

Lehrstuhl für Angewandte Mathematik

**Mathematische Modellierung und Analyse
von Formgedächtnislegierungen
in mehreren Raumdimensionen**

Johannes Zimmer

Vollständiger Abdruck der von der Fakultät für Mathematik der Technischen Universität München zur Erlangung des akademischen Grades eines
Doktors der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)
genehmigten Dissertation.

Vorsitzender: Univ.-Prof. Dr. Martin Brokate
Prüfer der Dissertation: 1. Univ.-Prof. Dr. Jürgen Scheurle
2. Univ.-Prof. Dr. Dr. h. c. Karl-Heinz Hoffmann
3. Prof. Dr. Gero Friesecke, Univ. Oxford / GB
(schriftliche Beurteilung)

Die Dissertation wurde am 19. 4. 2000 bei der Technischen Universität München eingereicht und durch die Fakultät für Mathematik am 11. 10. 2000 angenommen.

Inhaltsverzeichnis

Zusammenfassung — 3

Summary — 5

Dank — 7

Notationen und Konventionen — 9

Ganz Elementares — 9

Notationen für Funktionen & Bezeichnung der wichtigsten Variablen — 9

Tensoralgebra und Tensoranalysis — 10

Schreibweisen aus der Gruppentheorie — 10

Funktionsräume und Konvergenzbegriffe — 11

§1 Was ist ein Formgedächtniseffekt? — 13

Phänomenologische Beschreibung — 13

Landautheorie — 18

§2 Modelle für Formgedächtnislegierungen — 21

§3 Herleitung des Modells — 25

Vorbemerkung — 25

Kinematik — 25

Thermomechanische Gleichungen und Energieerhaltung — 27

Entropieproduktion — 29

Konstitutive Gesetze — 30

Helmholtzsche freie Energie — 31

Aufstellen der Gleichungen — 32

Formulierung des Problems — 33

§4 Existenz einer Lösung — 35

Das Anfangsrandwertproblem — 35

Voraussetzungen für den Existenzsatz — 36

Definition des Lösungsbegriffs — 38

Bekannte Ergebnisse über renormierte Lösungen von (P) — 41

Untersuchung der Bewegungsgleichung — 42

Behandlung des gekoppelten Problems — 57

§5 Konstruktion mehrdimensionaler Potentiale — 65

Das Pflichtenheft — 65

Das Konstruktionsverfahren — 68

Beispiel: Kubisch-tetragonaler Phasenübergang — 84

Konstruktion eines Potentials für §4 — 87

Konstruktion glatter invarianter Funktionen — 88

Vergleich mit anderen Methoden — 89

Anhang: Verwendete mathematische Sätze — 91**Bibliographie — 93**

Zusammenfassung

Der Fokus dieser Arbeit liegt auf dem Studium von Formgedächtnismaterialien in mehreren Raumdimensionen, einem verhältnismäßig wenig erschlossenen Gebiet. Unser Ziel ist es, ein dreidimensionales Modell für die Dynamik von Materialien mit Formgedächtnis zu entwickeln und mathematisch zu untersuchen. Das spezielle Verhalten dieser Materialien beruht auf Phasenübergängen und ist mathematisch dadurch charakterisiert, daß die entsprechende freie Energie als Funktion der Verzerrung für niedrige Temperaturen nicht konvex ist.

In der mathematischen Analyse wird ein gekoppeltes System nichtlinearer Evolutionsgleichungen aus der Thermoviskoelastizität mit nichtkonvexer freier Energie in drei Raumdimensionen studiert. Dabei ist jede Gleichung in bezug auf die Verschiebung voll nichtlinear. Anders als bei bisherigen Arbeiten wird keine Regularisierung höherer Ordnung eingeführt. Die Wärmeleitungsgleichung wird nicht linearisiert; dies führt auf eine parabolische Gleichung mit einer rechten Seite aus $L^1(0, T; L^1(\Omega))$. Um diese Gleichung zu behandeln, werden renormierte Lösungen betrachtet. Gezeigt wird die Existenz einer Lösung global in der Zeit. Unseres Wissens ist dies der erste Existenzsatz für dreidimensionale Formgedächtnislegierungen mit rein viskoser Regularisierung. Auch für einen zusätzlichen regularisierenden Term höherer Ordnung (Kapillarität), der eine Transformation der Bewegungsgleichung erlaubt, ist erst in jüngster Zeit ein globales Existenzresultat für ein voll dreidimensionales Modell gelungen [PZ99].

Ein zweiter Teil der Arbeit beschäftigt sich einem Aspekt der Modellbildung: Wie sehen mehrdimensionale nichtkonvexe Energien für Phasenübergänge („Landaupotentiale“) aus? Typischerweise muß die freie Energie unter der Operation einer Symmetriegruppe invariant sein. Das macht die Schwierigkeit und den Reiz aus: Für martensitische Phasenumwandlungen führt die Invarianz auf eine Symmetriebeziehung in \mathbb{R}^6 , die für alle Temperaturen erfüllt sein muß; zusätzlich sind bei niedriger Temperatur die Martensitvarianten stabil, bei hoher Temperatur hingegen die Austenitphase. Bisher sind nur wenige Beispiele für solche Energiefunktionen bekannt. Mit Hilfe gruppen- und darstellungstheoretischer Überlegungen wird hier eine Methode vorgestellt, allgemeine nichtkonvexe freie Energien („Lan-

daupotentiale“) mit vorgegebenen Symmetriebedingungen zu konstruieren. Anders als die bisherigen Arbeiten über Potentiale für martensitische Phasenübergänge fassen wir die Menge der invarianten Polynome als Algebra und nicht als Vektorraum auf. Das ermöglicht es, Wachstumsbedingungen an die freie Energie zu erfüllen, ohne die Invarianz zu verlieren. Bei einer Einschränkung auf einen endlichdimensionalen Untervektorraum ist das im allgemeinen nicht möglich. Die vorgestellte Methode erlaubt zugleich die Konstruktion einer großen Klasse von Potentialen. Es wird exemplarisch vorgeführt, wie man mit diesem Verfahren eine konkrete freie Energie für den kubisch-tetragonalen Phasenübergang gewinnt. Insbesondere wird geschildert, wie eine freie Energie konstruiert werden kann, die neben den Symmetriebedingungen auch die Glattheits- und Wachstumsbedingungen des Existenzsatzes erfüllt.

Summary

The focus of this work is on the study of shape memory alloys in several space dimensions, which is a comparatively new area of research. Our aim is to develop a three-dimensional model for the dynamics of materials with memory and to provide rigorous mathematical analysis of this model. The special behaviour of these materials is based on phase transitions and can be characterized mathematically by a nonconvexity of the corresponding free energy as a function of the deformation gradient at low temperatures.

In the analytical part, we study a coupled system of nonlinear evolution equations in three space dimensions. This system represents equations of thermoviscoelasticity with a nonconvex free energy. Each equation is fully nonlinear as a function of the deformation. Unlike in other work, we do not introduce a regularizing higher-order term. The heat equation is not linearized; this leads to a parabolic equation with a right hand side in $L^1(0, T; L^1(\Omega))$. To deal with this, we use the theory of renormalized solutions. We prove the existence of a solution that is global in time. To our knowledge, this is the only proof of existence for three-dimensional models of shape memory alloys with a purely viscous regularization. Even with an additional regularizing higher-order term (capillarity) which allows a transformation of the equations of motion, the global existence for a fully three-dimensional model has been proved only very recently [PZ99].

The second part of this thesis deals with an aspect of mathematical modeling: What do multidimensional nonconvex energies for phase transitions ('Landau potentials') look like? Typically, the free energy has to be invariant under the operation of a symmetry group. This makes for an appealing challenge: For martensitic phase transitions, the invariance leads to a symmetry requirement in \mathbb{R}^6 , which has to be satisfied for all temperatures. Additionally, the martensitic variants are stable at low temperatures while the austenitic phase is stable at high temperatures. So far, only very few examples of these energies have been known. Using methods of group theory and representation theory, we present a method that allows the construction of general nonconvex free energies ('Landau potentials') with given symmetry requirements. Unlike previous work on potentials for martensitic pha-

se transitions, we consider the space of invariant polynomials as an algebra rather than a vector space. This makes it possible to satisfy growth assumptions on the free energy without losing invariance. In general, this is not possible if one works in a finite-dimensional subspace. At the same time, the method presented in this thesis allows the construction of a large class of potentials. As an example, the construction of a free energy for the cubic-tetragonal phase transition is given. In particular, we describe how to satisfy, besides symmetry requirements, the assumptions on smoothness and growth which were used in the proof of existence.

Dank

Ganz herzlich bedanken möchte ich mich bei den Betreuern der Arbeit, Prof. Jürgen Scheurle und Prof. Karl-Heinz Hoffmann. Es ist ungewöhnlich, eine Doktorarbeit als gemeinsam betreute Arbeit zu planen. Für mich war es aber gut so: Auf unterschiedliche Weise habe ich von beiden viel gelernt und verdanke ihnen viel. Herzlichen Dank für die Möglichkeit, an einem interessanten Thema in einem aktiven Gebiet zu arbeiten, die notwendige Betreuung zu genießen, den gewünschten Freiraum zu haben und sehr großzügig gefördert zu werden!

Viel von dem, was ich über Orbiträume weiß, habe ich von Matthias Rumberger gelernt. Herzlichen Dank für die vielen Diskussionen und Anregungen!

Prof. Gero Friesecke und Prof. Stefan Müller danke ich für die Einladungen und Diskussionen in Oxford, Leipzig und Oberwolfach; sicher trägt ihre Nachwuchsförderung ganz wesentlich dazu bei, daß die Arbeit in diesem Gebiet so viel Spaß macht und eindringlich weiterempfohlen werden kann.

Prof. Piotr Rybka hat mir den Einstieg in mein neues Gebiet in vielen Gesprächen sehr erleichtert und die Themenwahl beeinflußt. Für sein stetes Interesse an der Arbeit bin ich ihm sehr dankbar! Auch die Diskussionen mit Prof. Toyohiko Aiki in München und Bonn waren anregend und wertvoll.

Olivier Guibé hat mir eine Vorabversion von [BG00] zur Verfügung gestellt und mich bei der Literatur über renormierte Lösungen beraten. Alexander Wonhas hat Anregungen gegeben, die Darstellung der Landautheorie in §1.2 zu verbessern. Susanne Ertel, Hans-Peter Grimm, Thomas Hagen, Mathias Kratzer, Marc Oliver Rieger und Matthias Rumberger haben das Manuskript ganz oder teilweise korrektur gelesen und eine Reihe von Verbesserungsvorschlägen gemacht. Von den Diskussionen mit Jochen Denzler, Thomas Hagen und Marc Oliver Rieger habe ich sehr profitiert. Hans-Georg Zimmer hat die Zeichnungen direkt in Postscript programmiert und besser gestaltet, als ich es vermocht hätte. Christian Ludwig hat Makros zu $\text{J}\text{\o T}\text{\e X}$ beigesteuert.

Allen sei herzlich gedankt!

Notationen und Konventionen

Die Aufgabe dieses vorbereitenden Kapitels ist es, die grundlegenden Schreibweisen und Vereinbarungen gebündelt darzustellen. Mit dem Anhang, der die wichtigsten verwendeten mathematischen Sätze zitiert, bildet es eine Klammer für die eigentliche Arbeit.

Ganz Elementares

Mit \mathbb{N} werden die natürlichen Zahlen bezeichnet, dabei wird — der Definition John von Neumanns folgend — 0 als natürliche Zahl angesehen. Ist A eine Menge, steht χ_A für die zugehörige charakteristische Funktion. Die abgeschlossene Kugel mit Mittelpunkt x und Radius r wird mit $B(x, r)$ bezeichnet.

Notationen für Funktionen & Bezeichnung der wichtigsten Variablen

Schreibweisen aus der Analysis

Etwas unkonventionell, dafür hoffentlich unmißverständlich ist unsere Notation für zeit- und ortsabhängige Funktionen: Beispielsweise steht $C_0^\infty(\Omega \times]0, T[\rightarrow \mathbb{R}^n)$ für glatte Funktionen mit kompakten Träger von $\Omega \times]0, T[$ mit Werten im \mathbb{R}^n , analog ist $L^2(]0, T[\rightarrow L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}))$ die Menge der in Zeit und Ort quadratintegrierbaren Funktionen. „Integrierbar“ heißt in dieser Arbeit immer Lebesgue-integrierbar; $\text{meas}(A)$ steht für das Lebesgue-Maß der Menge A . Randwerte von Sobolevfunktionen werden durch Indizes notiert — etwa $W_g^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n) := \{u \in W^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n) \mid u - g \in W_0^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)\}$. Bisweilen identifizieren wir für $k \in \mathbb{N}$ und $1 \leq p < \infty$ den Raum $L^p(]0, T[\rightarrow L^p(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^k))$ mit $L^p(]0, T[\times \Omega \rightarrow \mathbb{R}^k)$. Die definierende Gleichung für gemittelte Integrale lautet

$$\int_A f(x) dx := \frac{1}{\text{meas}(A)} \int_A f(x) dx.$$

Alle auftretenden Vektor-, Hilbert- und Banachräume sind *reell*. Ist H ein Hilbertraum, bezeichnet (\cdot, \cdot) das Skalarprodukt. Diese Regel wird nur für das euklidische Skalarprodukt im \mathbb{R}^n gebrochen: Um Klammern zu vermeiden, schreiben wir dafür einen Punkt, etwa $a \cdot b$ für $a, b \in \mathbb{R}^n$.

Häufig auftretende Variablen

Die Größen Ω, u, θ treten in so gut wie jedem Kapitel auf, daher hier eine kurze Erläuterung: Im ganzen Text steht $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ ($n = 2, 3$) für die Referenzkonfiguration des Kristalls (Austenit im unbelasteten Zustand bei der Transformationstemperatur). Weiter sind u die Verschiebung des Kristalls, θ bezeichnet die Temperatur. Die präzise Formulierung mit Definitions- und Wertebereich findet sich zu Beginn von §4.

Tensoralgebra und Tensoranalysis

$M^{m \times n}$ ist der Raum der reellen $m \times n$ -Matrizen. Ist $A = (a_{jk})_{j,k=1,\dots,n} \in M^{n \times n}$, bezeichnet $\text{tr}(A) := \sum_{j=1}^n a_{jj}$ die Spur; A^* ist die Transponierte von A . Für $A, B \in M^{n \times n}$ ist $A : B := \sum_{j,k=1}^n a_{jk} b_{jk} = \text{tr}(A^T B)$ das übliche Skalarprodukt im $\mathbb{R}^{n \times n}$, die zugehörige Norm ist $|A| := \sqrt{A : A} = \left(\sum_{j,k=1}^n a_{jk}^2 \right)^{1/2}$. Die *Divergenz* einer Matrix $A \in M^{n \times n}$ ist definiert als der (Spalten)vektor, der die Divergenz der Zeilenvektoren von A bündelt; zur Unterscheidung von der „gewöhnlichen“ Divergenz schreiben wir für Matrizen Div statt div , also $\text{Div}(A) := \left(\sum_{k=1}^n \partial_k(a_{jk}) \right)_{j=1,\dots,n}$. Wir werden Abbildungen $\Phi: M^{n \times n} \rightarrow \mathbb{R}$ studieren und deren Ableitung $\phi := \frac{\partial \Phi(F)}{\partial F}$ betrachten. Damit ist folgendes gemeint: Ist $u: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ eine Abbildung mit den einzelnen Komponenten u_1, \dots, u_n , bezeichnet $\nabla u := \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_j} \right)_{j,k=1,\dots,n}$ den Ortsgradienten. Als Argument für Φ wird auch $F := (f_{jk})_{j,k=1,\dots,n}$ geschrieben; damit ist dann $\phi(\nabla u) := \frac{\partial \Phi}{\partial F}(\nabla u) := \left(\frac{\partial \Phi}{\partial f_{jk}}(\nabla u) \right)_{j,k=1,\dots,n}$. Auch später, wenn u zusätzlich von der Zeit abhängen wird, bezeichnet $\nabla := \nabla_x$ immer den Ortsgradienten.

Für eine quadratische Matrix $A = (a_{jk})_{j,k=1,\dots,n}$ ist jede $k \times k$ -Matrix, die aus A durch Streichen von $n - k$ Zeilen und Spalten hervorgeht, eine k -Untermatrix von A , die zugehörige Determinante ist ein k -ter Minor. Nimmt man das Streichen symmetrisch in bezug auf Zeilen und Spalten vor, entstehen Untermatrizen, deren Minoren als symmetrische Minoren bezeichnet werden. Werden speziell die letzten $n - k$ Zeilen und Spalten eliminiert, sprechen wir von der k -Hauptuntermatrix und dem k -ten Hauptminor.

Schreibweisen aus der Gruppentheorie

Gruppen werden mit großen griechischen Buchstaben bezeichnet, ihre Elemente mit kleinen griechischen Buchstaben. Ist Γ eine Gruppe, steht $\#\Gamma$ für die Ordnung von Γ .

Funktionsräume und Konvergenzbegriffe

Der Dualraum eines Banachraumes X wird mit X' notiert. Ist $X = L^p$, wird der Exponent des Dualraumes konsequenterweise mit p' bezeichnet, es ist also

$$\frac{1}{p} + \frac{1}{p'} = 1.$$

Spitze Klammern $\langle \cdot, \cdot \rangle$ stehen für die duale Paarung eines Banachraumes und seines Dualraumes.

Schwache Konvergenz

Ist X ein Banachraum, sagen wir, daß eine Folge $(f_j)_{j \in \mathbb{N}}$ aus $L^\infty(]0, T[\rightarrow X)$ *schwach** gegen f konvergiert (in Zeichen: $f_j \xrightarrow{*} f \in L^\infty(]0, T[\rightarrow X)$), wenn für alle $\zeta \in L^1(]0, T[\rightarrow X')$ die Beziehung

$$\int_0^T \langle f_j, \zeta \rangle dt \rightarrow \int_0^T \langle f, \zeta \rangle dt$$

erfüllt ist.

Sobolevräume mit negativem Exponenten

In dieser Arbeit steht $W^{-1,p'}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)$ für die Vervollständigung von $L^{p'}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)$ unter der Norm

$$\|f\|_{W^{-1,p'}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)} := \sup_{\zeta \in W_0^{1,p}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n) \setminus \{0\}} \frac{|\int_\Omega f(x) \cdot \zeta(x) dx|}{\|\zeta\|_{W^{1,p}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)}}.$$

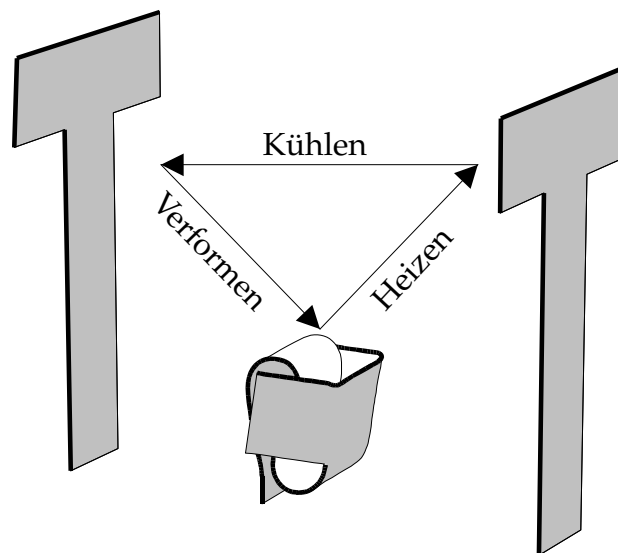
§1 Was ist ein Formgedächtniseffekt?

Dieses weitgehend mathematikfreie Kapitel gibt eine kurze Einführung in den Themenkreis der Formgedächtnismaterialien. Der werkstoffwissenschaftliche Hintergrund wird so weit skizziert, wie es für das Verständnis der vorliegenden Arbeit erforderlich ist. Dabei wird erläutert, wie die Änderung der Kristallsymmetrie ein so erstaunliches makroskopisches Verhalten hervorrufen kann; als Vorbereitung auf §5 werden einige Ergebnisse aus der theoretischen Physik zur Beschreibung von Phasenübergängen bereitgestellt.

§1.1 Phänomenologische Beschreibung

1. Beschreibung des Formgedächtniseffekts

Formgedächtnislegierungen (*shape memory alloys*) sind Materialien, die nach einer plastischen Verformung unter hinreichender Wärmezufuhr in ihre ursprüngliche makroskopische Form zurückkehren. In der folgenden Graphik ist dies schematisch angedeutet.



Augenscheinlich „erinnern“ sich diese Materialien also an ihre ursprüngliche Gestalt; in Wirklichkeit ändert sich die kristalline Struktur (es handelt sich um Metallegierungen). Der geschilderte Effekt ist als *Ein-Weg-Effekt* bekannt und muß vom *Zwei-Wege-Effekt* unterschieden werden: Bei letzterem wird das Werkstück

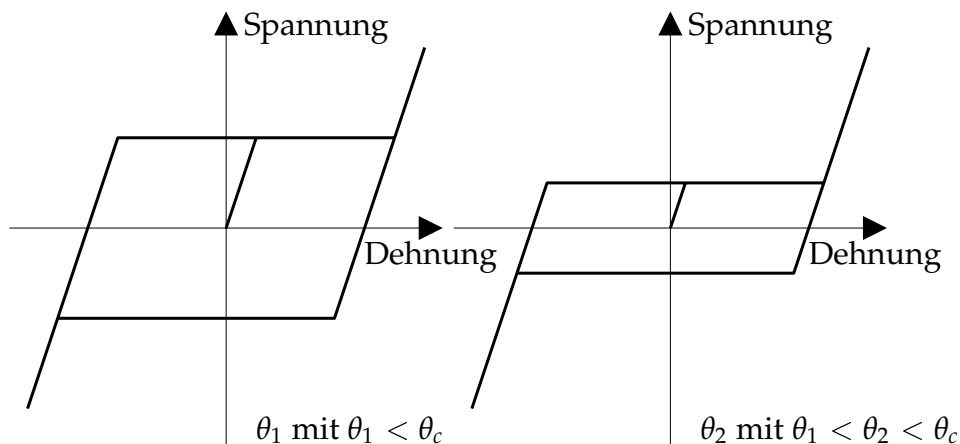
im martensitischen Zustand — das ist die bei niedriger Temperatur stabile kristalline Struktur — speziell behandelt, nämlich entweder stark verformt oder nach einer Verformung unter Spannung erhitzt [ST84]. Dadurch kann erreicht werden, daß auch die Martensitphase teilweise memoriert wird. Nachdem das Material auf solche Weise „erzogen“ wurde, erfolgt die Formänderung anschließend allein durch Zu- und Abfuhr thermischer Energie. Mehr zum Zwei-Wege-Effekt und zum *all-around shape memory effect* findet sich in [Hon84].

Beispiele für Formgedächtnismaterialien sind Nickel-Titan-Verbindungen (NiTi) und Legierungen auf Kupfer- oder Nickelbasis, z.B. $\text{Au}_{23}\text{Cu}_{30}\text{Zn}_{47}$. Nickel-Titanlegierungen (sogenanntes Nitinol) als Formgedächtnismaterialien sind in [Hon84] ausführlich diskutiert; sie sind korrosionsbeständig und biokompatibel. Dieser Vorzüge machen sie zu den beliebtesten und weitverbreitetsten Legierungen mit Formgedächtnis.

Shape memory alloys sind in der Lage, große Kräfte zu übertragen; außerdem können verhältnismäßig große Verformungen durch Erhitzen rückgängig gemacht werden (je nach Material bis zu 8% in bezug auf die ursprüngliche Länge).

2. Thermodynamischer Hintergrund

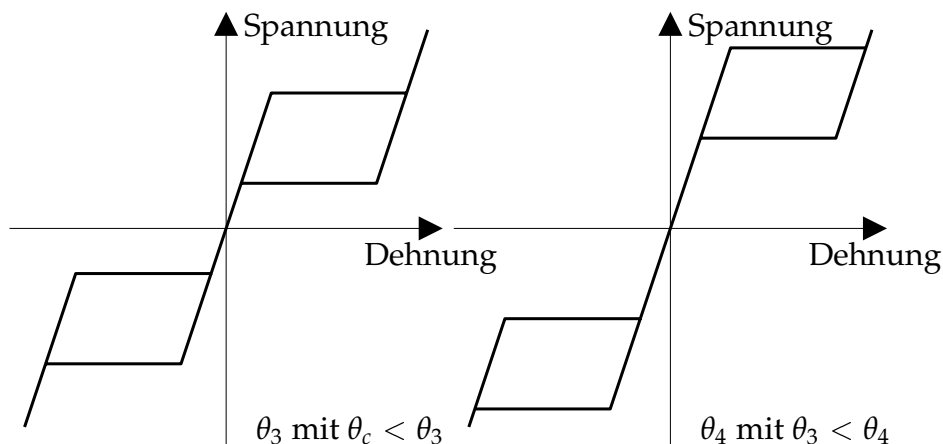
Aus thermodynamischer Sicht liegt der Schlüssel zur Erklärung des Formgedächtniseffekts in der starken Temperaturabhängigkeit der Spannungs-Dehnungs-Diagramme[‡]. Das soll hier kurz erläutert werden. Die folgende Darstellung orientiert sich an [Mül94, HMS94].



Bei niedriger Temperatur (θ_1 , linkes Diagramm) liegt im wesentlichen ein plastisches Verhalten vor: bis zu einer gewissen Grenzspannung findet eine elastische Verformung statt, die im Diagramm durch die Ursprungsgerade repräsentiert ist. Wird die Grenzspannung aber überschritten, nimmt die Dehnung auch ohne weitere Spannungszunahme zu — also ein Fließvorgang wie bei einem plastischen Körper. Anders als bei einem plastischen Körper schließt sich bei weiterer Spannungs-

[‡] Zur Vereinfachung betrachten wir in diesem Abschnitt ein eindimensionales Modellproblem.

zunahme eine erneute elastische Verformung an. Aus diesem Grund spricht man von einem *quasiplastischen Verhalten*. Quasiplastizität ist durch eine Hystereseschleife um den Ursprung des Spannungs-Dehnungs-Diagramms gekennzeichnet. Führt man die Spannung auf Null zurück, bleibt eine Restverformung. Unter Druck ist das Verhalten ähnlich wie unter positiver Spannung — zunächst verhält sich der Körper elastisch, jenseits einer Rückstellgrenze findet jedoch ein Kriechvorgang (untere waagerechte Gerade im Diagramm) statt. Die entstehende Hystereseschleife ist temperaturabhängig: erhöht man die Temperatur (rechtes Diagramm, Temperatur θ_2), bleibt aber unter der materialabhängigen Sprungtemperatur, die hier mit θ_c bezeichnet wird, wird die Hystereseschleife etwas flacher: Die Fließgrenze sinkt, die Rückstellgrenze steigt.



Völlig anders wird das Verhalten, wenn die Sprungtemperatur θ_c überschritten wird (θ_3 , in der obigen Zeichnung links): Nach wie vor findet man eine elastische Gerade, eine Fließgrenze, eine zweite elastische Gerade und eine Rückstellgrenze. Wesentlich ist aber, daß die entstandene Hystereseschleife die elastische Gerade durch den Ursprung einbezieht. Fährt man einen kompletten Be- und Entlastungszyklus, erhält man den Körper makroskopisch im Urzustand zurück. Aus diesem Grund sagt man, daß *pseudoelastisches Verhalten* vorliegt: Elastisch, da man in den Ausgangszustand zurückkehrt, pseudo, da man zwischendurch eine Hystereseschleife durchfährt. Erhöht man die Temperatur weiter (vergleiche das Diagramm zu θ_4), bleibt das Diagramm qualitativ unverändert, allerdings wandert die obere Hystereseschleife nach oben und die untere nach unten. Die von ihnen umschlossenen Flächen, die der Dissipation entsprechen, bleiben dabei quantitativ unverändert.

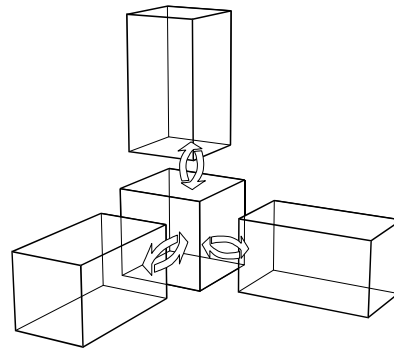
Anhand dieser Diagramme kann das Auftreten des Gedächtniseffektes leicht begründet werden: Nehmen wir an, daß der Körper bei niedriger Temperatur eine Restverformung behält, wie sie beim Durchlaufen der Hystereseschleife auf der zweiten elastischen Geraden auftritt (siehe Diagramm zu θ_1 oder θ_2 , verschwindende Spannung). Nach einem Erhitzen über die Sprungtemperatur muß der Körper

dann in den dehnungsfreien Zustand zurückkehren, denn dies ist im spannungsfreien Fall der einzige stabile Zustand.

Hier sieht man, warum das Studium von Formgedächtniseffekten mathematisch so reizvoll ist: Die Spannungs-Dehnungs-Diagramme sind hochgradig nichtlinear und die auftretende Hysterese stellt eine Herausforderung für die mathematische Analyse dar. Das in §4 studierte Problem modelliert allerdings nicht das hysteretische Verhalten, sondern untersucht die Koppelung von Temperatur und Verschiebung bei nichtmonotoner Spannung; aus diesem Themenkreis ergeben sich spannende Fragen, die bei einer Reihe von Mathematikern Interesse geweckt haben. In §2 werden einige Arbeiten zu diesem Thema vorgestellt.

3. Kristallographischer Hintergrund

Auf mikroskopischer Ebene betrachtet ist der Formgedächtniseffekt ein fest-fest Phasenübergang. Die angelegte Spannung beziehungsweise die Zufuhr von Wärme bewirkt eine sprunghafte Änderung der Symmetrie des Kristallgitters. Bei hoher Temperatur ist bei den eingangs genannten Formgedächtnislegierungen die Phase mit dem höchsten Symmetriegrad stabil. Diese Phase wird *Austenit* genannt. Bei niedrigerer Temperatur werden niedersymmetrische Phasen stabil, die als *Martensit* bezeichnet werden. Dabei sind im unbelasteten Zustand mehrere Martensitvarianten stabil, die durch Symmetrieeoperationen aufeinander abgebildet werden können. Die nächste Abbildung versinnbildlicht dies am einfachsten Beispiel: dem Übergang einer kubischen Austenitphase in drei tetragonale[‡] Martensitvarianten.

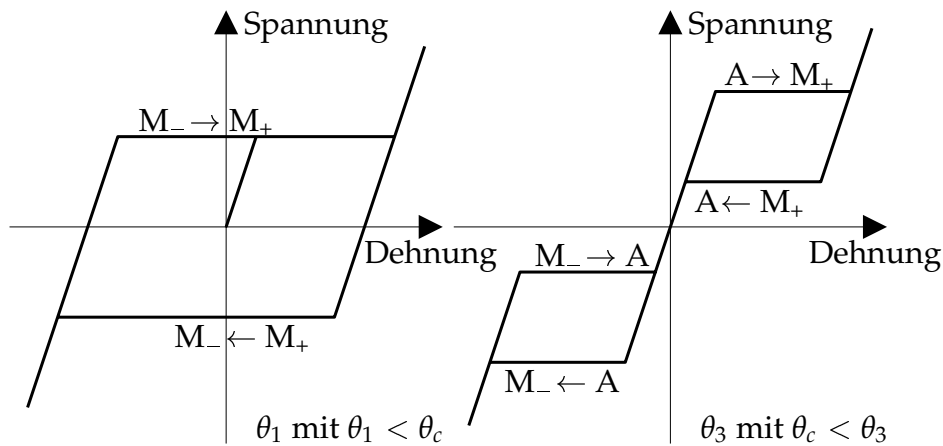


BEMERKUNG. Hinsichtlich der Zahl der Martensitvarianten ist Vorsicht angebracht, da die Darstellung in der Literatur oft unklar ist. Hier gehen wir von 3 Martensitvarianten aus, vergleiche [BJ87]. Betont werden soll, daß dieses Beispiel mit drei Martensitvarianten Modellcharakter besitzt; die in §§3–5 angestellten Überlegungen gelten für eine wesentlich allgemeinere Situation. In [BJ87] wird der Übergang einer flächenzentrierten kubischen Gitterzelle in eine flächenzentrierte tetragona-

[‡] Mit „tetragonal“ ist hier „quaderförmig“ gemeint, im Einklang mit der üblichen Sprechweise und im Widerspruch zur griechischen Wurzel.

le Gitterzelle (*face-centered cubic to face-centered tetragonal, fcc*→*fcc*) betrachtet. Ein solcher Übergang tritt bei Indium-Thallium-Legierungen (InTl) auf; in der grundlegenden Arbeit [WLR53] wird hierfür erstmals eine Theorie entwickelt, die die austenitisch-martensitische Transformation erfolgreich beschreibt. Das Hauptaugenmerk dieser Arbeit liegt aber auf martensitischen Umformungen in *Stahl*, also eisenbasierten Materialien. Die Theorie von Wechsler, Lieberman und Read (siehe auch [Way64]) sagt für diesen Übergang 24 kristallographisch äquivalente *Habitus-ebenen* voraus, genauer: 24 verschiedene Lösungen für die Normalenrichtung der Habitusebene in bezug auf die austenitischen Achsen und für die Orientierungsbeziehung zwischen den austenitischen und den martensitischen Achsen.

Durch die Kenntnis, daß das beschriebene Phänomen ein Phasenübergang eines Metallgitters ist, erschließt sich ein tieferes Verständnis des Formgedächtniseffekts. Um das Prinzip zu erklären, betrachten wir hier den eindimensionalen Fall, bei dem nur zwei Martensitvarianten auftreten. Bei hoher Temperatur ist die hochsymmetrische (Austenit-)phase A stabil. Bei niedriger Temperatur befindet sich das Gitter in den weniger symmetrischen martensitischen Phasen M_+ und M_- . Diese Phasen treten typischerweise zusammen auf — man sagt, daß Martensit zur Zwillingbildung neigt. Eine dieser Phasen, im folgenden mit M_+ bezeichnet, ist bei Zug bevorzugt, die andere (hier mit M_- notiert) bei Druck. Bei niedriger Temperatur θ_1 liegen im unbelasteten Zustand die Martensitvarianten M_+ und M_- zu gleichen Teilen vor, Austenit tritt nicht auf. Eine Belastung in eine Richtung begünstigt jedoch eine Variante und benachteiligt die andere. Die begünstigte Variante wird sich also auf Kosten der anderen verstärkt ausbilden. Beispielsweise kommt es längs der Fließgrenze zu einem Umflippen $M_- \rightarrow M_+$. Stellt man sich in Analogie zur letzten Zeichnung M_+ als liegendes und M_- als stehendes Rechteck vor, klappen die stehenden Rechtecke auf der Fließgrenze in liegende um. Daraus resultiert die Längenzunahme. Bei Überschreiten der Sprungtemperatur wird Martensit im spannungsfreien Zustand instabil und Austenit stabil. Liegt jedoch eine Spannung an, wird Austenit auf einer pseudoelastischen Fließlinie in eine Martensitvariante umgewandelt, auf der Rückstelllinie läuft der umgekehrte Vorgang ab. So findet auf der Fließgrenze eine Umwandlung $A \rightarrow M_+$ statt. Damit ist die erste elastische Gerade im rechten Diagramm eine Belastung in der austenitischen Phase, die zweite Gerade steht für eine Belastung im M_+ -Zustand. Im nächsten Diagramm ist der Vorgang noch einmal dargestellt.



Zwangsläufig konnten hier nur die ganz elementaren Grundlagen dargestellt werden; strukturelle Phasenübergänge in Festkörpern und speziell martensitische Umwandlungen sind u.a. in [Kha83] detailliert beschrieben.

§1.2 Landautheorie

Ein Kommentar zur Klassifikation von Phasenübergängen ist noch angebracht, um das studierte Phänomen richtig einordnen zu können. Formal beschreiben wir Phasen durch einen *Ordnungsparameter* — eine physikalische Größe, die geeignet ist, unterschiedliche Phasen zu trennen, etwa die Dichte bei einem Übergang von flüssiger zu gasförmiger Phase. Der Ordnungsparameter beschreibt auf diese Weise den Zustand des Körpers. Ursprünglich wurde der Begriff des Ordnungsparameters zur Beschreibung von Phasenübergängen im Magnetismus gewählt. Dort sind die Spins in der paramagnetischen Phase ungeordnet, in der ferromagnetischen Phase hingegen geordnet. Die Bezeichnung „Ordnungsparameter“ hat sich dann auch für andere Phasenübergänge durchgesetzt, bei denen es nicht notwendigerweise um Ordnung versus Unordnung geht.

Beispiele für Ordnungsparameter hängen natürlich von dem betrachteten Phasenwechsel ab; die Magnetisierung bei ferromagnetischen Übergängen, die Dichte oder das Volumen bei der Kondensation eines Gases mögen als typische Beispiele dienen. — Das Auffinden eines geeigneten Ordnungsparameters kann eine nicht-triviale Aufgabe sein; in gewisser Weise ist der Ordnungsparameter aber die Essenz von Phasenübergängen, da er die Information des Phasenwechsels in einer leicht überschaubaren Form kodiert (anders als etwa die weniger handhabbare freie Energie, die wir nicht als Ordnungsparameter betrachten wollen). Ordnungsparameter ändern sich in Abhängigkeit von einem Kontrollparameter, etwa der Temperatur.

Anhand des Ordnungsparameters lassen sich Phasenübergänge weiter unterteilen. Betrachten wir als Beispiel den Übergang zwischen Phasen mit unterschiedlicher Symmetrie, wie sie hier beim Übergang zwischen Austenit und Martensit auftreten. Dieser Übergang geschieht sprunghaft in dem Sinne, daß der Umbau des

Kristallgitters schlagartig erfolgt. Quantifiziert man diesen Wechsel der Kristallstruktur durch einen Ordnungsparameter, so erfährt dieser also bei der kritischen Temperatur einen Sprung. Eine solche unstetige Änderung des Ordnungsparameters bezeichnet man als *Phasenübergang erster Art*. Dem entgegensetzen sind Phasenwechsel, bei denen der Sprung in der ersten Ableitung des Ordnungsparameters auftritt: das sind *Phasenübergänge zweiter Art*. Letztere werden in [LL87, §142] diskutiert. Beschränkt man sich auf Kristalle, so ist ein Phasenübergang erster Art durch einen sprunghaften Umbau des Kristallgitters charakterisiert, während der Umbau bei Phasenübergängen zweiter Art stetig verläuft. Um den Unterschied allgemein abzugrenzen: Zum Zeitpunkt des Phasenübergangs erster Art befinden sich die Körper im Gleichgewicht in unterschiedlichen Phasen, bei Übergängen zweiter Art hingegen in der gleichen Phase. Ein Beispiel für den stetigen Umbau ist der Umwandlungsprozeß in BaTiO_3 , bei dem bei hoher Temperatur ein kubisches Gitter mit den O-Atomen in den Flächenmittelpunkten, den Ba-Atomen in den Eckpunkten und den Ti-Atomen in den Zellmittelpunkten stabil ist; unterhalb einer kritischen Temperatur bewegen sich die O- und Ti-Atome längs einer Würfelkante in bezug auf die Ba-Atome, so daß ein tetragonales Gitter entsteht. Der Zustand des Körpers ändert sich also kontinuierlich, auch wenn die Symmetrie einen abrupten Wechsel durchläuft. — Die klassische Definition von Phasenübergängen nach Ehrenfest ist phänomenologischer Natur. Demnach sind Phasenübergänge erster Art durch die Absorption oder Abgabe von latenter Wärme charakterisiert. Das äußert sich in einer Unstetigkeit der spezifischen Energie. Bei einem Phasenübergang zweiter Art tritt diese Unstetigkeit nicht auf, latente Wärme wird nicht freigesetzt oder aufgenommen. Allgemeiner handelt es sich im Sinne von Ehrenfest um einen Phasenübergang n -ter Ordnung, wenn die n -te Ableitung des chemischen Potentials an der Übergangstemperatur einen Sprung macht [Fli99].

Aus thermodynamischer Sicht wird die Nomenklatur der Phasenübergänge genauso wie der Zusammenhang zur ursprünglichen Definition von Ehrenfest verständlich, wenn man die Änderung des Ordnungsparameters auf die Änderung der thermodynamischen Größen (Entropie, Energie, Volumen usw.) überträgt. Bei einem Übergang zweiter Art bewirkt der stetige Zustandswechsel einen stetigen Wechsel der thermodynamischen Größen; deshalb kommt es nicht zur Absorption oder zur Freisetzung von Energie. Man kann aber sehen [LL87, §142ff.], daß die Ableitungen der genannten thermodynamischen Zustandsfunktionen (also Wärmekapazität, Koeffizient der thermischen Ausdehnung, Kompressibilität usw.) bei einem Phasenübergang zweiter Art einen Sprung durchlaufen.

Die Landautheorie ist ein Modell für Phasenübergänge zweiter Art. Der Kern ist eine (in der Regel phänomenologische) Beschreibung der Helmholtzschen freien Energie als Funktion von Ordnungsparameter und Kontrollparameter. Als klassische Referenz kann [LL87, §142ff.] herangezogen werden. Zur Ausdehnung dieser Theorie auf Phasenübergänge erster Art siehe [TT87] und die darin zitierte Literatur. Mehr zur Landautheorie findet sich auch in [BS96, Fli99].

Der Formgedächtniseffekt ist ein Phasenübergang erster Art. Phasenübergänge zweiter Art treten erst in §5 wieder auf. Dort geben wir ein Verfahren zur Konstruktion von mehrdimensionalen Landaupotentialen an, bei denen die eine Phase durch eine bestimmte Symmetriegruppe (normalerweise eine endliche Gruppe) gekennzeichnet ist und die andere Phase eine Untergruppe davon zur Symmetriegruppe hat; unter dieser Voraussetzung funktioniert das Verfahren gleichermaßen für Phasenübergänge erster wie zweiter Art. Unterschiedliche Phasen lassen sich oft durch Unterschiede in der Symmetrie des Ordnungsparameters kennzeichnen. Bei einem Übergang erster Art können die zugehörigen Symmetriegruppen voneinander unabhängig sein. Bei einem Übergang zweiter Art folgt jedoch aus der Definition, daß die Symmetriegruppe der einen Phase in der der anderen enthalten sein muß. So gut wie immer ist die Hochtemperaturphase die symmetrischere Phase; dies ist jedoch kein thermodynamisches Gesetz. Beim unteren Curiepunkt des Seignettesalzes ist es beispielsweise umgekehrt [LL87, §142].

§2 Modelle für Formgedächtnislegierungen

§1 hat gezeigt, daß die mathematische Analyse von *shape memory alloys* eine spannende Problemstellung ist. Auch die mathematische Modellbildung ist interessant. Dieses Kapitel gibt eine Übersicht über einige Modelle.

Eine naheliegende Unterteilung der mathematischen Modelle ist die Unterscheidung zwischen Mikro-, Meso- und Makromodellen. Ein solchermaßen strukturierter Überblick wird in [Rou99] gegeben. In der folgenden Übersicht trennen wir zwischen ein- und mehrdimensionalen Modellen, da der Stand der Forschung zur Modellbildung, Analysis und numerischen Simulation stark von der studierten Raumdimension abhängt.

Modelle in *einer* skalaren Ortsvariablen x und der Zeitvariablen t existieren seit langem und sind, zumindest hinsichtlich Existenz und Eindeutigkeit der Lösung, gründlich studiert. Hierbei sind insbesondere folgende Modelle zu nennen:

das Modell von Müller und Wilmański bzw. Achenbach und Müller [MW80, AM83, Ach90] sowie die Weiterentwicklung von Müller und Seelecke [MS96]. Diese Makromodelle beruhen auf Prinzipien der Statistischen Mechanik. Die gesuchten Größen sind hier die Temperatur und die prozentualen Anteile der austenitischen und der martensitischen Phasen. Die Bestimmung dieser Unbekannten geschieht durch ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen. In Simulation und Optimalsteuerung hat sich das Modell von Müller und Seelecke ausgezeichnet bewährt [See99]. Eine mathematische Analyse existiert jedoch nicht.

Aufbauend auf einer Reihe von Arbeiten von Falk aus den 80er Jahren, die mit [Fal80a] beginnt, wurden phänomenologische Modelle mit Hilfe der Landau-Ginzburg-Theorie aufgestellt und untersucht. In dieser Theorie wird die freie Energie als Polynomfunktion des Ordnungsparameters betrachtet. Für Formgedächtnismaterialien ist dies die Verzerrung. Zusätzlich enthält die freie Energie einen Term höherer Ableitungsordnung, der Oberflächenenergien repräsentiert. Aus mathematischer Sicht stellt die Hinzunahme dieses Termes eine Regularisierung dar. Aus den Erhaltungsgleichungen für das lineare Moment, die Energie und die Masse ergibt sich in diesem Fall ein System partieller Differentialgleichungen für die Verschiebung u und die Temperatur θ , das etwa für eine freie Energie der Form $\Phi(u_x, u_{xx}, \theta) := \Phi_0(\theta) + \alpha\theta\Phi_1(u_x) + \Phi_2(u_x) + \frac{\gamma}{2}u_{xx}^2$ (und $\sigma(\epsilon, \theta) = \frac{\partial\Phi}{\partial\epsilon}$ mit $\epsilon := u_x$) die

folgende Gestalt besitzt:

$$\rho u_{tt} = \sigma(u_x, \theta)_x - \gamma u_{xxxx} + f, \quad (2.1a)$$

$$-\theta \Phi_0''(\theta) \theta_t = \kappa \theta_{xx} + \theta \sigma_\theta(u_x) u_{xt} + g, \quad (2.1b)$$

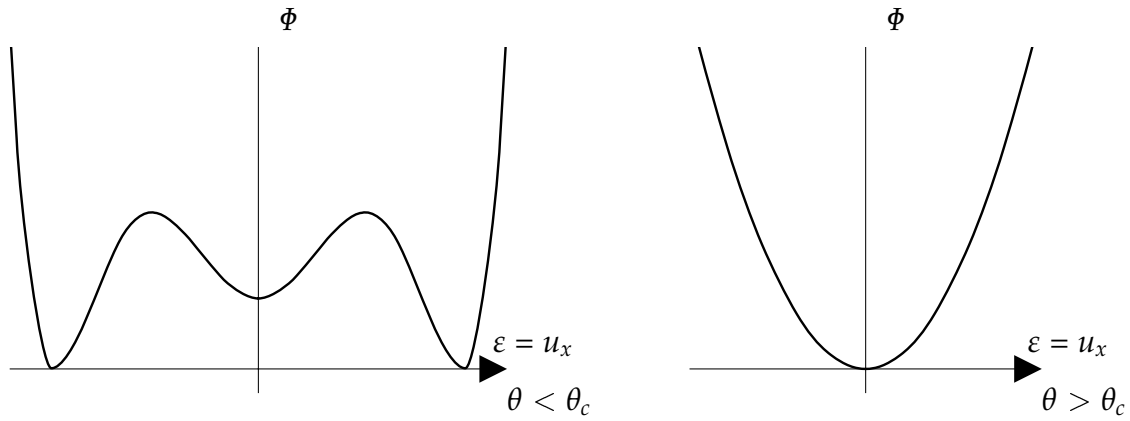
mit positiven Materialkonstanten $\alpha, \rho, \gamma, \kappa$ und Termen f und g , die für externe Anregungen stehen. Zusätzlich hat man die Randbedingungen $u(0, t) = u(1, t) = 0 = u_{xx}(0, t) = u_{xx}(1, t)$, $\theta_x(0, t) = 0$, $-\kappa \theta_x(1, t) = \beta(\theta(1, t) - \theta_\Gamma(t))$ ($\beta > 0$ konstanter Austauschkoefizient, θ_Γ Umgebungstemperatur) sowie Anfangswerte für u, u_t und θ . Für dieses Problem wurde die Existenz einer klassischen Lösung in [SZ89] gezeigt (vergleiche auch [Zhe89]).

Ebenfalls auf der Landau-Ginzburg-Theorie bauen die sogenannten Frémond-Modelle auf. In diesen Makromodellen wird für jede Phase eine eigene Funktion für die freie Energie verwendet, die mittels der volumetrischen Phasenfraktion als weiterem thermodynamischen Parameter zusammengefügt werden. Die Gesamtenergie ergibt sich als die mit den Phasenanteilen gewichtete Summe der Einzelenergien. Neben Temperatur und Verschiebung sind hier die Phasenanteile gesucht. Letztere werden durch eine Variationsungleichung beschrieben, während Verschiebung und Temperatur wieder durch ein gekoppeltes System partieller Differentialgleichungen gegeben sind. Damit ergibt sich ein System der Art

$$\begin{aligned} c_0 \theta_t &= h \theta_{xx} + \partial_t (L \chi_1 - (\alpha(\theta) - \theta \alpha'(\theta)) \chi_2 u_x) + \alpha(\theta) \chi_2 u_{xt} + f, \\ 0 &= (-\nu u_{xxx} + \lambda u_x + 2\mu u_x + \alpha(\theta) \chi_2)_x + g, \\ k \partial_t \begin{bmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{bmatrix} &+ \begin{bmatrix} l(\theta - \theta_1) \\ \alpha(\theta) u_x \end{bmatrix} + \partial I_K(\chi_1, \chi_2) \ni \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

(χ_1, χ_2 sind im wesentlichen die lokalen Anteile der beiden Martensitvarianten, $\alpha(\theta)$ ist eine nichtnegative, nichtwachsende Funktion zur Beschreibung der thermischen Expansion des Systems, ∂I_K ist das Subdifferential der Indikatorfunktion I_K des ebenen Dreiecks $K := \{(\chi_1, \chi_2) \in \mathbb{R}^2 \mid |\chi_2| \leq \chi_1 \leq 1\}$; $c_0, h, L, \nu, \lambda, \mu, k, l, \theta_1$ sind positive Konstanten). Existenz- und Eindeutigkeitsaussagen wurden insbesondere von Colli eingehend studiert (siehe z.B. [CS95] für ein zu obigem Gleichungssystem gehörendes Anfangsrandwertproblem).

Eine weitere Modellierung basiert auf einem Landau-Ansatz der freien Energie mit einem zusätzlichen Viskositätsterm. Hier ist — wie beim Landau-Ginzburg-Modell — die freie Energie als Funktion der Verzerrung (=Ordnungsparameter) bei niedrigen Temperaturen nicht konvex. Im Eindimensionalen ergibt sich folgendes qualitative Bild für die freie Energie:



Mit den oben eingeführten Bezeichnungen sieht das System partieller Differentialgleichungen unter der Annahme, daß σ_θ von θ unabhängig ist, so aus:

$$\rho u_{tt} = (\sigma(u_x, \theta) + \mu u_{xt})_x + f, \quad (2.2)$$

$$-\theta \Phi_0''(\theta) \theta_t = \kappa \theta_{xx} + \theta \sigma_\theta(u_x) u_{xt} + \mu u_{xt}^2 + g. \quad (2.3)$$

Existenz und Eindeutigkeit von klassischen Lösungen dieses Systems wurden beispielsweise in [CH94b] für den Fall $\Phi(u_x, \theta) := \Phi_0(\theta) + \phi(\theta)\Phi_1(u_x) + \Phi_2(u_x)$ mit $\Phi_0(\theta) = \alpha_0 - \alpha_1\theta \ln(\theta)$, $\phi(\theta) = \frac{1}{2}\alpha_2\theta$, $\Phi_1(\epsilon) = \epsilon^2$, $\Phi_2(\epsilon) = -\frac{1}{2}\alpha_2\theta_c\epsilon^2 - \frac{1}{4}\alpha_4\epsilon^4 + \frac{1}{6}\alpha_6\epsilon^6$ und den Randbedingungen $u(0, t) = u(1, t) = 0$, $\theta_x(0, t) = \theta_x(1, t) = 0$ sowie Anfangswerten für u , u_t und θ studiert; vergleiche auch [Daf82, DH82, Jia93]. Die Existenz und Eindeutigkeit klassischer Lösungen für eine größere Klasse entsprechender Gleichungen — die sowohl Formgedächtnislegierungen als auch Gase beschreiben — ist in [Wat00] gezeigt. In [RZ97] finden sich neben Existenz- und Eindeutigkeitsresultaten für schwache Lösungen auch Aussagen über das asymptotische Verhalten. Hoffmann und Źochowski beweisen in [HZ92] Existenz und Eindeutigkeit einer schwachen Lösung des obigen Modells mit zusätzlichem Ginzburg-Term $\frac{\gamma}{2}u_{xx}^2$ in der freien Energie; die Asymptotik $\gamma \rightarrow 0$ findet sich in [CH94a].

Mikrostrukturmodelle schließlich basieren auf einem Variationsproblem. Charakteristisch ist, daß das zu minimierende Energiefunktional nicht schwach folgenhalbstetig von unten ist, da die zugrundeliegende Energiedichte ein *double well potential*, also eine nichtkonvexe Funktion, ist. Die beiden Minima entsprechen den beiden Martensitvarianten im Eindimensionalen. Aufgrund dieser Bauart existiert in klassischen Funktionenräumen wie Sobolevräumen im allgemeinen keine Lösung des Variationsproblems. Statt dessen ist es sinnvoll, maßwertige Lösungen zu studieren. Dieser Weg wurde beispielsweise in [KP92, Dem96, Rie99] auch für mehrdimensionale Probleme eingeschlagen.

Modelle in *mehreren Ortsdimensionen* sind weniger gut verstanden. Hier bereitet bereits die Modellierung Schwierigkeiten.

Xie hat in seiner Dissertation [Xie94] das Modell von Achenbach und Müller auf den höherdimensionalen Fall übertragen. Eine Ausweitung des Seelecke-Modells auf mehrere Raumdimensionen existiert nicht.

In [Pau93] findet sich eine Übertragung des Landau-Ginzburg-Modells auf den dreidimensionalen Fall; dort wird Existenz und Eindeutigkeit der Lösung lokal in der Zeit für das folgende System bewiesen:

$$\begin{aligned} u_{tt} &= \operatorname{Div}(\sigma(\nabla u, \theta)) - \gamma \Delta^2 u + f, \\ -\theta \Phi_0''(\theta) \theta_t &= \kappa \Delta \theta + \theta \sigma_\theta(\nabla u) : \nabla u_t + g, \end{aligned}$$

mit einer freien Energie der Form

$$\Phi(\nabla u, \Delta u, \theta) := \Phi_0(\theta) + \alpha \theta \Phi_1(\nabla u) + \Phi_2(\nabla u) + \frac{\gamma}{2} |\Delta u|^2$$

und homogenen Randbedingungen für u und Δu und allgemeinen Dirichletranddaten für θ auf einem beschränkten Ortsgebiet Ω sowie Anfangsdaten für u, u_t und θ .

In eingeschränktem Maße sind mehrdimensionale Untersuchungen von Hoffmann und Źochowski in [HZ98] angestellt worden; dort wird die globale Existenz einer Lösung für ein ähnliches, aber einfacheres System bewiesen.

Ein neues Existenz- und Eindeutigkeitsresultat global in der Zeit findet sich in [PZ99]. Grundlage ist ein Modell in zwei und drei Ortsdimensionen mit der Falk-Konopka-Energie. Es handelt sich um eine Verallgemeinerung des Landau-Ginzburg-Modells (2.1)–(2.1) mit einer zusätzlichen viskosen Regularisierung. Der Beweis basiert auf einer Zerlegung der Bewegungsgleichung in ein System parabolischer Gleichungen. Möglich wird diese Transformation durch den Ginzburg-Term $\frac{\gamma}{2} |\Delta u|^2$.

Das Frémond-Modell in mehreren Raumdimensionen ist hinsichtlich Existenz und Eindeutigkeit einer Lösung beispielsweise von Colli und Sprekels in [CS92] studiert worden. In dieser Arbeit ist das Modell mehrdimensional formuliert, erfaßt aber nur zwei Martensitvarianten; dies ist jedoch nur eine notationstechnische Einschränkung (Colli, persönliche Mitteilung).

In §4 beweisen wir einen Existenzsatz für eine mehrdimensionale Version des Systems (2.2)–(2.3). Anscheinend ist dies der erste Beweis für die Existenz schwacher Lösungen eines Systems der vorgestellten Art ohne regularisierende Terme höherer Ordnung. Im Vergleich zu den Arbeiten für das System (2.2)–(2.3) muß im Beweis deutlich anders vorgegangen werden, da die im Eindimensionalen zentrale L^∞ -Schranke für u_x sich nur unter zu restriktiven Bedingungen an die Regularität oder das Gebiet auf den höherdimensionalen Fall übertragen läßt.

§3 Herleitung des Modells

In diesem Kapitel wird ein mathematisches Modell zur Beschreibung des Formgedächtniseffekts begründet, in §4 wird die Existenz einer globalen Lösung für ein zugehöriges Anfangsrandwertproblem bewiesen.

§3.1 Vorbemerkung

Wir wollen ein mathematisches Modell aus den physikalischen Erhaltungssätzen ableiten. Das Vorgehen bei der Modellbildung ist in [Ant95, XII] ausführlich dargestellt; vergleiche auch die dort angegebenen Referenzen. Wir betrachten ein Problem aus der Kontinuumsmechanik, genauer gesagt aus der Elastizitätstheorie. Daher werden die Gleichungen in materieller (=Lagrangescher) Formulierung gegeben.

§3.2 Kinematik

Betrachtet wird das zeitliche Verhalten eines Körpers im \mathbb{R}^n ($n = 2, 3$). Zur mathematischen Beschreibung wird eine Referenzkonfiguration $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ ausgezeichnet.

Eine *Bewegung* eines Körpers Ω ist eine einparametrische Familie von Konfigurationen

$$\Omega \ni x \mapsto u(x, t) \in \mathbb{R}^n;$$

$u(x, t)$ ist dann die Position des materiellen Punktes x zum Zeitpunkt t . Um physikalisch unmögliche Situationen wie Selbstdurchdringung des Körpers auszuschließen, wird man von u verlangen, daß es für fast alle t injektiv und orientierungserhaltend ist. Von u nehmen wir zunächst an, daß es hinreichend glatt ist. Dann läßt sich die Orientierungserhaltung umformulieren: In den Punkten in Ω , in denen u differenzierbar ist, wird die Ortsableitung $F := \nabla u$ eine positive Determinante besitzen. In §5 wird die Orientierungserhaltung eine Rolle spielen.

Nach diesen Vorarbeiten kann ein Schwung neuer Größen eingeführt werden: die *Geschwindigkeit* $u_t(x, t)$, die *Beschleunigung* $u_{tt}(x, t)$ und die *Verzerrung* $\nabla u(x, t)$.

1. Erhaltung des linearen Moments

Ist $f(t; \Omega)$ die **resultierende Kraft**, so gilt nach den *Newton-Eulerschen Bewegungsgleichungen* für das lineare Moment folgende Erhaltungsgleichung:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} u_t(x, t) \, dm = f(t; \Omega) \quad \text{für alle } \Omega \subseteq \mathbb{R}^n. \quad (3.1)$$

Handlicher wird diese Gleichung, wenn wir das Integral in ein Volumenintegral umschreiben. Ist ρ die Dichte der Ausgangskonfiguration, gilt also

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho(x) u_t(x, t) \, dV = f(t; \Omega) \quad \text{für alle } \Omega \subseteq \mathbb{R}^n. \quad (3.2)$$

Wir machen die übliche Annahme, daß $f(t; \Omega)$ eine Zerlegung der Form

$$f(t; \Omega) = \int_{\Omega} f(x, t) \, dV + \int_{\partial\Omega} \tau(x, t; \partial\Omega) \, dS \quad (3.3)$$

besitzt. Dabei ist $f(x, t)$ die **Körperkraft(intensität)** pro Einheitsreferenzvolumen in (x, t) und $\tau(x, t; \partial\Omega)$ ist die **Oberflächenspannung** von Ω in (x, t) .

Sind $\Omega, \tilde{\Omega}$ zwei Körper mit gemeinsamen Rand \mathcal{S} , so ist die wirkende Kontaktkraft

$$\int_{\mathcal{S}} \tau(x, t; \partial\Omega) \, dS.$$

Bezeichnet $\nu(x)$ das von Ω nach $\tilde{\Omega}$ weisende Normalenfeld in \mathcal{S} , besagt Cauchys Postulat, daß $\tau(x, t; \partial\Omega)$ auf $\partial\Omega$ nur von $\nu(x)$ abhängt. Demzufolge schreiben wir $\tau(x, t; \nu(x))$ statt $\tau(x, t; \partial\Omega)$.

Nach Satz (A.7) läßt sich, sofern $\tau(\cdot, t; \nu(x))$ und $\rho u_{tt}(\cdot, t) - f(\cdot, t)$ stetig sind, $\tau(\cdot, t; \nu(x))$ durch den (ersten) Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor $\sigma^{\text{PK}}(\cdot, t)$ in der Form

$$\tau(x, t; \nu(x)) = \sigma^{\text{PK}}(x, t) \nu(x) \quad (3.4)$$

darstellen.

Die Anwendung des Gaußschen Divergenzsatzes für die Newton-Eulerschen Bewegungsgleichungen in der Formulierung (3.2) mit „schönen“ Teilmengen $\Omega' \subseteq \Omega$ als Integrationsgebiet liefert unter Berücksichtigung von (3.3) und (3.4)

$$\int_{\Omega'} \rho(x) u_{tt}(x, t) \, dV = \int_{\Omega'} [\text{Div} (\sigma^{\text{PK}}(x, t)) + f(x, t)] \, dV.$$

Eine Variation der Teilmengen $\Omega' \subseteq \Omega$ rechtfertigt die differentielle Schreibweise

$$\rho(x)u_{tt}(x, t) = \text{Div} (\sigma^{\text{PK}}(x, t)) + f(x, t). \quad (3.5)$$

Dies ist die *materielle Formulierung der klassischen Bewegungsgleichungen*.

§3.3 Thermomechanische Gleichungen und Energieerhaltung

Neben der Momentenerhaltung muß auch die Energieerhaltung einfließen. In diesem Kontext wird das bedeuten, daß aus dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik eine weitere Gleichung abgeleitet wird. Referenzen für diesen Abschnitt sind [Ant95, XII.14] und [Mül94].

Für die Formulierung der Energiebilanz müssen noch einige Begriffe eingeführt werden. Die *kinetische Energie* des Körpers Ω zum Zeitpunkt t ist

$$K[u; \Omega](t) := \frac{1}{2} \int_{\Omega} \rho(x) |u_t(x, t)|^2 dV. \quad (3.6)$$

Die von den zum Zeitpunkt t am Körper Ω wirkenden Kräfte leisten die *mechanische Arbeit*

$$P[u, \sigma v; \Omega](t) := \int_{\Omega} f(x, t) \cdot u_t(x, t) dV + \int_{\partial\Omega} (\sigma^{\text{PK}}(x, t)v(x)) \cdot u_t(x, t) dS. \quad (3.7)$$

Die *Wärmekraft* Q soll folgende Gestalt haben (dabei ist r die Rate, mit der Wärme in (x, t) je Einheitsvolumen der Referenzkonfiguration erzeugt wird, q ist der lokale *Wärmefluß*):

$$Q[r, q; \Omega](t) := \int_{\Omega} r(x, t) dV + \int_{\partial\Omega} q(x, t) \cdot v(x) dS. \quad (3.8)$$

Da jetzt nicht mehr nur die Umwandlung von kinetischer Energie in potentielle Energie und umgekehrt geschehen kann, sondern die kinetische Energie sich auch in „unsichtbare“ (über die Temperaturänderung feststellbare) kinetische Energie der ungeordneten Atombewegung und in potentielle Energie zwischen den Atomen umwandeln kann, wird die *innere Energie* eingeführt als Integral über die *innere Energiedichte* e :

$$E[e; \Omega](t) := \int_{\Omega} e(x, t) dV. \quad (3.9)$$

Nach dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik gilt dann die Energiebilanz

$$\frac{d}{dt}E + \frac{d}{dt}K = P + Q. \quad (3.10)$$

Einsetzen von Gleichungen (3.6), (3.7), (3.8) und (3.9) in Gleichung (3.10) ergibt für $\Omega' \subseteq \Omega$

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega'} \left[e(x, t) + \frac{1}{2} \rho(x) |u_t(x, t)|^2 \right] dV = \int_{\Omega'} [f(x, t) \cdot u_t(x, t) + r(x, t)] dV$$

$$+ \int_{\partial\Omega'} [(\sigma^{\text{PK}}(x, t)v(x)) \cdot u_t(x, t) + q(x, t) \cdot v(x)] \, dS.$$

Wir wollen wieder den Gaußschen Divergenzsatz auf den zweiten Term der rechten Seite anwenden; durch Einführung von Koordinaten sieht man $(\sigma^{\text{PK}}(x, t)v(x)) \cdot u_t(x, t) = \left((\sigma^{\text{PK}}(x, t))^T u_t(x, t) \right) \cdot v(x)$. Gehen wir zur differentiellen Form über, ergibt sich also

$$e_t(x, t) + \rho(x)u_{tt}(x, t) \cdot u_t(x, t) = f(x, t) \cdot u_t(x, t) + r(x, t) + \operatorname{div} \left((\sigma^{\text{PK}}(x, t))^T u_t(x, t) \right) + \operatorname{div}(q(x, t)). \quad (3.11)$$

Im nächsten Schritt wird in Gleichung (3.11) die Ableitung des Produktes aufgelöst; es gilt $\operatorname{div}(Ab) = \operatorname{Div}(A^T) \cdot b + A^T : \nabla b$. Damit gewinnt die Gleichung die Gestalt

$$e_t(x, t) + \rho(x)u_{tt}(x, t) \cdot u_t(x, t) = f(x, t) \cdot u_t(x, t) + r(x, t) + \operatorname{Div}(\sigma^{\text{PK}}(x, t)) \cdot u_t(x, t) + \sigma^{\text{PK}}(x, t) : \nabla u_t(x, t) + \operatorname{div}(q(x, t)). \quad (3.12)$$

Bildet man in Gleichung (3.5) das Skalarprodukt mit u_t und subtrahiert das Resultat von Gleichung (3.12), steht

$$e_t(x, t) = \operatorname{div}(q(x, t)) + \sigma^{\text{PK}}(x, t) : \nabla u_t(x, t) + r(x, t). \quad (3.13)$$

auf dem Papier.

Aus den Erhaltungsgleichungen für das lineare Moment und die Energie wurden also die beiden Gleichungen

$$\rho(x)u_{tt}(x, t) = \operatorname{Div}(\sigma^{\text{PK}}(x, t)) + f(x, t), \quad (3.14a)$$

$$e_t(x, t) = \operatorname{div}(q(x, t)) + \sigma^{\text{PK}}(x, t) : \nabla u_t(x, t) + r(x, t) \quad (3.14b)$$

abgeleitet.

BEMERKUNG. Bei der Herleitung der Gleichungen in differentieller Form haben wir verwendet, daß alle auftretenden Größen glatt genug für die Anwendung des Gaußschen Integralsatzes sind. Nun treten aber gerade bei Phasenübergängen Unstetigkeiten in Form von Sprüngen zwischen den verschiedenen Phasen auf. Für Grenzflächen zwischen den Phasen gelten die Gesetze (3.14) also nicht. Das hat zwei Konsequenzen: Da diese Grenzflächen im allgemeinen Nullmengen sind, ist es sinnvoll, nach schwachen Lösungen des Gleichungssystems (3.14) zu suchen. Außerdem zeigt eine sorgfältigere Analyse unter Einbeziehung der Grenzflächen, daß die auftretenden Größen an den Phasengrenzen gewissen Sprungbedingungen — den sogenannten Rankine-Hugoniot-Sprungbedingungen — genügen müssen. Wir werden auf diese Thematik nicht weiter eingehen. In [Tru93, Tru94a, Tru94b, Tru97] findet sich mehr dazu.

Die *Massenerhaltung* schließlich folgt aus der Annahme, daß die Dichte $\rho(x)$ konstant ist. Durch geeignete Normierung kann ohne Einschränkung $\rho \equiv 1$ angenommen werden.

§3.4 Entropieproduktion

Bisher sind in die Herleitung nur Erhaltungsgleichungen eingegangen; damit deckt die erhaltene Formulierung *a priori* auch solche Prozesse ab, die gegen den zweiten Hauptsatz der Thermodynamik verstoßen. Um die Irreversibilität thermodynamischer Vorgänge zu formulieren, wird die Entropie betrachtet.

Ist $\eta(x, t)$ die *Entropiedichte* des Körpers Ω zum Zeitpunkt t , nennt man die Größe

$$S(t) := \int_{\Omega} \eta(x, t) \, dV$$

konsequenterweise *Entropie* des Körpers zum Zeitpunkt t .

Die Clausius-Duhem-Ungleichung für thermodynamische Prozesse lautet für zwei Zeitpunkte $t_1 \leq t_2$

$$S(t_2) - S(t_1) \geq \int_{t_1}^{t_2} \frac{Q[r, q; \Omega](t)}{\theta(x, t)} \, dt.$$

Setzen wir in diese Gleichung die Definition von Q nach (3.8) ein und differenzieren nach der Zeit, gewinnt die Clausius-Duhem-Ungleichung ein konkreteres Aussehen:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \eta(x, t) \, dV \geq \int_{\Omega} \frac{r(x, t)}{\theta(x, t)} \, dV + \int_{\partial\Omega} \frac{q(x, t)}{\theta(x, t)} \cdot \nu(x) \, dS$$

oder, nach Anwendung des Gaußschen Integralsatzes auf den dritten Term und Multiplikation mit θ in differentieller Schreibweise,

$$\theta(x, t)\eta_t(x, t) \geq r(x, t) + \theta(x, t)\operatorname{div} \left(\frac{q(x, t)}{\theta(x, t)} \right).$$

Subtrahiert man hiervon die aus dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik abgeleitete Gleichung (3.13), ergibt sich

$$\theta(x, t)\eta_t(x, t) - e_t(x, t) + \sigma^{\text{PK}}(x, t) : \nabla u_t(x, t) + \frac{q(x, t) \cdot \nabla \theta(x, t)}{\theta(x, t)} \geq 0.$$

Die Energiedichte

$$\Phi(x, t) := e(x, t) - \eta(x, t)\theta(x, t). \quad (3.15)$$

heißt (*Helmholtzsche freie Energie* (vergleiche [Hau00])). Bringt man diese Größe in die Clausius-Duhem-Ungleichung ein, erhält man die „endgültige“ Formulierung

$$-\Phi_t(x, t) - \eta(x, t)\theta_t(x, t) + \sigma^{\text{PK}}(x, t) : \nabla u_t(x, t) + \frac{q(x, t) \cdot \nabla \theta(x, t)}{\theta(x, t)} \geq 0. \quad (3.16)$$

§3.5 Konstitutive Gesetze

Wir nehmen an, daß die zu untersuchenden Formgedächtnismaterialien konstitutive Gleichungen der folgenden Art besitzen:

$$\sigma^{\text{PK}}(x, t) = \hat{\sigma}^{\text{PK}}(F(x, t), F_t(x, t), \theta(x, t), \nabla\theta(x, t), x), \quad (3.17a)$$

$$q(x, t) = \hat{q}(F(x, t), F_t(x, t), \theta(x, t), \nabla\theta(x, t), x), \quad (3.17b)$$

$$\eta(x, t) = \hat{\eta}(F(x, t), F_t(x, t), \theta(x, t), \nabla\theta(x, t), x), \quad (3.17c)$$

$$\Phi(x, t) = \hat{\Phi}(F(x, t), F_t(x, t), \theta(x, t), \nabla\theta(x, t), x). \quad (3.17d)$$

In dieser Definition sind noch Prozesse enthalten, die dem zweiten Hauptsatz der Thermodynamik zuwiderlaufen. Solche Prozesse werden mit dem **Entropieprinzip von Coleman und Noll** ausgeschlossen. Dieses Prinzip lautet: *Die konstitutiven Gleichungen müssen für jeden thermomechanischen Prozeß die Entropieungleichung in Form der Clausius-Duhem-Ungleichung (3.16) erfüllen.* Setzen wir die konstitutiven Gesetze (3.17) in die Clausius-Duhem-Ungleichung (3.16) ein, bekommen wir[‡]

$$\left[\hat{\sigma}^{\text{PK}} - \frac{\partial \hat{\Phi}}{\partial F} \right] : F_t - \frac{\partial \hat{\Phi}}{\partial F_t} : F_{tt} - \left[\hat{\eta} + \frac{\partial \hat{\Phi}}{\partial \theta} \right] : \theta_t - \frac{\partial \hat{\Phi}}{\partial(\nabla\theta)} \cdot \nabla\theta_t + \frac{\hat{q} \cdot \nabla\theta}{\theta} \geq 0 \quad (3.18)$$

für alle thermomechanischen Prozesse. Sei (x, t) fest. Eine Abwandlung des Prozesses zeigt, daß $F, F_t, F_{tt}, \theta, \theta_t, f$ und f_t in (x, t) *unabhängig voneinander* variiert werden können. Aufgrund dieser Überlegung sieht man

$$\frac{\partial \hat{\Phi}}{\partial F_t} = 0$$

und

$$\frac{\partial \hat{\Phi}}{\partial(\nabla\theta)} = 0.$$

Diese beide Erkenntnisse kombiniert zeigen, daß die Helmholtzsche freie Energie nur von $F(x, t), \theta(x, t)$ und x abhängt. Die konstitutive Gleichung (3.17d) vereinfacht sich also zu

$$\Phi(x, t) = \hat{\Phi}(F(x, t), \theta(x, t), x). \quad (3.19)$$

Ein Skalierungsargument (siehe [Ant95, XII.14]) liefert schließlich

$$\hat{\sigma}^{\text{PK}}(F(x, t), 0, \theta(x, t), 0, x) = \frac{\partial \hat{\Phi}}{\partial F}(F(x, t), \theta(x, t), x)$$

‡ Um die Rechnung übersichtlich zu halten, werden ab jetzt die Argumente (x, t) der einzelnen Funktionen bisweilen fortgelassen.

und

$$\hat{q}(F(x, t), 0, \theta(x, t), 0, x) = 0.$$

Für ein thermoviskoelastisches Material gilt also die konstitutive Gleichung, die zugleich Definition von $\hat{\sigma}_v^{\text{PK}}$ (Subskript v für „Viskosität“) ist:

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}^{\text{PK}}(F(x, t), F_t(x, t), \theta(x, t), \nabla\theta(x, t), x) &= \frac{\partial \hat{\Phi}}{\partial F}(F(x, t), \theta(x, t), x) \\ &+ \hat{\sigma}_v^{\text{PK}}(F(x, t), F_t(x, t), \theta(x, t), \nabla\theta(x, t), x). \end{aligned}$$

§3.6 Helmholtzsche freie Energie

Zur Modellierung von Phasenübergängen wird eine freie Energie gewählt, die — als Funktion des Verzerrungstensors ∇u betrachtet — im allgemeinen nicht konvex ist. So wird es möglich, daß mehrere Minima zur gleichen Zeit existieren. Das modelliert die Koexistenz mehrerer Martensitvarianten in unbelastetem Zustand bei niedriger Temperatur.

Wir werden als Helmholtzsche freie Energie

$$\Phi(\nabla u, \theta) := \phi_0(\theta) + \phi(\theta)\Phi_1(\nabla u) + \Phi_2(\nabla u) \quad (3.20)$$

studieren. Dabei wird Φ wie eben erwähnt als Funktion von ∇u für niedrige Temperaturen nicht konvex sein; als Konsequenz daraus wird der nichtviskose Anteil des Spannungstensors $\sigma^{\text{PK}}(\nabla u, \theta)$ in diesem Temperaturbereich nicht monoton sein. Damit besteht aber keine Hoffnung, in „klassischen“ Funktionenräumen, also Sobolevräumen, die Existenz einer schwachen Lösung nachweisen zu können. Aus diesem Grund wird eine viskositätsähnliche Regularisierung eingeführt. Zunächst ist nicht klar, welche Gestalt nichtkonvexe Funktionen Φ des Verzerrungstensors haben müssen (da zusätzlich Symmetriebedingungen zu erfüllen sind); in §5 wird ein Konstruktionsverfahren zur Lösung dieses Problems vorgestellt.

Der nichtviskose Anteil des Piola-Kirchhoffschen Spannungstensors wird mit σ bezeichnet; es gilt also

$$\sigma^{\text{PK}} = \sigma + \sigma_v^{\text{PK}}.$$

Eine Kurzschreibweise, die auch in §4 wieder auftauchen wird, ist

$$\phi_j(F) := \Phi'_j(F) := \frac{\partial \Phi_j(F)}{\partial F} \quad (j = 1, 2).$$

In Konsequenz der Gleichung (3.20) hat σ die Gestalt

$$\sigma^{\text{PK}}(\nabla u, \theta) = \phi_0(\theta) + \phi(\theta)\phi'_1(\nabla u) + \phi'_2(\nabla u)$$

$$= \phi_0(\theta) + \phi(\theta)\phi'_1(\nabla u) + \phi'_2(\nabla u).$$

Für den viskosen Term σ_v^{PK} setzen wir

$$\sigma_v^{\text{PK}} := \nabla u_t.$$

Darin liegt eine Schwäche des Modells, denn dieser Ausdruck ist nicht rahmeninvariant. Die Analysis in §4 ließe sich jedoch auch mit dem Ansatz

$$\sigma_v^{\text{PK}} := \frac{1}{2} (\nabla u_t + (\nabla u_t)^*)$$

durchführen, der immerhin infinitesimal rahmeninvariant ist (vergleiche [FD97], auch zur Behandlung der Bewegungsgleichung mit diesem Term). Um den Blick für das Wesentliche nicht zu verstellen, belassen wir es bei dem kürzeren Ausdruck $\sigma_v^{\text{PK}} = \nabla u_t$.

Damit gewinnt Gleichung (3.5) die endgültige Form

$$\rho u_{tt}(x, t) = \text{Div}(\sigma(\nabla u(x, t), \theta(x, t)) + \nabla u_t(x, t)) + f(x, t); \quad (3.21)$$

die Energieerhaltung (3.13) liest sich als

$$e_t(x, t) = \text{div}(q(x, t)) + \sigma(x, t) : \nabla u_t(x, t) + \nabla u_t(x, t) : \nabla u_t(x, t) + r(x, t). \quad (3.22)$$

Zur Beschreibung der Beziehung von der lokalen Wärmeflußdichte und der Temperatur nehmen wir die Gültigkeit des Fourierschen Gesetzes an. Bezeichnet $\kappa(x)$ die Wärmeleitfähigkeit, gilt also

$$q(x, t) = \kappa(x) \nabla \theta(x, t). \quad (3.23)$$

Es wird zusätzlich vorausgesetzt, daß die Wärmeleitfähigkeit κ konstant und positiv ist: $\kappa \equiv \text{const} > 0$.

§3.7 Aufstellen der Gleichungen

Einsetzen der konstitutiven Gleichung für die Entropie in die Definition der Helmholtzschen freien Energie (3.15) ergibt wegen $\eta(x, t) = \Phi_\theta(x, t)$

$$\begin{aligned} e(x, t) &= \Phi(x, t) - \theta(x, t)\Phi_\theta(x, t) \\ &= \phi_0(\theta) + \phi(\theta)\Phi_1(\nabla u) + \Phi_2(\nabla u) - \theta (\phi'_0(\theta) + \phi'(\theta)\Phi_1(\nabla u)). \end{aligned}$$

Um diese Gleichung mit (3.22) vergleichen zu können, leiten wir einmal nach der Zeit ab.

$$\begin{aligned}
e_t &= \phi'_0(\theta)\theta_t + \phi'(\theta)\Phi_1(\nabla u)\theta_t + \phi(\theta)\phi_1(\nabla u) : \nabla u_t \\
&\quad + \phi_2(\nabla u) : \nabla u_t - \theta (\phi''_0(\theta) + \phi''(\theta)\Phi_1(\nabla u)) \theta_t - \theta\phi'(\theta)\phi_1(\nabla u) : \nabla u_t \\
&\quad - (\phi'_0(\theta) + \phi'(\theta)\Phi_1(\nabla u)) \theta_t \\
&= \sigma(\nabla u, \theta) : \nabla u_t - \theta (\phi''_0(\theta) + \phi''(\theta)\Phi_1(\nabla u)) \theta_t - \theta\phi'(\theta)\phi_1(\nabla u) : \nabla u_t.
\end{aligned} \tag{3.24}$$

Die Kombination von (3.22) und (3.24) ergibt mit (3.23) die aus der Energieerhaltung abgeleitete Wärmeleitungsgleichung

$$\begin{aligned}
-\theta (\phi''_0(\theta) + \phi''(\theta)\Phi_1(\nabla u)) \theta_t &= \kappa\Delta\theta + \theta\phi'(\theta)\phi_1(\nabla u) : \nabla u_t + \nabla u_t : \nabla u_t + r \tag{3.25} \\
&= \kappa\Delta\theta + \theta\sigma_\theta(\nabla u, \theta) : \nabla u_t + \nabla u_t : \nabla u_t + r.
\end{aligned}$$

§3.8 Formulierung des Problems

Für die mathematische Analyse nehmen wir der Einfachheit halber $f = r = 0$ an. Zusammenfassend ergeben sich damit aus (3.21) und (3.25) die Gleichungen

$$u_{tt} = \text{Div}(\sigma(\nabla u, \theta) + \nabla u_t) \quad \text{in } \Omega \times]0, T[, \tag{3.26a}$$

$$\begin{aligned}
-\theta (\phi''_0(\theta) + \phi''(\theta)\Phi_1(\nabla u)) \theta_t &= \kappa\Delta\theta + \theta\sigma_\theta(\nabla u, \theta) : \nabla u_t + \nabla u_t : \nabla u_t \\
&\quad \text{in } \Omega \times]0, T[, \tag{3.26b}
\end{aligned}$$

die wir noch mit Rand- und Anfangsbedingungen versehen:

$$\begin{aligned}
u &= g \quad \text{auf } \partial\Omega \times [0, T[, \\
u &= u_0 \quad \text{in } \Omega \times \{0\}, \\
u_t &= v_0 \quad \text{in } \Omega \times \{0\}, \\
\theta &= 0 \quad \text{auf } \partial\Omega \times [0, T[, \\
\theta &= \theta_0 \quad \text{in } \Omega \times \{0\}.
\end{aligned}$$

Mit der üblichen Wahl des kalorischen Termes $\phi_0(\theta) := \alpha + \theta - \theta \ln(\theta)$ gilt

$$-\theta\phi''_0(\theta) \equiv 1.$$

Physikalisch läßt sich dies dadurch motivieren, daß im praxisrelevanten Fall die Wärmekapazität bei Formgedächtnislegierungen konstant ist, hier also

$$-\theta (\phi''_0(\theta) + \phi''(\theta)\Phi_1(\nabla u)) \equiv \text{const}$$

gilt. Als Konsequenz dieser Beobachtung nehmen wir als Vereinfachung des Modells zusätzlich an, daß $\theta\phi''(\theta)\Phi_1(\nabla u) \equiv 0$ ist. Für realistische Temperaturen steht das in Einklang mit der experimentellen Beobachtung, daß $\phi(\theta)$ linear ist. Allerdings können wir die mathematische Analyse dieses Gleichungssystem bei globalem linearem Wachstum von ϕ nicht durchführen; in den Existenzbeweis geht die Beschränktheit von ϕ ein — wir betrachten also eine Funktion ϕ , die in einem beliebig großen Bereich um die Null linear wachsen kann, außerhalb dieses Bereiches aber gekappt wird. Innerhalb des Bereiches steht folgendes Modell in Einklang mit den physikalischen Erhaltungssätzen:

$$u_{tt} = \text{Div}(\sigma(\nabla u, \theta) + \nabla u_t) \quad \text{in } \Omega \times]0, T[, \quad (3.27a)$$

$$u = g \quad \text{auf } \partial\Omega \times [0, T[, \quad (3.27b)$$

$$u = u_0 \quad \text{in } \Omega \times \{0\}, \quad (3.27c)$$

$$u_t = v_0 \quad \text{in } \Omega \times \{0\}, \quad (3.27d)$$

$$\theta_t = \kappa\Delta\theta + \theta\sigma_\theta(\nabla u, \theta) : \nabla u_t + \nabla u_t : \nabla u_t \quad \text{in } \Omega \times]0, T[, \quad (3.28a)$$

$$\theta = 0 \quad \text{auf } \partial\Omega \times [0, T[, \quad (3.28b)$$

$$\theta = \theta_0 \quad \text{in } \Omega \times \{0\}. \quad (3.28c)$$

§4 Existenz einer Lösung

Wir studieren ein zum in §3 eingeführten Modell gehörendes Anfangsrandwertproblem. Zur Behandlung der Wärmeleitungsgleichung werden renormierte Lösungen eingeführt. Für das Anfangsrandwertproblem wird die Existenz einer globalen schwachen renormierten Lösung gezeigt.

§4.1 Das Anfangsrandwertproblem

Sei Ω ein offenes, beschränktes und nichtleeres Gebiet im \mathbb{R}^n ($n = 2$ oder $n = 3$) mit Lipschitzrand $\partial\Omega$. Weiter sei $T > 0$ eine beliebig vorgegebene, aber feste Endzeit und schließlich $g: \overline{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^n$ sowie $u_0, v_0: \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$ und $\theta_0: \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ gegebene Funktionen von noch zu spezifizierender Regularität.

Wir betrachten für eine vektorwertige Funktion $u: \Omega \times [0, T[\rightarrow \mathbb{R}^n$ und eine skalarwertige Funktion $\theta: \Omega \times [0, T[\rightarrow \mathbb{R}$ das Anfangsrandwertproblem (3.27)–(3.28) aus §3:

$$u_{tt} = \text{Div}(\sigma(\nabla u, \theta) + \nabla u_t) \quad \text{in } \Omega \times]0, T[, \quad (4.1a)$$

$$u = g \quad \text{auf } \partial\Omega \times [0, T[, \quad (4.1b)$$

$$u = u_0 \quad \text{in } \Omega \times \{0\}, \quad (4.1c)$$

$$u_t = v_0 \quad \text{in } \Omega \times \{0\}, \quad (4.1d)$$

$$\theta_t = \Delta\theta + \theta\sigma_\theta(\nabla u, \theta) : \nabla u_t + \nabla u_t : \nabla u_t \quad \text{in } \Omega \times]0, T[, \quad (4.2a)$$

$$\theta = 0 \quad \text{auf } \partial\Omega \times [0, T[, \quad (4.2b)$$

$$\theta = \theta_0 \quad \text{in } \Omega \times \{0\}. \quad (4.2c)$$

Zur Sprechweise: u wird als *Verschiebung* bezeichnet, ∇u als *Verzerrung*. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit wurde in obigem System die Wärmekapazität κ auf 1 gesetzt.

Als Abkürzung wird gelegentlich $Q := \Omega \times]0, T[$ zur Bezeichnung des Ort-Zeit-Zylinders verwendet. In diesem Kapitel steht K für eine generische Konstante.

§4.2 Voraussetzungen für den Existenzsatz

1. Forderungen an die freie Energie

Wir stellen folgende Bedingungen an $\Phi(F, \theta)$:

1. $\Phi(F, \theta)$ ist hinreichend glatt:

$$\Phi \in C^2(M^{n \times n} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}). \quad (\text{FE1})$$

2. Die freie Energie hat die Gestalt

$$\Phi(F, \theta) = \alpha + \theta - \theta \ln(\theta) + \phi(\theta)\Phi_1(F) + \Phi_2(F), \quad (\text{FE2})$$

wobei α eine positive Konstante ist. Die anderen auftretenden Größen werden in den folgenden Unterpunkten genauer spezifiziert. Wir erinnern an die in §3 eingeführten Abkürzungen

$$\phi_j = \frac{\partial \Phi_j(F)}{\partial F} \quad (j = 1, 2).$$

3. Für $\phi: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ gilt

$$|\phi(\theta)|, |\theta\phi'(\theta)|, |\phi'(\theta)| \leq K. \quad (\text{FE3})$$

4. Eine Bedingung an Φ_1 , unter der sich der Existenzbeweis führen läßt, lautet

$$\Phi_1 \text{ wachse nahe Unendlich linear.} \quad (\text{FE4})$$

5. Von Φ_2 wird weniger verlangt, nämlich

$$\phi_2 = \frac{\partial \Phi_2(F)}{\partial F} \text{ sei global lipschitzstetig.} \quad (\text{FE5})$$

Außerdem wird gefordert, daß Konstanten $c, C > 0$ existieren mit

$$c|F|^2 - C \leq \Phi_2(F) \leq C(|F|^2 + 1) \text{ und } |\phi_2(F)| \leq C(|F| + 1). \quad (\text{FE6})$$

Man sollte im Auge behalten, daß Φ_2 für den Anwendungsfall martensitischer Phasenübergänge nicht konvex sein wird.

In §5 ist erläutert, wie man solche Funktionen $\Phi(\nabla u, \theta)$ mit mehreren symmetriebezogenen Minima gewinnen kann.

Aus der Form der freien Energie folgt die Gestalt des Spannungstensors: Es gilt

$$\sigma(\nabla u, \theta) = \frac{\partial \Phi(F, \theta)}{\partial F} = \phi(\theta)\phi_1(\nabla u) + \phi_2(\nabla u).$$

BEMERKUNG. Die eben genannten Voraussetzungen sind überwiegend „klassischer“ Natur, finden sich also in der einschlägigen Literatur. Wir wollen hier kurz die verschiedenen Bedingungen diskutieren.

Wachstumsbedingungen an die Temperatur wie hier (FE3) an $\phi(\theta)$ ergeben sich allgemein bei Problemen aus der Thermoviskoelastizität in mehreren Raumdimensionen. Die hier angegebenen Schranken finden sich in dieser Form auch in [Spr89] und [HZ92], dort für Energiefunktionale vom Landau-Ginzburg-Typ. Die in [HZ92] gegebene Motivation dieser Wachstumsschranke läßt sich *mutatis mutandis* auf den hier studierten Fall übertragen: Die Spannung $\sigma(\nabla u, \theta)$ nimmt mit steigender Temperatur zu. Da die viskosen Reibungseffekte Wärme erzeugen, könnte es bei polynomialem Wachstum von σ durch Rückkoppelung zu einem *blow-up* kommen (siehe etwa [Hen81]). — Die Bedingung (FE4) erscheint zunächst recht restriktiv. Überlegt man sich jedoch, daß diese Funktion im wesentlichen dazu dient, die freie Energie bei hoher Temperatur zu konvexifizieren, sieht man, daß die hier gestellten Bedingungen zulässige Annahmen für die Beschreibung martensitischer Phasenübergänge sind.

In [FD97] wird ein eng verwandtes viskoelastisches Problem betrachtet. Der hier präsentierte Existenzbeweis übernimmt wesentliche Argumentationen; bei festgehaltener Temperatur ließe sich die Existenz einer Lösung der Bewegungsgleichung auch zeigen, wenn die Bedingung (FE4) durch folgende schwächere Voraussetzung ersetzt wird:

Es gibt ein $L > 0$, so daß $(\phi_1(\bar{F}) - \phi_1(F)) : (\bar{F} - F) \geq -L |\bar{F} - F|^2$ (FE4'),
und die gleiche Modifikation für ϕ_2 in (FE5) vorgenommen wird:

$$\text{Es gibt ein } L > 0, \text{ so daß } (\phi_2(\bar{F}) - \phi_2(F)) : (\bar{F} - F) \geq -L |\bar{F} - F|^2. \quad (\text{FE5}')$$

Da wir zur Behandlung des gekoppelten Problems den Schauderschen Fixpunktsatz in einer einfachen (nicht mengenwertigen) Version verwenden, muß die Lösung der Bewegungsgleichung eindeutig bestimmt sein. In den Beweis der Eindeutigkeit der Lösung gehen (FE5) und globale Lipschitzstetigkeit von ϕ_1 ein. Alle Aussagen dieses Kapitels bis einschließlich Satz (4.16) bleiben richtig, wenn man unter den schwächeren Bedingungen (FE4') und (FE5') jedes Auftreten von $\max(\phi_1)$ und $\text{Lip}(\phi_2)$ durch L ersetzt.

Wünschenswert ist es, die Bedingungen (FE3) und (FE4) abzuschwächen. Hier bleibt für eine zukünftige mathematische Analyse noch viel zu tun.

Aus den Annahmen (FE3), (FE4) und (FE6) folgt, daß Konstanten $c', C' > 0$ existieren, so daß für jedes θ

$$c'|F|^2 - C' \leq \phi(\theta)\phi_1(F) + \phi_2(F) \leq C' (|F|^2 + 1) \quad (4.3)$$

ebenso gilt wie

$$|\phi(\theta)\phi_1(F) + \phi_2(F)| \leq C' (|F| + 1).$$

2. Bedingungen an die Anfangs- und Randdaten

Die Anfangsdaten sollen diesen Glattheitsbedingungen genügen:

$$g \in W^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n),$$

$$u_0 \in W_g^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n) := \{u \in W^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n) \mid u - g \in W_0^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)\},$$

$$v_0 \in L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n),$$

$$\theta_0 \in L^1(\Omega \rightarrow \mathbb{R}).$$

3. Resultierende Form des Gleichungssystems

Als nächstes setzen wir die definierende Gleichung des Spannungstensors

$$\sigma(\nabla u, \theta) = \frac{\partial \Phi(F, \theta)}{\partial F} = \phi(\theta)\phi_1(\nabla u) + \phi_2(\nabla u)$$

in (4.1)–(4.2) ein. Dabei besitzt der Term $\theta\sigma_\theta(\nabla u, \theta) : \nabla u_t$ aus Gleichung (4.2) die Gestalt $\theta\sigma_\theta(\nabla u, \theta) : \nabla u_t = \theta\phi'(\theta)\phi_1(\nabla u) : \nabla u_t$. Also ergibt sich, wenn zur Abkürzung noch die Notation $f(\theta) := \theta\phi'(\theta)$ eingeführt wird,

$$u_{tt} = \text{Div} (\phi(\theta)\phi_1(\nabla u) + \phi_2(\nabla u) + \nabla u_t) \quad \text{in } \Omega \times]0, T[, \quad (4.4a)$$

$$u = g \quad \text{auf } \partial\Omega \times [0, T[, \quad (4.4b)$$

$$u = u_0 \quad \text{in } \Omega \times \{0\}, \quad (4.4c)$$

$$u_t = v_0 \quad \text{in } \Omega \times \{0\}, \quad (4.4d)$$

$$\theta_t = \Delta\theta + f(\theta)\phi_1(\nabla u) : \nabla u_t + \nabla u_t : \nabla u_t \quad \text{in } \Omega \times]0, T[, \quad (4.5a)$$

$$\theta = 0 \quad \text{auf } \partial\Omega \times [0, T[, \quad (4.5b)$$

$$\theta = \theta_0 \quad \text{in } \Omega \times \{0\}. \quad (4.5c)$$

§4.3 Definition des Lösungsbegriffs

§4 hat das Ziel, die Existenz einer schwachen Lösung des Gleichungssystems (4.4)–(4.5) zu zeigen. In diesem Abschnitt präzisieren wir den Begriff der schwachen Lösung für den vorliegenden Fall; ein zentraler Punkt wird dabei die Behandlung der Wärmeleitungsgleichung mit Anfangsdaten aus $L^1(\Omega \rightarrow \mathbb{R})$ und rechter Seite aus $L^1(]0, T[\rightarrow L^1(\Omega \rightarrow \mathbb{R}))$ sein. Für Probleme dieser Art gibt es verschiedene Lösungswege. Wir stützen uns auf die Theorie der renormierten Lösungen. Da diese Methoden (noch) kein Allgemeingut sind, werden in zwei kurzen Abschnitten die wichtigsten Handwerkszeuge dieser Theorie vorgestellt: hier die zugrundeliegenden Definitionen, in §4.4 die zugehörige Existenztheorie. Mit dem Anwendungsfall der Gleichung (4.5) im Hinterkopf konzentrieren sich diese Exkurse auf parabolische Gleichungen. Eingeführt wurde das Konzept der renormierten Lösungen von Lions und DiPerna zur Behandlung der Boltzmann-Gleichung

[DL89b, DL89a]. In [Lio96] werden renormierte Lösungen auf ein System partieller Differentialgleichungen, nämlich die Rayleigh-Bénard-Gleichungen, angewendet. Weitere Quellen für das folgende sind beispielsweise [Bla93, BM97]. Wir stützen uns insbesondere auf [BR98, BG00].

Tragen wir also die zentralen Definitionen aus der Theorie der renormierten Lösungen für parabolische Gleichungen zusammen! Studiert wird das Problem

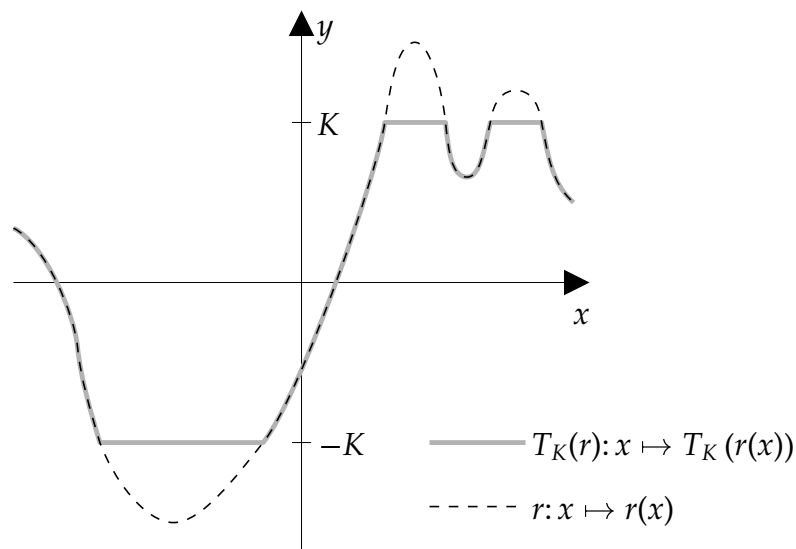
$$\begin{aligned} \theta_t - \Delta \theta &= H \text{ in } \Omega \times]0, T[, \\ \theta &= 0 \text{ auf } \partial \Omega \times]0, T[, \\ \theta &= \theta_0 \text{ in } \Omega \times \{0\}, \end{aligned} \quad (\text{P})$$

mit $H \in L^1(]0, T[\rightarrow L^1(\Omega \rightarrow \mathbb{R}))$ und $\theta_0 \in L^1(\Omega \rightarrow \mathbb{R})$.

Um renormierte Lösungen des Problems (P) definieren zu können, müssen wir die Kappungsfunktion zur Höhe $K \geq 0$ einführen,

$$T_K(r) := \max(\min(r, K), -K).$$

Im Bild:



(4.1) DEFINITION. (Renormierte Lösung)

Eine Funktion θ ist eine **renormierte Lösung** des Problems (P), wenn θ folgende Eigenschaften besitzt:

- (i) $\theta \in L^\infty(]0, T[\rightarrow L^1(\Omega \rightarrow \mathbb{R}))$,
- (ii) $T_K(\theta) \in L^2(]0, T[\rightarrow W_0^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}))$ für jedes $K \geq 0$,
- (iii) $\lim_{n \rightarrow +\infty} \iint_{\{(x,t) \mid n \leq |\theta(x,t)| \leq n+1\}} |\nabla \theta|^2 \, dy \, ds = 0$,

und außerdem für beliebiges $S \in C^\infty(\mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R})$, dessen Ableitung kompakten Träger besitzt (also $S' \in C_0^\infty(\mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R})$), die folgenden zwei Eigenschaften erfüllt sind:

- (iv) $S(\theta)_t - \operatorname{div} [S'(\theta)\nabla\theta] + S''(\theta)|\nabla\theta|^2 = HS'(\theta)$ in $\mathcal{D}'(Q)$,
- (v) $S(\theta) = S(\theta_0)$ in $\Omega \times \{0\}$.

BEMERKUNG. Renormierte Lösungen müssen also neben Regularitätsanforderungen ((i) und (ii) aus der Definition) auch die Abklingbedingung (iii) erfüllen. Bedingung (iv) bedarf noch der Motivation: Formal entsteht sie aus (P) durch Multiplikation mit $S'(\theta)$, denn ausgeschrieben lautet (iv)

$$\begin{aligned} - \int_0^T \int_\Omega S(\theta)\psi_t \, dx \, dt + \int_0^T \int_\Omega S'(\theta)\nabla\theta \cdot \nabla\psi \, dx \, dt + \int_0^T \int_\Omega S''(\theta)|\nabla\theta|^2 \psi \, dx \, dt \\ = \int_0^T \int_\Omega HS'(\theta)\psi \, dx \, dt \end{aligned}$$

für alle $\psi \in C_0^\infty(\Omega \times]0, T[\rightarrow \mathbb{R})$. In einem formalen Sinne ist dies die übliche schwache Formulierung mit speziellen Testfunktionen $\psi S'(\theta)$.

In [BR98] wird gezeigt, daß für $H \in L^1(]0, T[\rightarrow L^1(\Omega \rightarrow \mathbb{R}))$ und $\theta_0 \in L^1(\Omega \rightarrow \mathbb{R})$ eine eindeutig bestimmte renormierte Lösung θ existiert. In Abschnitt 4.4 wird darauf ausführlicher eingegangen.

BEMERKUNG. In unserer Anwendung wird die rechte Seite H der Wärmeleitungsgleichung von einer Temperatur $\hat{\theta}$ und u abhängen:

$$\theta_t - \Delta\theta = H(\hat{\theta}, u) \text{ in } \Omega \times]0, T[.$$

Um $H \in L^1(]0, T[\rightarrow L^1(\Omega \rightarrow \mathbb{R}))$ zu erreichen, zeigt eine oberflächliche Inspektion von $H(\hat{\theta}, u) := f(\hat{\theta})\phi_1(\nabla u) : \nabla u_t + \nabla u_t : \nabla u_t$, daß versucht werden sollte, $u \in W^{1,2}(]0, T[\rightarrow W^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n))$ als Regularität der Verschiebung zu erhalten. In Definition (4.2) spiegelt sich das wider. Der so erhaltene Lösungsraum ist physikalisch sinnvoll: Mehr als $u \in W^{1,2}(]0, T[\rightarrow W^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n))$ ist aus Sicht der Materialtheorie nicht zu erwarten; diese Regularität führt zu einer Behandlung der Temperatur mit Ortsregularität aus $L^1(\Omega \rightarrow \mathbb{R})$. Bei konstanter Wärmekapazität wie im vorliegenden Fall ist die Temperatur proportional zum Energieinhalt — und dafür ist $L^1(\Omega \rightarrow \mathbb{R})$ ein natürlicher Funktionenraum.

Nach diesen Vorbereitungen können wir den angestrebten Lösungsbegriff des zu untersuchenden Systems von Thermoviskoelastizitätsgleichungen geben:

(4.2) DEFINITION. (Schwache renormierte Lösung von (4.4)–(4.5))

Ein auf $\Omega \times]0, T[$ definiertes Paar (u, θ) ist eine **schwache renormierte Lösung von (4.4) und (4.5)**, wenn u und θ folgende Bedingungen erfüllen:

(i) *Regularität von u :*

$$u \in L^\infty \left(]0, T[\rightarrow W_g^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n) \right) \cap W^{1,\infty} \left(]0, T[\rightarrow L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n) \right) \quad (4.6) \\ \cap W^{1,2} \left(]0, T[\rightarrow W^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n) \right) \cap W^{2,2} \left(]0, T[\rightarrow W^{-1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n) \right),$$

(ii) *u ist eine schwache Lösung von (4.4) im folgenden Sinn:*

$$\int_0^T \int_\Omega [(\sigma(\nabla u, \theta) + \nabla u_t) : \nabla \zeta - u_t \cdot \zeta_t] \, dx \, dt = 0 \quad \forall \zeta \in C_0^\infty(\Omega \times]0, T[\rightarrow \mathbb{R}^n), \\ u = u_0 \quad \text{in } \Omega \times \{0\}, \\ u_t = v_0 \quad \text{in } \Omega \times \{0\},$$

(iii) *θ schließlich ist eine renormierte Lösung von (4.5).*

Wie bereits angekündigt, stellt der nächste Abschnitt die wichtigsten Eigenschaften renormierter Lösungen bereit.

§4.4 Bekannte Ergebnisse über renormierte Lösungen von (P)

Die hier zusammengetragenen Ergebnisse finden sich in [BR98] oder lassen sich mit den dort vorgestellten Techniken leicht beweisen (siehe auch [BG00] für Beweisskizzen).

(4.3) SATZ. (Existenz und Eindeutigkeit einer Lösung von (P))

Für $H \in L^1(]0, T[\rightarrow L^1(\Omega \rightarrow \mathbb{R}))$ und $\theta_0 \in L^1(\Omega \rightarrow \mathbb{R})$ existiert eine eindeutige renormierte Lösung θ des Problems (P); diese Lösung läßt sich abschätzen durch

$$\|\theta\|_{L^\infty(]0, T[\rightarrow L^1(\Omega \rightarrow \mathbb{R}))} \leq \|H\|_{L^1(]0, T[\rightarrow L^1(\Omega \rightarrow \mathbb{R}))} + \|\theta_0\|_{L^1(\Omega \rightarrow \mathbb{R})}. \quad (4.7)$$

Für jedes $L > 0$ und $r \geq 0$ existiert eine positive, von L und r unabhängige Konstante K , so daß

$$\int_0^T \int_\Omega |\nabla T_{L+r}(\theta) - \nabla T_r(\theta)|^2 \, dx \, dt \leq LK \left(\|H\|_{L^1(]0, T[\rightarrow L^1(\Omega \rightarrow \mathbb{R}))} + \|\theta_0\|_{L^1(\Omega \rightarrow \mathbb{R})} \right). \quad (4.8)$$

Für jedes $Q \in W^{1,\infty}(\Omega \rightarrow \mathbb{R})$ mit $Q(0) = 0$, dessen Ableitung Q' kompakten Träger besitzt, gilt mit $\tilde{Q}(r) := \int_0^r Q(s) \, ds$ für fast alle t in $]0, T[$

$$\int_\Omega \tilde{Q}(\theta)(t) \, dx - \int_\Omega \tilde{Q}(\theta_0)(t) \, dx + \int_0^t \int_\Omega Q'(\theta) |\nabla \theta|^2 \, dx \, ds = \int_0^t \int_\Omega HQ(\theta) \, dx \, ds. \quad (4.9)$$

BEMERKUNG. In der zitierten Arbeit [BR98] wird eine erheblich stärkere Aussage bewiesen. Unter anderem wird dort statt der Ableitung θ_t in (P) der Term $b(\theta)_t$ betrachtet; dabei ist b eine streng wachsende stetig differenzierbare Funktion mit $b(0) = 0$, die Wachstumsbedingungen genügen muß.

(4.4) SATZ. (Stabilität renormierter Lösungen)

Sei $(H^\varepsilon)_\varepsilon$ eine Folge aus $L^1(]0, T[\rightarrow L^1(\Omega \rightarrow \mathbb{R}))$ und $\theta_0 \in L^1(\Omega \rightarrow \mathbb{R})$. Mit θ^ε bezeichnen wir die eindeutige renormierte Lösung des Problems

$$\begin{aligned}\theta_t^\varepsilon - \Delta \theta^\varepsilon &= H^\varepsilon \text{ in } \Omega \times]0, T[, \\ \theta^\varepsilon &= 0 \text{ auf } \partial\Omega \times]0, T[, \\ \theta^\varepsilon &= \theta_0 \text{ in } \Omega \times \{0\}.\end{aligned}\tag{P^\varepsilon}$$

Dann gilt:

1. Ist $(H^\varepsilon)_\varepsilon$ eine in $L^1(]0, T[\rightarrow L^1(\Omega \rightarrow \mathbb{R}))$ beschränkte Folge, liegt die Folge $(\theta^\varepsilon)_\varepsilon$ für $1 \leq p < 1 + \frac{2}{n}$ in einer kompakten Teilmenge von $L^p(]0, T[\rightarrow L^p(\Omega \rightarrow \mathbb{R}))$.
2. Gilt für $\varepsilon \rightarrow 0$ die Konvergenz $H^\varepsilon \rightarrow H$ in $L^1(]0, T[\rightarrow L^1(\Omega \rightarrow \mathbb{R}))$, dann konvergiert eine Teilfolge von $(\theta^\varepsilon)_\varepsilon$ für $1 \leq p < 1 + \frac{2}{n}$ in $L^p(]0, T[\rightarrow L^p(\Omega \rightarrow \mathbb{R}))$ gegen die renormierte Lösung θ des Problems (P).

§4.5 Untersuchung der Bewegungsgleichung

Um den angestrebten Existenz- und Eindeutigkeitsbeweis führen zu können, verwenden wir ein Fixpunktargument; dabei tritt auch eine Entkoppelung der Bewegungsgleichung von der Wärmeleitungsgleichung auf. In diesem Abschnitt soll die Existenz einer Lösung der Bewegungsgleichung bei festgehaltener Temperatur gezeigt werden; er gibt mit einigen Modifikationen die Arbeit [FD97] wieder. In der vorliegenden Arbeit wurde versucht, den Beweis bis ins Detail auszuarbeiten. Vergleiche auch [KP92, Dem96, Rie99] für ähnlich gelagerte Probleme im Kontext von Young-Maßen.

1. Formulierung des Problems

Sei $\hat{\theta}$ ein beliebiges Element aus $L^1(]0, T[\rightarrow L^1(\Omega \rightarrow \mathbb{R}))$. Studiert wird das Anfangsrandwertproblem

$$\begin{aligned}u_{tt} &= \text{Div} \left(\phi(\hat{\theta})\phi_1(\nabla u) + \phi_2(\nabla u) + \nabla u_t \right) \quad \text{in } \Omega \times]0, T[, \\ u &= g \quad \text{auf } \partial\Omega \times [0, T[, \\ u &= u_0 \quad \text{in } \Omega \times \{0\}, \\ u_t &= v_0 \quad \text{in } \Omega \times \{0\}.\end{aligned}\tag{4.10}$$

2. Nützliche Hilfsmittel bei Semidiskretisierungen in der Zeit

Bevor die Existenz einer Lösung des obigen Problems bewiesen wird, stellen wir erst einige Werkzeuge bereit. Den Beginn machen zwei allgemeine Aussagen.

(4.5) LEMMA.

Sei $l \in \mathbb{N}$. Ist $\tilde{\Omega}$ ein offenes Gebiet im \mathbb{R}^m und gilt für $q \in]1, \infty[$ die Konvergenz $f_j \rightarrow 0$

schwach in $L^q(\tilde{\Omega}, \mathbb{R}^l)$, so gilt für jede kompakte Teilmenge Ψ von $L^q(\tilde{\Omega}, \mathbb{R}^l)$

$$\sup_{\psi \in \Psi} \left| \int_{\tilde{\Omega}} f_j(x) \cdot \psi(x) dx \right| \rightarrow 0 \text{ für } j \rightarrow \infty.$$

Beweis: Nach Definition der schwachen Konvergenz gilt für jedes $\psi \in L^q(\tilde{\Omega}, \mathbb{R}^l)$

$$\left| \int_{\tilde{\Omega}} f_j(x) \cdot \psi(x) dx \right| \rightarrow 0 \text{ für } j \rightarrow \infty.$$

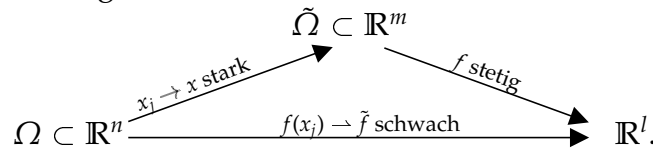
Aufgrund der Kompaktheit von Ψ gilt diese Aussage dann auch für das Supremum über alle $\psi \in \Psi$. \square

Das folgende Lemma ist eine Übung aus der Funktionalanalysis.

(4.6) LEMMA.

Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ beschränkt, $\tilde{\Omega} \subset \mathbb{R}^m$. Konvergiert eine Folge $(x_j)_{j \in \mathbb{N}}$ stark gegen x in $L^q(\Omega \rightarrow \tilde{\Omega})$ und ist $f: \tilde{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^l$ ($l \in \mathbb{N}$) stetig mit $f(x_j) \rightarrow \tilde{f}$ schwach in $L^p(\Omega, \mathbb{R}^l)$, so gilt $\tilde{f} = f(x)$ in $L^p(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^l)$.

Beweis: Wir betrachten folgende Situation:



Aus $x_j \rightarrow x$ stark in $L^q(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)$ folgt die Existenz einer wieder mit $(x_j)_{j \in \mathbb{N}}$ bezeichneten Teilfolge, die fast überall gegen x konvergiert. Aufgrund der Stetigkeit von f gilt dann für diese Teilfolge $f(x_j) \rightarrow f(x)$ fast überall. Daher und wegen $\text{meas}(\Omega) < \infty$ existiert nach dem Satz (A.8) von Egorov für jedes $\varepsilon > 0$ eine Menge $E_\varepsilon \subseteq \Omega$ mit $\text{meas}(E_\varepsilon) < \varepsilon$, so daß $f(x_j)$ auf dem Komplement E_ε^c von E_ε gleichmäßig gegen $f(x)$ konvergiert. Also gilt

$$\int_{E_\varepsilon^c} (f(x) - \tilde{f}) \cdot \zeta dx = \lim_{j \rightarrow \infty} \int_{E_\varepsilon^c} (f(x_j) - \tilde{f}) \cdot \zeta dx = 0 \quad \text{für alle } \zeta \in L^{p'}(\Omega, \mathbb{R}^l) \quad (4.11)$$

(die letzte Gleichheit folgt aus dem Umstand, daß

$$g \rightarrow \int_{E_\varepsilon^c} g \cdot \zeta dx$$

mit $\zeta \in L^{p'}(\Omega, \mathbb{R}^l)$ ein Funktional auf dem $L^p(\Omega, \mathbb{R}^l)$ ist und daher wegen $f(x_j) \rightarrow \tilde{f}$ schwach in $L^p(\Omega, \mathbb{R}^l)$

$$\int_{E_\varepsilon^c} (f(x_j) - \tilde{f}) \cdot \zeta dx \rightarrow 0$$

für $j \rightarrow \infty$ gilt). Mit $\varepsilon \rightarrow 0$ folgt aus (4.11) die Behauptung. \square

Zum Schluß dieses Unterabschnitts sammeln wir noch zwei Hilfsmittel, die speziell auf Beweise durch eine Semidiskretisierung in der Zeit zugeschnitten sind.

Ein solcher Beweis sieht typischerweise so aus: Zunächst wird die Existenz einer Lösung eines Näherungsproblems zu festen Zeitschritten gezeigt (im folgenden geschieht dies durch Lösung eines Variationsproblems); anschließend werden diese zeitunabhängigen Lösungen durch verschiedene Approximationen in der Zeit interpoliert (hier einmal stückweise konstant, einmal stückweise affin).

Wir betrachten die Zerlegung eines endlichen Zeitintervalls $[0, T]$. Die folgenden Definitionen entsprechen z.B. denen in [Tem85]. In [FD97] ist $[0, \infty[$ das zugrundeliegende Zeitintervall. — Die Schrittzahl N sei fest vorgegeben; die Schrittweite h ist dann definiert als $h := \frac{T}{N}$. Weiter sei für $j \in \{1, \dots, N\}$ das Zeitintervall $I_{h,j} :=](j-1)h, jh]$ definiert. Die charakteristische Funktion von $I_{h,j}$ wird mit $\chi^{h,j}$ bezeichnet.

(4.7) DEFINITION. (Stückweise konstante/affine Approximation)

Sei $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ offen und $w^{h,0}, \dots, w^{h,N}$ Funktionen aus $L^1_{\text{loc}}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)$. Die **stückweise konstante Approximation in der Zeit** ist für $t > 0$ definiert durch

$$w^h(x, t) := \sum_{j=1}^N \chi^{h,j}(t) w^{h,j}(x).$$

Analog ist die **stückweise affine Approximation in der Zeit** für $t > 0$ gegeben durch

$$\tilde{w}^h(x, t) := \sum_{j=1}^N \chi^{h,j}(t) \left(\left(j - \frac{t}{h} \right) w^{h,j-1}(x) + \left(\frac{t}{h} - (j-1) \right) w^{h,j}(x) \right);$$

außerdem setzen wir $w^h(x, 0) := \tilde{w}^h(x, 0) := w^{h,0}(x)$. Beide Approximationen sind Funktionen aus $L^1_{\text{loc}}([0, T] \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)$. Zur Notation: Als Faustregel gilt, daß die Tilde für stückweise affine Zeitapproximation steht; vergleiche die Bemerkung auf Seite 51.

Die stückweise affine Approximation ist besser differenzierbar; daher ist es in der Regel leichter, Konvergenzaussagen dafür zu gewinnen. Hat man solche Kenntnisse gewonnen, möchte man sie nach Möglichkeit auf die stückweise konstante Approximation übertragen. Das nächste Lemma stellt ein erstes Ergebnis in dieser Richtung bereit: Gezeigt wird, daß die beiden Approximationen im Grenzwert übereinstimmen.

(4.8) LEMMA. (Stückweise konstante und stückweise affine Approximation)

Seien zu festen Zeitpunkten $j = 0, 1, \dots, N$ Funktionen $w^{h,j} \in L^1_{\text{loc}}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)$ auf einem offenen Gebiet im \mathbb{R}^n gegeben. Dann gilt für die zugehörige stückweise konstante Approximation $w^h(x, t)$ und die stückweise affinen Approximation $\tilde{w}^h(x, t)$: Die Konvergenzen $w^h \rightharpoonup \tilde{w}$ und $\tilde{w}^h \rightharpoonup w$ schwach in $L^1_{\text{loc}}([0, T] \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)$ für $h \rightarrow 0$ implizieren $w = \tilde{w}$.

Beweis: Das Lemma ist [FD97, Lemma 2.4] entnommen; vergleiche auch [KP92, Lemma 6.3] für eine sehr ähnliche Aussage. Die gemeinsame Beweisidee ist, die Gleichheit der Limiten durch Testen mit glatten Funktionen zu zeigen. \square

Das nächste Lemma wird im Existenzbeweis mehrmals verwendet. Es treten zeitliche Approximationen von Elementen eines Banachraumes auf; für deren Vereinbarung ist in Definition (4.7) jeweils $w^{h,k}(x)$ durch $w^{h,k}$ zu ersetzen ($k = 0, \dots, N$). Beide Funktionen sind Elemente aus $L^1(]0, T[\rightarrow X)$. Vergleiche [FD97, Lemma 3.2] zur analogen Aussage für ein unbeschränktes Zeitintervall.

(4.9) LEMMA.

Sei X ein Banachraum und $w^{h,0}, \dots, w^{h,N}$ Elemente aus X , für die $\alpha > 0$ existiert, so daß

$$\sum_{j=1}^N h \left\| \frac{w^{h,j} - w^{h,j-1}}{h^\alpha} \right\|_X^2 \leq C \quad (4.12)$$

gilt. Dann gilt für deren stückweise konstante Zeitapproximation $w^h(t)$ und die stückweise affine Approximation $\tilde{w}^h(t)$ für alle $0 < t < T$ und alle $w \in L^2(]0, T[\rightarrow X)$ die Abschätzung

$$\int_0^t \|w^h - w\|_X^2 ds \leq 2 \int_0^t \|\tilde{w}^h - w\|_X^2 ds + \frac{2}{3} h^{2\alpha} C,$$

sofern die Integrale definiert sind.

Beweis: Sei $t \in I_{h,j}$. Nach der Definition der affinen Approximation ist

$$\tilde{w}^h(t) - w(t) = (w^{h,j} - w(t)) - \left(j - \frac{t}{h}\right) (w^{h,j} - w^{h,j-1}).$$

Vertauscht man den ersten Term der rechten Seite mit dem der linken Seite und geht zur Norm über, entsteht

$$\begin{aligned} \|w^{h,j} - w(t)\|_X^2 &= \left\| \tilde{w}^h(t) - w(t) + \left(j - \frac{t}{h}\right) (w^{h,j} - w^{h,j-1}) \right\|_X^2 \\ &\leq 2 \|\tilde{w}^h(t) - w(t)\|_X^2 + 2 \left|j - \frac{t}{h}\right|^2 \|w^{h,j} - w^{h,j-1}\|_X^2. \end{aligned}$$

Wir integrieren beide Seiten der Ungleichung über $I_{h,j}$:

$$\int_{I_{h,j}} \|w^{h,j} - w(t)\|_X^2 dt \leq 2 \int_{I_{h,j}} \|\tilde{w}^h(t) - w(t)\|_X^2 dt + \frac{2}{3} h \|w^{h,j} - w^{h,j-1}\|_X^2.$$

Bei Summation der Intervalle 1 bis N erhalten wir schließlich

$$\begin{aligned} \int_0^T \|w^h - w(t)\|_X^2 dt &\leq 2 \int_0^T \|\tilde{w}^h(t) - w(t)\|_X^2 dt + \frac{2}{3} h \sum_{j=1}^N \|w^{h,j} - w^{h,j-1}\|_X^2 \\ &\leq 2 \int_0^T \|\tilde{w}^h(t) - w(t)\|_X^2 dt + \frac{2}{3} h^{2\alpha} \sum_{j=1}^N h \left\| \frac{w^{h,j} - w^{h,j-1}}{h^\alpha} \right\|_X^2. \end{aligned}$$

\square

3. Behandlung des Zeitschrittproblems

Die Näherungslösungen zu festen Zeitpunkten mh mit $m = 1, \dots, N$ werden durch ein Minimierungsproblem definiert. Das zu minimierende Funktional besitzt die Gestalt

$$J^{h,j}[u] := \int_{\Omega} \left[\phi(\hat{\theta})\phi_1(\nabla u) + \phi_2(\nabla u) + \frac{1}{2h} \left| \nabla u - \nabla u^{h,j-1} \right|^2 + \frac{1}{2h^2} \left| u - 2u^{h,j-1} + u^{h,j-2} \right|^2 \right] dx. \quad (4.13)$$

Die Minimierer dieses Variationsproblems genügen der Euler-Lagrange-Gleichung

$$\int_{\Omega} \left[\left(\phi(\hat{\theta})\phi_1(\nabla u) + \phi_2(\nabla u) + \frac{1}{h} \left(\nabla u - \nabla u^{h,j-1} \right) \right) : \nabla \zeta + \frac{1}{h^2} \left(u - 2u^{h,j-1} + u^{h,j-2} \right) \cdot \zeta \right] dx = 0 \text{ für alle } \zeta \in C_0^\infty(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n); \quad (4.14)$$

das ist eine zeitdiskretisierte Version der Ausgangsgleichung (4.10) in schwacher Formulierung.

Insgesamt werden zu festen Zeitschritten hm mit $m = -1, \dots, N$ Näherungen an die Lösung vereinbart:

$$\begin{aligned} u^{h,-1} &:= u_0 - hv_0, \\ u^{h,0} &:= u_0, \\ u^{h,j} &:= \text{Minimierer des Funktionals } J^{h,j} \text{ aus } W_g^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n) \quad (j = 1, \dots, N). \end{aligned} \quad (4.15)$$

(Die Definition von $u^{h,0}$ ist naheliegend; da die zweite Zeitableitung u_{tt} in der Diskretisierung die Näherungswerte zu zwei vorausgehenden Zeitpunkten benötigt, wird $u^{h,-1}$ durch einen Eulerschritt rückwärts besorgt, um $u^{h,1}$ definieren zu können.) Zunächst muß man nachweisen, daß die Näherungslösungen zu festen Zeitpunkten tatsächlich existieren, sprich: daß das Funktional $J^{h,j}$ auf $W_g^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)$ sein Infimum annimmt.

(4.10) LEMMA.

Für geeignetes $h > 0$, $u^{h,j-1} \in W_g^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)$ und $u^{h,j-2} \in L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)$ nimmt $J^{h,j}$ sein Infimum auf $W_g^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)$ an.

Beweis: Nach den direkten Methoden der Variationsrechnung ist zu zeigen, daß das Funktional $J^{h,j}$ auf $W_g^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)$ wohldefiniert, nach unten beschränkt, schwach folgenhalbstetig von unten ist und daß eine Minimalfolge eine in $W_g^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)$ konvergente Teilfolge besitzt.

Das Funktional nimmt offensichtlich Werte in $\mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ an, ist also wohldefiniert.

Aufgrund der Stetigkeit der Spurabbildung ist $W_g^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)$ eine (stark) abgeschlossene Teilmenge von $W^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)$; da $W_g^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)$ zudem konvex ist, ist $W_g^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)$ schwach abgeschlossen in $W^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)$ (siehe z.B. [DS88, Theorem V.3.13]). Daher reicht es, die schwache Folgenhalbstetigkeit von unten von $J^{h,j}$ auf $W^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)$ zu zeigen. Hinreichend und notwendig dafür ist die Quasikonvexität des Integranden (vergleiche [Dac89, Chapter 4]). Probleme bereitet der Term $\Phi^{\hat{\theta}}(\nabla u) := \phi(\hat{\theta})\Phi_1(\nabla u) + \Phi_2(\nabla u)$, da dieser nicht quasikonvex (und erst recht nicht konvex) ist. Die zentrale Beobachtung aus [FD97] zeigt jedoch, daß die Kombination von $\Phi^{\hat{\theta}}(\nabla u)$ und einem Teil des diskretisierten Viskositätstermes konvex ist. Setzen wir

$$\tilde{\Phi}^{\hat{\theta}} := \Phi^{\hat{\theta}}(F) + \frac{1}{2h} |F|^2,$$

ergibt einfaches Nachrechnen unter Beachtung von (FE3)–(FE5)

$$\left(\nabla \tilde{\Phi}^{\hat{\theta}}(\bar{F}) - \nabla \tilde{\Phi}^{\hat{\theta}}(F) \right) : (\bar{F} - F) \geq \left(-\max(\phi) \max(\phi_1) - \text{Lip}(\phi_2) + \frac{1}{h} \right) |\bar{F} - F|^2,$$

also ist $\tilde{\Phi}^{\hat{\theta}}$ konvex für

$$h \leq \frac{1}{\max(\phi) \max(\phi_1) + \text{Lip}(\phi_2)}.$$

Man kann das Funktional $J^{h,j}$ mit Hilfe von $\tilde{\Phi}_2$ schreiben als

$$\begin{aligned} J^{h,j}[u] = & \int_{\Omega} \left[\tilde{\Phi}^{\hat{\theta}}(\nabla u) - \frac{1}{h} \nabla u : \nabla u^{h,j-1} + \frac{1}{2h} |\nabla u^{h,j-1}|^2 \right. \\ & \left. + \frac{1}{2h^2} |u - 2u^{h,j-1} + u^{h,j-2}|^2 \right] dx. \end{aligned}$$

Für $\tilde{\Phi}^{\hat{\theta}}$ wurde die Konvexität eben durch Differenzieren gezeigt, also ist der zugehörige Integrand schwach folgenhalbstetig von unten. Für die verbleibenden Terme ist dieselbe Aussage offensichtlich. Daher ist die Abbildung $u \mapsto J^{h,j}[u]$ schwach folgenhalbstetig von unten auf $W^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)$ als Kombination schwach von unten folgenhalbstetiger Funktionale.

Zu beweisen bleibt, daß jede Minimalfolge eine in $W_g^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)$ konvergente Teilfolge besitzt. Dazu wird gezeigt, daß das Funktional $J^{h,j}$ aus (4.13) auf $W_g^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)$ koerziv ist. Um dies zu sehen, werden die Beträge nach unten durch eine Konstante abgeschätzt. Da sich $\tilde{\Phi}^{\hat{\theta}}$ von $\Phi^{\hat{\theta}}$ nur durch einen positiven Zusatzterm unterscheidet, folgt mit (4.3)

$$c' \|\nabla u\|_{L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n})}^2 - C' \leq \int_{\Omega} \tilde{\Phi}^{\hat{\theta}}(\nabla u) dx.$$

Für den Term $\int_{\Omega} \frac{1}{h} \nabla u : \nabla u^{h,j-1}$ gilt nach der Hölderschen Ungleichung

$$\int_{\Omega} \frac{1}{h} \nabla u : \nabla u^{h,j-1} \, dx \leq \frac{1}{h} \|\nabla u\|_{L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n})} \|\nabla u^{h,j}\|_{L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n})}.$$

Für große Werte wird $\|\nabla u\|_{L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n})}$ von $\|\nabla u\|_{L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n})}^2$ dominiert. Insgesamt ergibt sich, daß positive Konstanten c'' und C'' existieren mit

$$c'' \|\nabla u\|_{L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n})}^2 - C'' < J^{h,j}[u].$$

Da vorausgesetzt wird, daß $\partial\Omega$ ein Lipschitzrand ist, können wir die Poincaré-Ungleichung anwenden und erhalten

$$\|u - g\|_{L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)}^2 \leq K \left(\|\nabla u\|_{L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n})}^2 + 1 \right);$$

beide Abschätzungen zusammengenommen ergeben die Koerzivität in $W^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)$. Aufgrund der Reflexivität dieses Raumes liefert ein Standardsatz der Variationsrechnung [Dac89, Theorem 3.1.1] die Existenz eines Minimums. \square

Als nächstes wird für $u \in W^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)$ und $v \in L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)$ ein Energiefunktional definiert:

$$E[u, v] := \int_{\Omega} \left[\phi(\hat{\theta}) \Phi_1(\nabla u) + \Phi_2(\nabla u) + \frac{1}{2} |v|^2 \right] \, dx. \quad (4.16)$$

Das nächste Lemma enthält die zentrale Energieabschätzung dieses Abschnitts. Als Notation wird dazu für $h > 0$ und $j \in \{1, \dots, N\}$

$$v^{h,j} := \frac{1}{h} \left(u^{h,j} - u^{h,j-1} \right) \quad (4.17)$$

vereinbart.

(4.11) LEMMA. (Diskrete Energiegleichung)

Für die durch (4.15) definierten $u^{h,j}$ und die in (4.17) eingeführten Geschwindigkeiten $v^{h,j}$ gilt: Für festes $\varepsilon \in]0, 1[$ existiert ein $h_0 = h_0(\varepsilon)$, so daß für alle $h \leq h_0$ folgende diskrete Energieabschätzung gilt:

$$\max_{j \in \{1, \dots, N\}} E[u^{h,j}, v^{h,j}] + \sum_{j=1}^N h \int_{\Omega} \left[(1 - \varepsilon) \left| \nabla v^{h,j} \right|^2 + \frac{1}{2} \left| \frac{v^{h,j} - v^{h,j-1}}{\sqrt{h}} \right|^2 \right] \, dx \leq E[u_0^h, v_0^h]$$

Beweis: Untersucht wird die Energieänderung innerhalb eines Zeitschrittes. Wieder ist die Idee, die nichtkonvexe Größe $\Phi^{\hat{\theta}}(\nabla u) := \phi(\hat{\theta}) \Phi_1(\nabla u) + \Phi_2(\nabla u)$ mit einem weiteren Term zu einer konvexen Größe zu kombinieren. Differenzieren zeigt, daß die Abbildung

$$F \mapsto \Phi^{\hat{\theta}}(F) + \frac{\varepsilon}{h} \left| F - \nabla u^{h,j} \right|^2$$

für

$$h \leq h_0(\varepsilon) := \frac{2\varepsilon}{\max(\phi) \max(\phi_1) + \text{Lip}(\phi_2)}$$

nach (FE3)–(FE5) konvex ist. Daraus ergibt sich für alle $x \in \Omega$ und $F, \bar{F} \in M^{n \times n}$ die im nächsten Schritt verwendete Abschätzung

$$\begin{aligned} \phi^{\hat{\theta}}(\bar{F}) + \frac{\varepsilon}{h} \left| \bar{F} - \nabla u^{h,j}(x) \right|^2 - \left(\phi^{\hat{\theta}}(F) + \frac{\varepsilon}{h} \left| F - \nabla u^{h,j}(x) \right|^2 \right) \\ \leq \left(\phi(\hat{\theta})\phi_1(\bar{F}) + \phi_2(\bar{F}) + \frac{2\varepsilon}{h} \left(\bar{F} - \nabla u^{h,j}(x) \right) \right) : (\bar{F} - F). \end{aligned}$$

Damit kann man die Energiedifferenz zwischen zwei aufeinanderfolgenden Zeitschritten folgendermaßen abschätzen ($j \in \{0, \dots, N-1\}$):

$$\begin{aligned} \Delta E^{h,j} &:= E[u^{h,j+1}, v^{h,j+1}] - E[u^{h,j}, v^{h,j}] \\ &= \int_{\Omega} \left[\phi(\hat{\theta})\phi_1(\nabla u^{h,j+1}) + \phi_2(\nabla u^{h,j+1}) + \frac{\varepsilon}{h} \left| \nabla u^{h,j+1} - \nabla u^{h,j} \right|^2 \right. \\ &\quad \left. - \phi(\hat{\theta})\phi_1(\nabla u^{h,j}) - \phi_2(\nabla u^{h,j}) - \frac{\varepsilon}{h} \left| \nabla u^{h,j} - \nabla u^{h,j} \right|^2 \right. \\ &\quad \left. - \frac{\varepsilon}{h} \left| \nabla u^{h,j+1} - \nabla u^{h,j} \right|^2 + \frac{1}{2} \left(\left| v^{h,j+1} \right|^2 - \left| v^{h,j} \right|^2 \right) \right] dx \\ &\leq \int_{\Omega} \left[\left(\phi(\hat{\theta})\phi_1(\nabla u^{h,j+1}) + \phi_2(\nabla u^{h,j+1}) + \frac{2\varepsilon}{h} \left(\nabla u^{h,j+1} - \nabla u^{h,j} \right) \right) \right. \\ &\quad \left. : \left(\nabla u^{h,j+1} - \nabla u^{h,j} \right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{\varepsilon}{h} \left| \nabla u^{h,j+1} - \nabla u^{h,j} \right|^2 + \frac{1}{2} \left(\left| v^{h,j+1} \right|^2 - \left| v^{h,j} \right|^2 \right) \right] dx \\ &= \int_{\Omega} \left[\left(\phi(\hat{\theta})\phi_1(\nabla u^{h,j+1}) + \phi_2(\nabla u^{h,j+1}) + \frac{1}{h} \left(\nabla u^{h,j+1} - \nabla u^{h,j} \right) \right) \right. \\ &\quad \left. : \left(\nabla u^{h,j+1} - \nabla u^{h,j} \right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{1-\varepsilon}{h} \left| \nabla u^{h,j+1} - \nabla u^{h,j} \right|^2 + \frac{1}{2} \left(\left| v^{h,j+1} \right|^2 - \left| v^{h,j} \right|^2 \right) \right] dx \\ &=: A. \end{aligned}$$

Mit $u^{h,j+1} \in W_{\mathcal{G}}^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)$ ist $\nabla u^{h,j+1} \in L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n})$; nach (4.3) ist

$$\phi(\hat{\theta})\phi_1(\nabla u^{h,j+1}) + \phi_2(\nabla u^{h,j+1}) \in L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n}).$$

Damit kann $\zeta := u^{h,j+1} - u^{h,j}$ als Funktion aus $L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)$ als Testfunktion verwendet werden[‡] und die letzte Zeile läßt sich unter Ausnützung der Euler-Lagrange

‡ Genaugenommen sind die Testfunktionen ζ als glatt angenommen, also als Elemente aus $C_0^\infty(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)$. Durch ein Approximationsargument sieht man dann aber, daß auch alle nichtglatten Funktionen zum Testen verwendet werden können, die sich durch glatte Funktionen nähern lassen und für die die auftretenden Integrale definiert sind.

Gleichung (4.14) umformen zu

$$\begin{aligned}
A &= \int_{\Omega} \left[-\frac{1}{h} \left(u^{h,j+1} - u^{h,j} - \left(u^{h,j} - u^{h,j-1} \right) \right) \cdot \frac{1}{h} \left(u^{h,j+1} - u^{h,j} \right) \right. \\
&\quad \left. - \frac{1-\varepsilon}{h} \left| \nabla u^{h,j+1} - \nabla u^{h,j} \right|^2 + \frac{1}{2} \left(\left| v^{h,j+1} \right|^2 - \left| v^{h,j} \right|^2 \right) \right] dx \\
&= \int_{\Omega} \left[- \left(v^{h,j+1} - v^{h,j} \right) \cdot v^{h,j+1} - \frac{1-\varepsilon}{h} \left| \nabla u^{h,j+1} - \nabla u^{h,j} \right|^2 \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2} \left(\left| v^{h,j+1} \right|^2 - \left| v^{h,j} \right|^2 \right) \right] dx \\
&= \int_{\Omega} \left[-\frac{1-\varepsilon}{h} \left| \nabla u^{h,j+1} - \nabla u^{h,j} \right|^2 - \frac{1}{2} \left| v^{h,j+1} - v^{h,j} \right|^2 \right] dx.
\end{aligned}$$

Summation über j von 0 bis $N-1$ liefert wegen

$$\frac{1-\varepsilon}{h} \left| \nabla u^{h,j+1} - \nabla u^{h,j} \right|^2 = h(1-\varepsilon) \left| \frac{\nabla u^{h,j+1} - \nabla u^{h,j}}{h} \right|^2 = h(1-\varepsilon) \left| \nabla v^{h,j+1} \right|^2$$

die Behauptung. \square

Die Behandlung des Zeitschrittproblems ist damit abgeschlossen.

4. Approximationen in der Zeit

Jetzt führen wir die zu Beginn dieses Abschnitts angekündigten Interpolationen in der Zeit ein. Zur Erinnerung: $I_{h,j}$ war definiert als $I_{h,j} :=](j-1)h, jh]$, die zugehörige charakteristische Funktion wird mit $\chi^{h,j}$ bezeichnet.

Folgende auf $I_{h,j}$ stückweise konstanten bzw. stückweise affinen, auf $\Omega \times [0, T]$ definierten Approximationen werden verwendet (für $t = 0$ wird wie in Definition (4.7) die jeweilige Funktion zum Index $j = 0$ genommen):

$$w^h(x, t) := \sum_{j=1}^N \chi^{h,j}(t) \frac{v^{h,j}(x) - v^{h,j-1}(x)}{h} \quad (\text{Treppenfunktion für } u_{tt}),$$

$$v^h(x, t) := \sum_{j=1}^N \chi^{h,j}(t) v^{h,j}(x) \quad (\text{Treppenfunktion für } u_t),$$

$$\tilde{v}^h(x, t) := \sum_{j=1}^N \chi^{h,j}(t) \left(\frac{1}{h} \left(v^{h,j}(x) - v^{h,j-1}(x) \right) (t - jh) + v^{h,j}(x) \right) \quad (\text{Stammfunktion von } w^h),$$

$$u^h(x, t) := \sum_{j=1}^N \chi^{h,j}(t) u^{h,j}(x) \quad (\text{Treppenfunktion für } u),$$

$$\tilde{u}^h(x, t) := \sum_{j=1}^N \chi^{h,j}(t) \left(v^{h,j}(x) (t - jh) + u^{h,j}(x) \right) \quad (\text{Stammfunktion von } v^h).$$

BEMERKUNG. Die hier verwendete Notation lehnt sich an die in [Rie99] an. Insbesondere sind alle Größen, die eine Stammfunktion sind, durch eine Tilde gekennzeichnet. Man sieht leicht, daß es sich dabei genau um die stückweise affinen Interpolationen in der Zeit handelt.

Mit dieser Notation läßt sich die Euler-Lagrange-Gleichung (4.14) kürzer fassen als

$$\int_{\Omega} \left[\left(\phi(\hat{\theta})\phi_1(\nabla u^h) + \phi_2(\nabla u^h) + \nabla v^h \right) : \nabla \zeta + w^h \cdot \zeta \right] dx = 0 \quad (4.18)$$

für alle t mit $0 < t < T$ und alle $\zeta \in C_0^\infty(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)$.

Integration von Gleichung (4.18) in der Zeit gibt für $\zeta \in C^\infty]0, t[\rightarrow C_0^\infty(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)$

$$\begin{aligned} \int_0^t \int_{\Omega} \left[\left(\phi(\hat{\theta})\phi_1(\nabla u^h) + \phi_2(\nabla u^h) + \nabla v^h \right) : \nabla \zeta - \tilde{v}^h \cdot \zeta_t \right] dx ds \\ + \int_{\Omega} \tilde{v}^h \cdot \zeta|_{s=t} dx - \int_{\Omega} \tilde{v}^h \cdot \zeta|_{s=0} dx = 0 \text{ für alle } 0 < t < T. \end{aligned} \quad (4.19)$$

(4.12) LEMMA. (Schwache Konvergenz der Näherungslösungen)

Nach Auswahl geeigneter Teilfolgen konvergieren die aufgelisteten Folgen für jedes $0 < t < T$ in den spezifizierten Räumen und definieren dadurch den angegebenen Grenzwert:

$$\begin{aligned} u^h &\overset{*}{\rightharpoonup} u \text{ in } L^\infty]0, t[\rightarrow W^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n), \\ \tilde{u}^h &\overset{*}{\rightharpoonup} \tilde{u} \text{ in } L^\infty]0, t[\rightarrow W^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n) \cap W^{1,\infty}]0, t[\rightarrow L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n) \cap \\ &W^{1,2}]0, t[\rightarrow W^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n), \\ v^h &\overset{*}{\rightharpoonup} v \text{ in } L^\infty]0, t[\rightarrow L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n) \cap L^2]0, t[\rightarrow W^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n), \\ \tilde{v}^h &\overset{*}{\rightharpoonup} \tilde{v} \text{ in } L^\infty]0, t[\rightarrow L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n) \cap L^2]0, t[\rightarrow W^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n) \cap \\ &W^{1,2}]0, t[\rightarrow W^{-1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n), \\ w^h &\overset{*}{\rightharpoonup} w \text{ in } L^2]0, t[\rightarrow W^{-1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n), \\ \phi_1(\nabla u^h) &\overset{*}{\rightharpoonup} \overline{\phi_1} \text{ in } L^\infty]0, t[\rightarrow L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n}), \\ \phi_2(\nabla u^h) &\overset{*}{\rightharpoonup} \overline{\phi_2} \text{ in } L^\infty]0, t[\rightarrow L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n}). \end{aligned} \quad (4.20)$$

Beweis: Die Konvergenzen von u^h und \tilde{u}^h in $L^\infty]0, t[\rightarrow W^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)$ folgen aus dem Term $\phi_2(\nabla u)$ in der Definition des Energiefunktionals (4.16) und (FE6); zu \tilde{u}^h : Die Konvergenz in $W^{1,\infty}]0, t[\rightarrow L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)$ ergibt sich aus der Beschränktheit des Termes $\frac{1}{2}|v|^2$ im Energiefunktional (4.16) und der Gleichheit $\tilde{u}_t^h = v^h$; letzteres und die Schranke von $\sum_{j=1}^N h \int_{\Omega} \left[(1 - \varepsilon) |\nabla v^{h,j}|^2 \right] dx$ nach Lemma (4.11) ziehen die Konvergenz in $W^{1,2}]0, t[\rightarrow W^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)$ nach sich.

Zur Konvergenz der Geschwindigkeitsapproximationen: Die beiden Konvergenzen in $L^\infty]0, t[\rightarrow L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)$ und $L^2]0, t[\rightarrow W^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)$ sind Folgerungen des bisher Bewiesenen und der Identität $\tilde{u}_t^h = v^h$. Die dritte Konvergenz von \tilde{v}^h ist

eine Konsequenz der Konvergenz von w^h ; letztere gewinnt man durch Einsetzen der bisherigen Erkenntnisse in die Differentialgleichung:

$$\begin{aligned} \int_0^t \|w^h\|_{W^{-1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)}^2 ds &= \int_0^t \left\| \operatorname{Div} \left(\phi(\hat{\theta})\phi_1(\nabla u^h) + \phi_2(\nabla u^h) + \nabla v^h \right) \right\|_{W^{-1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)}^2 ds \\ &= \int_0^t \left\| \phi(\hat{\theta})\phi_1(\nabla u^h) + \phi_2(\nabla u^h) + \nabla v^h \right\|_{L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n})}^2 ds \\ &\leq \int_0^t K \left(\left\| \nabla u^h \right\|_{L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n})}^2 + \left\| \nabla v^h \right\|_{L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n})}^2 + 1 \right) ds \\ &\leq K. \end{aligned}$$

Die Konvergenz von $\phi_1(\nabla u^h)$ und $\phi_2(\nabla u^h)$ ergibt sich aus der Beschränktheit von $\nabla u^h(t)$ in $L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n})$ und (FE4) bzw. (FE6). \square

BEMERKUNG. Aufgrund der Wachstumsbedingung (FE4) ließe sich die Konvergenz von $\phi_1(\nabla u^h)$ verschärfen; wir haben jedoch keine Verwendung dafür.

Die nächste Aussage ist eine Folgerung aus Lemma (4.8).

(4.13) LEMMA.

Die in Lemma (4.12) erhaltenen Limiten u und \tilde{u} für die Verschiebung bzw. v und \tilde{v} für die Verschiebungsgeschwindigkeit stimmen jeweils überein: $u = \tilde{u}$ und $v = \tilde{v} = \tilde{u}_t$. Insbesondere gilt

$$\begin{aligned} u &\in L^\infty \left(]0, T[\rightarrow W_g^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n) \right) \cap W^{1,\infty} \left(]0, T[\rightarrow L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n) \right) \\ &\cap W^{1,2} \left(]0, T[\rightarrow W^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n) \right) \cap W^{2,2} \left(]0, T[\rightarrow W^{-1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n) \right), \end{aligned}$$

und u erfüllt für alle $0 < t < T$ und alle Testfunktionen ζ in $C^\infty \left(]0, t[\rightarrow C_0^\infty(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n) \right)$ die Identität

$$\int_0^t \int_\Omega \left[\left(\phi(\hat{\theta})\overline{\phi_1} + \overline{\phi_2} + \nabla u_t \right) : \nabla \zeta - u_t \cdot \zeta_t \right] dx ds - \int_\Omega u_t \cdot \zeta|_{s=t} dx - \int_\Omega u_t \cdot \zeta|_{s=0} dx = 0 \quad (4.21)$$

sowie die Anfangsbedingungen

$$\begin{aligned} u &= u_0 \quad \text{in } \Omega \times \{0\}, \\ u_t &= v_0 \quad \text{in } \Omega \times \{0\}. \end{aligned}$$

Beweis: Die Gleichheit der Limiten ergibt sich aus Lemma (4.8) — die Voraussetzungen dafür, $u^h \rightharpoonup u$ und $\tilde{u}^h \rightharpoonup \tilde{u}$ schwach in $L_{\text{loc}}^1 \left(]0, T[\rightarrow L_{\text{loc}}^1(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n) \right)$ sowie $v^h \rightharpoonup v$ und $\tilde{v}^h \rightharpoonup \tilde{v}$ schwach in $L_{\text{loc}}^1 \left(]0, T[\rightarrow L_{\text{loc}}^1(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n) \right)$, folgen mit der Hölderschen Ungleichung aus den Konvergenzen nach Lemma (4.12). Die Regularität $u \in W^{2,2} \left(]0, T[\rightarrow W^{-1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n) \right)$ folgt mit $\tilde{u}_t = v$ aus der Regularität von

v nach Lemma (4.12). Da $W_g^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)$ schwach abgeschlossen in $W^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)$ ist, liegt u als schwacher Limes ebenfalls in $W_g^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)$, erfüllt also die Randbedingung $u - g \in W_0^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)$. Gleichung (4.21) ist eine unmittelbare Folgerung aus Lemma (4.12) und Gleichung (4.19). Alle Approximationen erfüllen definitionsgemäß die Anfangsbedingungen, also auch deren Grenzwert. \square

BEMERKUNG. Damit ist schon „fast“ gezeigt, daß u eine schwache Lösung des Systems (4.10) ist; der Beweis ist vollendet, wenn man zeigt, daß

$$\phi(\hat{\theta})\overline{\phi_1} + \overline{\phi_2} = \phi(\hat{\theta})\phi_1(\nabla u) + \phi_2(\nabla u)$$

gilt. Dieser Grenzübergang in der Nichtlinearität bereitet jedoch einige Mühe. In [FD97, Example 2.1] ist erklärt, daß diese Schwierigkeiten problemimmanent sind. Zu deren Überwindung sind noch weitere Überlegungen erforderlich — gezeigt wird die starke Konvergenz der Verzerrung ∇u . Damit folgt die zu beweisende Identität aus Lemma (4.6). Als Vorbereitung dient die folgende Aussage.

(4.14) LEMMA. (Starke Konvergenz der Geschwindigkeit)

Ist h der Index der Teilfolge, für die die in Lemma (4.12) aufgeführten Konvergenzen erfüllt sind, konvergieren \tilde{v} und $v = \tilde{u}_t$ im Grenzübergang $h \rightarrow 0$ für jedes $0 < t < T$ stark in $L^2([0, t[\rightarrow L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n))$.

Beweis: Der Beweis folgt dem üblichen roten Faden für Existenzbeweise durch Semidiskretisierung in der Zeit. Zunächst gilt nach Lemma (4.12) $\tilde{v}^h \rightharpoonup \tilde{v} = u_t$ schwach in $L^2([0, t[\rightarrow W^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)) \cap W^{1,2}([0, t[\rightarrow W^{-1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n))$. Daraus und aus

$$X_0 := W^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n) \xrightarrow{\text{kompakt}} X := L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n) \xrightarrow{\text{stetig}} X_1 := W^{-1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)$$

folgt mit Satz (A.9) ($p := q := 2$) die starke Konvergenz in $L^2([0, t[\rightarrow L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n))$ (für die kompakte Einbettung nach Rellich wird verwendet, daß $\partial\Omega$ ein Lipschitzrand ist, vgl. beispielsweise [EG92, Theorem 4.6.1]).

Damit wissen wir über die Konvergenz der stückweise affinen Interpolation Bescheid; das nährt die Hoffnung, daß die stückweise konstante Interpolation ebenfalls (im gleichen Funktionenraum, gegen den gleichen Grenzwert) stark konvergiert. Kombiniert man

$$\sup_{0 < h \leq h_0} \sum_{j=1}^N h \left\| \frac{v^{h,j} - v^{h,j-1}}{\sqrt{h}} \right\|_{L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)}^2 < \infty$$

aus der Energieabschätzung in Lemma (4.11) mit Lemma (4.9) (mit $X := L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)$, $w^{h,j} := v^{h,j}$, $w := u_t$ und $\alpha = \frac{1}{2}$), erhält man

$$\int_0^t \left\| v^h - u_t \right\|_{L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)}^2 ds < 2 \int_0^t \left\| \tilde{v}^h - u_t \right\|_{L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)}^2 ds + \eta(h)$$

mit $\eta(h) \rightarrow 0$ für $h \rightarrow 0$. Aus dem bereits Bewiesenen folgt die behauptete Konvergenz von v^h gegen u_t . \square

Damit ergibt sich die für den Existenzbeweis zentrale Proposition.

(4.15) PROPOSITION. (Starke Konvergenz der Verzerrung)

Sei wiederum h der Index der Teilfolge, für die die in Lemma (4.12) genannten Konvergenzen erfüllt sind. Dann konvergieren ∇u^h und $\nabla \tilde{u}^h$ für $h \rightarrow 0$ für alle $0 < t < T$ sogar stark in $L^2([0, t[\rightarrow L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n}))$.

Beweis: Es wird neben (4.21) eine zweite zeitintegrierte Variante der Euler-Lagrange-Gleichung (4.18) verwendet; der springende Punkt ist, daß diese sich auf Testfunktionen $\zeta \in L^1([0, T[\rightarrow W_0^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n))$ ausweiten läßt, also keine Differenzierbarkeitsforderungen hinsichtlich der Zeit stellt. Der Grund ist, daß die stückweise konstante Näherung u^h (oder genauer gesagt Approximationen davon) als Testfunktion verwendet wird. Statt des Terms ζ_t tritt der zugehörige Differenzenquotient auf. Für $0 < t < T$ lautet die neue Variante der Euler-Lagrange-Gleichung somit

$$\int_0^t \int_\Omega \left[\left(\phi(\hat{\theta})\phi_1(\nabla u^h) + \phi_2(\nabla u^h) + \nabla v^h \right) : \nabla \zeta - v^h \cdot \frac{\zeta(\cdot + h) - \zeta}{h} \right] dx ds \\ + \int_{t-h}^t \int_\Omega v^h \cdot \zeta(\cdot + h) dx ds - \int_{-h}^0 \int_\Omega v_0^h \cdot \zeta(\cdot + h) dx ds = 0.$$

Wählt man in dieser Gleichung $u^h - u$ als Testfunktion, testet Gleichung (4.21) mit $\tilde{u}^h - u$ (dort muß die Testfunktion ja in der Zeit differenzierbar sein) und subtrahiert, erhält man

$$\int_0^t \int_\Omega \left[\left(\phi(\hat{\theta})\phi_1(\nabla u^h) + \phi_2(\nabla u^h) \right) : \left(\nabla u^h - \nabla u \right) \right. \\ \left. - \left(\phi(\hat{\theta})\overline{\phi_1} + \overline{\phi_2} \right) : \left(\nabla \tilde{u}^h - \nabla u \right) \right] dx ds \tag{4.22} \\ + \int_0^t \int_\Omega \left[\nabla v^h : \left(\nabla u^h - \nabla u \right) - \nabla u_t : \left(\nabla \tilde{u}^h - \nabla u \right) \right] dx ds \\ - \int_0^t \int_\Omega \left[v^h \cdot \left(v^h(\cdot + h) - \frac{u(\cdot + h) - u}{h} \right) + u_t \cdot \left((\tilde{u}^h)_t - u_t \right) \right] dx ds \\ + \int_\Omega \left[\int_{t-h}^t \left[v^h \cdot \left(u^h(\cdot + h) - u(\cdot + h) \right) \right] ds - u_t(t) \cdot \left(\tilde{u}^h(t) - u(t) \right) \right] dx \\ - \int_\Omega \left[v_0^h \cdot \left(\int_{-h}^0 \left[u^h(\cdot + h) - u(\cdot + h) \right] ds - \left(u_0^h(t) - u_0 \right) \right) \right] dx = 0.$$

Die auftretenden Terme lassen sich genau wie in [FD97] abschätzen; für das erste Integral wird die Abschätzung hier explizit ausgeführt. Dabei bezeichnet $\eta(h)$ Ausdrücke, die für $h \rightarrow 0$ gleichmäßig gegen Null gehen. Vor der eigentlichen Rechnung sollen die verschiedenen Umformungen erläutert werden: Die erste Abschätzung gilt aufgrund der Lipschitzstetigkeit, die zweite Ungleichung ergibt sich

aus Lemma (4.5) mit $\tilde{\Omega} := Q$, $q := 2$ und für den einen Fall $f_j := \nabla u^h - \nabla u$ und

$$\Psi := \left\{ \chi_Q \left(\phi(\hat{\theta})\phi_1(\nabla u) + \phi_2(\nabla u) \right) \mid 0 \leq t \leq T \right\}$$

beziehungsweise $f_j := \nabla \tilde{u}^h - \nabla u$ und

$$\Psi := \left\{ \chi_Q \left(\phi(\hat{\theta})\overline{\phi_1} + \overline{\phi_2} \right) \mid 0 \leq t \leq T \right\}$$

im zweiten Fall; die dritte Abschätzung schließlich ist eine Anwendung von Lemma (4.9) (mit $X := L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n})$, $w^{h,j} := \nabla u^{h,j}$, $w := \nabla u$ und $\alpha = 1$; die diskrete Energieabschätzung aus Lemma (4.11) garantiert für diesen Fall die Gültigkeit von (4.12)). Also gilt

$$\begin{aligned} & \int_0^t \int_{\Omega} \left[\left(\phi(\hat{\theta})\phi_1(\nabla u^h) + \phi_2(\nabla u^h) \right) : \left(\nabla u^h - \nabla u \right) \right. \\ & \quad \left. - \left(\phi(\hat{\theta})\overline{\phi_1} + \overline{\phi_2} \right) : \left(\nabla \tilde{u}^h - \nabla u \right) \right] dx ds \\ &= \int_0^t \int_{\Omega} \left[\left(\phi(\hat{\theta})\phi_1(\nabla u^h) + \phi_2(\nabla u^h) - \left(\phi(\hat{\theta})\phi_1(\nabla u) + \phi_2(\nabla u) \right) \right) \right. \\ & \quad : \left(\nabla u^h - \nabla u \right) + \left(\phi(\hat{\theta})\phi_1(\nabla u) + \phi_2(\nabla u) \right) : \left(\nabla u^h - \nabla u \right) \\ & \quad \left. - \left(\phi(\hat{\theta})\overline{\phi_1} + \overline{\phi_2} \right) : \left(\nabla \tilde{u}^h - \nabla u \right) \right] dx ds \\ &\geq -K \int_0^t \int_{\Omega} \left| \nabla u^h - \nabla u \right|^2 dx ds \\ & \quad - \sup_{t \in]0, T[} \left| \int_Q \chi_Q \left(\phi(\hat{\theta})\phi_1(\nabla u) + \phi_2(\nabla u) \right) : \left(\nabla u^h - \nabla u \right) dx ds \right| \\ & \quad - \sup_{t \in]0, T[} \left| \int_Q \chi_Q \left(\phi(\hat{\theta})\overline{\phi_1} + \overline{\phi_2} \right) : \left(\nabla \tilde{u}^h - \nabla u \right) dx ds \right| \\ &\geq -K \int_0^t \int_{\Omega} \left| \nabla u^h - \nabla u \right|^2 dx ds + \eta(h) \\ &\geq -2K \int_0^t \int_{\Omega} \left| \nabla \tilde{u}^h - \nabla u \right|^2 dx ds + \eta(h). \end{aligned}$$

Bezeichnet man die weiteren Terme in (4.22) der Reihe nach mit T_2, \dots, T_5 , so lassen sich die in [FD97] bewiesenen Abschätzungen wortwörtlich übertragen (zu beachten ist, daß die Notation in [FD97] genau umgekehrt ist — dort kennzeichnet die Tilde stückweise konstante Funktionen). Man erhält

$$T_2 \leq \frac{1}{2} \int_{\Omega} \left| \nabla \tilde{u}^h(t) - \nabla u(t) \right|^2 dx - \frac{1}{2} \int_{\Omega} \left| \nabla \tilde{u}^h(0) - \nabla u(0) \right|^2 dx + \eta(h)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2} \partial_t \int_0^t \int_{\Omega} \left| \nabla \tilde{u}^h(s) - \nabla u(s) \right|^2 dx ds - \frac{1}{2} \int_{\Omega} \left| \nabla \tilde{u}^h(0) - \nabla u(0) \right|^2 dx + \eta(h), \\
|T_3| &\leq \eta(h), \\
|T_4| &\leq \eta(h), \\
|T_5| &\leq \eta(h).
\end{aligned}$$

Aufräumen ergibt

$$\begin{aligned}
\partial_t \int_0^t \int_{\Omega} \left| \nabla \tilde{u}^h(s) - \nabla u(s) \right|^2 dx ds &\leq \int_{\Omega} \left| \nabla \tilde{u}^h(0) - \nabla u(0) \right|^2 dx \\
&\quad + 4K \int_0^t \int_{\Omega} \left| \nabla \tilde{u}^h(s) - \nabla u(s) \right|^2 dx ds + \eta(h).
\end{aligned}$$

Mit der Gronwallschen Ungleichung folgt

$$\int_0^t \int_{\Omega} \left| \nabla \tilde{u}^h(s) - \nabla u(s) \right|^2 dx ds \leq \frac{e^{4KT}}{4K} \left(\int_{\Omega} \left| \nabla \tilde{u}^h(0) - \nabla u(0) \right|^2 dx + \eta(h) \right).$$

Der Grenzübergang $h \rightarrow 0$ liefert wegen $\eta(h) \rightarrow 0$ die Behauptung für die stückweise affine Näherung. Ein erneuter Vergleich der stückweise affinen mit der stückweise konstanten Näherung nach Lemma (4.9) (mit $X := L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n})$, $w^{hj} := \nabla u^{hj}$, $\alpha := 1$) gibt die Behauptung für ∇u^h . \square

Nun können wir die Früchte abernten:

(4.16) SATZ. (Globale Existenz einer Lösung der Bewegungsgleichung)

Ist Ω ein offenes, beschränktes und nichtleeres Gebiet im \mathbb{R}^n ($n = 2$ oder $n = 3$) mit Lipschitzrand und erfüllen die Anfangs- und Randdaten die Bedingungen aus Abschnitt 4.2, dann existiert unter den Voraussetzungen (FE1)–(FE6) eine schwache Lösung der Bewegungsgleichung (4.10) im Sinne des in Definition (4.2) für u eingeführten Lösungsbegriffs.

BEMERKUNG. Bis zu diesem Punkt wurde die Lipschitzstetigkeit des Spannungstensors als Funktion der Verzerrung nicht verwendet: Würde man (FE4) durch (FE4') und (FE5) durch (FE5') ersetzen, ließe sich die bisherige Argumentation mit minimalen Modifikationen führen. Vergleiche die Bemerkung in Abschnitt 4.2.

Beweis: Fast die ganze Aussage ist schon in Lemma (4.13) gezeigt. Offen ist dort nur noch der Nachweis der „fehlenden“ Identität

$$\phi(\hat{\theta})\bar{\phi}_1 + \bar{\phi}_2 = \phi(\hat{\theta})\phi_1(\nabla u) + \phi_2(\nabla u).$$

Diese Gleichheit folgt aber unmittelbar aus Proposition (4.15) und Lemma (4.6). \square

(4.17) SATZ. (Eindeutigkeit der Lösung)

Die Lösung des Systems (4.10) nach Satz (4.16) ist eindeutig bestimmt.

Beweis: Seien u, \bar{u} zwei Lösungen von (4.10). Sei $\sigma^{\hat{\theta}}(F) := \phi(\hat{\theta})\phi_1(F) + \phi_2(F)$. Bildet man für u und \bar{u} die Differenz in (4.10), testet mit $\bar{u} - u$ und integriert über Ort und Zeit, erhält man

$$\begin{aligned} & \partial_t \frac{1}{2} \left(\int_0^t \int_{\Omega} |\nabla \bar{u} - \nabla u|^2 \, dx \, ds + \int_{\Omega} |\bar{u}(t) - u(t)|^2 \, dx \right) \\ &= - \int_0^t \int_{\Omega} \left(\sigma^{\hat{\theta}}(\nabla \bar{u}) - \sigma^{\hat{\theta}}(\nabla u) \right) : (\nabla \bar{u} - \nabla u) \, dx \, ds + \int_0^t \int_{\Omega} |\bar{u}_t - u_t|^2 \, dx \, ds \\ &\leq \text{Lip}(\sigma^{\hat{\theta}}) \int_0^t \int_{\Omega} |\nabla \bar{u} - \nabla u|^2 \, dx \, ds + \int_0^t \int_{\Omega} |\bar{u}_t - u_t|^2 \, dx \, ds. \end{aligned}$$

Geht man ebenso vor, testet aber mit $\bar{u}_t - u_t$, erhält man

$$\begin{aligned} & \partial_t \frac{1}{2} \int_0^t \int_{\Omega} |\bar{u} - u|^2 \, dx \, ds \\ &= - \int_0^t \int_{\Omega} \left(\sigma^{\hat{\theta}}(\nabla \bar{u}) - \sigma^{\hat{\theta}}(\nabla u) \right) : (\nabla \bar{u}_t - \nabla u_t) \, dx \, ds - \int_0^t \int_{\Omega} |\nabla \bar{u}_t - \nabla u_t|^2 \, dx \, ds \\ &\leq \text{KLip}(\sigma^{\hat{\theta}}) \int_0^t \int_{\Omega} |\nabla \bar{u} - \nabla u|^2 \, dx \, ds. \end{aligned}$$

Addiert man diese beiden Ungleichungen und wendet auf die resultierende Abschätzung die Gronwallsche Ungleichung an, ergibt sich $\bar{u} = u$. \square

§4.6 Behandlung des gekoppelten Problems

In diesem Abschnitt beweisen wir ein Existenzresultat für das gekoppelte System. Die Aussage lautet wie folgt:

(4.18) SATZ. (Existenz einer Lösung von (4.4)–(4.5))

Sei Ω ein offenes, beschränktes und nichtleeres Gebiet im \mathbb{R}^n ($n = 2$ oder $n = 3$) mit Lipschitzrand. Erfüllen die Anfangs- und Randdaten die Bedingungen aus Abschnitt 4.2 und sind die Voraussetzungen (FE1)–(FE6) erfüllt, so existiert eine schwache renormierte Lösung des Systems (4.4)–(4.5).

Beweis: Der Beweis beruht auf einem Fixpunktargument. Sei $\hat{\theta}$ ein beliebiges Element aus $L^1(]0, T[\rightarrow L^1(\Omega \rightarrow \mathbb{R}))$. Wir betrachten zuerst das Problem

$$\begin{aligned} u_{tt} &= \text{Div} \left(\phi(\hat{\theta})\phi_1(\nabla u) + \phi_2(\nabla u) + \nabla u_t \right) \quad \text{in } \Omega \times]0, T[, \\ u &= g \quad \text{auf } \partial\Omega \times [0, T[, \\ u &= u_0 \quad \text{in } \Omega \times \{0\}, \end{aligned} \tag{4.23}$$

$$u_t = v_0 \quad \text{in } \Omega \times \{0\}.$$

Die Überlegungen aus Abschnitt 4.5 (Sätze (4.16) und (4.17)) zeigen, daß dieses Problem eine eindeutige Lösung \hat{u} mit folgender Regularität besitzt:

$$\begin{aligned} \hat{u} \in L^\infty \left(]0, T[\rightarrow W_g^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n) \right) \cap W^{1,\infty} \left(]0, T[\rightarrow L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n) \right) \\ \cap W^{1,2} \left(]0, T[\rightarrow W^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n) \right) \cap W^{2,2} \left(]0, T[\rightarrow W^{-1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n) \right). \end{aligned} \quad (4.24)$$

Multipliziert man Gleichung (4.23) mit \hat{u}_t und integriert über Ort und Zeit, erhält man

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \int_{\Omega} |\hat{u}_t(t)|^2 dx + \int_0^t \int_{\Omega} |\nabla \hat{u}_t|^2 dx ds + \int_{\Omega} \Phi_2(\nabla \hat{u})(t) dx \\ = - \int_0^t \int_{\Omega} \phi(\hat{\theta}) \phi_1(\nabla \hat{u}) : \nabla \hat{u}_t dx ds + \frac{1}{2} \int_{\Omega} |\hat{u}_t(0)|^2 dx + \int_{\Omega} \Phi_2(\nabla \hat{u})(0) dx \end{aligned}$$

für fast alle t in $]0, T[$.

Nach (FE6) existieren positive Konstanten c und C , so daß folgende Abschätzungen erfüllt sind:

$$c |\nabla \hat{u}(t)|^2 - C < \Phi_2(\nabla \hat{u})(t) \quad \text{und} \quad \Phi_2(\nabla \hat{u})(0) < C \left(|\nabla \hat{u}(0)|^2 + 1 \right).$$

Damit ergibt sich

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \int_{\Omega} |\hat{u}_t(t)|^2 dx + \int_0^t \int_{\Omega} |\nabla \hat{u}_t|^2 dx ds + c \int_{\Omega} |\nabla \hat{u}(t)|^2 dx \\ \leq - \int_0^t \int_{\Omega} \phi(\hat{\theta}) \phi_1(\nabla \hat{u}) : \nabla \hat{u}_t dx ds + \frac{1}{2} \|v_0\|_{L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)}^2 + C \|u_0\|_{W^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)}^2 + K \end{aligned} \quad (4.25)$$

für fast alle t in $]0, T[$.

Nach (FE4) ist $\phi_1(\nabla \hat{u})$ beschränkt. Mit der Youngschen Ungleichung läßt sich damit die erste Größe auf der rechten Seite in den Griff bekommen:

$$- \int_0^t \int_{\Omega} \phi(\hat{\theta}) \phi_1(\nabla \hat{u}) : \nabla \hat{u}_t dx ds \leq K \int_0^t \int_{\Omega} |\phi(\hat{\theta})|^2 dx ds + \frac{1}{2} \int_0^t \int_{\Omega} |\nabla \hat{u}_t|^2 dx ds. \quad (4.26)$$

Die Kombination von (4.25) und (4.26) führt auf

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \int_{\Omega} |\hat{u}_t(t)|^2 dx + \frac{1}{2} \int_0^t \int_{\Omega} |\nabla \hat{u}_t|^2 dx ds + c \int_{\Omega} |\nabla \hat{u}(t)|^2 dx \\ \leq K \int_0^t \int_{\Omega} |\phi(\hat{\theta})|^2 dx ds + \frac{1}{2} \|v_0\|_{L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)}^2 + C \|u_0\|_{W^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)}^2 + K \end{aligned} \quad (4.27)$$

für fast alle t in $]0, T[$.

Bildet man jetzt das Supremum über t und beachtet, daß aus einer Ungleichung der Form $a(t) + b(t) \leq c(t)$ für positive Terme $a(t)$ und $b(t)$ durch Supremumbildung $\sup_t a(t) + \sup_t b(t) \leq 2 \sup_t c(t)$ folgt, erhält man die Abschätzung

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \|\hat{u}_t\|_{L^\infty(]0, T[\rightarrow L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n))}^2 + \frac{1}{2} \|\nabla \hat{u}_t\|_{L^2(]0, T[\rightarrow L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n}))}^2 + c \|\nabla \hat{u}\|_{L^\infty(]0, T[\rightarrow L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n}))}^2 \\ \leq K \left[\|\phi(\hat{\theta})\|_{L^2(]0, T[\rightarrow L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}))}^2 + \|\vartheta_0\|_{L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)}^2 + \|u_0\|_{W^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)}^2 + 1 \right] \leq K. \end{aligned}$$

Wendet man die Poincaré-Ungleichung

$$\|\hat{u} - g\|_{L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)}^2 \leq K \left(\|\nabla \hat{u}\|_{L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n})}^2 + 1 \right)$$

an, ergibt sich

$$\frac{1}{2} \|\hat{u}_t\|_{L^\infty(]0, T[\rightarrow L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n))}^2 + \frac{1}{2} \|\nabla \hat{u}_t\|_{L^2(]0, T[\rightarrow L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n}))}^2 + \|\hat{u}\|_{L^\infty(]0, T[\rightarrow W^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n))}^2 \leq K. \quad (4.28)$$

Jetzt wird die stetige Abhängigkeit der Lösung \hat{u} von $\hat{\theta}$ gezeigt. Das Vorgehen ähnelt dem im Beweis von Satz (4.17): Man startet hier mit zwei verschiedenen Temperaturen $\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2$ in (4.23) und bezeichnet die daraus gewonnenen Lösungen mit \hat{u}_1 und \hat{u}_2 ; anschließend bildet man die Differenz der beiden Gleichungen, multipliziert zunächst mit $\hat{u}_1 - \hat{u}_2$ und integriert über Ort und Zeit. Man erhält

$$\begin{aligned} \partial_t \frac{1}{2} \left(\int_{\Omega} |\hat{u}_1(t) - \hat{u}_2(t)|^2 dx + \int_0^t \int_{\Omega} |\nabla \hat{u}_1 - \nabla \hat{u}_2|^2 dx ds \right) \quad (4.29) \\ = - \int_0^t \int_{\Omega} \left(\phi(\hat{\theta}_1) \phi_1(\nabla \hat{u}_1) - \phi(\hat{\theta}_2) \phi_1(\nabla \hat{u}_2) \right) : (\nabla \hat{u}_1 - \nabla \hat{u}_2) dx ds \\ - \int_0^t \int_{\Omega} \left(\phi_2(\nabla \hat{u}_1) - \phi_2(\nabla \hat{u}_2) \right) : (\nabla \hat{u}_1 - \nabla \hat{u}_2) dx ds \\ + \int_0^t \int_{\Omega} |\partial_t \hat{u}_1 - \partial_t \hat{u}_2|^2 dx ds \\ \leq \left| \int_0^t \int_{\Omega} \left(\phi(\hat{\theta}_1) - \phi(\hat{\theta}_2) \right) \phi_1(\nabla \hat{u}_1) : (\nabla \hat{u}_1 - \nabla \hat{u}_2) \right. \\ \left. + \phi(\hat{\theta}_2) \left(\phi_1(\nabla \hat{u}_1) - \phi_1(\nabla \hat{u}_2) \right) : (\nabla \hat{u}_1 - \nabla \hat{u}_2) dx ds \right| \\ + \text{Lip}(\phi_2) \int_0^t \int_{\Omega} |\nabla \hat{u}_1 - \nabla \hat{u}_2|^2 dx ds + \int_0^t \int_{\Omega} |\partial_t \hat{u}_1 - \partial_t \hat{u}_2|^2 dx ds \\ \leq K \int_0^t \int_{\Omega} \left| \phi(\hat{\theta}_1) - \phi(\hat{\theta}_2) \right|^2 dx ds + \frac{1}{2} \int_{\Omega} |\nabla \hat{u}_1 - \nabla \hat{u}_2|^2 dx ds \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \text{KLip}(\phi_1) \int_0^t \int_{\Omega} |\nabla \hat{u}_1 - \nabla \hat{u}_2|^2 \, dx \, ds \\
& + \text{Lip}(\phi_2) \int_0^t \int_{\Omega} |\nabla \hat{u}_1 - \nabla \hat{u}_2|^2 \, dx \, ds + \int_0^t \int_{\Omega} |\partial_t \hat{u}_1 - \partial_t \hat{u}_2|^2 \, dx \, ds \\
& \leq K \int_0^t \int_{\Omega} |\phi(\hat{\theta}_1) - \phi(\hat{\theta}_2)|^2 \, dx \, ds + K \int_0^t \int_{\Omega} |\nabla \hat{u}_1 - \nabla \hat{u}_2|^2 \, dx \, ds \\
& \quad + \int_0^t \int_{\Omega} |\partial_t \hat{u}_1 - \partial_t \hat{u}_2|^2 \, dx \, ds
\end{aligned}$$

für fast alle t in $]0, T[$ (die erste Ungleichung basiert auf (FE5), die zweite auf der Youngschen Ungleichung, (FE3) und (FE4)).

Wir wiederholen dieses Vorgehen jetzt mit der Testfunktion $\partial_t \hat{u}_1 - \partial_t \hat{u}_2$. In der folgenden Rechnung stammt die Identität aus der Differentialgleichung; die erste Abschätzung danach verwendet (FE5) und die Youngsche Ungleichung. Im nächsten Schritt gehen dann (FE3), (FE4) und die Youngsche Ungleichung ein.

$$\begin{aligned}
& \partial_t \frac{1}{2} \int_0^t \int_{\Omega} |\partial_t \hat{u}_1 - \partial_t \hat{u}_2|^2 \, dx \, ds \tag{4.30} \\
& \leq \partial_t \frac{1}{2} \int_0^t \int_{\Omega} |\partial_t \hat{u}_1 - \partial_t \hat{u}_2|^2 \, dx \, ds + \frac{1}{2} \int_0^t \int_{\Omega} |\nabla \partial_t \hat{u}_1 - \nabla \partial_t \hat{u}_2|^2 \, dx \, ds \\
& = - \int_0^t \int_{\Omega} \left(\phi(\hat{\theta}_1) \phi_1(\nabla \hat{u}_1) - \phi(\hat{\theta}_2) \phi_1(\nabla \hat{u}_2) \right) : (\nabla \partial_t \hat{u}_1 - \nabla \partial_t \hat{u}_2) \, dx \, ds \\
& \quad - \int_0^t \int_{\Omega} \left(\phi_2(\nabla \hat{u}_1) - \phi_2(\nabla \hat{u}_2) \right) : (\nabla \partial_t \hat{u}_1 - \nabla \partial_t \hat{u}_2) \, dx \, ds \\
& \quad - \frac{1}{2} \int_0^t \int_{\Omega} |\nabla \partial_t \hat{u}_1 - \nabla \partial_t \hat{u}_2|^2 \, dx \, ds \\
& \leq \left| \int_0^t \int_{\Omega} \left(\phi(\hat{\theta}_1) - \phi(\hat{\theta}_2) \right) \phi_1(\nabla \hat{u}_1) : (\nabla \partial_t \hat{u}_1 - \nabla \partial_t \hat{u}_2) \right. \\
& \quad \left. + \phi(\hat{\theta}_2) \left(\phi_1(\nabla \hat{u}_1) - \phi_1(\nabla \hat{u}_2) \right) : (\nabla \partial_t \hat{u}_1 - \nabla \partial_t \hat{u}_2) \, dx \, ds \right| \\
& \quad + \text{KLip}(\phi_2) \int_0^t \int_{\Omega} |\nabla \hat{u}_1 - \nabla \hat{u}_2|^2 \, dx \, ds - \frac{1}{4} \int_0^t \int_{\Omega} |\nabla \partial_t \hat{u}_1 - \nabla \partial_t \hat{u}_2|^2 \, dx \, ds \\
& \leq K \int_0^t \int_{\Omega} |\phi(\hat{\theta}_1) - \phi(\hat{\theta}_2)|^2 \, dx \, ds + \frac{1}{16} \int_0^t \int_{\Omega} |\nabla \partial_t \hat{u}_1 - \nabla \partial_t \hat{u}_2|^2 \, dx \, ds \\
& \quad + \text{KLip}(\phi_1) \int_0^t \int_{\Omega} |\nabla \hat{u}_1 - \nabla \hat{u}_2|^2 \, dx \, ds + \frac{1}{16} \int_0^t \int_{\Omega} |\nabla \partial_t \hat{u}_1 - \nabla \partial_t \hat{u}_2|^2 \, dx \, ds \\
& \quad + \text{KLip}(\phi_2) \int_0^t \int_{\Omega} |\nabla \hat{u}_1 - \nabla \hat{u}_2|^2 \, dx \, ds - \frac{1}{4} \int_0^t \int_{\Omega} |\nabla \partial_t \hat{u}_1 - \nabla \partial_t \hat{u}_2|^2 \, dx \, ds \\
& \leq K \int_0^t \int_{\Omega} |\phi(\hat{\theta}_1) - \phi(\hat{\theta}_2)|^2 \, dx \, ds + K \int_0^t \int_{\Omega} |\nabla \hat{u}_1 - \nabla \hat{u}_2|^2 \, dx \, ds
\end{aligned}$$

für fast alle t in $]0, T[$.

Jetzt werden (4.29) und (4.30) addiert; die zweite Ungleichung verwendet $|\phi| < K$, die dritte $|\phi'| < K$.

$$\begin{aligned}
& \partial_t \frac{1}{2} \left(\int_{\Omega} |\hat{u}_1(t) - \hat{u}_2(t)|^2 dx \right. \\
& \quad \left. + \int_0^t \int_{\Omega} |\nabla \hat{u}_1 - \nabla \hat{u}_2|^2 dx ds + \int_0^t \int_{\Omega} |\partial_t \hat{u}_1 - \partial_t \hat{u}_2|^2 dx ds \right) \\
& \leq K \int_0^t \int_{\Omega} \left| \phi(\hat{\theta}_1) - \phi(\hat{\theta}_2) \right|^2 dx ds \\
& \quad + K \int_0^t \int_{\Omega} |\nabla \hat{u}_1 - \nabla \hat{u}_2|^2 dx ds + \int_0^t \int_{\Omega} |\partial_t \hat{u}_1 - \partial_t \hat{u}_2|^2 dx ds \\
& \leq K \int_0^t \int_{\Omega} \left| \phi(\hat{\theta}_1) - \phi(\hat{\theta}_2) \right| dx ds \\
& \quad + K \int_0^t \int_{\Omega} |\nabla \hat{u}_1 - \nabla \hat{u}_2|^2 dx ds + \int_0^t \int_{\Omega} |\partial_t \hat{u}_1 - \partial_t \hat{u}_2|^2 dx ds \\
& \leq K \int_0^t \int_{\Omega} \left| \hat{\theta}_1 - \hat{\theta}_2 \right| dx ds \\
& \quad + K \int_0^t \int_{\Omega} |\nabla \hat{u}_1 - \nabla \hat{u}_2|^2 dx ds + \int_0^t \int_{\Omega} |\partial_t \hat{u}_1 - \partial_t \hat{u}_2|^2 dx ds
\end{aligned}$$

für fast alle t in $]0, T[$.

Mit der Gronwallsche Ungleichung sieht man, daß die Lösung \hat{u} stetig von $\hat{\theta}$ abhängt. Insbesondere ist die Abbildung

$$\hat{\theta} \mapsto \nabla \hat{u}$$

stetig als Abbildung von $L^1(]0, T[\rightarrow L^1(\Omega \rightarrow \mathbb{R}))$ in $L^2(]0, T[\rightarrow L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n}))$; aus der zweiten Zeile von (4.30) liest man ab, daß auch die Abbildung

$$\hat{\theta} \mapsto \nabla \hat{u}_t$$

stetig von $L^1(]0, T[\rightarrow L^1(\Omega \rightarrow \mathbb{R}))$ in $L^2(]0, T[\rightarrow L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n))$ ist, da auf der linken Seite ein nichtnegativer Ausdruck auftritt — partielle Ableitung und Zeitintegral heben sich auf — und auf der rechten Seite Größen auftreten, von denen gerade gezeigt wurde, daß sie sich nach oben durch $|\hat{\theta}_1 - \hat{\theta}_2|$ abschätzen lassen.

Nutzt man die erhaltenen Abschätzungen aus, ergibt sich leicht eine Schranke der rechten Seite der Wärmeleitungsgleichung in der $L^1(]0, T[\rightarrow L^1(\Omega \rightarrow \mathbb{R}))$ -Norm:

$$\left\| f(\hat{\theta}) \phi_1(\nabla \hat{u}) : \nabla \hat{u}_t + \nabla \hat{u}_t : \nabla \hat{u}_t \right\|_{L^1(]0, T[\rightarrow L^1(\Omega \rightarrow \mathbb{R}))} \quad (4.31)$$

$$\begin{aligned} &\leq K \left[\|u_0\|_{W^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)}^2 + \|v_0\|_{L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)}^2 + \|f(\hat{\theta})\|_{L^2([0,T[\rightarrow L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}))}^2 \right] \\ &\leq K \left[\|u_0\|_{W^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)}^2 + \|v_0\|_{L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)}^2 + 1 \right] \leq K \end{aligned}$$

mit einer von $\|\hat{\theta}\|_{L^1([0,T[\rightarrow L^1(\Omega \rightarrow \mathbb{R}))}$ unabhängiger Konstante K .

Der nächste Schritt ist klar: Wir setzen die gewonnene Lösung \hat{u} und $\hat{\theta}$ in die rechte Seite der Gleichung (4.5) ein, lösen diese und bezeichnen die eindeutige Lösung mit θ :

$$\begin{aligned} \theta_t &= \Delta\theta + f(\hat{\theta})\phi_1(\nabla\hat{u}) : \nabla\hat{u}_t + \nabla\hat{u}_t : \nabla\hat{u}_t \quad \text{in } \Omega \times]0, T[, \\ \theta &= 0 \quad \text{auf } \partial\Omega \times]0, T[, \\ \theta &= \theta_0 \quad \text{in } \Omega \times \{0\} \end{aligned} \tag{4.32}$$

(weil die rechte Seite in $L^1([0, T[\rightarrow L^1(\Omega \rightarrow \mathbb{R}))$ liegt, garantiert Satz (4.3) die Existenz einer eindeutigen Lösung).

Da der Beweis mit dem Schauderschen Fixpunktsatz geführt werden soll, wird jetzt eine Funktion Ψ eingeführt als die Abbildung, die der „Starttemperatur“ $\hat{\theta}$ die eben gewonnene (und konstruktionsgemäß von $\hat{\theta}$ abhängige) Lösung θ zuordnet. Wir müssen zeigen, daß die Abbildung Ψ stetig und kompakt ist.

Untersuchen wir zuerst die Stetigkeit von Ψ : wie eben gesehen, sind die Abbildungen $\hat{\theta} \mapsto \nabla\hat{u}_t$ und $\hat{\theta} \mapsto \nabla\hat{u}$ stetig als Abbildungen des $L^1([0, T[\rightarrow L^1(\Omega \rightarrow \mathbb{R}))$ in den $L^2([0, T[\rightarrow L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n}))$. Damit gilt für die rechte Seite

$$f(\hat{\theta})\phi_1(\nabla\hat{u}) : \nabla\hat{u}_t + \nabla\hat{u}_t : \nabla\hat{u}_t$$

der Wärmeleitungsgleichung: Die Abbildung

$$\hat{\theta} \mapsto f(\hat{\theta})\phi_1(\nabla\hat{u}) : \nabla\hat{u}_t + \nabla\hat{u}_t : \nabla\hat{u}_t$$

ist stetig als Abbildung des $L^1([0, T[\rightarrow L^1(\Omega \rightarrow \mathbb{R}))$ in sich. Aufgrund der stetigen Abhängigkeit der renormierten Lösung von der rechten Seite nach Satz (4.3) folgt damit die Stetigkeit von Ψ .

Zur Kompaktheit: Aus (4.31) und Satz (4.4) folgt, daß Ψ für $1 \leq p < 1 + \frac{2}{n}$ als Abbildung des $L^1([0, T[\rightarrow L^1(\Omega \rightarrow \mathbb{R}))$ in den $L^p([0, T[\rightarrow L^p(\Omega \rightarrow \mathbb{R}))$ kompakt ist.

Im letzten Schritt bleibt die Existenz einer Menge $B \subseteq L^1([0, T[\rightarrow L^1(\Omega \rightarrow \mathbb{R}))$ zu zeigen, die von Ψ in sich abgebildet wird. Die Abschätzung (4.31) garantiert, daß die rechte Seite der Wärmeleitungsgleichung (4.32) bis auf eine Konstante (die nicht von $\hat{\theta}$ in der $L^1([0, T[\rightarrow L^1(\Omega \rightarrow \mathbb{R}))$ -Norm abhängt) durch

$$\|u_0\|_{W^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)}^2 + \|v_0\|_{L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)}^2$$

begrenzt ist. Daraus folgt mit (4.7) die Existenz einer Konstanten K , die wiederum von $\|\hat{\theta}\|_{L^1([0,T] \rightarrow L^1(\Omega \rightarrow \mathbb{R}))}$ unabhängig ist, so daß

$$\|\theta\|_{L^1([0,T] \rightarrow L^1(\Omega \rightarrow \mathbb{R}))} < R := K \left[\|u_0\|_{W^{1,2}(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)}^2 + \|v_0\|_{L^2(\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n)}^2 + \|\theta_0\|_{L^1(\Omega \rightarrow \mathbb{R})} \right]$$

gilt. Wählt man $B := B(0, R)$, liefert der Schaudersche Fixpunktsatz (A.10) die Behauptung. \square

BEMERKUNG. In §3 wurde schon erwähnt, daß sich obiger Existenzbeweis mit geringen Modifikationen auf den physikalisch relevanteren Fall

$$\hat{\sigma}_v^{\text{PK}} := \frac{1}{2} (\nabla u_t + (\nabla u_t)^*)$$

anstelle von

$$\hat{\sigma}_v^{\text{PK}} := \nabla u_t$$

übertragen läßt.

§5 Konstruktion mehrdimensionaler Potentiale

In diesem Kapitel wird ein allgemeines Verfahren für die Konstruktion von parameterbehafteten freien Energien zur Beschreibung der Thermomechanik von Formgedächtnislegierungen angegeben. Die hier vorgestellte Methode eignet sich generell zur Erzeugung von Funktionen, die der Symmetrie einer kompakten Liegruppe genügen. Das Ziel ist es, nichtkonvexe freie Energien zu erhalten. Dabei steht jeder konvexe Bereich für eine (meta-)stabile Phase.

1. Sprechweisen und grundlegende Annahmen

Unser Ziel ist es, Funktionen zu finden, die Symmetrien aufweisen, wie man sie sich von Potentialen aus der Physik wünscht. Zu beachten ist, daß in ein physikalisches Potential mehr eingeht als die Symmetrie: Typischerweise werden Parameter auftreten, die andere physikalische Eigenschaften wie z.B. den Elastizitätsmodul beschreiben. Um diesen Aspekt geht es hier nicht; unter einem Potential verstehen wir eine Funktion, die einer gewissen Symmetrie genügt und die in Abhängigkeit eines Kontrollparameters (bei uns die Temperatur) an vorgegebenen Stellen Minima besitzt. Normalerweise werden die Parameter dadurch nicht eindeutig bestimmt, sondern unterliegen beispielsweise Vorzeichenbeschränkungen. Ein Potential ist für uns also eine Klasse von symmetrischen Funktionen. Diese Sprechweise deckt sich mit der Ingenieursprechweise, vergleiche etwa [Mül94, Fal80b].

Für martensitische Phasenumwandlungen wird die zugrundeliegende Symmetriegruppe diskret sein. Die hier vorgestellten Methoden sind jedoch für eine größere Klasse von Symmetriegruppen anwendbar: In diesem Kapitel wird, soweit nichts gesagt ist, Γ eine kompakte Liegruppe sein. Mit offensichtlichen Modifikationen gelten die Aussagen auch für algebraische und diskrete Gruppen.

§5.1 Das Pflichtenheft

In diesem Abschnitt wollen wir die Anforderungen herleiten und auflisten, die an freie Energien für Formgedächtnislegierungen gestellt werden. Im Hinblick auf das weitere Vorgehen wird die Bedingung der Materialsymmetrie augenscheinlich anders formuliert als sonst in der Literatur üblich (vergleiche etwa [Pau96]); man überzeugt sich aber sofort, daß die verschiedenen Formulierungen äquivalent sind.

Der Formgedächtniseffekt läßt sich durch Gleichungen der Thermo(visko)elastizität im Rahmen der Kontinuumsmechanik mathematisch modellieren. Dies ist in

§3 ausgeführt. Zur Auffrischung noch einmal die hier in §5 benötigten Sprechweisen: Die Temperatur θ und die Verschiebung u werden in Bezug auf eine Referenzkonfiguration $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ beschrieben. In diesem Kapitel spielt die zeitliche Abhängigkeit von u und θ keine Rolle. Deshalb unterdrücken wir die Zeit t in der Notation und fassen beispielsweise die Verschiebung auf als eine Abbildung

$$u: \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n.$$

Um physikalisch unmögliche Situationen wie eine Selbstdurchdringung des Körpers auszuschließen, wurde in §3 gefordert, daß u injektiv und orientierungserhaltend ist. In den Punkten x , in denen u differenzierbar ist, wird die Ableitung $F(x) := \nabla u(x)$ eine positive Determinante besitzen, also[‡]

$$F: \Omega \rightarrow \text{GL}(n, \mathbb{R})^+.$$

Im folgenden identifizieren wir F oft mit dem Funktionswert, schreiben also einfach F statt $F(x)$ für $x \in \Omega$.

Wir folgen dem üblichen Sprachgebrauch und nennen eine freie Energie Φ auch *Potential*. Der Grund dafür ist die Identität

$$\sigma(\nabla u, \theta) = \frac{\partial \Phi(F, \theta)}{\partial F}.$$

Im hier betrachteten Kontext werden Potentiale Φ von der Verzerrung und der Temperatur abhängen, also die Gestalt

$$\begin{aligned} \text{GL}(n, \mathbb{R})^+ \times \mathbb{R}^+ &\rightarrow \mathbb{R} \\ (F, \theta) &\mapsto \Phi(F, \theta) \end{aligned}$$

besitzen.

In §1 wurde die Besonderheit von Formgedächtnislegierungen geschildert: Bei hoher Temperatur ist nur die Austenitphase stabil, unterhalb der kritischen Temperatur werden im unbelasteten Zustand mehrere Martensitvarianten stabil. Die Modellierung des Potentials muß dies durch die entsprechende Zahl und Position von Minima berücksichtigen.

Die zentrale Schwierigkeit der Konstruktion rührt von der Kristallsymmetrie her: Diese impliziert Symmetriebeziehungen zwischen den Martensitvarianten. Im allgemeinen existieren für einen gegebenen Kristall verschiedene kristallographisch ununterscheidbare Richtungen. Die räumliche Anordnung der Atome bildet

‡ $\text{GL}(n, \mathbb{R})^+$ bezeichnet die Zusammenhangskomponente der $\text{GL}(n, \mathbb{R})$ mit positiver Determinante; analoges gilt für alle weiteren auftretenden Matrizenuntergruppen.

das *Kristallgitter*. Es ist vom *Bravaisgitter* zu trennen: Letzteres besteht genau aus den (nach geeigneter Einheitenwahl ganzzahligen) Translationen, die die Dichtefunktion des Kristalls invariant lassen. Die Menge aller orthogonalen Selbstabbildungen des Bravaisgitters nennt man *Bravaisgruppe*. Die *Punktgruppe* \mathcal{P} des Kristalls ist davon die Untergruppe der Elemente, für die eine Translation existiert, deren Komposition mit dem Gruppenelement das Kristallgitter auf sich abbildet[‡]. Da eine Selbstabbildung des Bravaisgitters den Wert der freien Energie nicht ändern darf, ergibt sich als notwendige Bedingung die *Materialsymmetrie*

$$\phi(FP^{-1}, \theta) = \phi(F, \theta) \quad \text{für alle } P \in \mathcal{P}, \quad F \in \text{GL}(n, \mathbb{R})^+, \quad \theta \in \mathbb{R}^+.$$

Wie üblich werden wir im folgenden für *alle* Temperaturen die Punktgruppe der Hochsymmetriephase Austenit zugrunde legen und nur orientierungserhaltende Transformationen betrachten. Für die zu schildernde Konstruktion sind diese Annahmen nicht wesentlich.

Eine fundamentale Symmetrie ist die *Rahmeninvarianz*: Die freie Energie darf nicht vom Standpunkt des Beobachters abhängen, muß also im folgendem Sinne rotationsinvariant sein:

$$\phi(SF, \theta) = \phi(F, \theta) \quad \text{für alle } S \in \text{SO}(n), \quad F \in \text{GL}(n, \mathbb{R})^+, \quad \theta \in \mathbb{R}^+,$$

wobei $\text{SO}(n)$ die spezielle reelle orthogonale Gruppe bezeichnet. Unter Ausnutzung der Polarzerlegung einer reellen $n \times n$ Matrix folgt aus der Rahmeninvarianz unmittelbar, daß die freie Energie nur von

$$C := \sqrt{F^*F}$$

abhängt. Da $F := \nabla u$ den Verzerrungstensor bezeichnet, nennen wir $C = \sqrt{F^*F}$ den *linken Cauchy-Greenschen Verzerrungstensor*.

Die Menge der symmetrischen Matrizen mit positiver Determinante wird hier mit $\text{Sym}(n, \mathbb{R})^+$ bezeichnet. Damit läßt sich die Materialsymmetrie schreiben als

$$\phi(CP^{-1}, \theta) = \phi(C, \theta) \quad \text{für alle } P \in \mathcal{P}, \quad C \in \text{Sym}(n, \mathbb{R})^+, \quad \theta \in \mathbb{R}^+.$$

Da \mathcal{P} eine Untergruppe der $\text{SO}(n)$ ist, ist dies wegen der Rahmeninvarianz äquivalent zu

$$\phi(PCP^{-1}, \theta) = \phi(C, \theta) \quad \text{für alle } P \in \mathcal{P}, \quad C \in \text{Sym}(n, \mathbb{R})^+, \quad \theta \in \mathbb{R}^+;$$

[‡] Die Definition der verschiedenen kristallographischen Gruppen ist nicht kanonisch. In [AM76] wird beispielsweise eine andere Definition gegeben. Wir unterscheiden zwischen der Bravaisgruppe und der Raumgruppe; letztere ist definiert als Invarianzgruppe einer dreifach periodischen Ortsfunktion. Bei dieser Definition ist die Punktgruppe nicht notwendigerweise eine Untergruppe der Raumgruppe, wohl aber der Bravaisgruppe.

diese Formulierung wird hier verwendet. Ein Grund dafür ist, daß aus gruppentheoretischer Sicht die Konjugation die „natürliche“ Art und Weise ist, in der Gruppen operieren. Das im nächsten Abschnitt beschriebene Verfahren zur Konstruktion invarianter Potentiale funktioniert für jede äquivalente Formulierung der Rahmeninvarianz. Die konkreten Rechnungen hängen aber von der gewählten Formulierung ab und können unterschiedlich komplex sein.

§5.2 Das Konstruktionsverfahren

Versucht man, ein Potential für austenitisch-martensitische Phasenübergänge „zu Fuß“ zu konstruieren, stößt man schnell auf Schwierigkeiten. Letztendlich basieren diese auf dem Problem, die im letzten Abschnitt genannten Symmetriebedingung zu erfüllen und obendrein eine physikalisch sinnvolle Temperaturabhängigkeit zu erhalten. Ein Beispiel eines Potentials ist in [FK90] angegeben; dort werden gruppen- und darstellungstheoretische Methoden zur Konstruktion eingesetzt. In §5.6 gehen wir ausführlicher auf diese Arbeit ein. Ein anderer Ansatz, das Problem auf verhältnismäßig elementare Weise zu lösen, findet sich in [Pau96]. Der Nachteil der dort beschriebenen Methode ist, daß die Erfüllung der Symmetriebedingungen wenig Spielraum bei der Wahl der Temperaturabhängigkeit läßt.

Hier wollen wir einen anderen Weg beschreiten. Die nun folgende Konstruktion ist zwar aufwendiger, nutzt aber mathematische Strukturen aus. Dies ermöglicht, Ergebnisse in größerer Allgemeinheit zu erhalten.

Die grundlegende und ganz elementare Beobachtung, die alle weiteren Schritte motivieren wird, läßt sich so formulieren: *Jedes Potential muß auf den „Orbits“ $\{PCP^{-1} \mid P \in \mathcal{P}\}$ konstant sein.* Daher ist es naheliegend, jeden Orbit der Symmetriegruppe des betrachteten Systems (hier die Operation der Punktgruppe des Austenits auf dem linken Cauchy-Greenschen Verzerrungstensor) als einen Punkt aufzufassen; auf diese Weise entsteht ein neues Objekt — der sogenannte Orbitraum —, das automatisch die erforderlichen Symmetrien „in sich“ trägt. Nun kann man auf dem Orbitraum eine Funktion definieren, die in Abhängigkeit von der Temperatur an den „richtigen“ Stellen des Orbitraums ein Minimum annimmt. Das gesuchte Potential entsteht als Verkettung dieser Funktion mit der Abbildung, die den zugrundeliegenden Raum in den Orbitraum abbildet. Die letztgenannte Abbildung ist dabei dadurch definiert, daß sie jeden Punkt auf seinen Orbit abbildet.

Die Konstruktion nichtkonvexer Potentiale mittels des hier präsentierten Weges scheint neu zu sein. Der Zusammenhang zwischen Symmetriebrechung, Potentialen und dem Orbitraum wurde aber schon früher beobachtet, vergleiche [AS81, AS83] und nachfolgende Arbeiten von Sartori.

Damit ist das weitere Programm abgesteckt: Zuerst werden die notwendigen Begriffe wie Operation, Orbit und Orbitraum eingeführt. Als nächstes wird der Orbitraum studiert; man erhält, daß der Orbitraum als semialgebraische Varietät

beschrieben werden kann. Wichtig für uns ist eine Konsequenz daraus, nämlich das Zerfallen des Orbitraumes in Mannigfaltigkeiten, die den verschiedenen möglichen Symmetrien entsprechen. Für Austenit-Martensit-Phasenübergänge wird die Hauptarbeit darin bestehen, den Orbitraum richtig zu verstehen — im wesentlichen wird das die Antwort auf die Frage sein, was denn die „richtigen“ Stellen für Minima sind und wie eine Funktion auf dem Orbitraum angegeben werden kann.

Der hier vorgestellte Weg läßt sich allgemein zur Erzeugung von Funktionen benutzen, die der Symmetrie einer kompakten Liegruppe genügen. Für martensitische Phasenübergänge ist die zugrundeliegende Gruppe sogar diskret. Wir werden diese Anwendung modellhaft vorführen; das Verfahren wollen wir aber in größerer Allgemeinheit beschreiben. Die folgenden Informationen zu Orbiträumen sind zum großen Teil [Rum97] entnommen. Auf diese Darstellung werden wir uns im folgenden stützen.

Zunächst einige Grundbegriffe: Sei M eine Menge und Γ eine Gruppe, deren Einselement wir mit ε bezeichnen. Existiert eine Abbildung

$$\begin{aligned}\Gamma \times M &\rightarrow M \\ (\gamma, x) &\mapsto \gamma x\end{aligned}$$

mit den Eigenschaften

$$\varepsilon x = x \quad \text{für alle } x \in M \quad \text{und} \quad (\gamma\gamma')x = \gamma(\gamma'x) \quad \text{für alle } \gamma, \gamma' \in \Gamma,$$

so bezeichnet man diese Abbildung als *Operation von Γ auf M* .

Aus den definierenden Eigenschaften einer Operation folgt, daß durch diese jedem Gruppenelement γ eine bijektive Abbildung $M \rightarrow M; x \mapsto \gamma x$ zugeordnet ist und daß diese Zuordnung ein Gruppenhomomorphismus von Γ in die Gruppe der Bijektionen von M ist. Beispiele solcher Gruppenhomomorphismen sind die im nächsten Unterabschnitt eingeführten Darstellungen, die zur Beschreibung von Operationen dienen.

Schritt 1: Darstellung der Gruppe

Ist V ein \mathbb{R} -Vektorraum und Γ eine Gruppe, die auf einer Menge M operiert, so bezeichnet man einen Gruppenhomomorphismus $\Gamma \rightarrow \text{GL}(V)$ als $(\dim V)$ -dimensionale (reelle) *Darstellung* von Γ ; V heißt dann *Darstellungsraum*. Ist V ein Prähilbertraum mit dem Skalarprodukt (\cdot, \cdot) , so daß für alle $\gamma \in \Gamma$ die Beziehung $(\cdot, \cdot) = (\gamma\cdot, \gamma\cdot)$ gilt, heißt das Skalarprodukt Γ -invariant und die Darstellung *orthogonal*. In diesem Fall sagen wir auch, daß die Gruppe Γ *orthogonal auf V operiert*. Für kompakte Liegruppen ist dies immer möglich: Durch

$$\begin{aligned}V \times V &\rightarrow \mathbb{R} \\ (x, y) &\mapsto \int_{\Gamma} (\gamma x, \gamma y) \, d\gamma\end{aligned}$$

wird ein Γ -invariantes Skalarprodukt definiert. Dabei ist das Integral das Haarsche Integral nach Satz (A.11).

In unserem Fall ist $\Gamma := \mathcal{P}$ und $M := \text{Sym}(n, \mathbb{R})^+$; die Punktgruppe \mathcal{P} des Ausenits operiert auf der Menge der symmetrischen Matrizen mit positiver Determinante durch Konjugation:

$$\begin{aligned} \mathcal{P} \times \text{Sym}(n, \mathbb{R})^+ &\rightarrow \text{Sym}(n, \mathbb{R})^+ \\ (P, C) &\mapsto PCP^{-1} \end{aligned}$$

(daß \mathcal{P} tatsächlich auf $\text{Sym}(n, \mathbb{R})^+$ operiert, liegt daran, daß PCP^{-1} wegen $P^* = P^{-1}$ symmetrisch ist).

Die Konstruktion wird im folgenden für den interessantesten Fall der dreidimensionalen Phasenumwandlungen beschrieben, also $n = 3$. Die Punktgruppe \mathcal{P} der Hochtemperaturphase ist hier die *Oktaedergruppe*, sprich die Gruppe aller orientierungserhaltenden Selbstabbildungen des Würfels. Diese Operation läßt sich auf ganz $\text{Sym}(3, \mathbb{R})$ fortsetzen: Obwohl $\text{Sym}(3, \mathbb{R})^+$ kein Vektorraum ist, handelt es sich um eine bezüglich der Konjugation mit Matrizen aus \mathcal{P} invariante Teilmenge von $\text{Sym}(3, \mathbb{R})$.

Für $\text{Sym}(3, \mathbb{R})$ führen wir Koordinaten e_1, \dots, e_6 ein, indem wir für eine symmetrische Matrix $(m_{jk})_{1 \leq j, k \leq 3}$

$$e_1 := m_{11}, \quad e_2 := m_{22}, \quad e_3 := m_{33}, \quad e_4 := m_{12}, \quad e_5 := m_{23}, \quad e_6 := m_{13} \quad (5.1)$$

setzen, also in Matrixschreibweise

$$(m_{jk})_{1 \leq j, k \leq 3} = \begin{pmatrix} e_1 & e_4 & e_6 \\ e_4 & e_2 & e_5 \\ e_6 & e_5 & e_3 \end{pmatrix}.$$

Der Darstellungsraum ist daher $V := \mathbb{R}^6$. Der Buchstabe e ist in Anlehnung an physikalische und ingenieurwissenschaftliche Bezeichnungen gewählt; dort ist diese Transformation unter dem Namen *Voigt-Notation* bekannt.

Die Darstellung wird durch die Angabe der Bilder der Erzeugenden der zugrundeliegenden Gruppe $\Gamma = \mathcal{P}$ vollständig beschrieben. Eine Möglichkeit, ein Erzeugendensystem zu wählen, sieht so aus:

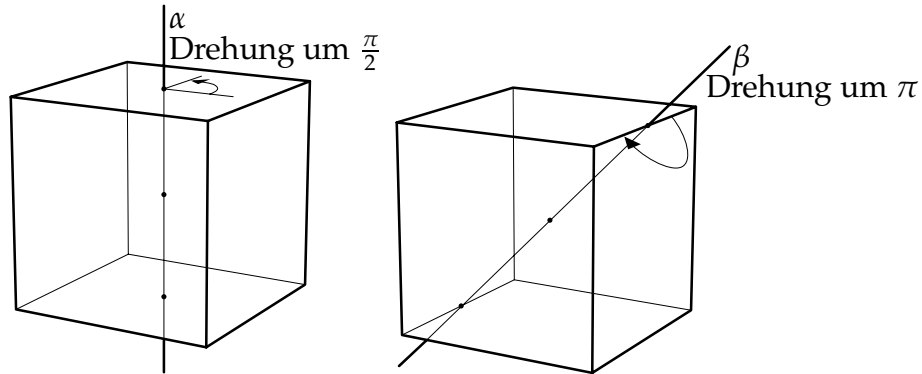
- (i) eine Vierteldrehung um gegenüberliegende Seitenmitten,
- (ii) eine halbe Drehung um gegenüberliegende Kantenmitten (die in Abhängigkeit von der Drehung aus (i) zu wählen ist: Die Kanten müssen an den Seiten angrenzen, die von der Drehung aus (i) auf sich abgebildet werden. Andernfalls wird nicht die Oktaedergruppe, sondern nur die Diedergruppe D_4 erzeugt).

Im betrachteten Anwendungsfall wählen wir für (i) die Drehung um die z -Achse, also

$$\alpha := \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

und für (ii) die Drehung

$$\beta := \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$



Die entsprechende Abbildung für α auf dem Darstellungsraum hat in Matrixschreibweise die Gestalt

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

und β wird zu

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Die von den Elementen $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ erzeugte Gruppe wollen wir mit $\langle \alpha_1, \dots, \alpha_n \rangle$ bezeichnen. Man überzeugt sich leicht, daß $\mathcal{P} = \langle \alpha, \beta \rangle$ gilt (vergleiche z.B. [Lju62] für eine Diskussion der Oktaedergruppe).

Schritt 2: Bestimmung des Orbitraums

Ist $x \in M$, so bezeichnet man die Menge $\Gamma x := \{\gamma x \mid \gamma \in \Gamma\}$ als Γ -Orbit von x , kurz als Orbit von x . Zwei Orbits $\Gamma x, \Gamma y$ sind entweder gleich oder disjunkt, denn Orbits sind nichts anderes als Äquivalenzklassen der Relation $x \sim y :\Leftrightarrow \exists \gamma \in \Gamma: \gamma x = y$.

Die Operation zerlegt die Menge M folglich in disjunkte Klassen. Der *Orbitraum* \mathcal{O} ist die Menge dieser Klassen (= Γ -Orbits), $\mathcal{O} := M / \Gamma$. Der Orbitraum entsteht also aus dem Darstellungsraum durch Zusammenfassen von Punkten des gleichen Orbits zu einem Objekt. Die Projektion $\pi: M \rightarrow \mathcal{O}; x \mapsto \Gamma x$ weist jedem Punkt seinen Bildpunkt im Orbitraum zu.

Bisher ist der Orbitraum lediglich als Menge definiert; wir werden jedoch ausnutzen, daß der Orbitraum sich in einen Vektorraum einbetten und als Varietät in einem affinen Raum auffassen läßt. Dies liefert eine Beschreibung des Orbitraumes, die im allgemeinen handlicher ist.

Dazu ein weiterer Begriff: Sei N eine Menge. Eine Funktion $f: M \rightarrow N$ ist *invariant*, wenn sie auf jedem Orbit von Γ konstant ist, also $f(x) = f(\gamma x)$ für alle $\gamma \in \Gamma$ und alle $x \in M$. Strenggenommen müßten wir natürlich von Γ -invarianten Funktionen sprechen.

Offensichtlich läßt sich eine invariante Funktion über dem Orbitraum faktorisieren: für ein invariantes f existiert eine Abbildung $\bar{f}: \mathcal{O} \rightarrow N$ mit $f = \bar{f} \circ \pi$.

$$\begin{array}{ccc} M & \xrightarrow{f} & N \\ \pi \downarrow & \nearrow \bar{f} & \\ \mathcal{O} = M / \Gamma & & \end{array}$$

Dies entspricht der zentralen Idee der Konstruktion: *Die gesuchten Potentiale sind spezielle invariante Funktionen, faktorisieren also über dem Orbitraum.* Da der Orbitraum die ganze Symmetrieinformation kondensiert, kann auf dem Orbitraum verhältnismäßig leicht eine Funktion angegeben werden, die in Abhängigkeit von der Temperatur an den Stellen ein Minimum annimmt, deren Symmetrie der Symmetrie der stabilen Phase entspricht.

Die Konstruktion der gesuchten Potentiale zerfällt also in folgende drei Probleme: Bestimmung von π , Analyse des Orbitraumes, Definition von \bar{f} . Im folgenden betrachten wir eine orthogonale Darstellung mit dem Darstellungsraum $V := \mathbb{R}^m$; ein Blick zurück auf Gleichung (5.1) zeigt $m = 6$.

Eine wichtige Rolle wird der Raum der invarianten Polynome[‡] spielen; er wird mit $\mathcal{P}(\mathbb{R}^m)^\Gamma$ bezeichnet. Die Bedeutung dieses Raumes liegt für uns darin, daß das zu konstruierende Potential im einfachsten Fall aus invarianten Polynomen aufgebaut wird, also aus $\mathcal{P}(\mathbb{R}^m)^\Gamma$ stammt. Der folgende Satz spielt eine zentrale Rolle bei der Beschreibung des Orbitraumes.

(5.1) SATZ. (Hilbert)

Operiert eine kompakte Liegruppe Γ auf dem \mathbb{R}^m , so ist die \mathbb{R} -Algebra $\mathcal{P}(\mathbb{R}^m)^\Gamma$ der Γ -invarianten Polynome endlich erzeugt. Das heißt, es existieren endlich viele Polynome $\rho_j \in$

[‡] Streng algebraisch gesehen müßte man vom Raum der invarianten Polynomabbildungen sprechen.

$\mathcal{P}(\mathbb{R}^m)^\Gamma$, so daß jedes $p \in \mathcal{P}(\mathbb{R}^m)^\Gamma$ in der Form $p = P(\rho_1, \dots, \rho_k)$ dargestellt werden kann, wobei P ein Polynom über \mathbb{R}^k ist.

Beweis: Siehe [Wey73] als klassische Referenz. □

BEMERKUNG. Aus der vorangehenden Beschreibung der Methode, mit der das Potential konstruiert werden soll, folgt: Sofern das gesuchte Potential eine Polynomabbildung ist, läßt es sich in der Form $P(\rho_1, \dots, \rho_k)$ schreiben. Das macht klar, daß die weitere Arbeit darin bestehen wird, ein geeignetes Polynom P zu finden. Übrigens lassen sich nach Proposition (5.6) auch glatte nichtpolynomiale Funktionen über den Orbitraum charakterisieren. Darin liegt einer der Vorteile der präsentierten Methode.

Man kann auch versuchen, eine invariante Funktion „zu Fuß“ (ohne Berücksichtigung von Satz (5.1)) zu konstruieren. Beispielweise kann man erst eine nicht-invariante Funktion mit geeigneten Minima konstruieren und dann die Invarianz durch Mittelung über die Orbits erzwingen, also im Fall einer endlichen Gruppe durch die Operation

$$f(x) \mapsto \frac{1}{\#\Gamma} \sum_{\gamma \in \Gamma} f(\gamma x)$$

(beziehungsweise im kontinuierlichen Fall durch $x \mapsto \int_{\Gamma} f(\gamma x) d\gamma$; es handelt sich um eine Abbildung $C^0(\mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}) \rightarrow C^0(\mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R})^\Gamma$, die als Reynoldsoperator bezeichnet wird). Dabei muß man allerdings sicherstellen, daß die Mittelung die Minima an den richtigen Stellen erhält und keine zusätzlichen Minima schafft. Das ist im allgemeinen keine triviale Aufgabe.

Die Erzeugenden der Algebra $\mathcal{P}(\mathbb{R}^m)^\Gamma$ verdienen einen eigenen Namen:

(5.2) DEFINITION. (Hilbertbasis, Hilbertabbildung)

Ein endliches Erzeugendensystem $\{\rho_1, \dots, \rho_k\}$ der \mathbb{R} -Algebra $\mathcal{P}(\mathbb{R}^m)^\Gamma$ heißt **Hilbertbasis**. Die zugehörige **Hilbertabbildung** ist definiert als die Abbildung

$$\begin{aligned} \mathbb{R}^m &\rightarrow \mathbb{R}^k \\ e &\mapsto (\rho_1(e), \dots, \rho_k(e)). \end{aligned}$$

Ein tief liegendes Resultat [HR74] besagt, daß der Ring (!) $\mathcal{P}(\mathbb{R}^m)^\Gamma$ die **Cohen-Macaulay**-Eigenschaft hat, d.h. es gibt (jeweils endlich viele) **primäre** und **sekundäre Invarianten**, so daß $\mathcal{P}(\mathbb{R}^m)^\Gamma$ ein von den sekundären Invarianten erzeugter freier Modul über dem Polynomring $\mathbb{R}[\text{primäre Invarianten}]$ ist. Die primären Invarianten sind algebraisch unabhängig.

Für uns ist von Bedeutung, daß die Hilbertabbildung genau die oben erwähnte Einbettung des Orbitraumes liefert. Das besagt das nächste Lemma.

(5.3) LEMMA. (Hilbertabbildung und Orbitraum)

Eine Hilbertabbildung $\rho: \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^k$ ist Γ -invariant und trennt die Orbits, d.h. für zwei Punkte $x, y \in \mathbb{R}^m$ gilt $\rho(x) = \rho(y)$ dann und nur dann, wenn x und y Punkte des gleichen Orbits sind. Die Abbildung $\bar{\rho}: \mathbb{R}^m / \Gamma \rightarrow \mathbb{R}^k$ ist also eine Bijektion zwischen dem Orbitraum und $\rho(\mathbb{R}^m)$.

Beweis: (Vergleiche [Rum97, Bemerkung 2.5.1].) Die Grundidee ist einfach: Die Orbits sind kompakt; daher läßt sich eine stetige Funktion angeben, die zwei gegebene Orbits trennt. Nach Weierstraß läßt sich diese Funktion gleichmäßig durch Polynome approximieren. Man sieht leicht, daß dann auch die über die Orbits gemittelten Polynome die stetige Funktion insoweit approximieren, daß sie ebenfalls die Orbits trennen. Damit ist ein Element f der Algebra gefunden, das die gegebenen Orbits trennt. Da ein Polynom P existiert mit $f = P(\rho_1, \dots, \rho_k)$, muß mindestens ein Element der Hilbertbasis die Punkte x und y trennen. Damit ist die Injektivität von $\bar{\rho}$ gezeigt; die Surjektivität ist klar.

Die Γ -Invarianz schließlich folgt unmittelbar aus der Definition der Hilbertabbildung. \square

Wir werden im folgenden stillschweigend die Identifikation des Orbitraumes mit $\rho(\mathbb{R}^m)$ gemäß Lemma (5.3) verwenden. Wichtig werden wird auch noch eine andere Charakterisierung des Orbitraumes, nämlich die Beschreibung als semialgebraische Varietät, also durch Gleichungen und Ungleichungen. Dabei sind die Gleichungen Relationen zwischen den Elementen der Hilbertbasis: Eine Hilbertbasis ist im allgemeinen nicht algebraisch unabhängig, d.h. es existieren nichttriviale Relationen r mit $r(\rho_1, \dots, \rho_k) = 0$. Diese Relationen bilden das **Verschwindungsideal** I . Die gemeinsame Nullstellenmenge dieses Ideals sei mit $V(I)$ bezeichnet[‡]. Es gilt also $V(I) \supseteq \rho(V)$. $V(I)$ ist die kleinste Varietät, die den Orbitraum enthält. Sind die Relationen zwischen den Erzeugenden der Hilbertabbildung bekannt, kann man das Verschwindungsideal I betrachten und ausnützen, daß $\rho(V)$ in $V(I)$ liegt. Die Bestimmung der Relationen kann man wieder dem Computer überlassen. Allerdings ist die erforderliche Rechnung hier so aufwendig, daß sie an Speicherplatzproblemen scheiterte. Wir werden deshalb im folgenden einen anderen Weg beschreiben.

Procesi und Schwarz haben gezeigt, daß sich der Orbitraum, aufgefaßt als semialgebraische Varietät, beschreiben läßt als die Menge der Punkte, für die die symmetrischen Minoren der Matrix $((\nabla \rho_i, \nabla \rho_j))_{i,j}$ nichtnegativ sind [PS85].

Zur Berechnung von Hilbertabbildungen können diverse Computeralgebrapakete eingesetzt werden. Hier wurde die Rechnung mit SINGULAR [GPS98] durchgeführt, wobei ein Algorithmus von Sturmfels [Stu93] Verwendung fand.

[‡] Diese Notation kollidiert etwas mit der Bezeichnung V für die Darstellung; daraus sollte sich aber kein Mißverständnis ergeben können, da wir konsequent $V(I)$ bzw. V schreiben.

Für den konkreten Fall ergibt sich:

$$\rho_1 := e_1 + e_2 + e_3,$$

$$\rho_2 := e_1^2 + e_2^2 + e_3^2,$$

$$\rho_3 := e_4^2 + e_5^2 + e_6^2,$$

$$\rho_4 := e_1^3 + e_2^3 + e_3^3,$$

$$\rho_5 := e_4 e_5 e_6,$$

$$\rho_6 := e_4^4 + e_5^4 + e_6^4,$$

$$\rho_7 := 1,$$

$$\rho_8 := e_1 e_4^2 + e_2 e_4^2 + e_2 e_5^2 + e_3 e_5^2 + e_1 e_6^2 + e_3 e_6^2,$$

$$\rho_9 := e_1^2 e_4^2 + e_2^2 e_4^2 + e_2^2 e_5^2 + e_3^2 e_5^2 + e_1^2 e_6^2 + e_3^2 e_6^2,$$

$$\rho_{10} := e_1 e_4^4 + e_2 e_4^4 + e_2 e_5^4 + e_3 e_5^4 + e_1 e_6^4 + e_3 e_6^4,$$

$$\rho_{11} := e_1^2 e_4^4 + e_2^2 e_4^4 + e_2^2 e_5^4 + e_3^2 e_5^4 + e_1^2 e_6^4 + e_3^2 e_6^4,$$

$$\rho_{12} := e_1^2 e_2 e_4^4 e_5^2 + e_2 e_3^2 e_4^4 e_5^4 + e_1 e_2^2 e_4^4 e_6^2 + e_2^2 e_3 e_5^4 e_6^2 + e_1 e_3^2 e_4^4 e_6^4 + e_1^2 e_3 e_5^2 e_6^4.$$

In diesem Fall ist also $k = 12$; bei den ersten 6 Invarianten ρ_1, \dots, ρ_6 handelt es sich um primäre Invarianten und bei ρ_7, \dots, ρ_{12} um sekundäre Invarianten. Als Folgerung aus der Cohen-Macaulay-Eigenschaft läßt sich jedes invariante Polynom eindeutig in der Form

$$\sum_{j=7}^{12} \rho_j P_j(\rho_1, \dots, \rho_6)$$

schreiben (d.h. es existieren eindeutig bestimmte Polynome P_7, \dots, P_{12} , so daß diese Aussage erfüllt ist). Insbesondere gilt dann für Produkte zweier sekundärer Invarianten, daß sie sich in dieser Form schreiben lassen:

$$\rho_i \rho_j = \sum_{l=7}^{12} \rho_l P_l(\rho_1, \dots, \rho_6) \quad \text{für } i, j \in \{7, \dots, 12\}.$$

Bevor wir die eigentliche Konstruktion eines Potentials angehen, ist noch ein Nachtrag zu leisten. Zunächst muß man sich überlegen, daß tatsächlich ein Potential mit der gewünschten Symmetrieminvarianz existiert. Aus physikalischen Gründen wird man das erwarten, aber beweisbedürftig ist diese Aussage schon: Die invarianten Polynome leben auf dem Darstellungsraum der symmetrischen Matrizen; das Potential ist jedoch aus physikalischen Gründen nur für $\text{Sym}(n, \mathbb{R})^+$ definiert. *A priori* ist nicht klar, daß die zugehörige Teilmenge im Orbitraum Punkte mit der richtigen Symmetrie enthält. Deshalb bestimmen wir das Bild von $\text{Sym}(n, \mathbb{R})^+$ im Orbitraum.

(5.4) LEMMA. (Bild von $\text{Sym}(n, \mathbb{R})^+$ im Orbitraum)

Unter der gegebenen Hilbertabbildung ist das Bild von $\text{Sym}(n, \mathbb{R})^+$ im Orbitraum genau durch die Ungleichungen

$$\begin{aligned} \rho_1 &> 0, \\ \frac{1}{2} (\rho_1^2 - \rho_2) + \rho_3 &> 0, \\ \frac{1}{6} (\rho_1^3 - 3\rho_1\rho_2 + 2\rho_4) + 2\rho_5 + \rho_8 - \rho_1\rho_3 &> 0 \end{aligned}$$

charakterisiert.

Beweis: Für eine gegebene symmetrische Matrix sei e die zugehörige Voigt-Notation. Positive Definitheit bedeutet nach dem Jacobi-Kriterium, daß die symmetrischen Minoren positiv sind. Wir berechnen diese Minoren:

$$\begin{aligned} e_1, e_2, e_3 &> 0 \quad (1 \times 1\text{-Minoren}), \\ e_1e_2 - e_4^2 > 0, \quad e_1e_3 - e_6^2 > 0, \quad e_2e_3 - e_5^2 > 0 & \quad (2 \times 2\text{-Minoren}), \\ e_1e_2e_3 + 2e_4e_5e_6 - e_2e_6^2 - e_1e_5^2 - e_3e_4^2 &> 0 \quad (3 \times 3\text{-Minor}). \end{aligned}$$

Daraus ergibt sich durch Aufsummieren der 1×1 -Minoren

$$\rho_1 = e_1 + e_2 + e_3 > 0 \quad (5.2)$$

und analog für die 2×2 -Matrizen

$$e_1e_2 - e_4^2 + e_1e_3 - e_6^2 + e_2e_3 - e_5^2 = \frac{1}{2} (\rho_1^2 - \rho_2) - \rho_3 > 0. \quad (5.3)$$

Ebenso gilt

$$\begin{aligned} e_1e_2e_3 + 2e_4e_5e_6 - e_2e_6^2 - e_1e_5^2 - e_3e_4^2 \\ = \frac{1}{6} (\rho_1^3 - 3\rho_1\rho_2 + 2\rho_4) + 2\rho_5 + \rho_8 - \rho_1\rho_3 > 0. \end{aligned} \quad (5.4)$$

Damit ist gezeigt, daß die symmetrischen Matrizen mit positiver Determinante in der durch die Ungleichungen charakterisierten Menge liegen; zu zeigen bleibt, daß diese Menge exakt durch $\text{Sym}(n, \mathbb{R})^+$ beschrieben wird.

Äquivalent in Eigenwerten ausgedrückt besagen die drei Ungleichungen (5.2)–(5.4)

$$\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 > 0,$$

$$\lambda_1\lambda_2 + \lambda_1\lambda_3 + \lambda_2\lambda_3 > 0,$$

$$\lambda_1\lambda_2\lambda_3 > 0.$$

Aus der letzten Ungleichung ergibt sich, daß entweder alle Eigenwerte positiv sind oder negative Eigenwerte paarweise auftreten. Im zweiten Fall kann man aber aus den ersten beiden Ungleichungen leicht einen Widerspruch herleiten. Sei etwa $\lambda_1, \lambda_2 < 0$ und ohne Beschränkung der Allgemeinheit $\lambda_1 \leq \lambda_2$. Aus der ersten Ungleichung ergibt sich dann $\lambda_3 \geq -2\lambda_2$; damit erhält man im Widerspruch zur zweiten Ungleichung $\lambda_1\lambda_2 + \lambda_1\lambda_3 + \lambda_2\lambda_3 \leq 0$. \square

Wir müssen den Orbitraum noch eingehender untersuchen; insbesondere interessiert uns natürlich eine Zerlegung des Orbitraumes bezüglich der Symmetrie. Es wird sich gleich zeigen, daß jeder Orbitraum in Mannigfaltigkeiten zerlegt werden kann: Sei Γ eine kompakte Liegruppe, V ein geeigneter Darstellungsraum und ρ eine Hilbertabbildung. Die *Isotropiegruppe (Stabilisator)* Γ_x eines Punktes x aus V ist die Menge der Elemente aus Γ , die x fixieren, in Zeichen: $\Gamma_x := \{\gamma \in \Gamma \mid \gamma x = x\}$. Die Isotropiegruppe von x beschreibt also die Symmetrie von x . Zwei Isotropiegruppen Γ_x, Γ_y sind *konjugiert*, wenn ein $\gamma \in \Gamma$ existiert mit $\Gamma_y = \gamma\Gamma_x\gamma^{-1}$. Die Konjugationsklasse von Γ_x wird mit $[\Gamma_x]$ bezeichnet; enthält die Konjugationsklasse nur ein einziges Element, lassen wir die eckigen Klammern $[\cdot]$ weg. Die hier vorgestellte Konstruktion benützt die Tatsache, daß die Konjugationsklassen den Darstellungsraum in endlich viele invariante Mengen zerlegen (siehe [Jän68, I.1.4]): Wir weisen jedem Punkt aus V die Konjugationsklasse seiner Isotropiegruppe zu. Damit zerfällt der Darstellungsraum V in endlich viele Äquivalenzklassen, die jeweils aus den Elementen mit paarweise konjugierten Isotropiegruppen bestehen; diese Äquivalenzklassen werden hier mit S_1, \dots, S_l bezeichnet. Da zwei Punkte $x, \gamma x$ des gleichen Orbits wegen $\Gamma_{\gamma x} = \gamma\Gamma_x\gamma^{-1}$ konjugierte Isotropiegruppen besitzen, sind die S_j (Γ -)invariant. Auf der Menge $\{S_1, \dots, S_l\}$ läßt sich durch die Definition

$$S_i \leq S_j \Leftrightarrow \text{es existiert ein } x \in S_i \text{ und ein } y \in S_j \text{ mit } \Gamma_y \subseteq \Gamma_x$$

eine partielle Ordnung einführen. Das nächste Lemma ist [Rum97] entnommen.

(5.5) LEMMA. (Eigenschaften der Menge $\{S_1, \dots, S_l\}$)

Die Äquivalenzklassen S_j besitzen folgende Eigenschaften:

- i) Jedes S_j ist eine lokal abgeschlossene C^∞ -Mannigfaltigkeit.
- ii) Der Darstellungsraum V ist die disjunkte Vereinigung der S_j .
- iii) Ist $i \neq j$ und $S_i \cap \overline{S_j} \neq \emptyset$, so folgt $S_i \subseteq \overline{S_j}$, $\dim S_i < \dim S_j$ und $S_i < S_j$.
- iv) Es existiert in Bezug auf die partielle Ordnung ein eindeutiges maximales Element; dieses Element ist offen und dicht in V .

Eine solche Menge S_j nennen wir *Schicht* oder *Stratum*; eine Zerlegung mit den oben angegebenen vier Eigenschaften heißt dementsprechend eine *Schichtung* oder eine *Stratifizierung* von V .

Die Schichtung des Darstellungsraumes induziert durch die Hilbertabbildung ρ eine Schichtung $\rho(S_1), \dots, \rho(S_l)$ des Orbitraumes. Jede Schicht $\rho(S_j)$ ist eine C^∞ -Mannigfaltigkeit.

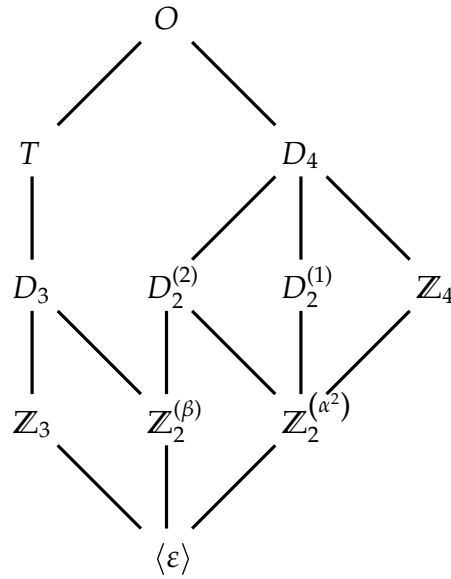
Zusammenfassend: der Orbitraum ist die disjunkte Vereinigung endlich vieler Schichten $\rho(S_1), \dots, \rho(S_l)$, deren Urbilder S_1, \dots, S_l die von den Konjugationsklassen der Isotropiegruppen induzierten Äquivalenzklassen sind. Jede Schicht entspricht einem Symmetriotyp; die Aufgabe wird also sein, in der „richtigen“ Schicht ein Minimum zu konstruieren — bei einer Temperatur, die über der kritischen Temperatur θ_c liegt, wird dies die zu Austenit gehörende Schicht sein, für Temperaturen unter θ_c die zu Martensit gehörende Schicht. In der Sprache der Gruppentheorie ausgedrückt muß also für $\theta > \theta_c$ ein Minimum in der zur Oktaedergruppe O gehörenden Schicht vorliegen, für $\theta < \theta_c$ ein Minimum in der zur D_4 -Symmetrie gehörenden Schicht, denn dies ist die Symmetrie der Niedertemperaturphase Martensit. Zusätzlich soll die austenitische Phase bei einer Temperatur unterhalb der kritischen Temperatur metastabil sein.

Also müssen die Isotropiegruppen bestimmt werden, damit wir die Schichten des Darstellungsraumes analysieren können. Diese Bestimmung wird hier sehr elementar ablaufen; die wesentliche Ingredienz ist nur der *Fixpunktraum* einer Untergruppe Δ der gegebenen Gruppe Γ : definitionsgemäß ist das der Unterraum von V , der genau die Elemente aus V umfaßt, die von Δ festgehalten werden.

Obige Überlegungen ermöglichen es, ein genaueres Bild des konkreten Orbitraumes zu gewinnen. Wir werden im folgenden alle Untergruppen der Oktaedergruppe untersuchen und dabei die Ordnung, den Fixpunktraum und die Anzahl der konjugierten Gruppen studieren. Da Isotropiegruppen definitionsgemäß die maximalen Untergruppen sind, die das zugehörige Element fest lassen, kann man sie leicht aus dem Gruppendiagramm ablesen: Man vergleicht jede Gruppe mit der nächstgrößeren Gruppe. Nimmt dabei die Dimension des Fixpunktraumes ab, ist die kleinere Gruppe eine Isotropiegruppe.

Um den Fixpunktraum zu bestimmen, haben wir einfach alle Untergruppen bestimmt und sie daraufhin untersucht, ob sie Isotropiegruppen sind[‡]. Die nächste Abbildung zeigt das Gruppendiagramm der Oktaedergruppe:

‡ Da die betrachtete Oktaedergruppe diskret ist, ist diese Aufgabe lediglich eine Fleißarbeit. Aus Bequemlichkeit wurde hierbei auf das Softwarepaket GAP zurückgegriffen: mit dessen Hilfe wurde für einen Vertreter jeder Konjugationsklasse der Untergruppen der Oktaedergruppe alle Elemente bestimmt.



Insgesamt ergibt sich folgende Übersicht über die Repräsentanten der Konjugationsklassen der Untergruppen der Oktaedergruppe:

Gruppe Δ	Erzeuger	Fixpunktraum V^Δ	$\dim V^\Delta$	Isotropiegruppe
$Z_2^{(\beta)}$	β	$\{(a, b, a, c, -c, d)\}$	4	ja
$Z_2^{(\alpha^2)}$	α^2	$\{(a, b, c, d, 0, 0)\}$	4	ja
Z_3	$\gamma := (\beta\alpha)^{-1}$	$\{(a, a, a, b, b, -b)\}$	2	nein
Z_4	α	$\{(a, a, c, 0, 0, 0)\}$	2	nein
$D_2^{(1)}$	$\alpha^2, \beta\alpha^2\beta$	$\{(a, b, c, 0, 0, 0)\}$	3	ja
$D_2^{(2)}$	$\beta, \alpha^2\beta\alpha^2\alpha^2$	$\{(a, b, a, 0, 0, c)\}$	3	ja
D_3	$\beta, \alpha\beta\alpha^{-1}$	$\{(a, a, a, b, -b, -b)\}$	2	ja
D_4	β, α^2	$\{(a, b, a, 0, 0, 0)\}$	2	ja
T	$\gamma, \alpha^2\gamma\alpha^2$	$\{(a, a, a, 0, 0, 0)\}$	1	nein
O	α, β	$\{(a, a, a, 0, 0, 0)\}$	1	ja

Zusammenfassend existieren also folgende Symmetrietypen:

$$O, D_4, D_3, Z_2^{(\beta)}, D_2^{(1)}, D_2^{(2)}, Z_2^{(\alpha^2)}, \langle \varepsilon \rangle.$$

Für die weitere Untersuchung hilft die Beobachtung, daß die Darstellung in drei Unterdarstellungen zerfällt: die Darstellung der Spur und einer weiteren, dazu orthogonalen Darstellung auf den Diagonalelementen plus einer Darstellung auf den Außerdiagonalelementen. Deshalb untersuchen wir im folgenden die Außerdiagonalelemente des Piola-Kirchhoffschen Verzerrungstensors getrennt von den Diagonalelementen.

Beginnen wir mit den Außerdiagonalelementen. Auch hier studieren wir die Isotropiegruppen, indem die Dimensionen der Fixpunkträume der Untergruppen verglichen werden. Ein Vorgehen wie eben zeigt, daß folgende Gruppen Isotropiegruppen für die Einschränkung auf die Außerdiagonalelemente sind:

$$O, \quad D_3, \quad D_2^{(2)}, \quad Z_2^{(\beta)}, \quad \langle \varepsilon \rangle.$$

Die Konjugationsklassen der Isotropiegruppen führen zu den Schichten des Darstellungsraumes; zur besseren Übersicht sind die Schichten hier mit der Dimension ihres Fixpunktraumes zusammengestellt:

Schicht zu	O	$[D_3]$	$[D_2^{(2)}]$	$[Z_2^{(\beta)}]$	$\langle \varepsilon \rangle$
dim Fixpunktraum	0	1	1	2	3

Damit rücken wir der Beschreibung des Orbitraumes für die Außerdiagonalelemente näher. Aus der SINGULAR-Rechnung auf Seite 74 lassen sich unmittelbar die primären invarianten Polynome für die Außerdiagonalelemente ablesen:

$$\begin{aligned} \rho_1^0 &:= \rho_3 = e_4^2 + e_5^2 + e_6^2, \\ \rho_2^0 &:= \rho_5 = e_4 e_5 e_6, \\ \rho_3^0 &:= \rho_6 = e_4^4 + e_5^4 + e_6^4. \end{aligned}$$

Mit einfachem Ablesen ist es aber nicht getan. Die hier angegebenen Invarianten sind sicher eine Teilmenge einer Hilbertbasis für die Außerdiagonalelemente. Allerdings könnte es sein, daß sie keine Basis bilden, da in den sekundären Invarianten weitere Basiselemente versteckt sein könnten — auf den ersten Blick sieht es zwar so aus, als ob sich die sekundären Invarianten nicht für Diagonal- und Außerdiagonalelemente entkoppeln lassen, aber sicher sein kann man erst, nachdem man geprüft hat, daß die angegebenen drei Elemente $\rho_1^0, \rho_2^0, \rho_3^0$ schon eine Hilbertbasis auf den Außerdiagonalelementen bilden. Das kann wie eben durch die computergestützte Berechnung einer Invariantenbasis (hier für die Einschränkung der Gruppenoperation auf die Außerdiagonalelemente) und deren Vergleich mit $\rho_1^0, \dots, \rho_3^0$ geschehen. Eine andere Möglichkeit basiert auf der Beobachtung, daß die Gruppe auf die Außerdiagonalelemente eingeschränkt durch Spiegelungen operiert. Daher existiert eine algebraisch unabhängige Hilbertbasis, deren Dimension mit der des Darstellungsraumes übereinstimmt [Che55, Theorem (A)]. Demzufolge existiert hier für die drei Außerdiagonalelemente eine Hilbertbasis aus drei algebraisch unabhängigen Invarianten. Man sieht leicht, daß $\rho_1^0, \dots, \rho_3^0$ eine solche Basis bilden.

Wir verwenden hier den schon erwähnten Satz von Procesi und Schwarz, demzufolge der Orbitraum als die Menge der Punkte charakterisiert werden kann, für die die symmetrischen Minoren der Matrix $\left(\left(\nabla \rho_i^0, \nabla \rho_j^0 \right) \right)_{ij}$ nichtnegativ sind.

Eine einfache Rechnung zeigt

$$\left(\left(\nabla \rho_i^0, \nabla \rho_j^0 \right) \right)_{ij} = \begin{pmatrix} 4\rho_1^0 & 6\rho_2^0 & 8\rho_3^0 \\ 6\rho_2^0 & \frac{1}{2}(\rho_1^0)^2 - \frac{1}{2}\rho_3^0 & 4\rho_1^0\rho_2^0 \\ 8\rho_3^0 & 4\rho_1^0\rho_2^0 & 16 \left(-\frac{1}{2}(\rho_1^0)^3 + 3(\rho_2^0)^2 + \frac{3}{2}\rho_1^0\rho_3^0 \right) \end{pmatrix}.$$

Die Berechnung der Minoren ergibt, daß unterstehende Ungleichungen erfüllt sein müssen:

$$\begin{aligned} \rho_1^0 &\geq 0, \\ \rho_3^0 &\leq \rho_1^{0^2}, \\ -\rho_1^0(\rho_1^{0^2} - 3\rho_3^0) + 6\rho_2^{0^2} &\geq 0, \\ \rho_1^0(\rho_1^{0^2} - \rho_3^0) - 18\rho_2^{0^2} &\geq 0, \\ \rho_1^{0^5} - 2\rho_1^{0^2}\rho_2^{0^2} - 3\rho_1^{0^3}\rho_3^0 + 6\rho_2^{0^2}\rho_2^0 + 2\rho_1^0\rho_3^{0^2} &\leq 0, \\ \rho_1^0(\rho_1^{0^3} - 6\rho_2^{0^2} - 3\rho_1^0\rho_2^0) + 252\rho_3^{0^2} &\leq 0, \\ \rho_1^{0^6} - 20\rho_1^{0^3}\rho_2^{0^2} - 4\rho_1^{0^4}\rho_3^0 + 36\rho_1^0\rho_2^{0^3}\rho_3^0 + 5\rho_1^{0^2}\rho_3^{0^2} + 108\rho_2^{0^4} - 2\rho_3^{0^3} &\leq 0. \end{aligned}$$

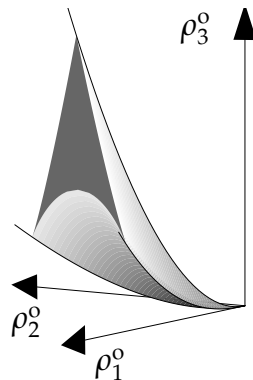
Vergleicht man diese Bedingungen, so sieht man leicht, daß folgende Beschränkungen aktiv sind:

$$\begin{aligned} \rho_1^0 &\geq 0, \\ \rho_3^0 &\leq \rho_1^{0^2}, \\ \rho_1^{0^6} - 20\rho_1^{0^3}\rho_2^{0^2} - 4\rho_1^{0^4}\rho_3^0 + 36\rho_1^0\rho_2^{0^3}\rho_3^0 + 5\rho_1^{0^2}\rho_3^{0^2} + 108\rho_2^{0^4} - 2\rho_3^{0^3} &\leq 0. \end{aligned}$$

Dies ermöglicht eine Interpretation der Schichten des zugehörigen Orbitraumes als Bilder der Fixpunkträume:

Schicht zu	Parametrisierung
O	$\rho_1^0 = \rho_2^0 = \rho_3^0 = 0$
$[D_2^{(2)}]$	$\rho_1^0 = t, \quad \rho_2^0 = 0, \quad \rho_3^0 = t^2$
$[D_3]$	$\rho_1^0 = t, \quad \rho_2^0 = \pm \frac{\sqrt{3}}{9}\sqrt{t^3}, \quad \rho_3^0 = \frac{1}{3}t^2$
$[Z_2^{(\beta)}]$	$\rho_1^0 = t, \quad \frac{1}{3}t^2 < \rho_3^0 < t^2,$
$\langle \varepsilon \rangle$	$\rho_2^0 = \pm \frac{1}{18} \sqrt{30t^3 - 54t\rho_3^0 \pm 6\sqrt{-2t^6 + 18t^4\rho_3^0 - 54t^2\rho_3^{0^2} + 54\rho_3^{0^3}}}$ Inneres

Eine schöne Eigenschaft des Orbitraumes ist, daß man die Situation graphisch veranschaulichen kann:



Die Spitze im Ursprung ist die zu O gehörende Schicht, die Außenflächen gehören zu $[Z_2^{(\beta)}]$, die obere Kante repräsentiert die Schicht zu $[D_2^{(2)}]$, $[D_3]$ findet sich in den beiden unteren Kanten wieder.

Entsprechend wird nun der Orbitraum für die Diagonalelemente studiert. Hier wird die Untersuchung einfacher, da die durch (5.1) gegebene Darstellung auf den Diagonalelementen in eine eindimensionale Darstellung (der Spur entsprechend) und eine zweidimensionale Darstellung zerfällt.

Es existieren folgende Schichten:

Schicht zu	O	$[D_4]$	$[D_2^{(1)}]$
dim Fixpunktraum	1	2	3

Aus der SINGULAR-Rechnung lassen sich die zugehörigen primären invarianten Polynome ablesen:

$$\begin{aligned}\rho_1^d &:= \rho_1 = e_1 + e_2 + e_3, \\ \rho_2^d &:= \rho_2 = e_1^2 + e_2^2 + e_3^2, \\ \rho_3^d &:= \rho_4 = e_1^3 + e_2^3 + e_3^3.\end{aligned}$$

Auch hier rechnet man nach, daß dies bereits eine Hilbertbasis der Diagonalelemente ist. Prinzipiell könnte genauso wie bei den Außerdiagonalelementen vorgegangen werden. Hier wollen wir jedoch zunächst eine Koordinatentransformation durchführen, um eine günstigere Basis der Invarianten zu erhalten. Das Zerfallen der Darstellung dient hierfür als Motivation. Die erste neue Koordinate s parametrisiert den eindimensionalen Fixpunktraum (daher wird es möglich, die erste Invariante abzukoppeln); die beiden anderen Koordinaten t und u sind orthogonal dazu gewählt. Sei

$$s(e_1, e_2, e_3) := \frac{1}{\sqrt{3}}(e_1 + e_2 + e_3),$$

$$t(e_1, e_2, e_3) := \frac{1}{\sqrt{2}}(e_1 - e_2),$$

$$u(e_1, e_2, e_3) := \sqrt{\frac{2}{3}} \left(\frac{1}{2}e_1 + \frac{1}{2}e_2 - e_3 \right).$$

Eine neue Hilbertbasis bezüglich der neuen Koordinaten ist beispielsweise

$$\tilde{\rho}_1^d := s = \frac{1}{\sqrt{3}}(e_1 + e_2 + e_3),$$

$$\tilde{\rho}_2^d := t^2 + u^2,$$

$$\tilde{\rho}_3^d := \frac{3}{\sqrt{2}}t^2u - \frac{1}{\sqrt{2}}u^3.$$

Der Vorteil ist, daß der Fixpunktraum bezüglich dieser Invarianten entkoppelt. Damit ist der zugehörige (Teil-)Orbitraum ein kartesisches Produkt (die lineare Invariante lebt genau auf dem eindimensionalen Fixpunktraum; $\tilde{\rho}_2^d$ ist so gewählt, daß s darin nicht auftritt; es handelt sich nicht um eine direkte Transformation der alten Hilbertbasis $\{\rho_1^d, \rho_2^d, \rho_3^d\}$). Wer mit der Darstellungstheorie endlicher Gruppen etwas vertraut ist, erkennt, daß $\tilde{\rho}_2^d$ und $\tilde{\rho}_3^d$ Invarianten sind, wie man sie von einer Darstellung der D_3 kennt.

Es ergibt sich

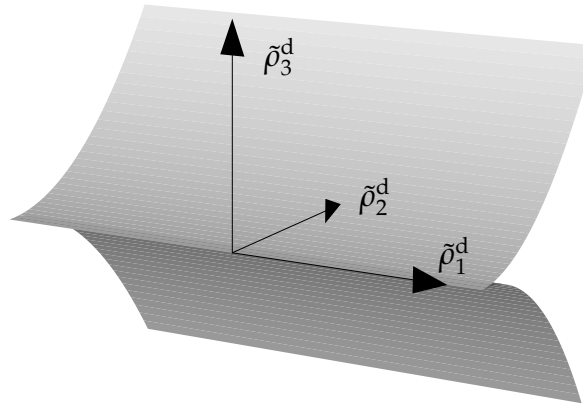
$$\left((\nabla \tilde{\rho}_i^d, \nabla \tilde{\rho}_j^d) \right)_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 4\tilde{\rho}_2^d & 6\tilde{\rho}_3^d \\ 0 & 6\tilde{\rho}_3^d & \frac{9}{2}(\tilde{\rho}_2^d)^2 \end{pmatrix}.$$

Auch hier läßt sich der Orbitraum charakterisieren als die Menge der Punkte, für die die Matrix $\left((\nabla \tilde{\rho}_i^d, \nabla \tilde{\rho}_j^d) \right)_{ij}$ positiv semidefinit ist, also nichtnegative Minoren besitzt. Auswertung dieses Kriteriums liefert eine Beschreibung des Orbitraumes in Gestalt von Ungleichungen

$$\tilde{\rho}_2^d \geq 0,$$

$$\tilde{\rho}_3^d \leq \pm \sqrt{\frac{1}{2}(\tilde{\rho}_2^d)^3}.$$

Im Bild:



Hier ist $\tilde{\rho}_1^d$ seitlich, $\tilde{\rho}_2^d$ nach hinten und $\tilde{\rho}_3^d$ nach oben abgetragen. Die Gerade in der Mitte ist die Schicht zu O , der Rest des Randes gehört zur $[D_4]$, und das Innere repräsentiert $[D_2^{(1)}]$. Zu beachten ist, daß der Orbitraum in der Zeichnung seitlich und nach hinten abgeschnitten wurde, während er sich in Wirklichkeit in diese Richtungen unendlich weit erstreckt. Außerdem sind nur die oberen und unteren Begrenzungsflächen gezeichnet; das Innere gehört ebenfalls zum Orbitraum.

Die wirklich interessante Frage ist natürlich, wie der Orbitraum der Gruppe auf dem kompletten Darstellungsraum aussieht. Im nächsten Unterabschnitt gehen wir darauf ein.

§5.3 Beispiel: Kubisch-tetragonaler Phasenübergang

Exemplarisch vorgeführt werden soll der Übergang einer kubischen Austenitphase in eine tetragonale Martensitphase, d.h. unterhalb der Sprungtemperatur sollen Minima in der Schicht zur Quadersymmetrie D_4 erzeugt werden. Dieser besonders wichtige Fall ist zugleich besonders einfach: Die $[D_4]$ -Schicht zerfällt in eindeutiger Weise in das kartesische Produkt der $[O]$ -Schicht über den Außerdiagonalelementen und der $[D_4]$ -Schicht auf der Diagonalen (betrachtet man im Gruppendiagramm D_4 und O , ist D_4 die kleinste gemeinsame Untergruppe). Wir setzen das Potential als

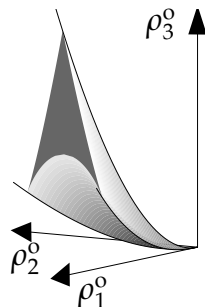
$$\bar{f} = (\rho_1^o, \rho_2^o, \rho_3^o, \tilde{\rho}_1^d, \tilde{\rho}_2^d, \tilde{\rho}_3^d, \theta) := \bar{f}_1(\rho_1^o, \rho_2^o, \rho_3^o, \theta) + \bar{f}_2(\tilde{\rho}_1^d, \tilde{\rho}_2^d, \tilde{\rho}_3^d, \theta)$$

mit noch zu bestimmenden Funktionen \bar{f}_1, \bar{f}_2 an. Das ist nicht der allgemeinste Ansatz: Es treten keine gemischten Terme auf, und die sekundären Invarianten fehlen bis auf die einfachste $\rho_7 = 1$ (vergleiche mit der allgemeinen Form invarianter Polynome nach Cohen-Macaulay!). Die Vernachlässigung der sekundären Invarianten hat ihren Grund. Der „wirkliche“ Orbitraum $\rho(V)$ besteht aus endlich vielen Blättern über dem Bild der primären Invarianten; und dieses Bild ist genau der Orbitraum des Kreuzproduktes aus Diagonal- und Außerdiagonalelementen $\text{im}\rho^d \times \text{im}\rho^o$ (im bezeichnet das Bild einer Abbildung). Die Blätter werden durch die

sekundären Invarianten beschrieben. Insofern spielen die sekundären Invarianten nur eine zweitrangige Rolle. Dies gilt insbesondere in der vorliegenden Situation, da die $[D_4]$ -Schicht aus einem einzigen Blatt besteht (die Orbitgröße einer Gruppe ist hier die Ordnung von O geteilt durch die Ordnung der Gruppe; die Anzahl der primären Invarianten einer Gruppe ist die Ordnung von O mit sich selbst multipliziert geteilt durch die Ordnung der zugehörigen Außerdiagonalgruppe und die Ordnung der Diagonalgruppe; die Zahl der Blätter ist die Anzahl der primären Invarianten geteilt durch die Orbitgröße). Die primären Invarianten entkoppeln auf den drei oben eingeführten Unterräumen (da die zugrundeliegende Gruppe endlich ist). In jedem Unterraum haben wir algebraisch unabhängige Invarianten gefunden. Als Konsequenz daraus ist jede sekundäre Invariante eine Funktion der Außerdiagonal- und der Diagonalelemente, die miteinander multiplikativ verknüpft auftreten. Gleich werden wir sehen, daß für den kubisch-tetragonalen Phasenübergang die richtige Position des Minimums bezogen auf die Außerdiagonalelemente der Ursprung ist; da die sekundären Invarianten homogene Funktionen der primären Invarianten der Außerdiagonalelemente sind, verschwinden sie (bis auf den Sonderfall $\rho_7 = 1$). Deshalb reicht es für die primären Invarianten, das kartesische Produkt der beiden Teilorbiträume (einmal für die Außerdiagonalelemente, einmal für die Diagonalelemente) zu betrachten. Selbstverständlich ist dies nicht der einzig mögliche Weg; allerdings ist es nach den vorausgegangenen Überlegungen in gewisser Weise naheliegend, die primären Invarianten der beiden Teilorbiträume getrennt zu betrachten.

Für den Übergang einer kubischen in eine tetragonale Phase gibt es also eine gute Motivation, nur die primären Invarianten zu betrachten. Sobald man Phasenübergänge studiert, bei denen die relevanten Schichten in mehrere Blätter zerfallen, müssen aber auch die sekundären Invarianten einbezogen werden.

Die Bestimmung von \bar{f}_1 ist leicht: die zu $[D_4]$ gehörige Schicht auf den Außerdiagonalelementen ist $[O]$. Im Orbitraum der Außerdiagonalelemente ist dies, wie wir schon gesehen haben, genau die Spitze des Orbitraumes im Ursprung.



Um ein Minimum in genau dieser Schicht zu erzeugen, kann man also einfach

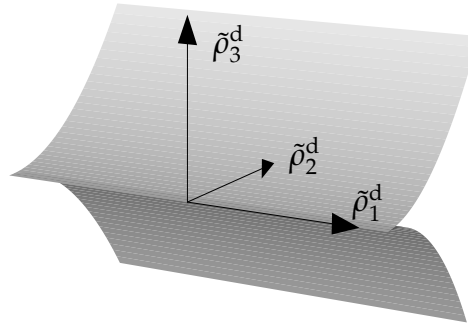
$$\bar{f}_1(\rho_1^o, \rho_2^o, \rho_3^o, \theta) := \rho_1^o$$

setzen. Auch hier sind Varianten denkbar; die vorgeschlagene Möglichkeit ist besonders simpel, da der Orbitraum sich vom gewünschten Minimum aus, eingeschränkt auf die Achse von ρ_1^o , nur in eine Richtung erstreckt. Deshalb reicht hier eine lineare Penalisierung längs ρ_1^o aus, um die Existenz von anderen, unerwünschten Minima zu verhindern. Aufgrund der Ungleichungen $|\rho_2^o| \leq K |\rho_1^o|^{3/2}$ und $|\rho_3^o| \leq K |\rho_1^o|^2$ wird längs der anderen beiden Richtungen gleich „mitbestraft“.

Für die Diagonalelemente ist die zu $[D_4]$ gehörige Schicht zu betrachten. Oben haben wir gesehen, daß dies eine zweidimensionale Schicht ist, parametrisierbar durch

$$\tilde{\rho}_1^d = v, \quad \tilde{\rho}_2^d = w, \quad \tilde{\rho}_3^d = \pm \sqrt{\frac{1}{2}w^3}.$$

Zur Erinnerung noch einmal das Bild des Orbitraumes der Diagonalelemente:



Dabei ist die $[D_4]$ -Schicht die zweidimensionale Begrenzungsfläche des Orbitraums nach oben und nach unten. Um genau in dieser Schicht ein Minimum zu schaffen, betrachte man etwa einen Ausdruck der Gestalt $f(v) := (v - v_0)^2$ mit $v_0 > 0$, der längs der Geraden $v = v_0$ ein Minimum schafft (die Wahl $v_0 = 0$ wäre unzulässig, da diese Menge nach Lemma (5.4) nicht zu $\text{Sym}(n, \mathbb{R})^+$ gehört). Für Phasenübergänge erster Ordnung setzen wir zum Beispiel $g(w) := (\theta - \theta_c + \frac{1}{4})w - \frac{1}{2}w^2 + \frac{1}{3}w^3$; für Phasenübergänge zweiter Ordnung kann man stattdessen zum Beispiel $\tilde{g}(w) := (\theta - \theta_c)w + \frac{1}{3}w^3$ betrachten. Das sind einfache Abwandlungen der klassischen Landauansätze aus dem Eindimensionalen, wobei die eindimensionale Symmetrie herausfaktoriert wurde, die uns im Orbitraum nicht interessiert. Schließlich ist mit $h(x) := (\theta - \theta_c)x := \frac{\sqrt{2}}{2}(\theta - \theta_c)w^{3/2}$ das „Potential auf dem Orbitteilraum“ definiert als

$$\bar{f}_2(v, w, x) := f(v) + \begin{cases} g(w) \\ \tilde{g}(w) \end{cases} + h(x) \text{ für Phasenübergänge } \begin{cases} \text{erster} \\ \text{zweiter} \end{cases} \text{ Ordnung.}$$

Man rechnet nach, daß diese Funktion für $(v, w, x) \in \mathbb{R}^3$ kein Extremum besitzt. Also muß ein Randextremum im Orbitraum vorliegen. Geometrische Überlegungen zeigen sofort, daß das Extremum in Abhängigkeit von der Temperatur

in der richtigen Schicht liegt. Eingeschränkt auf $v = v_0$ wird unter Beachtung von $x = \frac{\sqrt{2}}{2}w^{3/2}$ eine nur von w abhängige Funktion daraus. Eine Kurvendiskussion zeigt, daß diese Funktion in Abhängigkeit von der Temperatur qualitativ genau dort ein Minimum hat, wo man es bei Phasenübergängen erster beziehungsweise zweiter Ordnung erwartet. Eine abschließende Kontrolle zeigt, daß dieses Minimum im zu $\text{Sym}(n, \mathbb{R})^+$ gehörenden Bereich liegt. Da das Potential aus Polynomen aufgebaut ist, ist es automatisch unendlich oft differenzierbar.

Das Potential entsteht durch Addition von \bar{f}_1 und \bar{f}_2 . In den Koordinaten e_1, \dots, e_6 ausgeschrieben lautet es bei geeigneter Wahl von v_0 für einen Phasenübergang erster Art

$$\begin{aligned} \Phi(e_1, \dots, e_6) = & e_4^2 + e_5^2 + e_6^2 + \frac{1}{3} (e_1 + e_2 + e_3 - 1)^2 \\ & + \left(\theta - \theta_c + \frac{1}{4} \right) \left(\frac{1}{2} (e_1 - e_2)^2 + \frac{2}{3} \left(\frac{1}{2} e_1 + \frac{1}{2} e_2 - e_3 \right)^2 \right) \\ & - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} (e_1 - e_2)^2 + \frac{2}{3} \left(\frac{1}{2} e_1 + \frac{1}{2} e_2 - e_3 \right)^2 \right)^2 \\ & + \frac{1}{3} \left(\frac{1}{2} (e_1 - e_2)^2 + \frac{2}{3} \left(\frac{1}{2} e_1 + \frac{1}{2} e_2 - e_3 \right)^2 \right)^3 \\ & + \frac{\sqrt{2}}{2} (\theta - \theta_c) \left(\frac{1}{2} (e_1 - e_2)^2 + \frac{2}{3} \left(\frac{1}{2} e_1 + \frac{1}{2} e_2 - e_3 \right)^2 \right)^{\frac{3}{2}}. \end{aligned}$$

§5.4 Konstruktion eines Potentials für §4

Das gerade aufgeführte Beispiel erfüllt die gestellten physikalischen Bedingungen, nicht aber die Anforderungen (FE1)–(FE6) für den Existenzsatz aus §4. Hier soll noch kurz erläutert werden, mit welchen Modifikationen man die dort aufgestellten Glattheits- und Wachstumsbedingungen in die obige freie Energie einbauen kann. Einmal wurde der Orbitraum oben durch die Funktion $\theta \mapsto \theta - \theta_c$ parametrisiert; für einen beliebig großen Bereich läßt sich das durch eine Funktion wie $\theta \mapsto \arctan(\theta - \theta_c)$ ganz analog erreichen. Die Wachstumsbedingungen an die freie Energie als Funktion der Verzerrungen lassen sich leicht realisieren — wählt man eine Abschneidefunktion ζ auf dem Orbitraum mit der in (FE1) verlangten Glattheit, betrachtet man einfach das Produkt $\zeta \bar{f}_j$ anstelle von \bar{f}_j ($j = 1, 2$). Das so erhaltene Potential erfüllt alle Glattheits- und Wachstumsbedingungen, sieht durch das Abschneiden für große Verzerrungen jedoch nicht sehr „potentialartig“ aus. Verbessern läßt sich das, indem man zusätzlich einen Term wie $(1 - \zeta) \left(c_1 \sqrt{\rho_2^d} + c_2 \right)$

hinzufügt; damit wird für große Verzerrungswerte bis auf Konstanten nur der Radius auf den Diagonalelementen dazuaddiert, die entstandene Funktion ist nahe Unendlich linear. Strebt man nur Lipschitzstetigkeit an, gewinnt man noch mehr Spielraum bei der Definition der Funktion.

§5.5 Konstruktion glatter invarianter Funktionen

Im letzten Abschnitt haben wir eine nichtpolynomiale freie Energie konstruiert, um Wachstumsbedingungen zu erfüllen. In diesen Kontext gehört ein klassisches, schon zitiertes Resultat von Schwarz [Sch75] zur Beschreibung glatter symmetrieminvarianter Funktionen mittels des Orbitraumes:

(5.6) PROPOSITION. (Erzeugung aller C^∞ -Potentiale)

Sei Γ eine kompakte Liegruppe. Dann läßt sich jede Γ -invariante C^∞ -Funktion als glatte Funktion auf dem eingebetteten Orbitraum darstellen.

BEMERKUNG. Dieses Ergebnis stellt eine Verallgemeinerung von Satz (5.1) dar.

Die gute Nachricht ist also, daß sich im Prinzip eine sehr große Klasse von Funktionen, deren Symmetriegruppe die genannten Eigenschaften besitzt, auf dem in diesem Kapitel geschilderten Weg erzeugen läßt. Formal lassen sich die aus der Literatur bekannten Potentiale [Pau96, FK90] über den Orbitraum faktorisieren. Allerdings muß man natürlich im Auge behalten, daß keinesfalls garantiert ist, daß die hier ausgeführten „Rechenschritte“ sich in anderen Situationen in praktikabler Rechenzeit durchführen lassen! Anders formuliert: Theoretisch enthält der Orbitraum alle Informationen über invariante Funktionen, praktisch kann aber die Bestimmung des Orbitraumes unüberwindbare Schwierigkeiten bereiten.

Als Ausklang noch ein paar Anmerkung zur Klassifikation von Phasenübergängen zweiter Ordnung. Im Kern geht es dabei um die Frage, ob es möglich ist, eine Funktion zu konstruieren, die ihr Minimum für bestimmte Koeffizienten der invarianten Polynome in der einen Phase, für infinitesimal gestörte Koeffizienten ihr Minimum in einer anderen Phase hat. Sobald man zeigen kann, daß zwei Schichten im Orbitraum vollständig durch weitere Schichten getrennt sind, existiert keine solche Funktion, denn eine infinitesimale Änderung der Koeffizienten führt zunächst zu einem Minimum in der dazwischenliegenden Phase. Allerdings ist im vorliegenden Fall die Schicht der Hochsymmetriephase von keiner weiteren Schicht getrennt. Relevant sein könnten diese Überlegungen hier also nur für kompliziertere mehrstufige Phasenumwandlungen, bei denen jeweils die globale Hochtemperatursymmetrie als Symmetriegruppe zugrundegelegt wird. Die Landautheorie zur Klassifikation der Phasenübergänge zweiter Ordnung [LL87, §145] basiert auf anderen Argumenten wie dem Ausschluß invarianter Polynome dritten Grades.

Für invariante Funktionen aus $C^n(\mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R})$ ist die Situation komplizierter, vergleiche [Rum98]. Im Prinzip ist es aber möglich, analog zum beschriebenen Verfah-

ren vorzugehen.

Der Vollständigkeit halber noch ein Nachtrag zur Identifikation von Orbitraum und Bild der Hilbertabbildung: Man kann zeigen, daß sich auf \mathbb{R}^m / Γ und $\rho(\mathbb{R}^m)$ differenzierbare Strukturen einführen lassen und daß $\bar{\rho}$ diese Strukturen identifiziert [Sch75].

§5.6 Vergleich mit anderen Methoden

Die Konstruktion von Landaupotentialen ist bereits von einer Reihe von Autoren studiert worden, vergleiche etwa [FK90, Pau96] und die Monographie [TT87]. Die Methode von Falk und Konopka hat im Vergleich zu [Pau96] den Vorteil, daß die Erfüllung der notwendigen Symmetriebeziehungen keine Einschränkung an die Wahl der Temperatur nach sich zieht. Deshalb soll auf die Arbeit [FK90] kurz eingegangen werden. Was sind die Unterschiede zwischen der Konstruktion nach Falk und Konopka und der hier vorgestellten Methode? Die ersten Schritte ähneln sich; allerdings wird die Menge der invarianten Polynome in [FK90] als Vektorraum aufgefaßt und hier als Algebra. Der Vorteil der Interpretation als Vektorraum ist natürlich die einfachere Handhabung; dafür ist die Algebra anders als der Vektorraum endlich erzeugt und die Einführung des Orbitraumes ermöglicht es, eine angemessene Geometrie auf dem Raum der Verzerrungstensoren einzuführen. Das erleichtert es, Stabilitätsuntersuchungen durchzuführen und nachzuweisen, daß keine anderen Minima (etwa auf anderen Schichten) existieren (was im Vektorraumfall noch auszuführen ist). Interpretiert man die Menge der invarianten Polynome als Vektorraum, wird man bei der Konstruktion eines konkreten Potentials einen endlichdimensionalen Untervektorraum betrachten, typischerweise den der Polynome bis zu einem gewissen Grad. In einem solchen Unterraum lassen sich Wachstumsbedingungen im allgemeinen nicht realisieren; ein Vorgehen wie in §5.6 ist also normalerweise nicht möglich.

Die oben erwähnten Potentiale nach [FK90, Pau96] werden in der numerischen Simulation kaum eingesetzt. Viel populärer ist die zunächst für zwei Raumdimensionen entwickelte Ericksen-James-Energie [Eri80, Eri86, Eri87], die einen kubisch-tetragonalen Phasenübergang erster Ordnung modelliert. Eine Übertragung auf andere Phasenübergänge existiert nicht. In §5.3 ist angedeutet, daß eine solche Übertragung im allgemeinen auch nicht so leicht sein wird, da die sekundären Invarianten normalerweise nicht vernachlässigt werden dürfen und erheblich mehr Überlegungen erforderlich sind, um auf einem eindeutig bestimmten Blatt ein Minimum zu erzeugen. Eine Übersicht über die numerische Simulation der betrachteten Phasenübergänge, auch mit der Ericksen-James-Energie, findet sich in [Lus96].

Mit dem hier vorgestellten Konstruktionsverfahren lassen sich nach Proposition (5.6) alle glatten invarianten Potentiale erzeugen, insbesondere auch die eben genannten Beispiele. Genauso ist es unerheblich, ob Phasenübergänge erster oder

zweiter Ordnung beschrieben werden, sofern die eine Symmetriegruppe eine Untergruppe der anderen ist, wie es bei Phasenübergängen zweiter Ordnung immer der Fall ist.

Man darf aber nicht außer acht lassen, daß hier eher ein Kochrezept für freie Energien angegeben wurde denn eine konkrete freie Energie. In ein konkretes Beispiel muß ja mehr einfließen als nur Mathematik — erst eine Bestimmung der Parameter aufgrund von physikalischen Überlegungen liefert eine physikalisch sinnvolle Energie. Die Überlegungen in [FK90] mögen hierfür als Anregung dienen. Diese Aufgabe ist auch aus abstrakter Sicht reizvoll: Dabei geht es darum, physikalische Größen mit den Koeffizienten der Taylorentwicklung zu identifizieren. Eine Taylorentwicklung auf dem Orbitraum bedeutet ein Studium der auf dem Orbitraum lokalen Situation. Ein geeignetes Werkzeug dafür ist der Scheibensatz (vergleiche zum Beispiel [Jän68, Rum97]). Man gewinnt dadurch eine physikalische Interpretation des Orbitraumes.

Anhang: Verwendete mathematische Sätze

In diesen Abschnitt sind einige Aussagen allgemeiner Natur ausgelagert, damit die logische Entwicklung der vorhergehenden Abschnitte nicht unterbrochen wird. Um dem Leser entgegenzukommen, wollen wir diese wichtigen verwendeten Aussagen klassischer Natur hier zusammenstellen.

1. Kontinuumsmechanik und Elastizitätstheorie

(A.7) SATZ. (Cauchy)

Ist $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ eine Referenzkonfiguration, $u(x, t)$ eine Bewegung, $f(x, t)$ die Körperkraftintensität pro Einheitsreferenzvolumen in (x, t) , $\tau(x, t; \nu(x))$ die vom Normalenfeld $\nu(x)$ abhängige Oberflächenkraft pro Einheitsreferenzfläche von Ω in (x, t) und ρ die Massendichte, so gilt: Sind $\tau(\cdot, t; \nu(x))$ und $\rho u_{tt}(\cdot, t) - f(\cdot, t)$ stetig, existiert ein Tensor zweiter Stufe $\sigma^{\text{PK}}(\cdot, t)$, so daß

$$\tau(x, t; \nu(x)) = \sigma^{\text{PK}}(x, t) \cdot \nu(x)$$

erfüllt ist. Dieser Tensor heißt (**erster**) **Piola-Kirchhoffscher Spannungstensor**.

Beweis: Siehe z.B. [Ant95, XII.7.14] oder [Cia88, Theorem 2.3-1].

2. Maßtheorie

(A.8) SATZ. (Egorov)

Seien $X \subset \mathbb{R}^k$ eine Menge mit endlichem Maß und $f_j: X \rightarrow \mathbb{R}^l$ ($j \in \mathbb{N}$) meßbare Funktionen mit $f_j \rightarrow f$ fast überall. Dann existiert für jedes $\varepsilon > 0$ eine Menge $E \subseteq X$ mit $\text{meas}(E) < \varepsilon$, so daß f_j auf $X \setminus E$ sogar gleichmäßig konvergiert.

Beweis: In [Fol99, 2.33] ist der Satz von Egoroff für komplexwertige Funktionen formuliert und bewiesen; der Beweis läßt sich ohne Änderungen auf die hier vorliegende Situation übertragen. \square

3. Funktionalanalytische Aussagen

(A.9) SATZ. (Kompakte Einbettung in Banachräumen)

Seien X_0, X_1 reflexive Banachräume und X ein Banachraum, für den folgende Einbettung gilt:

$$X_0 \xrightarrow{\text{kompakt}} X \xrightarrow{\text{stetig}} X_1.$$

Sei $1 < p, q < \infty$. Der Raum $Y := \{u \mid u \in L^p([0, T[\rightarrow X_0), u_t \in L^q([0, T[\rightarrow X_1))\}$ ist, versehen mit der Norm

$$\|u\|_Y := \|u\|_{L^p([0, T[\rightarrow X_0)} + \|u_t\|_{L^q([0, T[\rightarrow X_1)}$$

ein Banachraum, der kompakt in den $L^p([0, T[\rightarrow X)$ eingebettet ist:

$$Y \xrightarrow{\text{kompakt}} L^p([0, T[\rightarrow X).$$

Beweis: Dies ist eine Folgerung aus dem Ehrling-Lemma (siehe z.B. [Alt92, 8.3]); der Beweis findet sich in [Lio69, Théorème 1.5.1] oder [Tem85, Lemma III.2.1].

(A.10) SATZ. (Schauderscher Fixpunktsatz)

Sei B eine nichtleere, beschränkte und konvexe Teilmenge eines Banachraumes X . Jeder stetige kompakte Operator $\Psi: B \rightarrow B$ besitzt einen Fixpunkt.

Beweis: Vergleiche [Zei93, Theorem 2.A]. □

4. Darstellungstheorie und Liethorie

(A.11) SATZ. (Haarsches Integral)

Ist Γ eine kompakte Liegruppe und $C^0(\Gamma \rightarrow \mathbb{R})$ der (reelle) Vektorraum der stetigen Funktionen auf Γ . Dann existiert ein eindeutig bestimmtes lineares Funktional \int , das monoton, normalisiert (d.h. $\int 1 = 1$) und linksinvariant (d.h. $\int_{\Gamma} f(\gamma) d\gamma = \int_{\Gamma} f(\gamma'\gamma) d\gamma$ für alle $f \in C^0(\Gamma \rightarrow \mathbb{R}), \gamma' \in \Gamma$) ist.

Beweis: Siehe zum Beispiel [BtD95, Theorem I.8.13]. □

Bibliographie

- [Ach90] M[anfred] Achenbach. A Model of Shape Memory Alloys as a Solid/Solid Phase Transition. In K[arl-Heinz] Hoffmann und J[ürgen] Sprekels, Hrsg., *Free Boundary Problems: Theory and Applications*, Seiten 796–801. International Colloquium on Free Boundary Problems: Theory and Applications, 1990.
- [Alt92] Hans Wilhelm Alt. *Lineare Funktionalanalysis*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg u.a., 2. Auflage, 1992.
- [AM76] Neil W. Ashcroft und N. David Mermin. *Solid State Physics*. HRW International Editions, 1976.
- [AM83] M[anfred] Achenbach und I[ngo] Müller. Creep and Yield in Martensitic Transformations. *Ingenieur-Archiv*, 53:73–83, 1983.
- [Ant95] Stuart S. Antman. *Nonlinear Problems of Elasticity*. Band 107 der Applied Mathematical Sciences. Springer-Verlag, 1995.
- [AS81] M[ario] Abud und G[ianfranco] Sartori. The geometry of orbit-space and natural minima of Higgs potentials. *Physics Letters B*, 104(2):147–152, 1981.
- [AS83] M[ario] Abud und G[ianfranco] Sartori. The Geometry of Spontaneous Symmetry Breaking. *Annals of Physics*, 150:307–372, 1983.
- [BG00] D[ominique] Blanchard und O[livier] Guibé. Existence of a solution for a nonlinear system in thermoviscoelasticity. *Advances in Differential Equations*, 5:1221–1252, 2000.
- [BJ87] J[ohn] M. Ball und R[ichard] D. James. Fine Phase Mixtures as Minimizers of Energy. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 100:13–52, 1987.
- [Bla93] Dominique Blanchard. Truncations and monotonicity methods for parabolic equations. *Nonlinear Analysis. Theory, Methods & Applications*, 21(10):725–743, 1993.

- [BM97] D[ominique] Blanchard und F[rançois] Murat. Renormalised solutions of nonlinear parabolic problems with L^1 data: existence and uniqueness. *Proceedings of the Royal Society of Edinburgh. Section A. Mathematics*, 127(6):1137–1152, 1997.
- [BR98] Dominique Blanchard und Hicham Redwane. Renormalized solutions for a class of nonlinear evolution problems. *Journal de Mathématiques Pures et Appliquées. Neuvième Série*, 77(2):117–151, 1998.
- [BS96] Martin Brokate und Jürgen Sprekels. *Hysteresis and Phase Transitions*. Band 121 der Applied Mathematical Sciences. Springer-Verlag, 1996.
- [BtD95] Theodor Bröcker und Tammo tom Dieck. *Representation of Compact Lie Groups*. Band 98 der Graduate Texts in Mathematics. Springer-Verlag, 1995.
- [CH94a] Zhiming Chen und Karl-Heinz Hoffmann. Asymptotic Behaviors of Landau-Devonshire-Ginzburg Model for Structural Phase Transitions in Shape Memory Alloys. *Advances in Mathematical Sciences and Applications. An International Journal*, 4(1):209–226, 1994.
- [CH94b] Zhiming Chen und K[arl-Heinz] Hoffmann. On a One-Dimensional Nonlinear Thermoviscoelastic Model for Structural Phase Transitions in Shape Memory Alloys. *Journal of Differential Equations*, 112(2):325–350, 1994.
- [Che55] Claude Chevalley. Invariants of finite groups generated by reflections. *American Journal of Mathematics*, 77:778–782, 1955.
- [Cia88] Philippe G. Ciarlet. *Mathematical Elasticity. Volume 1: Three-dimensional Elasticity*. Band 20 der Studies in mathematics and its applications. North-Holland, Amsterdam, New York, Oxford, Tokyo, 1988.
- [CS92] Pierluigi Colli und Jürgen Sprekels. Global Existence for a Three-dimensional Model for the Thermo-mechanical Evolution of Shape Memory Alloys. *Nonlinear Analysis. Theory, Methods & Applications*, 18(9):873–888, 1992.
- [CS95] Pierluigi Colli und Jürgen Sprekels. Global solution to the full one-dimensional Frémond model for shape memory alloys. *Mathematical Methods in the Applied Sciences*, 18(5):371–385, 1995.
- [Dac89] Bernard Dacorogna. *Direct Methods in the Calculus of Variations*. Band 78 der Applied Mathematical Sciences. Springer-Verlag, 1989.
- [Daf82] C[onstantine] M. Dafermos. Global smooth solutions to the initial-boundary value problem for the equations of one-dimensional nonlinear

- thermoviscoelasticity. *SIAM Journal on Mathematical Analysis*, 13(3):397–408, 1982.
- [Dem96] Sophia Demoulini. Young Measure Solutions for a Nonlinear Parabolic Equation of Forward-Backward type. *SIAM Journal on Mathematical Analysis*, 27(2):376–403, 1996.
- [DH82] C[onstantine] M. Dafermos und L[ing] Hsiao. Global smooth thermo-mechanical processes in one-dimensional nonlinear thermoviscoelasticity. *Nonlinear Analysis. Theory, Methods & Applications*, 6(5):435–454, 1982.
- [DL89a] R[onald] J. DiPerna und P[ierre-Louis] Lions. On the Cauchy problem for Boltzmann equations: global existence and weak stability. *Annals of Mathematics. Second Series*, 130(2):321–366, 1989.
- [DL89b] R[onald] J. DiPerna und P[ierre-Louis] Lions. Ordinary differential equations, transport theory and Sobolev spaces. *Inventiones Mathematicae*, 98(3):511–547, 1989.
- [DS88] Nelson Dunford und Jacob T. Schwartz. *Linear Operators. Part I: General Theory*. John Wiley & Sons, 1988.
- [EG92] Lawrence C. Evans und Ronald F. Gariepy. *Measure Theory and Fine Properties of Functions*. Studies in Advanced Mathematics. CRC Press, Boca Rota, 1992.
- [Eri80] J[erry] L. Ericksen. Some Phase Transitions in Crystals. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 73:99–124, 1980.
- [Eri86] Jerry L. Ericksen. Constitutive theory for some constrained elastic crystals. *International Journal of Solids and Structures*, 22:951–964, 1986.
- [Eri87] Jerry L. Ericksen. Some constrained elastic crystals. In John M. Ball, Hrsg., *Material Instabilities in Continuum Mechanics and Related Problems*, Seiten 119–137. Oxford University Press, Oxford, 1987.
- [Fal80a] F[ritz] Falk. Model free energy, mechanics, and thermodynamics of shape memory alloys. *Acta Metallurgica et Materialia*, 28:1773–1780, 1980.
- [Fal80b] F[ritz] Falk. Wie hängt die Freie Energie einer Memory-Legierung von der Verzerrung ab? *Zeitschrift für angewandte Mathematik und Mechanik*, 60:T118–T120, 1980.
- [FD97] G[ero] Friesecke und G[eorg] Dolzmann. Implicit time discretization and global existence for a quasilinear evolution equation with nonconvex energy. *SIAM Journal on Mathematical Analysis*, 28(2):363–380, 1997.

- [FK90] F[ritz] Falk und P. Konopka. Three-dimensional Landau theory describing the martensitic phase transformation of shape-memory alloys. *J. Phys.: Condensed Matter*, 2:61–77, 1990.
- [Fli99] Torsten Fliessbach. *Statistische Physik. Lehrbuch zur Theoretischen Physik IV*. Spektrum Akademischer Verlag, 3. Auflage, 1999.
- [Fol99] Gerald B. Folland. *Real Analysis: Modern Techniques and Their Applications*. Pure and Applied Mathematics. John Wiley & Sons, New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto, 2. Auflage, 1999.
- [GPS98] Gert-Martin Greuel, Gerhard Pfister und Hans Schönemann. Singular version 1.2 User Manual. In *Reports On Computer Algebra*. Centre for Computer Algebra, Universität Kaiserslautern, Juni 1998.
- [Hau00] Peter Haupt. *Continuum Mechanics and Theory of Materials*. Advanced Texts in Physics. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg u.a., 2000.
- [Hen81] Dan Henry. *Geometric Theory of Semilinear Parabolic Equations*. Band 840 der Lecture Notes in Mathematics. Springer-Verlag, 1981.
- [HMS94] Y[ongzhong] Huo, I[ngo] Müller und S[tefan] Seelecke. Quasiplasticity and Pseudoelasticity in Shape Memory Alloys. In Augusto Visintin, Hrsg., *Phase Transitions and Hysteresis: lectures given at the 3rd Session of the Centro Internazionale Matematico Estivo Montecatini Terme, Italy, July 13–21, 1993*, Band 1584 der Lecture Notes in Mathematics, Seiten 87–146. Springer-Verlag, 1994.
- [Hon84] Toshio Honma. Types and Mechanical Characteristics of Shape Memory Alloys. In Hiroyasu Funakubo, Hrsg., *Shape Memory Alloys*, Seiten 61–115. Gordon and Breach Science Publishers, New York London Paris Montreux Tokyo Melbourne, 1984.
- [HR74] Melvin Hochster und Joel L. Roberts. Rings of invariants of reductive groups acting on regular rings are Cohen-Macaulay. *Advances in Mathematics*, 13:115–175, 1974.
- [HZ92] K[arl-Heinz] Hoffmann und A[ntoni] Źochowski. Existence of Solutions to some Non-linear Thermoelastic System with Viscosity. *Mathematical Methods in the Applied Sciences*, 15:187–204, 1992.
- [HZ98] K[arl-Heinz] Hoffmann und A[ntoni] Źochowski. Control of the thermoelastic model of a plate activated by shape memory alloy reinforcements. *Mathematical Methods in the Applied Sciences*, Seiten 589–603, 1998.

- [Jän68] Klaus Jänich. *Differenzierbare G-Mannigfaltigkeiten*. Band 59 der Lecture Notes in Mathematics. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, 1968.
- [Jia93] Song Jiang. Global large solutions to initial boundary value problems in one-dimensional nonlinear thermoviscoelasticity. *Quarterly of Applied Mathematics*, 51:731–744, 1993.
- [Kha83] A. G. Khachaturyan. *Theory of Structural Transformations in Solids*. John Wiley & Sons, New York, Chichester, Brisbane, Toronto, Singapore, 1983.
- [KP92] David Kinderlehrer und Pablo Pedregal. Weak convergence of integrands and the Young measure representation. *SIAM Journal on Mathematical Analysis*, 23(1):1–19, 1992.
- [Lio69] Jacques-Louis Lions. *Quelques méthodes de résolution des problèmes aux limites non linéaires*. Dunond, Paris, 1969.
- [Lio96] Pierre-Louis Lions. *Mathematical topics in fluid mechanics. Vol. 1*. The Clarendon Press Oxford University Press, New York, 1996.
- [Lju62] G. J. Ljubarski. *Anwendungen der Gruppentheorie in der Physik*. VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, 1962.
- [LL87] L. D. Landau und E. M. Lifschitz. *Lehrbuch der theoretischen Physik. Band V. Statistische Physik, Teil 1*. Akademie-Verlag, Berlin, 7. Auflage, 1987.
- [Lus96] Mitchell Luskin. On the computation of crystalline microstructure. *Acta Numerica*, 5:191–257, 1996.
- [MS96] Ingo Müller und Stefan Seelecke. Thermodynamic Aspects of Shape Memory Alloys. In G. Airoldi, Hrsg., *Shape memory Alloys—From Microstructure to Macroscopic Properties*. TransTech Publ., 1996.
- [Mül94] Ingo Müller. *Grundzüge der Thermodynamik*. Springer-Verlag, 1994.
- [MW80] I[ngo] Müller und K[rzysztof] Wilmański. A Model for Phase Transitions in Pseudoelastic Bodies. *Il Nuovo Cimento*, 57 B(2):283–318, 1980.
- [Pau93] Wilfried H. Paus. Existence and Uniqueness of Local Solutions in Time for a Three-Dimensional Model on Shape Memory Alloys. Technical Report 301, SFB 256, Rheinische Friedrich-Willhelms-Universität Bonn, 1993.
- [Pau96] Wilfried H. Paus. Stored Energy Potentials for Shape Memory Alloys. Technical Report 492, SFB 256, Rheinische Friedrich-Willhelms-Universität Bonn, 1996.

- [PS85] Claudio Procesi und Gerald Schwarz. Inequalities defining orbit spaces. *Inventiones Mathematicae*, Seiten 539–554, 1985.
- [PZ99] Irena Pawłow und Antoni Żochowski. Nonlinear thermoelastic system with viscosity and nonlocality. Erscheint in den Proceedings der International Conference on Free Boundary Problems: Theory and Applications, November 7–13, 1999, Keyaki-Kaikan in Chiba University, Japan, 1999.
- [Rie99] Marc Oliver Rieger. Young-Measure Solutions for Diffusion Elasticity Equations. Manuscript, 1999.
- [Rou99] Tomáš Roubíček. Dissipative evolution of microstructure in shape memory alloys. In Hans-Joachim Bungartz, Ronald Heinz Willibald Hoppe und Christoph Zenger, Hrsg., *Lectures on Applied Mathematics*. Springer-Verlag, 1999.
- [Rum97] Matthias Rumberger. *Symmetrische dynamische Systeme: Differenzierbarkeit und linearisierte Stabilität*. Dissertation, Universität Hamburg, Fachbereich Mathematik, 1997.
- [Rum98] Matthias Rumberger. Finitely differentiable invariants. *Mathematische Zeitschrift*, 229:675–694, 1998.
- [RZ97] Reinhard Racke und Songmu Zheng. Global Existence and Asymptotic Behaviour in Nonlinear Thermoviscoelasticity. *Journal of Differential Equations*, 134:46–67, 1997.
- [Sch75] Gerald W. Schwarz. Smooth function invariant under the action of a compact Lie group. *Topology*, Seiten 63–68, 1975.
- [See99] Stefan Seelecke. Adaptive Strukturen mit Formgedächtnisaktoren—Modellierung und Simulation. Habilitation, Technische Universität Berlin, 1999.
- [Spr89] Jürgen Sprekels. Global Existence for Thermomechanical Processes with Nonconvex Free Energies of Ginzburg-Landau Form. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 141:333–348, 1989.
- [ST84] Kenichi Shimizu und Tsugio Tadaki. Shape Memory Effect: Mechanism. In Hiroyasu Funakubo, Hrsg., *Shape Memory Alloys*, Seiten 1–60. Gordon and Breach Science Publishers, New York London Paris Montreux Tokyo Melbourne, 1984.
- [Stu93] Bernd Sturmfels. *Algorithms in Invariant Theory*. Texts and Monographs in Symbolic Computation. Springer-Verlag, Wien New York, 1993.

- [SZ89] Jürgen Sprekels und Songmu Zheng. Global solutions to the equations of a Ginzburg-Landau theory for structural phase transitions in shape memory alloys. *Physica D*, 39:59–76, 1989.
- [Tem85] Roger Temam. *Navier-Stokes equations: Theory and Numerical Analysis*. Band 2 der Studies in mathematics and its applications. North-Holland, Amsterdam, New York, Oxford, 1985.
- [Tru93] L[ev] Truskinovsky. Kinks versus shocks. In J.E. Dunn, Roger Fosdick und Marshall Slemrod, Hrsg., *Shock Induced Transitions and Phase Structures in General Media*, Band 52 der The IMA volumes in mathematics and its applications, Seiten 185–229. Springer-Verlag, New York Berlin Heidelberg, 1993.
- [Tru94a] L[ev] Truskinovsky. About the “normal growth” approximation in the dynamical theory of phase transitions. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 6:185–208, 1994.
- [Tru94b] Lev Truskinovsky. Transition to Detonation in Dynamic Phase Changes. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 125:375–397, 1994.
- [Tru97] Lev Truskinovsky. Nucleation and Growth in Elastodynamics. To be published in: *Dynamics of Crystal Surfaces and Interfaces*, Ed. P.M. Duxbury, T. Pence, *Fundamental Material Sciences*, Plenum, 1997, 1997.
- [TT87] Jean-Claude Tolédano und Pierre Tolédano. *The Landau theory of phase transitions*. World Scientific, Singapore, New Jersey, Hong Kong, 1987.
- [Wat00] Stephen J. Watson. Unique global solvability for initial value problems in one-dimensional nonlinear thermoviscoelasticity with phase transitions. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 153(1):1–37, 2000.
- [Way64] C[larence] M[arvin] Wayman. *Introduction to the Crystallography of Martensitic Transformations*. Macmillan Series in Material Science. Macmillan, New York, 1964.
- [Wey73] Hermann Weyl. *The classical groups: their invariants and representations*. Princeton University Press, Princeton, 1973.
- [WLR53] M. S. Wechsler, D. S. Lieberman und T. A. Read. On the Theory of the Formation of Martensite. *Transactions of the American Institute of Mining and Metallurgical Engineers*, 197:1503–1515, 1953.
- [Xie94] Yihuan Xie. *Modell zur Simulierung einer mehrphasigen Gedächtnislegierung unter mehrachsiger Belastung*. Dissertation, Technische Universität Berlin, 1994.

- [Zei93] Eberhard Zeidler. *Nonlinear Functional Analysis and its Applications I: Fixed-Point Theorems*. Springer-Verlag, New York Berlin Heidelberg u.a., 1993.
- [Zhe89] Songmu Zheng. Global solutions to the thermomechanical equations with nonconvex Landau-Ginzburg free energy. *Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik*, 40:111–127, 1989.