



TopMath  
Mathematik mit Promotion

# Homogenisierung eines Reaktions-Diffusions-Problems mit veränderlicher Mikrostruktur

David Wiedemann, Betreuer: Prof. Dr. Malte Peter

Institut für Mathematik, Universität Augsburg

Lehr- und Forschungseinheit Angewandte Analysis



EliteNetzwerk  
Bayern

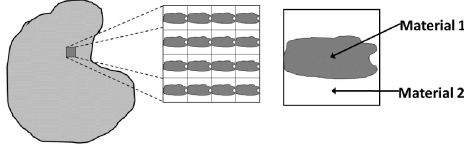


## Zusammenfassung

Die mathematische Homogenisierung befasst sich mit Differentialoperatoren, welche auf mehreren Skalen definiert sind. Diese werden unter anderem für die Beschreibung von Kompositmaterialien oder biologischen Stoffen verwendet. Da häufig das makroskopische Verhalten eines solchen Stoffes von Interesse ist, betrachtet man bei der Homogenisierung den Grenzprozess für feiner werdende Mikroskala. Der daraus resultierende Grenzwert kann dann zur Beschreibung des makroskopischen Verhaltens des Ausgangsstoffes verwendet werden. Hier wird im Speziellen ein Differentialoperator betrachtet, der ein Reaktions-Diffusions-Problem auf einem perforierten Medium beschreibt, welches eine über die Zeit veränderliche Mikroskala besitzt.

## Homogenisierung

Sei  $\Omega$  ein Medium, welches auf einer sehr viel feineren Skala periodisch aus mehreren Materialien zusammengesetzt ist.



Um eine physikalische Fragestellung wie zum Beispiel die Wärmeleitfähigkeit dieses Mediums zu betrachten, wird eine entsprechende Differentialgleichung verwendet. Die Differentialgleichung besitzt materialabhängige Koeffizienten, welche auf einer feinen Skala stark variieren und somit insbesondere nicht konstant sind. Deshalb lassen sich auch nicht direkt die makroskopischen physikalischen Eigenschaften des Mediums, wie zum Beispiel die Wärmeleitfähigkeit, angeben. Des Weiteren kann man aufgrund der feinen Struktur nur unter großem numerischen Aufwand mit Hilfe von Standardverfahren Berechnungen für ein solches Medium durchführen. Aus physikalischer Sicht ist es naheliegend, dass bei einer feinen periodischen Verteilung der Materialien sich die makroskopischen Eigenschaften nur minimal verändern, wenn das Material feiner gemischt wird. Mit  $\varepsilon$  wird das Verhältnis der Makroskala zur Mikroskala angegeben, also wie fein die Materialien gemischt sind. Indem man zum Grenzwert  $\varepsilon \rightarrow 0$  übergeht, lässt sich dieser Ansatz modellieren. Dies bedeutet: Man betrachtet für einen Banachraum  $X$  und dessen Dualraum  $X'$  eine Folge von Differentialoperatoren  $T_\varepsilon : X \rightarrow X'$ , welche je eine eindeutige Lösung  $u_\varepsilon$  besitzen. Für die Folge der Lösungen  $u_\varepsilon$  lässt sich die Existenz eines Grenzwerts  $u_0$  zeigen. Dann bestimmt man einen Differentialoperator  $T_0$ , welcher  $u_0$  als Lösung besitzt.

$$\begin{array}{ccc} T_\varepsilon & \text{----} & T_0 \\ \downarrow & & \downarrow \\ u_\varepsilon & \text{----} & u_0 \end{array}$$

Der wesentliche Vorteil besteht nun darin, dass der Differentialoperator  $T_0$  nicht von der Mikrostruktur abhängt. Somit lässt sich  $u_0$  numerisch leichter bestimmen und der Differentialoperator  $T_0$  gibt direkt makroskopische physikalische Eigenschaften des Mediums an. Mit  $u_0$  erhält man somit eine approximative Lösung des Ausgangsproblems für kleines  $\varepsilon$ , also für eine feine Mikrostruktur.

## Zwei-Skalen-Konvergenz

Um den Differentialoperator  $T_0$  zu bestimmen, wird hier die Zwei-Skalen-Konvergenz verwendet. Aus der Zwei-Skalen-Konvergenz der Folge  $(u_\varepsilon)$  lassen sich Rückschlüsse auf die Struktur der Lösung  $u_0$  ziehen, welche es dann ermöglichen den Differentialoperator  $T_0$  zu bestimmen.

**Definition.** Eine Folge  $(u_\varepsilon)$  in  $L^p(\Omega)$  mit  $p \in (1, \infty)$  konvergiert gegen eine Funktion  $u_0(x, y) \in L^p(\Omega \times Y)$  (mit  $Y = (0, 1)^n$ ) schwach im Zwei-Skalen-Sinn genau dann, wenn

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\Omega} u_\varepsilon(x) \psi\left(x, \frac{x}{\varepsilon}\right) dx = \int_{\Omega} \int_Y u_0(x, y) \psi(x, y) dy dx$$

für jede Funktion  $\psi(x, y) \in L^q[\Omega; C_\#(Y)]$  (mit  $1 = \frac{1}{p} + \frac{1}{q}$ ).

Gilt zusätzlich

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \|u_\varepsilon\|_{L^p(\Omega)} = \|u_0\|_{L^p(\Omega \times Y)},$$

so bezeichnet man die Konvergenz als starke Zwei-Skalen-Konvergenz.

Um zum Grenzwert  $\varepsilon \rightarrow 0$  übergehen zu können, verwendet man folgenden Satz, wobei  $v_\varepsilon$  durch die Koeffizienten von  $T_\varepsilon$  bestimmt ist und mit  $u_\varepsilon$  die Lösung des Problems  $T_\varepsilon u_\varepsilon = f$  für ein  $f \in X'$  bezeichnet wird.

Für eine stark im Zwei-Skalen-Sinn konvergente Folge  $(v_\varepsilon)$  mit Grenzwert  $v_0$  und eine schwach im Zwei-Skalen-Sinn konvergente Folge  $(u_\varepsilon)$  lässt sich der Grenzprozess mit der Integration vertauschen, d.h.:

$$v_\varepsilon(x) u_\varepsilon(x) \rightharpoonup \int_Y v_0(x, y) u_0(x, y) dy \text{ in } D'(\Omega).$$

Durch geeignete Wahl der Testfunktionen kann man die Mikrostruktur getrennt von der Makrostruktur betrachten und mit Hilfe des folgenden Konvergenzresultats das homogenisierte System  $T_0$  bestimmen.

Eine in  $H^1(\Omega)$  schwach konvergente Folge  $(u_\varepsilon)$  mit Grenzwert  $u \in H_0^1(\Omega)$  konvergiert auch im Zwei-Skalen-Sinn gegen  $u$ . Des Weiteren existiert ein  $u_1 \in L^2[\Omega; H_\#^1(Y)/\mathbb{R}]$ , sodass eine Teilfolge  $\nabla u$  schwach im Zwei-Skalen-Sinn gegen  $\nabla_x u + \nabla_y u_1$  konvergiert.

## Reaktions-Diffusions-Problem mit veränderlicher Mikrostruktur

Das Gebiet  $\Omega$  bestehe nun aus zwei disjunkten Gebieten  $\Omega^w$  und  $\Omega^s$ . Dabei entspricht  $\Omega^w$  einer Trägersubstanz, in der die Reaktion bzw. Diffusion stattfindet und  $\Omega^s$  der „Matrix“, welche das Gebiet  $\Omega$  zusammenhält.

Das folgende Randwertproblem beschreibt ein Reaktions-Diffusions-Problem auf dem Zeitintervall  $S = (0, T)$  über dem sich mit der Zeit veränderliche Gebiet  $\Omega^\varepsilon(t)$ . Hierbei stellt  $u$  die Konzentration des diffundierenden Stoffes dar,  $D$  den Diffusionskoeffizienten und  $f$  den Reaktionsterm. Dieses Modell berücksichtigt ebenfalls advektiven Stofftransport, welcher aus der Geschwindigkeit  $w^\varepsilon$  der Verformung des Gebiets  $\Omega^\varepsilon$  resultiert.

$$\begin{aligned} \partial_t u^\varepsilon(x, t) - \nabla \cdot (D^\varepsilon \nabla u^\varepsilon - w^\varepsilon u^\varepsilon) &= f & x \in \Omega^\varepsilon(t), t \in S, \\ -(D^\varepsilon \nabla u^\varepsilon) \cdot n^\varepsilon &= 0 & x \in \partial\Omega^\varepsilon(t), t \in S \end{aligned}$$

Für den Anfangszeitpunkt  $t = 0$  sei das Gebiet  $\Omega$  periodisch in  $\Omega^w$  und  $\Omega^s$  aufgeteilt. Um die Differentialgleichung zu homogenisieren, müssen wir sie deshalb zuerst auf das periodische Gebiet  $\Omega(0)$  bzw.  $\Omega^\varepsilon(0)$  zurückführen. Sei ein orientierungserhaltender Diffeomorphismus  $\psi(\cdot, t) : \Omega(0) \rightarrow \Omega^\varepsilon(t)$  gegeben, sodass  $\psi(X, \cdot) : S \rightarrow \Omega$  die Trajektorie eines Materialpartikels  $X$  beschreibt. Sei  $\hat{u}(X, t) := u(\psi(X, t), t)$ ,  $\hat{D}(X, t) := D(\psi(X, t), t)$ ,  $\hat{f}(X, t) := f(\psi(X, t), t)$ ,  $\Phi(X, t) := \nabla \psi(X, t)$  und  $J(X, t) = \det \Phi(X, t)$  so erhält man die folgende Differentialgleichung mit entsprechender homogener Randbedingung:

$$\begin{aligned} \partial_t [\hat{u}(X, t) J(X, t)] - \nabla_X \cdot [\Psi^{-1}(X, t) \hat{D}(X, t) \Psi^{-T}(X, t) \nabla_X \hat{u}(X, t) J(X, t)] \\ = \hat{f}(X, t) J(X, t), & X \in \Omega^\varepsilon, t \in S, \\ \Psi^{-1}(X, t) \hat{D}(X, t) \Psi^{-T}(X, t) \nabla_X \hat{u}(X, t) \cdot N(X, t) J(X, t) = 0, & X \in \partial\Omega^\varepsilon, t \in S. \end{aligned}$$

Nach einer  $\varepsilon$ -Skalierung und dem Übergang zur schwachen Formulierung ergibt sich folgendes Problem: Finde eine Funktion  $u_\varepsilon^\varepsilon \in \mathcal{V}(\Omega_\varepsilon^w) := L^2(0, T; W^{1,2}(\Omega_\varepsilon^w))$ , sodass

$$\begin{aligned} (\partial_t (J_\varepsilon^\varepsilon(t) u_\varepsilon^\varepsilon(t)) | \phi^\varepsilon(t))_{\Omega_\varepsilon^w} + (J_\varepsilon^\varepsilon(t) \Psi_\varepsilon^{\varepsilon-1}(t) D_\varepsilon^\varepsilon(t) \Psi_\varepsilon^{\varepsilon-T}(t) \nabla u_\varepsilon^\varepsilon(t) | \nabla \phi^\varepsilon(t))_{\Omega_\varepsilon^w} \\ = (J_\varepsilon^\varepsilon(t) f_\varepsilon^\varepsilon(t) | \phi^\varepsilon(t))_{\Omega_\varepsilon^w} \end{aligned}$$

für alle  $\phi^\varepsilon \in \mathcal{V}(\Omega_\varepsilon^w)$  und fast alle  $t \in S$  gilt.

## Makroskopisches Grenzproblem

Indem man mit Hilfe der Zwei-Skalen-Konvergenz zum Grenzwert  $\varepsilon \rightarrow 0$  in obiger schwacher Formulierung übergeht, lässt sich folgendes Grenzproblem für obiges Reaktions-Diffusions-Problem mit veränderlicher Mikrostruktur bestimmen:

$$\partial_t (Q^w u^w(x, t)) - \nabla \cdot (P^w \nabla u^w) = F^w$$

Wobei  $Q^w, F^w$  und der Tensor  $P^w$  wie folgt definiert sind:

$$Q^w(x, t) := \int_{Z^w} J^w(x, y, t) dy, \quad F^w(x, t) := \int_{Z^w} J^w(x, y, t) \hat{f}(x, y, t) dy,$$

$$P_{ij}^w(x, t) := \int_{Z^w} J^w(x, y, t) \Psi^{w-1}(x, y, t) \hat{D}^w(x, y, t) \Psi^{w-T}(x, y, t) (\delta_{ij} + \partial_{y_i} \zeta_j^w(x, y, t)) dy.$$

Hierbei sind  $\zeta_1^w, \dots, \zeta_n^w$  die Lösungen der folgenden Zellprobleme:

$$-\nabla_y \cdot (J^w(x, y, t) \Psi^{w-1}(x, y, t) \hat{D}^w(x, y, t) \Psi^{w-T}(x, y, t)) (\nabla_y \zeta_j^w(x, y, t) + e_j) = 0$$

$$y \in Z^w, x \in \Omega, t \in S$$

$$-J^w(x, y, t) \Psi^{w-1}(x, y, t) \hat{D}^w(x, y, t) \Psi^{w-T}(x, y, t) (\nabla_y \zeta_j^w(x, y, t) + e_j) \cdot n^w(x, y) = 0,$$

$$y \in \partial Z^w \cap \partial Z^s, x \in \Omega, t \in S.$$

Hier sind  $\hat{D}_\varepsilon^w, \hat{f}_\varepsilon^w, J_\varepsilon^w$  bzw.  $\Phi_\varepsilon^{w-1}$  die Grenzwerte von  $\hat{D}^w, \hat{f}^w, J^w$  bzw.  $\Phi^{w-1}$  im starken Zwei-Skalen-Sinn. Man erhält dies zum Beispiel, indem man die  $\varepsilon$ -skalierten Funktionen über  $\hat{D}_\varepsilon^w(x, t) := \hat{D}^w(x, \frac{x}{\varepsilon}, t)$ ,  $\hat{f}_\varepsilon^w(x, t) := \hat{f}^w(x, \frac{x}{\varepsilon}, t)$ ,  $J_\varepsilon^w(x, t) := J^w(x, \frac{x}{\varepsilon}, t)$  bzw.  $\Phi_\varepsilon^{w-1}(x, t) := \Phi^{w-1}(x, \frac{x}{\varepsilon}, t)$  mit geeigneten  $\hat{D}^w, \hat{f}^w, J^w$  bzw.  $\Phi^{w-1}$  definiert. Dabei stellt  $Z^w, Z^s$  den Teil der Einheitszelle dar, mit dem  $\Omega^w$  bzw.  $\Omega^s$  durch  $\varepsilon$ -Skalierung und periodischer Fortsetzung gebildet wird.

## Referenzen

- [1] G. Allaire: Homogenization and two-scale convergence. In: SIAM J. Math Anal 23. (1992)
- [2] M. Peter: Coupled reaction-diffusion processes inducing an evolution of the microstructure: Analysis and homogenization. In: Nonlinear Analysis: Theory, Method & Applications 70. (2009).
- [3] M. Peter: Coupled reaction-diffusion systems and evolving microstructure: mathematical modelling and homogenisation. Berlin: Logos Verlag 2007.
- [4] D. Wiedemann: Homogenisierung eines Reaktions-Diffusions-Problems mit veränderlicher Mikrostruktur. Bachelorarbeit, Universität Augsburg, Oktober 2017.