwendeten Verfahren sind in Anhang A.3 zu finden. An dieser Stelle sei nur das Nötigste zusammengefasst: Die x -Achse wird in $N = 6000$ äquidistante Intervalle zerlegt, sodass $x_j = j\Delta x$ ist mit $\Delta x = \frac{L}{N}$. Die Wahl der Ortsschrittweite

Δx wird in Abschnitt 5.2 begründet. Zu einer bestimmten Zeit t_i wird nun der Konzentrationsverlauf durch N Werte approximiert: $c(x_j, t_i) = c(j\Delta x, t_i) =: c_j(t_i)$ mit $j = 0, \dots, N - 1$. Die Schreibweise $\{c_j\}(t_i)$ soll die Gesamtheit aller Werte für die Konzentration an allen Punkten des räumlichen Gitters zum Zeitpunkt t_i kenntlich machen.

Auch die Zeit wird diskretisiert, d.h. dass die Konzentrationsverläufe zu konkreten Zeitpunkten berechnet werden. Das Runge-Kutta-Verfahren ist ein Einschrittverfahren, was bedeutet, dass die $\{c_j\}(t_{i+1})$ im nächsten Zeitschritt $t_{i+1} = t_i + \Delta t_i$ aus den $\{c_j\}(t_i)$ zu ermitteln sind. Dies erfordert unter anderem die Approximation der räumlichen Ableitungen durch finite Differenzen. In den zu simulierenden Gleichungen (1.1) und (1.2) werden die erste, die zweite und die vierte räumliche Ableitung benötigt. Die Randbedingungen aus Gl. (2.11) erfordern zudem das Berechnen der dritten Ableitung. Diese Ableitungen werden wie folgt aus den diskrete Werten für die Konzentration $c_j(t_i)$ ermittelt:

$$\partial_x c(x_j, t_i) \approx \frac{c_{j+1}(t_i) - c_{j-1}(t_i)}{2\Delta x}, \quad (5.1a)$$

$$\partial_{xx} c(x_j, t_i) \approx \frac{c_{j+1}(t_i) + c_{j-1}(t_i) - 2c_j(t_i)}{\Delta x^2}, \quad (5.1b)$$

$$\partial_{xxx} c(x_j, t_i) \approx \frac{c_{j+2}(t_i) - c_{j-2}(t_i) - 2[c_{j+1}(t_i) - c_{j-1}(t_i)]}{2\Delta x^3}, \quad (5.1c)$$

$$\partial_{xxxx} c(x_j, t_i) \approx \frac{c_{j+2}(t_i) + c_{j-2}(t_i) - 4[c_{j+1}(t_i) + c_{j-1}(t_i)] + 6c_j(t_i)}{\Delta x^4}. \quad (5.1d)$$

Die Berücksichtigung der Randbedingungen erfordert das zu Null setzen der Gleichungen (5.1a) und (5.1c) an den Randpunkten $j = 0$ und $j = N - 1$. Dazu werden zwei zusätzliche Punkte an jeweils beiden Rändern in die Gesamtzahl aller Gitterpunkte hinzugefügt, d.h. der Index j läuft jetzt formal von -2 bis $N + 1$, und die Randbedingungen werden durch

$$c_1(t_i) = c_{-1}(t_i) \quad , \quad c_2(t_i) = c_{-2}(t_i) \quad , \quad c_{N-2}(t_i) = c_N(t_i) \quad , \quad c_{N-3}(t_i) = c_{N+1}(t_i). \quad (5.2)$$

erfüllt [3]. Die Zeitschrittweite Δt_i wird in jedem Zeitschritt aus einer Fehlerabschätzung neu berechnet und variiert aus diesem Grund. Zu den Details dieser Vorgehensweise werde wieder auf den Anhang A.3 verwiesen.

5.2. Wahl der Ortsdiskretisierung

Um zu untersuchen, wie klein die Schrittweite gewählt werden darf, ohne dass die numerischen Fehler überwiegen, wird die Massenerhaltung der vereinfachten Cahn-Hilliard-Gleichung ausgenutzt. Dazu wird die vereinfachte Cahn-Hilliard-Gleichung für verschiedene Ortsauflösungen über einen gewissen Zeitraum entwickelt und zu festen Zeitpunkten t_j die Masse $m_j = \int_0^L c(x, t_j) dx$ bestimmt. Da die Masse konstant sein soll, wird schließlich als Maß für die Ungenauigkeit der Ausdruck

$$\Delta m = \sqrt{\sum_j (m_j - Lc_0)^2}, \quad (5.3)$$

berechnet, welcher möglichst klein und idealerweise Null sein sollte. Das Resultat ist in Abb. 10 zu sehen. Bis zu einer Ortsauflösung von $\frac{1}{\Delta x} \approx 4, 8$ sinken die Varianzen, weil der Diskretisierungsfehler für kleinere Δx zunächst abnimmt. Für größere Auflösungen steigen die Varianzen jedoch rapide an, weil dann die Rundungsfehler stark ins Gewicht fallen. Rundungsfehler haben an mehreren Stellen der numerischen Methode einen entscheidenden Einfluss in Abhängigkeit von der Ortsdiskretisierung. Erstens stimmen die bei der Methode der finiten Differenzen zu subtrahierenden Werte für die Konzentration auf benachbarten Gitterpunkten in mehr Nachkommastellen überein, wenn die Ortsauflösung erhöht wird. Folglich steigt aufgrund der begrenzten Stellengenauigkeit der Fehler bei der Subtraktion dieser Werte. Zweitens sinkt mit abnehmender

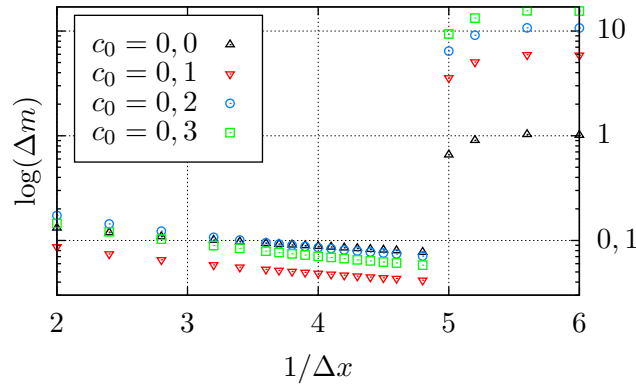


Abbildung 10: Zu sehen sind die Varianzen der in festen Zeitabständen bestimmten Massen (Gl. (5.3)) in Abhängigkeit der Ortsauflösung für verschiedene Konzentrationen. Die große Varianz (Gl. (5.3)) der Masse bei kleinen Ortsschrittweiten ($\frac{1}{\Delta x} \geq 5$) dient als Indikator dafür, dass hier numerische Fehler überwiegen.

Ortsschrittweite auch die Zeitschrittweite. Dadurch werden zwischen den Zeitpunkten, an denen die Masse berechnet wird, viel mehr Entwicklungsschritte gemacht, sodass aufgrund der Mehrzahl an Rechenschritten der Einfluss von Rundungsfehlern an Bedeutung gewinnt.

Um sicherzustellen, dass die numerischen Fehler die Genauigkeit der Auflösung nicht überwiegen, wird mit $\frac{1}{\Delta x} = 4$ gearbeitet. Diese Ortsauflösung wird auch für die Untersuchung der erweiterten Cahn-Hilliard-Gleichung verwendet, obwohl die Ergebnisse in Abb. 10 mithilfe der vereinfachten Cahn-Hilliard-Gleichung erzielt wurden.

5.3. Wahl der Anfangsbedingungen

Da die Fronten in räumlich homogene Zustände $c(x, t) = c_0$ einfallen sollen, ist die Anfangsbedingungen eine auf fast der kompletten x -Achse konstante Konzentrationsverteilung. Lediglich am rechten Rand beträgt die Konzentration $1,0$ und wird dann auf einem kurzen Intervall mittels einer Viertelperiode einer Kosinusfunktion differenzierbar an die homogene Lösung angeschlossen. Das Viertel der Periodenlänge der Kosinusfunktion beträgt in den Einheiten der skalierten x -Achse weniger als 10 und wird mit l bezeichnet. Die initiale Perturbation kann wie folgt notiert werden:

$$c(x, t) - c_0 = \begin{cases} \frac{1-c_0}{2} (1 + \cos(\frac{\pi x}{l})) & , \text{ für } x \in [0, l] \\ 0 & , \text{ sonst} \end{cases} . \quad (5.4)$$

Diese Auslenkung sorgt für die Invasionsfront und soll hinsichtlich einiger Kriterien, die in Abschnitt 4.3 genannte werden, untersucht werden. Die Fouriertransformierte von Gl. (5.4) lautet bis auf einige Vorfaktoren:

$$e^{-ik\frac{l}{2}} \left[\frac{\sin(k\frac{l}{2})}{k} + \frac{ik \cos(k\frac{l}{2})}{(\frac{\pi}{l})^2 - k^2} \right] . \quad (5.5)$$

Sie hat drei Polstellen bei $k = 0$ und $k = \pm \frac{\pi}{l}$, ist allerdings in einer beliebig kleinen Umgebung um diese Stellen beschränkt und \mathbb{C} -differenzierbar in diese fortsetzbar. Damit auch die Anfangsbedingung die Randbedingung erfüllt, entspricht die initiale Auslenkung nicht ganz der Funktion in Gl. (5.4). In Wahrheit betragen die ersten fünf Randpunkte c_j mit $j = -2, \dots, 2$ allesamt $1,0$. Dadurch erhält die Fouriertransformierte in Gl. (5.5) lediglich eine zusätzliche Phase sowie einen additiven Term der Form $\frac{\sin(k\dots)}{k}$, kann also immer noch in ihre Polstellen \mathbb{C} -differenzierbar fortgesetzt werden. Da die Anfangsbedingung auf einem beschränkten Intervall begrenzt ist und ihre Fouriertransformierte über keine Singularitäten verfügt, erfüllt sie die Bedingungen, um gut lokalisiert zu sein und folglich sind Fronten zu erwarten, die mit einer Geschwindigkeit v^*

propagieren, vorausgesetzt, es handelt sich um „gezogene“ Fronten (siehe Abschnitt 4.4).

5.4. Bestimmung von Geschwindigkeit und Wellenzahl

Aus den numerischen Simulationen gilt es vier Größen zu bestimmen, sofern sie sich aus den Ergebnissen bestimmen lassen: Jeweils zwei Geschwindigkeiten und zwei Wellenzahlen für die erste und die zweite Front.

Die Lokalisierung der ersten Front erfolgt durch die Bestimmung der Stelle, an der die Konzentration zum ersten Mal um mehr als einen kleinen Schwellwert von der mittleren Konzentration abweicht. Dies ist schematisch in Abb. 11a dargestellt.

Zur Bestimmung der Geschwindigkeit werden nicht alle Frontpositionen zu allen Zeiten mit einbezogen. Die Simulation wird abgebrochen, sobald die (nach rechts propagierende) Front sich in einem gewissen Abstand zum rechten Rand befindet, um zu verhindern, dass ebendieser Rand einen Einfluss auf die Geschwindigkeit nimmt. In den Simulationen beträgt dieser Abstand 200 Einheiten auf der x -Achse. Ferner stellt sich die Geschwindigkeit v^* nicht von Anfang an ein. Vielmehr konvergiert die Frontgeschwindigkeit im Laufe der Zeit gegen diese [25]. Die Geschwindigkeit in linearer Näherung ergibt sich schließlich aus der Sattelpunktsapproximation, die sich ohnehin den Grenzwert großer Zeiten zunutze macht. Folglich werden die Frontpositionen erst dann zur Geschwindigkeitsbestimmung berücksichtigt, wenn die Front bereits eine gewisse Strecke zurück gelegt hat bzw. wenn sie einen gewissen Abstand zum linken Rand hat. Dieser Abstand wird in den Simulationen zu 600 Einheiten auf der x -Achse gewählt. Die Ermittlung der Geschwindigkeit erfolgt letztendlich durch lineare Interpolation der übrigen Frontpositionen.

Durch numerische Fehler und die Methode der finiten Differenzen kommt es vor, dass schon zu frühen Zeiten an Stellen fern von der Front die Konzentrationsverteilung bereits gestört wird. Dies hat zur Folge, dass die Front plötzlich deutlich schneller propagiert als durch die lineare Stabilitätsanalyse gegeben - sie „bricht aus“. Die numerischen Instabilitäten sorgen dabei für eine zu schwache räumliche Abnahme der Front, was im Einklang mit der linearen Theorie zu schnelleren Fronten führt. Dieser Sachverhalt ist in den Abb. 11b und 11c pathologisch dargestellt. Um dem Ausbrechen der Front vorzubeugen, wird eine „Einfrierfront“ eingeführt, d.h. dass die Differentialgleichung nicht auf der gesamten Domäne, sondern nur bis zu dieser Einfrierfront entwickelt wird. Diese Front hat zu Beginn einen kleinen Vorsprung zur eigentlichen Front und bewegt sich mit $1,2v^*$. Hierbei wurden bereits numerische Erkenntnisse ausgenutzt, dass sich die in räumlich homogene Zustände einfallenden Fronten in der Cahn-Hilliard-Gleichung mit v^* bewegen. In Abb. 11d ist die relative Position der ersten Front und der Einfrierfront zu sehen.

Die Ermittlung der Wellenzahl erfolgt durch die Bestimmung der Schnittpunkte von $c(x, t)$ mit c_0 . Dadurch kann k nur an konkreten Punkten, z.B. zwischen zwei solchen Schnittpunkten bestimmt werden. Abbildung 12 zeigt exemplarisch einen Ausschnitt aus einer Zeitsimulation. In diesem Diagramm sind zudem die zu den abgebildeten Fronten korrespondierenden Wellenzahlen eingezeichnet sowie die momentane Position der Einfrierfront, der ersten und der zweiten Front. Die Lokalisierung der Letzteren gelingt durch die Bestimmung der Wellenzahlen. Da die Werte der ersten Front ziemlich gut mit k^* übereinstimmen, kann die Position der Coarsening-Front als diejenige Stelle definiert werden, bei der k um mehr als einen gewissen Schwellwert von k^* abweicht. Für den Schwellwert wird 0,02 in Einheiten von k verwendet. Die Wellenzahlen der ersten Front werden durch Mittelung der entsprechenden Werte zwischen der ersten und der zweiten Front erhalten. Die Wellenzahlen der zweiten Front ergeben sich durch Mittelung von k über einem Intervall, das vor der Position dieser Front liegt. Dies ist allerdings nicht immer einfach. In Abb. 12 ist zu sehen, dass k bei $x \approx 160$ nach oben abweicht. Die fehlende Konstanz der Wellenzahlen der zweiten Front ist ein generelles Problem, das insbesondere bei Konzentrationen niedrigen Betrags auftaucht. In dem in Abb. 12 dargestellten Fall tritt eine **vereinzelte** Abweichung der Wellenzahlen der zweiten Front von einem mehr oder weniger konstantem Verlauf auf. In solchen Fällen werden diese Abweichungen bei der Mittelung der Daten außer Acht gelassen. Schwankt k jedoch auf dem gesamten Intervall sehr stark, so werden

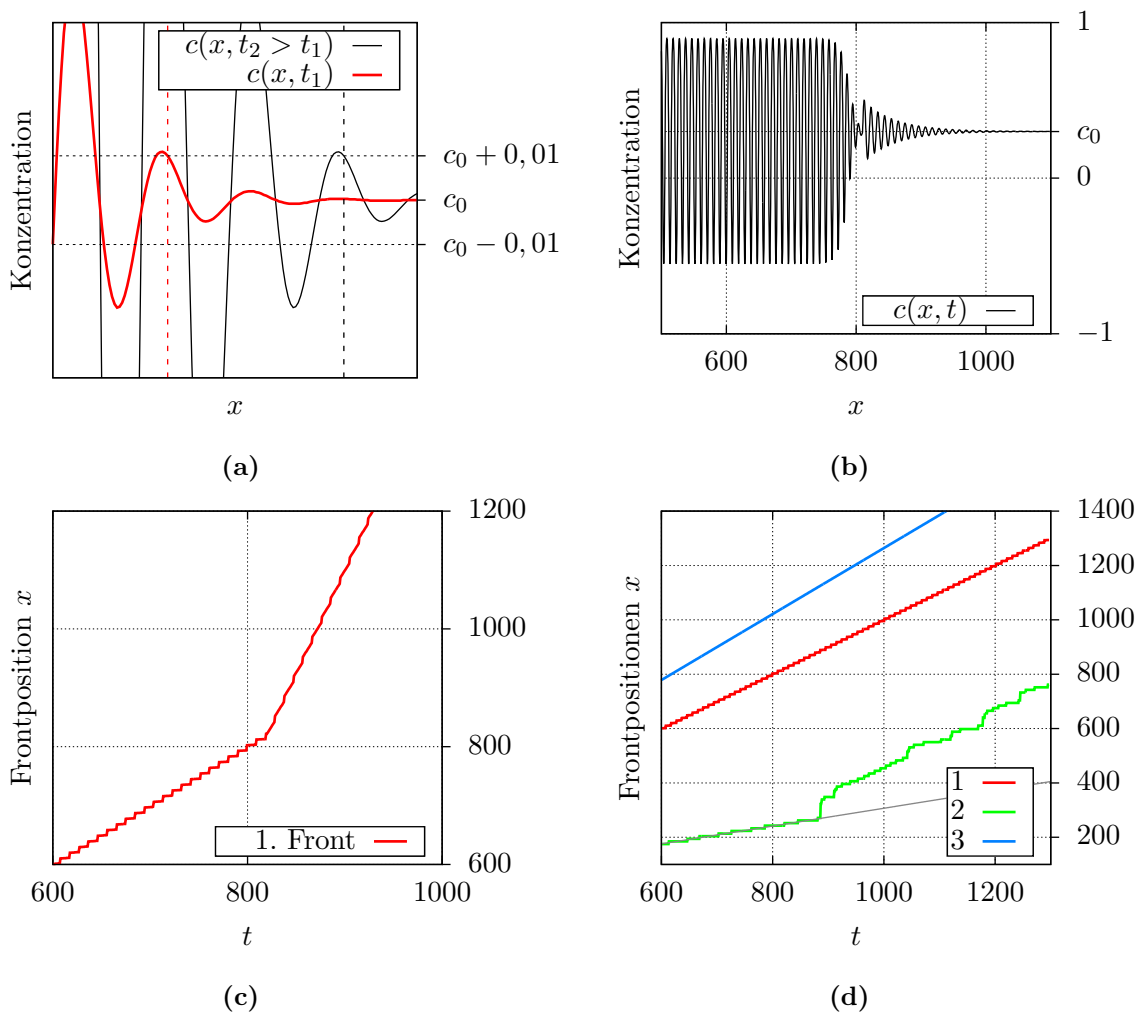


Abbildung 11: (a) Zu sehen ist schematisch eine nach rechts propagierende Front zu zwei Zeiten $t_2 > t_1$. Die Position der ersten Front ist das größte x , für das die Konzentration c um mehr als einen gewissen Schwellwert von c_0 abweicht. Der verwendete Schwellwert lautet $c - c_0 = 0,01$.

(b) Diese Abbildung zeigt qualitativ eine mögliche Auswirkung von numerischen Instabilitäten anhand der Daten einer Simulation ohne Einfrierfront. Dadurch kann eine neue, schnellere Front (siehe (c)) entstehen, die über x schwächer abfällt als durch die lineare Stabilitätsanalyse (Abschnitt 4.3 und Gl. (4.9a)) gegeben. Die Front „bricht aus“.

(c) Das Ausbrechen der Front kann auch in dieser Abbildung veranschaulicht werden, in der die Position der ersten Front über der Zeit aufgetragen ist. Die Abruptheit des Ausbruchs wird durch den Knick im Graphen deutlich.

(d) Diese Abbildung zeigt die Positionen verschiedener Fronten einer Simulation, die weiter ausgewertet werden kann. (1) steht für die 1. Front, (2) für die Coarsening-Front und (3) für die Einfrierfront. Zusätzlich ist eine Gerade eingezeichnet, die verdeutlicht, dass der Graph der Position der zweiten Front zu Beginn, in diesem Fall für $t \lesssim 880$, linear angepasst werden kann.

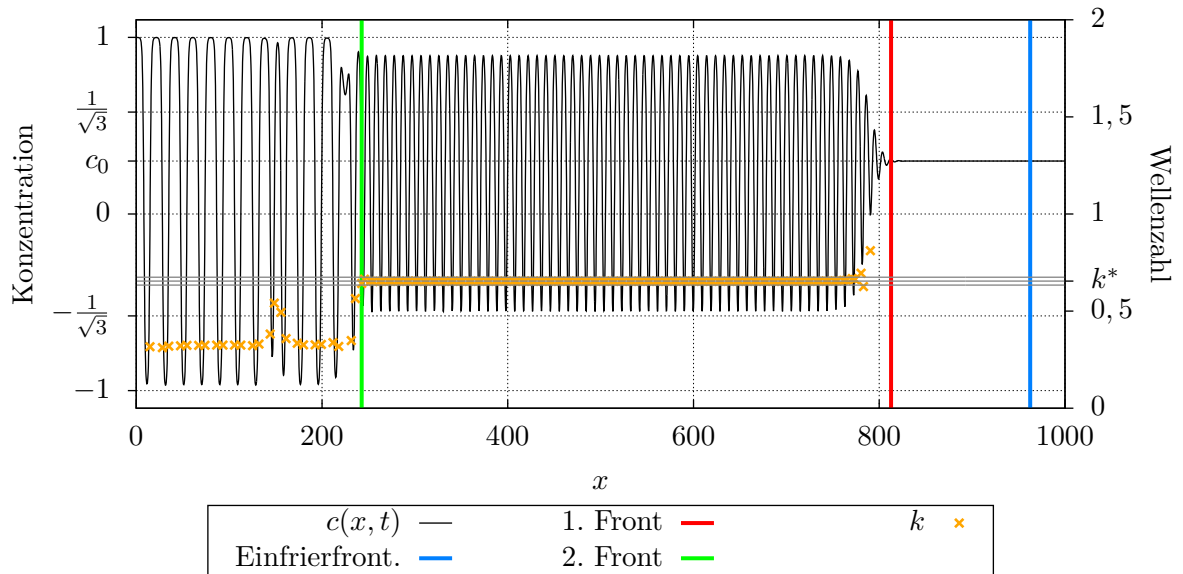


Abbildung 12: Der Ausschnitt aus einer Zeitsimulation mit $c_0 = 0,3$ zeigt $c(x, t)$ aufgetragen gegen die linke y -Achse sowie die daraus bestimmten lokalen Wellenzahlen k aufgetragen gegen die rechte y -Achse.

alle Daten berücksichtigt und die entsprechend größere Varianz der Daten als Fehlerabschätzung verwendet.

Es bleibt noch zu erklären, wie die Geschwindigkeit der Coarsening-Front bestimmt wird. Prinzipiell kann diese, genau wie bei der ersten Front, durch lineare Datenanpassung der Frontpositionen erhalten werden. In Abb. 11d ist die Position der zweiten Front über der Zeit aufgetragen. Es ist zu sehen, dass sie zunächst linear propagiert, dann aber beschleunigt und sich zunehmend unregelmäßig ausbreitet. Dies wird auf numerische Instabilitäten zurückgeführt. Es wird angenommen, dass diese mehr und mehr Überhand gewinnen, je mehr Entwicklungsschritte ausgeführt wurden. Aus diesem Grund wird davon ausgegangen, dass zur Ermittlung der Geschwindigkeit der Coarsening-Front die Datenanpassung einfach auf frühen Intervall vorgenommen werden muss, wie es auch in Abb. 11d illustriert ist.

6. Resultate

In diesem Abschnitt sollen die Resultate der numerischen Simulationen präsentiert werden. Untersucht werden dabei die Differentialgleichungen (1.1) und (1.2). Da v^* und k^* über α vom Mittelwert der Konzentration abhängen, müssen die Frontgeschwindigkeiten für verschiedene c_0 bestimmt werden.

6.1. Vereinfachte Cahn-Hilliard-Gleichung

Aufgrund der Symmetrie der Differentialgleichung (1.1) reicht es aus, $c_0 \in [0, \frac{1}{\sqrt{3}}]$ zu betrachten. Es werden jedoch keine Untersuchungen für $c_0 > 0,5$ gemacht, da die Simulation dann zunehmend aufwendiger wird. Die Ergebnisse der Geschwindigkeiten sind in Abb. 13a, die der Wellenzahlen in Abb. 13b dargestellt.

Die Abweichung der numerisch ermittelten Geschwindigkeiten der ersten Front von den nach Gl. (4.10) rechnerisch zu erwartenden Werten beträgt für alle Datenpunkte weniger als 1,5%. Theorie und Numerik stimmen folglich unter Berücksichtigung numerischer Fehler hier überein. Da die Geschwindigkeit der ersten Fronten aus den Zeitsimulationen stets etwas unterhalb der Kurve $v^*(c_0)$ liegen, wird geschlossen, dass auf dem betrachteten Bereich für c_0 nur gezogene

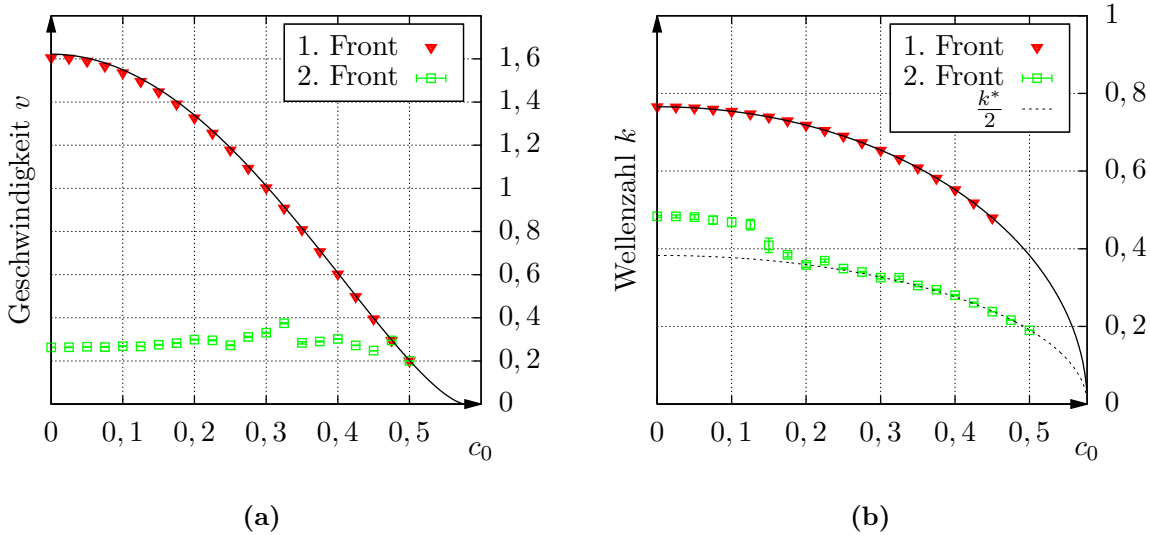


Abbildung 13: (a) Dargestellt sind die numerisch bestimmten Geschwindigkeiten der ersten und zweiten Front in der vereinfachten Cahn-Hilliard-Gleichung (1.1). Die schwarze Kurve entspricht der theoretisch vorausgesagten Geschwindigkeit der ersten Front im Grenzfalle $t \rightarrow \infty$ aus Gl. (4.10). (b) In dieser Abbildung sind die Wellenzahlen der Fronten dargestellt. Die schwarze Kurve zeigt $k^*(c_0)$ der linearen Stabilitätsanalyse aus Gl. (4.11). Bei $c_0 \geq 0,475$ sind keine Datenpunkte für die erste Front gezeigt, weil hier die Coarsening-Front unmittelbar hinter der ersten Front das Wellenmuster verändert.

Fronten in der Cahn-Hilliard-Gleichung existieren.

Die numerisch ermittelten Wellenzahlen der Muster der ersten Front weichen für $c_0 \leq 0,475$ um weniger als 0,15 % von $k^*(c_0)$ aus Gl. (4.11) ab. Für die mittleren Konzentrationen $c_0 = 0,475$ und $c_0 = 0,5$ wird effektiv nur eine einzelne Front beobachtet, die sich mit $v^*(c_0)$ ausbreitet und deren Wellenzahl in etwa bei $\frac{k^*(c_0)}{2}$ liegt. Dieses Resultat ist so zu interpretieren, dass die zweite Front genauso schnell propagiert wie die erste und unmittelbar hinter dieser lokalisiert ist. Auf die in den räumlich homogenen Zustand propagierende Front folgt eine instantane Verdoppelung der Periodenlänge des Wellenmusters. In diesem Zusammenhang wird vom sogenannten „locking-phenomenon“ gesprochen [1]. Die Coarsening-Front ist dann anschaulich an die erste Front gekoppelt.

Für $c_0 \gtrsim 0,25$ sind die zweiten Fronten periodenverdoppelnd. Die relative Abweichung der Wellenzahl dieser Fronten von $\frac{k^*(c_0)}{2}$ beträgt hier weniger als 1,6 %. Für kleinere mittlere Konzentrationen ist die Geschwindigkeit der zweiten Front ungefähr konstant und die Wellenzahlen sind etwas größer. Diese Resultate stehen qualitativ im Einklang mit [1].

Sowohl die Geschwindigkeiten als auch die Wellenzahlen der zweiten Fronten sind mit größeren Fehlern behaftet als die Werte der ersten Front. Dies beruht auf dem größeren Einfluss numerischer Fehler auf die Simulation der Frontpropagationen der Coarsening-Front in räumlich inhomogenen, instabilen Mustern. Im Wesentlichen kann zwischen drei Ursachen für das Zustandekommen von Abweichungen unterschieden werden. Die einzige in die Fehlerabschätzung mit einbezogene Ursache ist der Fehler, der bei der Auswertung der Daten gemacht wird. Da die Wellenzahlen sich durch Mittelung über n Datenpunkte, $k = \langle k \rangle$, ergeben (siehe Abschnitt 5.4), werden ihre Fehler durch die Varianz abgeschätzt:

$$\Delta k = \frac{1}{\sqrt{n-1}} \sqrt{\langle k^2 \rangle - \langle k \rangle^2}.$$

Für die Geschwindigkeiten liefert das verwendete Verfahren zur linearen Datenanpassung, der Levenberg-Marquardt-Algorithmus, implementiert im Programm Gnuplot [26], einen statistischen Fehler der Fit-Parameter.

Die anderen beiden, hier nicht berücksichtigten Ursachen sind der Diskretisierungsfehler und Rundungsfehler, die aus der Entwicklung der Differentialgleichung stammen. Ersteres beruht darauf, dass sich durch die Formulierung der Ableitungen als finite Differenzen eine veränderte Dispersionsrelation ergibt und entsprechend andere Werte für v^* und k^* zu erwarten sind. Im Falle der vereinfachten Cahn-Hilliard-Gleichung und dem expliziten Euler-Verfahren als Zeitschrittverfahren lautet die Dispersionsrelation (siehe Anhang A.4):

$$\omega_D(k) = \frac{i}{\Delta t} \ln \left[1 - \Delta t \left[\left(\frac{1}{\Delta x} \left(e^{ik\frac{1}{2}\Delta x} - e^{-ik\frac{1}{2}\Delta x} \right) \right)^4 + \alpha \left(\frac{1}{\Delta x} \left(e^{ik\frac{1}{2}\Delta x} - e^{-ik\frac{1}{2}\Delta x} \right) \right)^2 \right] \right].$$

Die Untersuchung dieser Dispersionsrelation nach den Gleichungen (4.7) ist wesentlich aufwendiger. Soll die Dispersionsrelation für das in dieser Arbeit verwendete Runge-Kutta-Verfahren berechnet werden, so nimmt die Komplexität des Problems beträchtlich zu. Aus diesem Grund wird auf eine Abschätzung des Diskretisierungsfehlers verzichtet, weil diese den Rahmen dieser Arbeit sprengen würde.

6.1.1. Vergleich mit den Ergebnissen des Kontinuierungsverfahrens

Um die Gültigkeit der in Abb. 13a und 13b dargestellten Ergebnisse zu beurteilen, werden die Lösungen für die Konzentrationsverteilung $c(x, t)$ der Zeitsimulationen mit Ergebnissen eines Kontinuierungsprogramms (siehe Abschnitt 3.4) verglichen. Unter welchen Voraussetzungen entsprechen diese Lösungen denen der Zeitsimulationen und wie kann der Vergleich vorgenommen werden? Dazu werde wieder ein Blick auf Abb. 12 geworfen. Dort ist zu erkennen, dass auf einem Intervall $300 \lesssim x \lesssim 700$ die Werte für $c(x, t)$ dem Wellenmuster der ersten Front, auf $0 \lesssim x \lesssim 200$ demjenigen der zweiten Front entsprechen. Auf diesen Intervallen werden die Werte für $c(x, t)$ auf einem Teilintervall, dessen Länge einem ganzzahligen Vielfachen der Periodenlänge des Wellenmusters entspricht, entnommen. Der Vergleich dieser den Zeitsimulationen entnommenen Daten mit den Ergebnissen des Kontinuierungsverfahrens setzt zwei Bedingungen voraus:

- (i) Die Muster, die die Fronten hinterlassen, entsprechen zeitlich konstanten Lösungen. In Abschnitt 3.4 wurde erwähnt, dass dies nie exakt erfüllt sein kann, weil diese Lösungen instabil sind und die Coarsening-Front in diese einfällt, während sie noch relaxieren. Aus diesem Grund ist eine inhärente Abweichung der L_2 -Normen zu erwarten.
- (ii) Das Kontinuierungsprogramm berechnet die Lösungen für c auf Domänen, deren Länge der Periodenlänge des Wellenmusters entspricht, mit periodischen Randbedingungen. Die Lösungen der Zeitsimulationen, die ja mit von Neumann-Randbedingungen (siehe Gl. (2.11) und (5.2)) arbeiten, entsprechen den Ergebnissen des Kontinuierungsverfahrens nur dann, wenn die Länge der Domäne in den Zeitsimulationen deutlich größer ist als die Periodenlänge des Wellenmusters.

Die kleinste Wellenzahl, die sich aus den Zeitsimulationen ergeben hat, ist die der zweiten Front bei $c_0 = 0,5$ und hat ungefähr den Wert $0,2$ in Einheiten von k (siehe Abb. 13b). Damit lassen sich die Periodenlängen der Wellenmuster aus den Zeitsimulationen abschätzen:

$$\frac{2\pi}{k} \lesssim \frac{2\pi}{0,2} \leq 40 \leq 0,03 \cdot L,$$

wobei $L = 1500$ der Domänenlänge entspricht. Beide Bedingungen werden demnach näherungsweise erfüllt. Konkret verglichen werden die L_2 -Norm $\|\delta c\|$ aus Gl. (3.16) und die mit der freien Energie in Zusammenhang stehende Größe \hat{F} aus Gl. (3.17) sowie die Minimal- und Maximalwerte

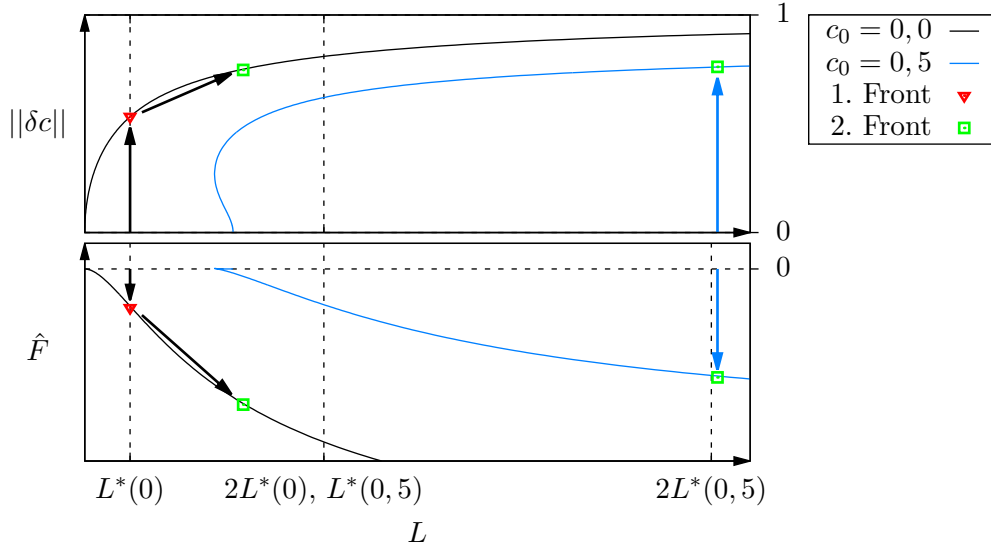


Abbildung 14: In der oberen Abbildung ist die L_2 -Norm nach Gl. (3.16) über der Periodenlänge L der Muster für $c_0 = 0,0$ und $c_0 = 0,5$ aufgetragen. Die untere Darstellung zeigt \hat{F} aus Gl. (3.17). Die schwarzen Kurven sind die Ergebnisse des Kontinuierungsverfahrens. Es gilt $L^*(c_0) = \frac{2\pi}{k^*(c_0)}$. Die Pfeile sollen die Dynamik der Cahn-Hilliard-Gleichung veranschaulichen.

der Konzentrationsverteilung. Dass aus den Zeitsimulationen mehrere Wellenzüge entnommen werden, stellt keine Schwierigkeit dar, weil $\|\delta c\|$ und \hat{F} aus auf die Periodenlänge zu normierenden Integralen berechnet werden und für eine l -periodische, reelle Funktion $c(x)$ und ein $n \in \mathbb{N}$ gilt:

$$\frac{1}{nl} \int_0^{nl} c(x) dx = \frac{1}{l} \int_0^l c(x) dx.$$

In Abb. 14 sind $\|\delta c\|$ und \hat{F} exemplarisch für $c_0 = 0$ und $c_0 = 0,5$ dargestellt. Die aus den Zeitsimulationen bestimmten Werte sind auch eingezeichnet und stimmen mit den Ergebnissen des Kontinuierungsverfahrens überein. Die Pfeile sollen die Dynamik der Cahn-Hilliard-Gleichung verdeutlichen. Im Fall $c_0 = 0$ ist zu erkennen, wie das System durch einen Übergang von einer räumlich homogenen Konzentrationsverteilung, $\hat{F} = 0$ entsprechend, über das Muster der ersten Front zum Muster der zweiten Front seine Energie verkleinert. Für $c_0 = 0,5$ wurde nur ein einziges periodisches Muster beobachtet, für welches die L_2 -Norm bestimmt werden konnte. Der Vergleich für alle übrigen mittleren Konzentrationen ist in Abb. 15 dargestellt, in der die relative Abweichung

$$\left| \frac{a_Z - a_K}{a_K} \right| \quad (6.1)$$

für alle zu vergleichenden Parameter gezeigt ist. Dabei ist a_K ein Parameter aus dem Kontinuierungsverfahren und a_Z einer aus der Zeitsimulation. Der Parameter steht hierbei entweder für die L_2 -Norm, \hat{F} , dem Minimal- oder dem Maximalwert einer Lösung. Die relative Abweichung beträgt bei der ersten Front für alle Werte außer \hat{F} unter 1%. Dass die Abweichungen für die auf L normierte Energie größer sind, wird auf den numerischen Mehraufwand zur Bestimmung dieser Größen zurückgeführt, weil zur Berechnung von \hat{F} nicht nur wie im Falle von $\|\delta c\|$ integriert, sondern auch noch die erste räumliche Ableitung von c aus dem diskreten Datensatz $\{c_j\}$ des Wellenzugs aus den Zeitsimulationen berechnet werden muss. Details zur Berechnung der L_2 -Norm und von \hat{F} aus den Wellenzügen der Zeitsimulationen werden in Anhang A.5 behandelt. Für die Coarsening-Front sind die Abweichungen für $c_0 \geq 0,3$ mit unter 1% sehr klein. Für

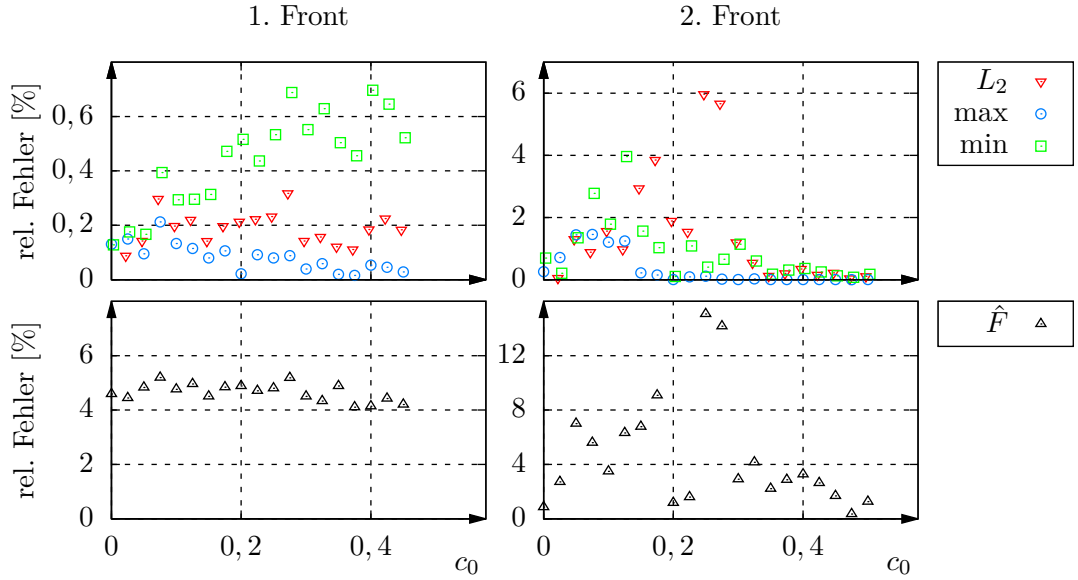


Abbildung 15: Verglichen werden L_2 -Norm $\|\delta c\|$ aus Gl. (3.16), \hat{F} aus Gl. (3.17), und die Minimal- und Maximalwerte der Lösungen, die sich einmal aus den Zeitsimulationen und einmal aus dem Kontinuierungsverfahren ergeben. In dieser Abbildung aufgetragen sind die relativen Abweichungen nach Gl. (6.1) dieser Werte bezogen auf die Ergebnisse des Kontinuierungsprogramms. Aufgrund unterschiedlicher Größenordnungen der relativen Abweichungen ist \hat{F} der Übersicht wegen in einem eigenen Diagramm aufgetragen.

kleinere mittlere Konzentrationen scheinen die numerischen Fehler jedoch sehr stark ins Gewicht zu fallen.

Für die in Abb. 13 dargestellten Geschwindigkeiten und Wellenzahlen bedeutet dies nun, dass die Ergebnisse der zweiten Front für mittlere Konzentrationen $c_0 < 0,3$ mit Vorsicht zu genießen sind, während die übrigen Daten durch die Untersuchungen mit dem Kontinuierungsprogramm bestätigt werden.

6.2. Erweiterte Cahn-Hilliard-Gleichung

Soll die Cahn-Hilliard-Gleichung mit dem aktiven Term aus Gl. (1.2) untersucht werden, so muss in diesem Fall die mittlere Konzentration sowohl über negative als auch über positive Werte variiert werden, weil diese Gleichung nicht invariant unter Vorzeichenvertauschung von c ist. Wie in dem im vorangehenden Abschnitt behandelten Fall $\lambda = 0$ wird $|c_0| \leq 0,5$ gewählt. Der Parameter λ wird über negative Werte variiert. Dann braucht die Differentialgleichung nicht für positive Werte von λ untersucht zu werden, weil dann die Resultate dieselben wären, nur dass sich in ihrer Abhängigkeit von der mittleren Konzentration das Vorzeichen von c_0 ändert.

Wie in Abschnitt 3 und Abschnitt 4 erwähnt, stimmen die linearisierten Formen der erweiterten und der vereinfachten Cahn-Hilliard-Gleichung überein, weswegen für beide Modelle die theoretisch vorausgesagten Ergebnisse für v und k der Front, die in den homogenen Zustand propagiert, dieselben sind. Das heißt, dass der aktive Term keinen Einfluss auf die Ausbreitungsgeschwindigkeit der ersten Front hat. Was die Wellenzahl betrifft, so sollte auch diese $k^*(c_0)$ entsprechen, sofern nicht wie bei den in Abschnitt 6.1 dargestellten Ergebnissen der Untersuchung zur vereinfachten Cahn-Hilliard-Gleichung instantane Periodenvergrößerung auftritt.

Die numerischen Untersuchungen bestätigen in allen Fällen die sich rechnerisch ergebenden Geschwindigkeit für die erste Front. Es können demnach auch hier keine „geschobenen“ Fronten ausgemacht werden. Die Wellenzahlen der Muster, die sie hinterlassen, werden im Intervall $-0,4 \lesssim c_0 \lesssim 0,45$ bestätigt. Allerdings werden wieder wie in Abschnitt 6.1 für betragsmäßig große c_0 keine zwei getrennten Fronten beobachtet und die Wellenzahl der einzigen, aus den

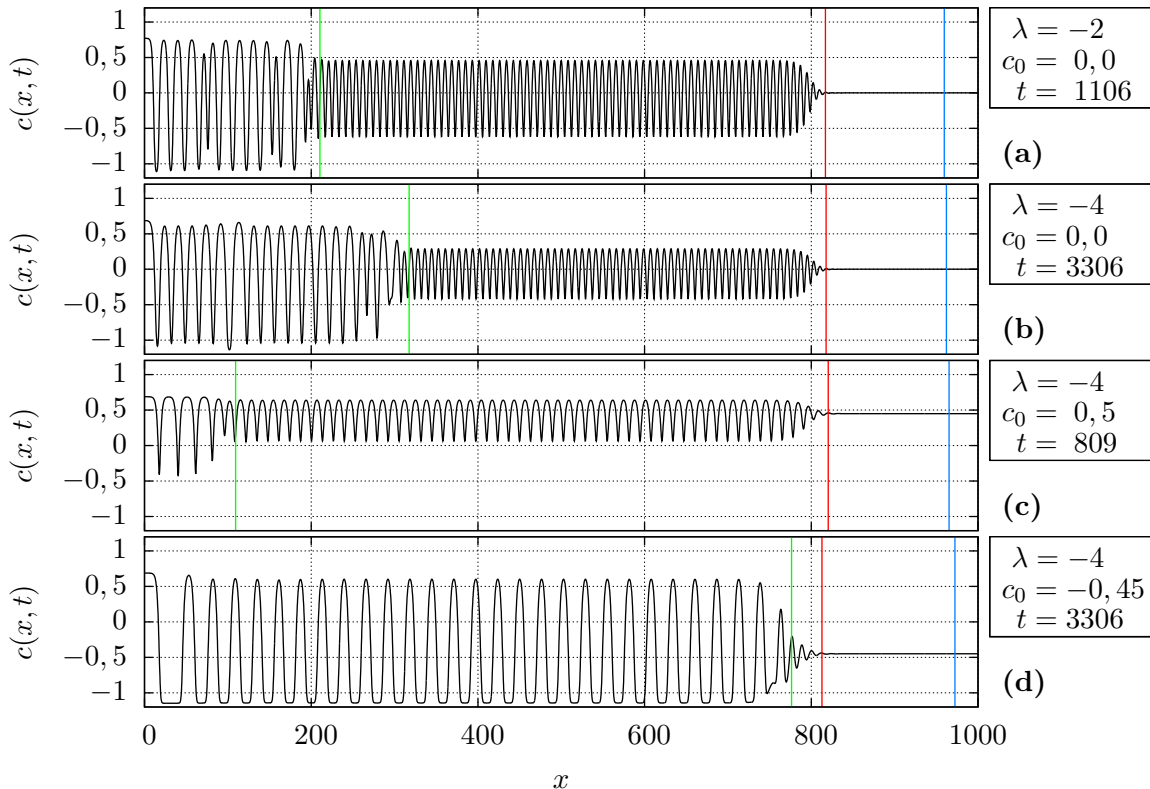


Abbildung 16: Der Vergleich von (a) und (b) soll zeigen, dass die Amplitude des Musters der ersten Front deutlich abnimmt, wenn $|\lambda|$ größer wird. Dies stimmt qualitativ mit den Ergebnissen aus Abschnitt 3.4 überein.

Die Abbildungen (c) und (d) zeigen, dass im Falle unterschiedlicher Vorzeichen von λ und c_0 die zweite Front ausgebremst wird und im Falle gleicher Vorzeichen effektiv eine einzige Front beobachtet wird, d.h. die zweite Front bewegt sich hier genauso schnell wie die erste.

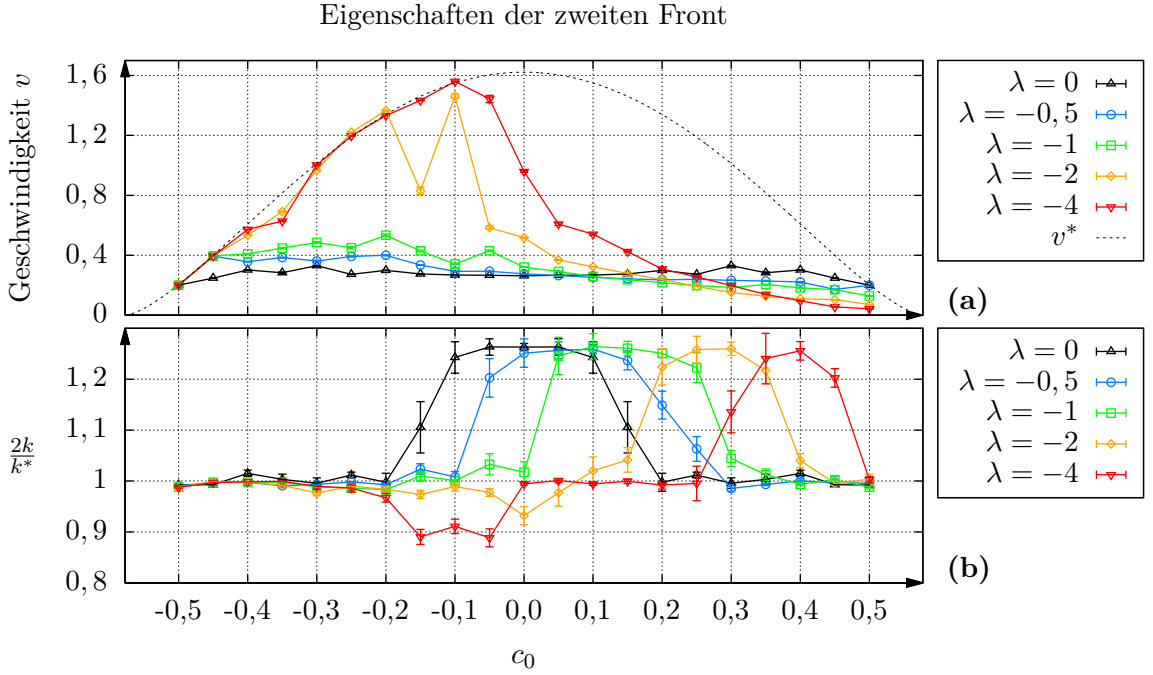


Abbildung 17: (a) Hier sind die numerisch ermittelten Geschwindigkeiten der Coarsening-Front in Abhängigkeit von c_0 für verschiedene λ aufgetragen. Die Datenpunkte sind nur der Übersicht wegen durch Linien verbunden. (b) In dieser Abbildung sind die Ergebnisse der Wellenzahlen des Musters, dass die zweite Front hinterlässt, normiert auf $\frac{k^*(c_0)}{2}$ über der mittleren Konzentration für verschiedene λ zu sehen. In beiden Abbildungen ergeben sich die eingezeichneten Fehlerbalken aus denselben Fehlerabschätzungen, wie sie in Abschnitt 6.1 gemacht wurden.

Simulationen erhaltenen Front liegt bei $\frac{k^*(c_0)}{2}$. Um dies zu präzisieren und um den Einfluss von λ dabei zu diskutieren, werden zwei grundsätzlich zu unterscheidende Fälle betrachtet.

Im ersten Fall ist die mittlere Konzentration positiv, sodass c_0 und λ unterschiedliche Vorzeichen haben. Qualitativ sorgt der aktive Term bei kleiner werdendem λ für eine Abnahme der Amplitude des Musters hinter der ersten Front, wovon sich durch den Vergleich der Abbildungen 16a und 16b überzeugt werden kann. Zudem vergrößert sich die räumliche Krümmung der Konzentrationsverteilung $c(x, t)$ an den Minimalstellen mit größer werdendem $|\lambda|$, d.h. die Minima werden „spitzer“⁴ (siehe zweite Front in Abb. 16(c)). Zusätzlich wird die zweite Front mit abnehmendem λ bei hohen mittleren Konzentrationen verlangsamt. Dies hat zur Folge, dass ab $\lambda < -1$ auch bei $c_0 = 0,5$ zwei getrennte Fronten beobachtet werden können und die Wellenzahl des Musters der ersten dieser beiden Fronten mit $k^*(0,5)$ übereinstimmt (vgl. Abb. 16c).

Im zweiten Fall ist die mittlere Konzentration negativ. Hier erreicht die Coarsening-Front bei niedrigen c_0 die Geschwindigkeit $v^*(c_0)$ der ersten Front. Bei $c_0 = -0,5$ werden grundsätzlich keine zwei Fronten beobachtet (vgl. Abb. 16d), und für $c_0 = -0,45$ ist es ab $\lambda < -0,5$ auch nicht mehr möglich.

Das Problem der Wellenzahl des Musters der ersten Front überträgt sich folglich auf die Frage nach der Geschwindigkeit der zweiten Front. Die numerischen Ergebnisse hierfür sind in Abb. 17a dargestellt. Die Geschwindigkeit der zweiten Front ist in Abhängigkeit der mittleren Konzentration für verschiedene λ aufgetragen. Der Abbildung ist zu entnehmen, dass für betragsmäßig größer werdende λ die Geschwindigkeiten zunehmend asymmetrisch werden bezüglich Vorzeichenvertauschung von c_0 . Während die Geschwindigkeiten mit fallendem λ für negative

⁴Wäre λ positiv, würden dies an den Maximalstellen beobachtet werden.

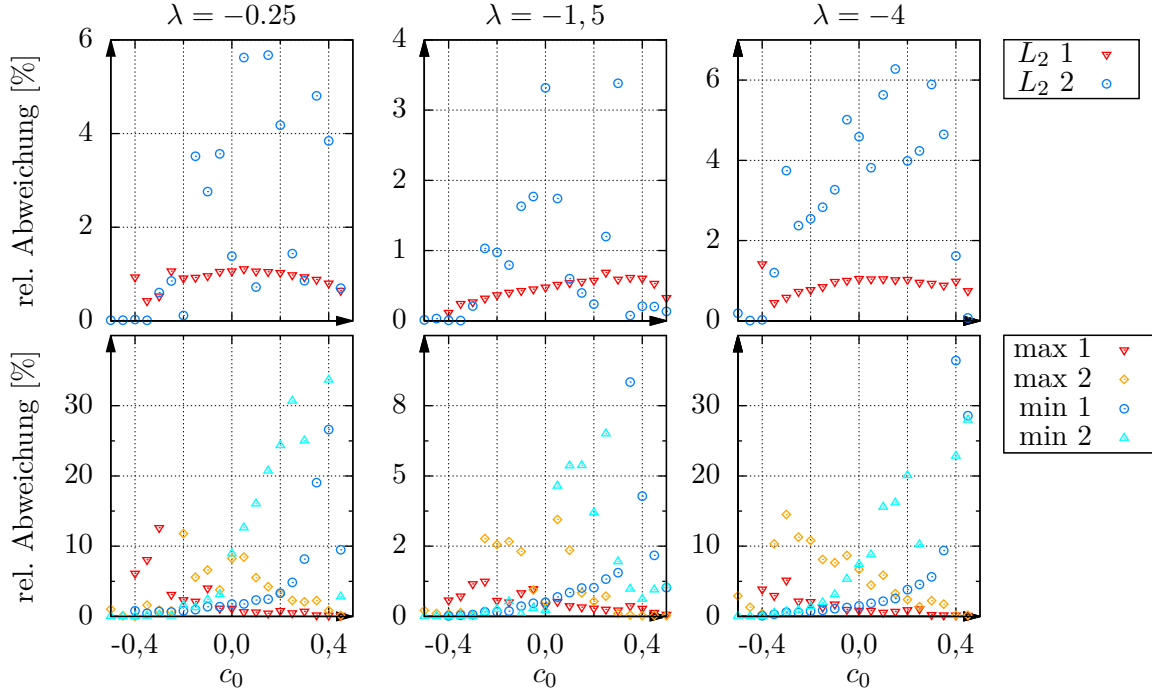


Abbildung 18: Open sind die relativen Abweichungen der L_2 -Normen der Konzentrationsverteilungen aus den Zeitsimulationen von denjenigen aus dem Kontinuerungsverfahren zu sehen. Die relative Abweichung wird wie in Gl. (6.1) und die L_2 -Norm wie in Gl. (3.16) berechnet. Der Vergleich geschieht sowohl für die erste als auch für die zweite Front.

Unten ist derselbe Vergleich anhand der Minimal- und Maximalwerte der Konzentrationsverteilungen dargestellt.

Man beachte die unterschiedliche Skalierung der y -Achsen!

c_0 steigen, sinken sie für positive c_0 ab. Nach den Datenpunkten in der Abbildung entspricht die Geschwindigkeit für $\lambda = -2$ und $\lambda = -4$ auf weiten Teilen der negativen c_0 -Halbachse in etwa derjenigen der ersten Front, $v^*(c_0)$. Teilweise liegt sie sogar darüber. Für $c_0 \geq -0,4$ werden jedoch stets zwei räumlich klar voneinander getrennte Fronten beobachtet. Die Coarsening-Front befindet sich dann eindeutig hinter der ersten Front, sodass hier nicht von einer „Kopplung“ beider Fronten gesprochen werden kann. Wie in Abb. 16b dargestellt, ergeben die Simulationen zwei klar unterscheidbare Fronten. Es ist anzunehmen, dass die ermittelten Ausbreitungsgeschwindigkeit der zweiten Fronten aufgrund von numerischen Fehlern zu groß sind. Ein Beleg hierfür ist die starke Schwankung der Werte, die beispielsweise in Abb. 17a am Datenpunkt bei $c_0 = -0,15$ und $\lambda = -2$ deutlich wird und einen diskontinuierlichen Verlauf von v über c_0 suggeriert.

Die Wellenzahlen der Konzentrationsverläufe hinter der zweiten Front sind in Abb. 17b, normiert auf $\frac{k^*(c_0)}{2}$, gegen c_0 aufgetragen. Die Wellenzahlen der zweiten Front entsprechen auf weiten Teilen der c_0 -Achse der Hälfte der sich aus der linearen Näherung ergebenden Wellenzahl $k^*(c_0)$. Das bedeutet, dass auch hier die Coarsening-Front für eine Verdopplung der Periodenlänge des Entmischungsmusters sorgt. Der Darstellung in Abb. 17b ist zu entnehmen, dass die Wellenzahlen auf einem gewissen Intervall von $\frac{k^*(c_0)}{2}$ nach oben abweichen, und dass sich dieses Intervall für fallende λ zu größeren c_0 hin verschiebt. Wie auch bei den Geschwindigkeiten sind diese Werte jedoch mit Vorsicht zu genießen. Oftmals sind die Konzentrationsverteilungen aus den Simulationen hinter der ersten Front sehr unregelmäßig, wie exemplarisch in den Abbildungen 16a und 16b zu sehen. Dadurch sind die Muster nicht mehr periodisch, obwohl dies eigentlich

Voraussetzung für die Bestimmung der Wellenzahl dieser Lösungen wäre.

Ein etwas präziserer Ansatz zur Diskussion der Ergebnisse erfolgt wieder durch den Vergleich der Lösungen aus den Zeitsimulationen mit denen des Kontinuierungsverfahrens. Die Vorgehensweise ist dabei genau wie in Abschnitt 6.1. In Abb. 18 sind exemplarisch die Vergleiche für einige λ dargestellt. Der Vergleich der L_2 -Normen zeigt, dass die Muster der ersten Front für betragsmäßig kleine c_0 im Allgemeinen besser mit den Lösungen des Kontinuierungsprogramms übereinstimmen als diejenigen der zweiten Front. Befindet sich c_0 jedoch am Rand des untersuchten Intervalls für die mittlere Konzentration, so verhält es sich umgekehrt. Des Weiteren steigen die relativen Abweichungen der Minimalwerte für positive c_0 stark an. Dies ist darin zu begründen, dass der Konzentrationsverlauf an den Minimalstellen stark gekrümmt ist und es folglich schwer wird, die Funktion $c(x, t)$ aufgrund der Ortsdiskretisierung an ihren räumlichen Extrema ausreichend gut aufzulösen. Für negative c_0 tritt dieses Problem entsprechend an den Maximalstellen auf, weswegen die relativen Abweichungen der Maximalwerte hier größer sind als für positive c_0 . Der Effekt ist hier jedoch nicht so stark, weil der aktive Term, wie bereits erwähnt, insbesondere für ein „Zuspitzen“ der **Minima** des Wellenmusters sorgt.

Der Vergleich mit dem Kontinuierungsverfahren bestätigt hier insbesondere die numerisch ermittelten Geschwindigkeiten und Wellenzahlen der ersten Front. Auf dem betrachteten Intervall der mittleren Konzentration verhalten sich auch in der erweiterten Cahn-Hilliard-Gleichung die in räumlich homogene Zustände einfallende Fronten genau so, wie es durch die lineare Stabilitätsanalyse vorher gesagt wurde. Der aktive Term erzeugt keine geschobenen Fronten. Aus dem Vergleich kann jedoch auch geschlossen werden, dass die verwendeten numerische Methoden nicht ausreichen, um präzise Aussagen über die Dynamik der zweiten Front für beliebige Werte von c_0 zu machen. Für betragsmäßig große c_0 bleibt der verwendete Code stabil und die Simulationen zeigen, dass das System ein periodisches Wellenmuster bildet. Ist der Betrag der mittleren Konzentration klein, d.h. in etwa $|c_0| \lesssim 0,3$, so sind die erhaltenen Muster oft sehr unregelmäßig.

7. Zusammenfassung und Ausblick

Ziel dieser Arbeit war die Untersuchung der Ausbreitung von Entmischungsfrenten und den sich dabei bildenden, periodischen Mustern in der eindimensionalen, vereinfachten Cahn-Hilliard-Gleichung und einer um einen aktiven Term erweiterten Form.

Zunächst wurden zeitlich konstante Lösungen der Cahn-Hilliard-Gleichung diskutiert. Im Langzeitverhalten pendelt die Konzentration zwischen zwei Gleichgewichtswerten. Im Falle der vereinfachten Cahn-Hilliard-Gleichung lassen sich diese trivial bestimmen. Durch den Einbau des aktiven Terms verschieben sich jedoch die Gleichgewichtswerte. Diese Verschiebung wurde mittels einer Formulierung eines mechanischen Analogons für das stationäre Problem und einer nichtlinearen Substitution der sich dabei ergebenden Differentialgleichungen berechnet.

Nach erfolgter Auseinandersetzung mit den zeitlich konstanten Lösungen wurde die Dynamik in linearer Näherung betrachtet und speziell für die vereinfachte sowie für die erweiterte Cahn-Hilliard-Gleichung die Herleitung eines Ausdrucks für die Ausbreitungsgeschwindigkeit und die Wellenzahl einer Entmischungsfrent im Grenzfall großer Zeiten nachvollzogen. Mit dem Ziel, die Stabilität einer Front zu diskutieren, wurde die Abhängigkeit der Geschwindigkeit von der räumlichen exponentiellen Abfallrate der Front in linearer Näherung bestimmt und numerisch bestätigt. Eine vollständige Diskussion der Stabilität involviert die Betrachtung nichtlinearen Wachstums, was in dieser Arbeit komplett außer Acht gelassen wurde und deswegen noch für zukünftige Arbeiten offenbliebe.

Die numerischen Untersuchungen bestätigen die theoretisch vorausgesagten Geschwindigkeiten aus der linearen Näherung. Demnach existieren sowohl in der vereinfachten als auch in der erweiterten Cahn-Hilliard-Gleichung ausschließlich gezogene Fronten. Die Wellenzahlen der Konzentrationsverteilungen der ersten Fronten ließen sich für betragsmäßig kleine mittlere Konzentrationen bestätigen. Befindet sich die mittlere Konzentration am Rande des spinodalen Bereichs, so breiten sich die zweiten Fronten mit derselben Geschwindigkeit aus wie die ersten und sorgen dabei in unmittelbarer Nähe hinter der ersten Front für eine instantane Verdopplung der Periodenlänge. In den Fällen betragsmäßig kleiner mittlerer Konzentrationen wurden stets Fronten beobachtet, die in inhomogene Konzentrationsverteilungen einfallen und die charakteristische Längenskala der Muster vergrößerten.

Bei der Modellierung der erweiterten Cahn-Hilliard-Gleichung wurden qualitativ veränderte Entmischungsmuster beobachtet. Die Simulationen haben darüber hinaus ergeben, dass die Konzentrationsbereiche, in denen periodenlängenverdoppelnde Coarsening-Frenten existieren, durch den symmetriebrechenden, aktiven Term in die entgegengesetzte Richtung verschoben werden wie die Gleichgewichtswerte.

Im Allgemeinen erwies sich die Modellierung der zweiten Fronten als sehr schwierig, weil die Zeitsimulation aufgrund der zu untersuchenden Frontpropagation in **instabile**, räumlich inhomogene Zustände sehr stark durch numerische Fehler beeinflusst wurde. Auf Basis dessen kann eine genauere Untersuchung der zweiten Fronten, zum Beispiel durch Präparation eines inhomogenen Anfangszustands, noch Gegenstand zahlreicher Untersuchungen von Entmischungsfrenten in der Cahn-Hilliard-Gleichung sein. Ferner besteht noch die Möglichkeit, den Diskretisierungsfehler abzuschätzen, indem die Dispersionsrelation der in der numerischen Methode verwendeten Differenzgleichung hinsichtlich der Theorie der Frontpropagation untersucht wird.

A. Anhang

A.1. Anwendung der Cardanoischen Formeln zur Bestimmung der Gleichgewichtslösungen

In Abschnitt 3.3 muss eine kubische Gleichung der Form

$$c^3 - c - \mu = 0 \quad (\text{A.1})$$

mit $|\mu| \leq \frac{2}{3\sqrt{3}}$ gelöst werden. Für diesen Zweck sind die Cardanoischen Formeln nützlich, die beispielsweise in [19] nachgelesen werden können. Zur Lösung von Gl. (A.1) wird $c = y_1 + y_2$ substituiert. Die dann erhaltene Gleichung wird wie folgt notiert:

$$y_1^3 + y_2^3 - \mu + (3y_1y_2 - 1)(y_1 + y_2) = 0. \quad (\text{A.2})$$

Daraus wird geschlussfolgert:

$$y_1^3 + y_2^3 = \mu \quad \text{und} \quad y_1y_2 = \frac{1}{3}. \quad (\text{A.3})$$

Nach dem Satz von Vieta sind y_1^3 und y_2^3 demnach Lösungen der quadratischen Gleichung

$$(z - y_1^3)(z - y_2^3) = z^2 - \mu z + \frac{1}{27} = 0. \quad (\text{A.4})$$

Das bedeutet:

$$z_{1,2} = y_{1,2}^3 = \frac{\mu}{2} \pm \sqrt{\frac{\mu^2}{4} - \frac{1}{27}}. \quad (\text{A.5})$$

Der Ausdruck unter der Wurzel ist sicher negativ, weil laut Annahme $|\mu| \leq \frac{2}{3\sqrt{3}}$ gilt. Zunächst wird eine der beiden Lösungen $z_{1,2}$ der quadratischen Gleichung (A.4) in der komplexen Polardarstellung notiert:

$$z_1 = \frac{\mu}{2} + i\sqrt{\frac{1}{27} - \frac{\mu^2}{4}} = \frac{1}{3\sqrt{3}}e^{i\alpha} \quad \text{mit} \quad \alpha = \arccos\left(\frac{3\sqrt{3}}{2}\mu\right). \quad (\text{A.6})$$

Die andere Lösung z_2 ist offensichtlich das komplex Konjugierte von z_1 und demnach gilt $z_2 = \frac{1}{3\sqrt{3}}e^{-i\alpha}$. Beim Ziehen der dritten Wurzel zur Berechnung von $y_1 = \sqrt[3]{z_1}$ und $y_2 = \sqrt[3]{z_2}$ müssen die drei komplexen Einheitswurzeln berücksichtigt werden. Damit ergeben sich für y_1 und y_2 jeweils drei Lösungen:

$$y_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}e^{i\frac{1}{3}\alpha + i\frac{2}{3}\pi k_1} \quad \text{und} \quad y_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}e^{-i\frac{1}{3}\alpha + i\frac{2}{3}\pi k_2} \quad \text{mit} \quad k_{1,2} = 0, 1, 2. \quad (\text{A.7})$$

Von den neun Kombinationsmöglichkeiten der Lösungen für y_1 und y_2 erfüllen jedoch nicht alle die Bedingung in Gl. (A.3), rechts. Die gültigen Lösungen können dadurch herausgefiltert werden:

$$\frac{1}{3} \stackrel{!}{=} y_{1,k_1}y_{2,k_2} = \frac{1}{3}e^{i\frac{2}{3}\pi(k_1+k_2)} \quad \Rightarrow \quad k_1 + k_2 \in \{0, 3, 6, \dots\}. \quad (\text{A.8})$$

Dadurch sind nur noch die Kombinationsmöglichkeiten $(k_1, k_2) \in \{(0, 0), (2, 1), (1, 2)\}$ zugelassen. Wird $c = y_1 + y_2$ unter Berücksichtigung diesen Kombinationsmöglichkeiten berechnet, so ergeben sich die Lösungen, die in Abschnitt 3.3 in Gl. (3.14) stehen.

A.2. Bisektionsverfahren

Die Problemstellung sei folgende: Gegeben sei eine reelle Funktion $f(x)$, die auf einem Intervall $[a_0, b_0]$ nur **eine** Nullstelle hat. Es gilt $\text{sign}(f(a)) \neq \text{sign}(f(b))$, wobei $\text{sign}(\sim)$ die Signumsfunktion ist. Sei ohne Beschränkung der Allgemeinheit $f(a) \geq 0$ und $f(b) \leq 0$. Im umgekehrten Fall müssen in den folgenden Gleichung dann einfach die Ordnungsrelationen vertauscht werden. Die Approximation der Nullstelle erfolgt durch iterative Halbierung des Intervalls [27]:

$$[a_n, b_n] = \begin{cases} [m_n, b_n] & \text{falls } f(m_n) > 0 \\ [a_n, m_n] & \text{falls } f(m_n) < 0 \end{cases}, \quad (\text{A.9})$$

wobei $m_n = \frac{a_n + b_n}{2}$ ist. Nach n Iterationen beträgt der Fehler der Nullstelle $\frac{b_0 - a_0}{2^n}$.

A.3. Koeffizienten der Runge-Kutta-4-5-Fehlberg-Methode und Finite Differenzen

Zur numerischen Integration einer Differentialgleichung der Form:

$$\partial_t c = f(t, c, \partial_x c, \partial_{xx} c, \dots) \quad (\text{A.10})$$

werden Ort und Zeit diskretisiert. Die Zerlegung der x -Achse ist äquidistant, d.h. $x_j = j\Delta x$ mit $j = 0, \dots, N - 1$, während aufgrund der adaptiven Zeitschrittweitenregulierung Δt variiert und deswegen mit dem Zeitindex i versehen werden muss. Die Funktion $c(x, t)$ wird dann durch N Punkte $c(x_j, t_i) = c_j(t_i)$ approximiert. Die räumlichen Ableitungen werden durch finite Differenzen genähert. In der Cahn-Hilliard-Gleichung

$$\partial_t c = -\partial_{xxxx} c - \partial_{xx} c + \partial_{xx} (c^3) \quad (\text{A.11})$$

werden die zweite und vierte räumliche Ableitung einer Funktion benötigt, für die Randbedingungen die erste und die dritte:

$$\partial_x c(x_j, t_i) \approx \frac{c_{j+1}(t_i) - c_{j-1}(t_i)}{2\Delta x}, \quad (\text{A.12a})$$

$$\partial_{xx} c(x_j, t_i) \approx \frac{c_{j+1}(t_i) + c_{j-1}(t_i) - 2c_j(t_i)}{\Delta x^2}, \quad (\text{A.12b})$$

$$\partial_{xxx} c(x_j, t_i) \approx \frac{c_{j+2}(t_i) + c_{j-2}(t_i) - 2[c_{j+1}(t_i) - c_{j-1}(t_i)]}{2\Delta x^3}, \quad (\text{A.12c})$$

$$\partial_{xxxx} c(x_j, t_i) \approx \frac{c_{j+2}(t_i) + c_{j-2}(t_i) - 4(c_{j+1}(t_i) + c_{j-1}(t_i)) + 6c_j(t_i)}{\Delta x^4}. \quad (\text{A.12d})$$

Damit kann die Funktion f in Gl. (A.10) zum Zeitpunkt t_i und am Ort x_j wie folgt approximiert werden:

$$f(t_i, c(x_j, t_i), \partial_x c(x_j, t_i), \dots) \approx f\left(t_i, c_j(t_i), \frac{c_{j+1}(t_i) - c_{j-1}(t_i)}{2\Delta x}, \dots\right) =: \tilde{f}(t_i, j, \{c_j\}(t_i)), \quad (\text{A.13})$$

wobei die Schreibweise $\{c_j\}(t_i)$ einen Vektor aus den Datenpunkten c_j an allen Orten zur Zeit t_i bezeichnen soll und das zweite Argument j von \tilde{f} kennzeichnet, dass die aus diesem Vektor berechneten räumlichen Ableitungen von c am Ort x_j zu nehmen sind. Zur Berücksichtigung der Randbedingungen müssen an jedem Rand zwei zusätzliche Punkte in diesen Vektor mit einbezogen werden, sodass das Verschwinden der ersten und dritten Ableitung (siehe Gl. (2.11)) an den Punkten $j = 0$ und $j = N - 1$ durch

$$c_1(t_i) = c_{-1}(t_i) \quad , \quad c_2(t_i) = c_{-2}(t_i) \quad , \quad c_{N-2}(t_i) = c_N(t_i) \quad , \quad c_{N-3}(t_i) = c_{N+1}(t_i). \quad (\text{A.14})$$

Tabelle 1: Die Koeffizienten β_{ml} .

m	$l = 1$	$l = 2$	$l = 3$	$l = 4$	$l = 5$
2	1/4				
3	3/32	9/32			
4	1932/2197	-7200/2197	7296/2197		
5	439/216	-8	3680/513	-845/4104	
6	-8/27	2	-3544/2565	1859/4104	-11/40

gewährleistet werden kann.

Die Zeitentwicklung ist etwas aufwendiger und benötigt eine Vielzahl von Koeffizienten, die allesamt [23, 24] entnommen sind. Da die Funktion f und in der Cahn-Hilliard-Gleichung (A.11) und damit \tilde{f} nicht explizit von t abhängen, reduziert sich die Gesamtzahl an benötigten Koeffizienten zur Beschreibung des Verfahrens zunächst ein wenig. Die Runge-Kutta-Methode ist ein Einschrittverfahren: An jedem Gitterpunkt auf dem Ortsgitter wird die Funktion c im nächsten Zeitschritt durch ihren Wert im aktuellen Zeitschritt wie folgt berechnet:

$$c_j(t_{i+1}) = c_j(t_i) + \Delta t_i \sum_{m=1}^6 c_m^{(5)} k_{m,j}(t_i), \quad (\text{A.15})$$

wobei

$$k_{m,j}(t_i) = \tilde{f} \left(j, \{c_j\}(t_i) + \Delta t_i \sum_{l=1}^{m-1} \beta_{ml} \{k_{l,j}\}(t_i) \right) \quad (\text{A.16})$$

und $\{k_{l,j}\}(t_i)$ ein Vektor mit $j = -2, \dots, N + 1$ und festem l ist. Die Koeffizienten $c_m^{(5)}$ und β_{ml} sind in den Tabellen 1 und 2 zu finden. Die Berücksichtigung der Randbedingungen nach Gl. (A.14) erfolgt, **bevor** für ein festes m alle $k_{m,j}$ mit $j = -2, \dots, N + 1$ berechnet werden.

Für die Zeitschrittweitenregulierung wird ein

$$\varepsilon_i = \max_j |E_{ij}| \quad (\text{A.17})$$

mit

$$E_{ij} = \Delta t_i \sum_{m=1}^6 \left[c_m^{(5)} - c_m^{(4)} \right] k_{m,j}(t_i) \quad (\text{A.18})$$

berechnet, wobei die Koeffizienten $c_m^{(4)}$ ebenfalls in Tabelle 2 zu finden sind. Dies stellt eine Fehlerabschätzung dar, indem der Unterschied zweier verschieden genauer Runge-Kutta-Methoden (4 und 5) ermittelt wird. Ist die Größe ε_i kleiner als ein Toleranzwert $\varepsilon_0 = 10^{-10}$, so wird der Zeitentwicklungsschritt nach Gleichung (A.15) ausgeführt und die neue Zeitschrittweite durch

$$\Delta t_{i+1} = s \left(\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_i} \right)^{0,25} \Delta t_i \quad (\text{A.19})$$

berechnet, wobei $s = 0,85$ ein Faktor ist, der zur Vermeidung von Instabilitäten beitragen soll. Überschreitet ε_i den Toleranzwert, so wird der Zeitentwicklungsschritt noch nicht ausgeführt und die Zeitschrittweite durch

$$\Delta t_{i+1} = s \left(\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_i} \right)^{0,2} \Delta t_i \quad (\text{A.20})$$

verkleinert.

Tabelle 2: Die Koeffizienten $c_m^{(R)}$ mit $R = 4, 5$.

R	$c_1^{(R)}$	$c_2^{(R)}$	$c_3^{(R)}$	$c_4^{(R)}$	$c_5^{(R)}$	$c_6^{(R)}$
4	25/216	0	1408/2565	2197/4104	-1/5	
5	16/135	0	6656/12825	28561/56430	-9/50	2/55

A.4. Dispersionsrelation der Differenzgleichung

Aufgrund der Diskretisierung von Ort und Zeit im numerischen Verfahren ergibt sich bei der Linearisierung der vereinfachten Cahn-Hilliard-Gleichung (Gl. (1.1)) eine veränderte Dispersionsrelation $\omega(k)$ (vgl. Gl. (4.8)) [12]. Diese soll beispielhaft für die Verwendung der expliziten Euler-Methode als Zeitschrittverfahren berechnet werden. Die zeitliche Ableitung von c am Ort $x_j = j\Delta x$ zur Zeit t wird dann durch den Differenzenquotienten $\frac{c_j(t + \Delta t) - c_j(t)}{\Delta t}$ approximiert. Die um die räumlich homogene Lösung c_0 **linearisierte**, diskrete Cahn-Hilliard-Gleichung lautet analog zu Gl. (3.2): $\partial_t c = \partial_{xx}((1 - 3c_0^2)c - \partial_{xx}c)$. Mit den Formeln für die finiten Differenzen aus den Gleichungen (A.12d) und (A.12b) gilt dann:

$$\begin{aligned} \frac{c_j(t + \Delta t) - c_j(t)}{\Delta t} = & - \frac{c_{j+2}(t_i) + c_{j-2}(t_i) - 4[c_{j+1}(t_i) + c_{j-1}(t_i)] + 6c_j(t_i)}{\Delta x^4} \\ & - \alpha \frac{c_{j+1}(t_i) + c_{j-1}(t_i) - 2c_j(t_i)}{\Delta x^2}. \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

Hierbei ist $\alpha = 1 - 3c_0^2$. In diese Gleichung wird wieder ein exponentieller Ansatz eingesetzt: $c_j(t) = e^{i(kj\Delta x - \omega t)}$. Dann ergibt sich die neue Dispersionsrelation der Differenzgleichung ω_D zu:

$$\omega_D(k) = \frac{i}{\Delta t} \ln \left[1 - \Delta t \left[\left(\frac{1}{\Delta x} \left(e^{ik\frac{1}{2}\Delta x} - e^{-ik\frac{1}{2}\Delta x} \right) \right)^4 + \alpha \left(\frac{1}{\Delta x} \left(e^{ik\frac{1}{2}\Delta x} - e^{-ik\frac{1}{2}\Delta x} \right) \right)^2 \right] \right]. \quad (\text{A.22})$$

Falls eine Fehlerabschätzung der numerisch bestimmten Geschwindigkeiten und Wellenzahlen vorgenommen werden soll, so können auf diese Dispersionsrelation die Gleichungen (4.7) angewendet werden. Falls wie im Falle dieser Arbeit die Runge-Kutta-4-5-Methode zur Zeit-Entwicklung benutzt wurde, so sollte sich, da diese Methode im Allgemeinen genauer ist als das explizite Euler-Verfahren, eine Abschätzung der Fehler nach oben ergeben.

A.5. Technik: Numerische Integration

Gegeben sei die formale Definition eines zu berechnenden Integrals

$$\int_a^b I(x) dx, \quad (\text{A.23})$$

wobei die Funktion I nur in Form von N diskreten Datenpunkten an äquidistanten Stellen vorliegt:

$$I_j = I(x_j) = I(a + j\Delta x) \quad \text{mit} \quad \Delta x = \frac{b - a}{N - 1}, \quad j = 0, \dots, N - 1.$$

Die Verwendung des Simpson-Verfahrens [27] stellt einen Kompromiss aus geringem Aufwand und relativ hoher Genauigkeit zur Approximation des Integrals in Gl. (A.23) dar:

$$\int_a^b I(x)dx \approx S = \begin{cases} \frac{\Delta x}{3} \left(I_0 + I_{N-1} + 4 \sum_{j=1,3,\dots}^{N-2} I_j + 2 \sum_{j=2,4,\dots}^{N-3} I_j \right) & \text{falls } N \text{ ungerade} \\ \frac{\Delta x}{6} \left(I_0 + I_{N-1} + 5I_1 + 5I_{N-2} + 6 \sum_{j=1}^{N-3} I_j \right) & \text{falls } N \text{ gerade} \end{cases} \quad (\text{A.24})$$

Im Falle der Berechnung der L_2 -Norm aus Gl. (3.16) muss lediglich $I = c^2$, also $I_j = c_j^2$, integriert werden. Zur Berechnung der Größe \hat{F} aus Gl. (3.17) muss das Lyapunov-Funktional aus Gl. (2.5) berechnet werden. Hier lautet der Integrand:

$$I = \frac{c^4}{4} - \frac{c^2}{2} + \frac{1}{2} (\partial_x c)^2 .$$

Mit den konkreten Datenpunkten wird geschrieben:

$$I_j = \frac{c_j^4}{4} - \frac{c_j^2}{2} + \frac{1}{2} \begin{cases} \frac{c_1 - c_0}{\Delta x} & , j = 0 \\ \frac{c_{N-1} - c_{N-2}}{\Delta x} & , j = N - 1 \\ \frac{c_{j+1} - c_{j-1}}{2\Delta x} & , \text{sonst} \end{cases} .$$

B. Verzeichnisse

B.1. Literaturverzeichnis

- [1] A. Scheel. „Spinodal Decomposition and Coarsening Fronts in the Cahn-Hilliard Equation“. In: *J. Dyn. Differ. Equ.* (2015). (first online). DOI: 10.1007/s10884-015-9491-5.
- [2] R. Wittkowski u. a. „Scalar ϕ^4 field theory for active-particle phase separation“. In: *Nature Communications* (Juli 2014).
- [3] M. Bestehorn. *Hydrodynamik und Strukturbildung: Mit einer kurzen Einführung in die Kontinuumsmechanik (Springer-Lehrbuch) (German Edition)*. Springer, 2006.
- [4] L. M. Pismen. „Fronts and Interfaces: Cahn-Hilliard Equation“. In: *Patterns and Interfaces in Dissipative Dynamics*. Springer, 2006. Kap. 2.4, S. 110–122.
- [5] M. Wilczek. *Pattern formation in Cahn-Hilliard models for Langmuir-Blodgett transfer*. Masterarb. 2012.
- [6] M. H. Koepf. „On the dynamics of surfactant covered thin liquid films and the formation of stripe patterns in Langmuir-Blodgett transfer“. Diss. Westfälische Wilhelms-Universität Münster, 2011.
- [7] A. Novick-Cohen. „The nonlinear Cahn - Hilliard equation: Transition from spinodal decomposition to nucleation behavior“. In: *J. Stat. Phys.* 38.3-4 (1985), S. 707–723. DOI: 10.1007/bf01010486.
- [8] A. J. Bray. „Theory of phase-ordering kinetics“. In: *Adv. Phys.* 43 (1994), S. 357–459. DOI: 10.1080/00018739400101505.
- [9] E. Doedel, H. B. Keller und J. B. Kernevez. „Numerical analysis and control of bifurcation problems (I) Bifurcation in finite Dimensions“. In: *Int. J. Bifurc. Chaos* (1991). 1:493-520.
- [10] E. Doedel, H. B. Keller und J. B. Kernevez. „Numerical analysis and control of bifurcation problems (II) Bifurcation in finite Dimensions“. In: *Int. J. Bifurc. Chaos* (1991). 1:745-72.
- [11] L. M. Pismen. „Fronts and Interfaces: Propagation into an unstable state: Asymptotic Theory of the Leading Edge“. In: *Patterns and Interfaces in Dissipative Dynamics*. Springer, 2006. Kap. 2.3.2, S. 10–106.

- [12] W. van Saarloos. „Front propagation into unstable states“. In: *Physical Reports* 386.2 (2003), S. 29–222. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.physrep.2003.08.001>.
- [13] W. van Saarloos. „Front propagation into unstable states: Marginal stability as a dynamical mechanism for velocity selection“. In: *Phys. Rev. A* 37 (1988), S. 211–229. DOI: [10.1103/PhysRevA.37.211](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.37.211).
- [14] J. W. Cahn. „Phase Separation by Spinodal Decomposition in Isotropic Systems“. In: *The journal of chemical physics* 42.1 (Jan. 1965), S. 93–99. DOI: <http://dx.doi.org/10.1063/1.1695731>.
- [15] F. Schwabl. *Statistische Mechanik*. 3. Aufl. Springer, 2006.
- [16] W. Nolting. *Grundkurs Theoretische Physik 6 - Statistische Mechanik*. 7. Aufl. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 2014.
- [17] J. W. Cahn. „Free Energy of a Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy“. In: *The journal of chemical physics* 28.2 (Feb. 1958), S. 258–267. DOI: <http://dx.doi.org/10.1063/1.1744102>.
- [18] W. Nolting. *Grundkurs Theoretische Physik 3 - Elektrodynamik*. 9. Auflage. Wiesbaden: Springer-Verlag, 2011.
- [19] K. Schroeder. *Mathematik für die Praxis II, Ein Handbuch*. Frankfurt a. M., Zürich: Harri Deutsch, 1964.
- [20] U. Thiele. *WWU Münster, Center of Nonlinear Sciences, Tutorials, Continuation with auto*. Apr. 2014. URL: <https://www.uni-muenster.de/CeNoS/Lehre/Tutorials/auto.html>.
- [21] G. Arfkan. *Mathematical Methods for Physicists*. 3. Aufl. New York, London: Academic Press, 1985.
- [22] J. Mathews und R. L. Walker. *Mathematical Methods of Physics*. New York, Amsterdam: Benjamin, 1964.
- [23] H. R. Schwarz und N. Köckler. *Numerische Mathematik*. 8. Aufl. Teubner, 2011.
- [24] J. Stoer und R. Bulirsch. *Numerische Mathematik 2*. 5. Aufl. Springer, 2005.
- [25] U. Ebert und W. van Saarloos. „Front propagation into unstable states: universal algebraic convergence towards uniformly translating pulled fronts“. In: *Physica D: Nonlinear Phenomena* 146.1 (2000), S. 1–99. DOI: [http://dx.doi.org/10.1016/S0167-2789\(00\)00068-3](http://dx.doi.org/10.1016/S0167-2789(00)00068-3).
- [26] T. Williams und C. Kelley. *Gnuplot 5.0: an interactive plotting program*. <http://gnuplot.sourceforge.net/>. <http://gnuplot.info/>. Juni 2015.
- [27] J. Stoer. *Numerische Mathematik 1*. 5. Aufl. Springer, 2005.

Plagiatserklärung des Studierenden

Hiermit versichere ich, Alexander Kirchhoff, dass die vorliegende Arbeit mit dem Titel *Modellierung der Dynamik von eindimensionalen Entmischungsfronten* 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.

Münster, den 4. September 2017.

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.

Münster, den 4. September 2017.