

Die Level Set Methode für das Stefan Problem

CES Master Seminararbeit

Autor:

Marco Schoos
RWTH Aachen
marco.schoos@rwth-aachen.de
Matrikelnr.: 312553

Betreuerin:

Dr. Julia Kowalski
AICES

Aachen, 2016

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	5
2	Das Stefan Problem	5
3	Die Level Set Methode	6
3.1	Idee der Level Set Methode	6
3.2	Update der Level Set Funktion	7
3.3	(Re)Initialisierung der signed distance Funktion	8
3.4	Update des Temperaturfeldes	8
4	Diskretisierung	9
4.1	Diskretisierung des Updates der Level Set Funktion	9
4.1.1	Approximation des Temperatursprungs	9
4.1.2	Stetige Erweiterung des Temperatursprungs	10
4.1.3	Berechnung der Geschwindigkeitsfunktion F	10
4.1.4	Diskretisierung der Advektionsgleichung	11
4.2	Diskretisierung der (Re)Initialisierung der signed distance Funktion	11
4.3	Diskretisierung der Temperaturgleichung	12
4.4	Algorithmus	14
5	Ergebnisse	14

Abbildungsverzeichnis

1	Darstellung des zweiphasigen Gebietes	5
2	Beispielplot einer signed distance Funktion mit Contourplot	7
3	Darstellung der vier Koordinatenrichtungen x, y, η und ζ	7
4	Beispiel für ein Feld des Temperatursprungs in einer Dimension	9
5	Beispiel für eine stetige Erweiterung eines Feldes des Temperatursprungs in einer Dimension .	10
6	Beispiel für die Konstruktion von P_L	12
7	Analytische Lösung für das Stefan Problem	14

Abkürzungsverzeichnis

Lateinische Symbole

Symbol	Beschreibung	Einheit
c	Wärmekapazität	J K^{-1}
cfl	CFL-Zahl	–
D	Vereinigung der Gebiete der flüssigen und festen Phase	–
d	euklidischer Abstand	m
F	Geschwindigkeitsfunktion	–
G	Godunov Funktion	–
h	Gitterweite	m
k	Wärmeleitfähigkeit	$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$
L	Latente Erstarrungswärme	J
\mathbf{n}	Normalvektor der Phasengrenze	m
S	Vorzeichenfunktion	–
T	Temperatur	K
t	Zeit	s
u	Sprung im Wärmefluss	–
V	Geschwindigkeit der Phasengrenze in Normalenrichtung	m s^{-1}
x	Ortskoordinate	m
y	Ortskoordinate	m

Griechische Symbole

Symbol	Beschreibung	Einheit
Δt	Zeitdifferenz	s
ϵ	Hilfsparameter	–
η	Ortskoordinate im gedrehten Koordinatensystem	m
Γ	Phasengrenze	–
Ω	Gebiet der festen Phase	–
Ω^c	Gebiet der flüssigen Phase	–
ϕ	Level Set Funktion	–
ρ	Dichte	kg m^{-3}
ζ	Ortskoordinate im gedrehten Koordinatensystem	m

Indizes

Index	Beschreibung
e	Eis
i	Zählvariable
j	Zählvariable
l	liquid (flüssig)
m	melt (Schmelz-)
s	solid (fest)
w	Wasser

Mathematische Symbole

Symbol	Beschreibung
Δ	Laplace Operator
\mathbb{R}	Menge der reellen Zahlen
∇	Nabla Operator

1 Einleitung

In dieser Arbeit wird eine numerische Methode vorgestellt um das Stefan Problem zu lösen. Betrachtet wird dazu ein zweidimensionales Gebiet und die Level Set Methode ist ein Teil der Diskretisierungsstrategie. Im zweiten Kapitel wird zunächst das Stefan Problem selbst kurz erläutert. Im dritten Kapitel wird die Level Set Methode beschrieben, während im vierten Kapitel auf die zugehörige Diskretisierung eingegangen wird. Das fünfte und abschließende Kapitel geht kurz auf verschiedene Berechnungsergebnisse ein.

Der Großteil dieser Arbeit wurde aus [1] entnommen, weitere Verwendung aus der Literatur ist an der entsprechenden Stelle referenziert.

2 Das Stefan Problem

Das Stefan Problem fragt nach der Temperaturverteilung in einem Reinstoff, bei welchen ein Phasenübergang zu beobachten ist. Insbesondere will man neben der Temperatur auch die Position der Phasengrenze bestimmen. In dieser Arbeit geht es konkret um die Entwicklung der Phasengrenze zwischen Eis und Wasser, sowie das dazugehörige Temperaturfeld. Beide Variablen entwickeln sich durch die Diffusion von Wärme. Zusätzlich bedingt latente Wärme den Phasenübergang zwischen Eis und Wasser, wobei an der Phasengrenze ein Sprung im Temperaturgradienten, also im Wärmefluss, zu beobachten ist.

Für die Modellierung des Problems werden folgende Annahmen getroffen:

- Betrachtet wird ein Stefan Problem, dabei bezeichnet Ω das Gebiet in der sich das Material in der festen Phase befindet. Entsprechend bezeichnet Ω^c das Gebiet der flüssigen Phase, siehe dazu Abbildung 1. Die entsprechenden Gleichungen werden in $D = \Omega \cup \Omega^c$ gelöst.
- Die Phasengrenze wird durch Γ angegeben und die Temperatur an der Phasengrenze ist $T_m = const$, welches der Schmelztemperatur entspricht.
- Zwischen Eis und Wasser findet keine signifikante Dichteänderung statt, das heißt $\rho_w \approx \rho_e$.
- Die Konvektion im Wasser wird vernachlässigt.

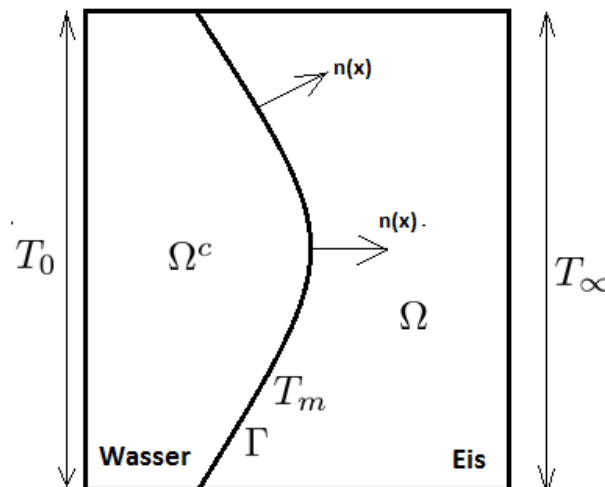


Abbildung 1: Darstellung des zweiphasigen Gebietes

Diese Annahmen führen zu den Gleichungen (1) - (3).

$$c_s \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla(k_s \nabla T) \quad , x \in \Omega \quad (1)$$

$$c_l \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla(k_l \nabla T) \quad , x \in \Omega^c \quad (2)$$

$$LV = - \left(k_l \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} - k_s \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} \right) \quad , x \in \Gamma \quad (3)$$

Dabei bezeichnen c_s und c_l die Wärmekapazität bei konstantem Volumen in der festen (Index s) beziehungsweise flüssigen (Index l) Phase, k_s und k_l die Wärmeleitfähigkeit, L die latente Erstarrungswärme, \mathbf{n} der Normalvektor der Phasengrenze und V die Geschwindigkeit der Phasengrenze in Normalenrichtung.

Als weitere Vereinfachung wird angenommen das die Stoffkonstanten für die Wärmekapazität, die Wärmeleitung und die latente Erstarrungswärme gleich eins sind und somit aus den Gleichungen (1) - (3) eliminiert werden können. Dies führt zu den Gleichungen (4) und (5), wobei Gleichung (5) als Stefan Bedingung bekannt ist.

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \Delta T \quad , x \in D \quad (4)$$

$$V = - \left[\frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} \right] \quad , x \in \Gamma \quad (5)$$

Gleichung (4) ist eine partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung in D und somit werden zusätzlich zwei Randbedingungen T_0 und T_∞ , sowie eine Anfangsbedingung zur Schließung des Systems benötigt. Die Notwendigkeit der Stefan Bedingung, Gleichung (5), ergibt sich aus der zusätzlichen Variable, die Position der Phasengrenze Γ .

3 Die Level Set Methode

3.1 Idee der Level Set Methode

Die Phasengrenze Γ wird durch die Nullstellenmenge einer Hilfsfunktion $\phi : D \times \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}$ beschrieben

$$\Gamma = \{x \mid \phi(x, t) = 0\}, x \in D \quad (6)$$

Für die Definition der sogenannten Level Set Funktion $\phi(x, t)$ gibt es mehrere Möglichkeiten. In dieser Arbeit wird eine signed-distance Funktion verwendet. Die signed-distance Funktion ist so definiert, das sie den euklidischen Abstand d eines Punktes x zur Phasengrenze angibt. Das Vorzeichen von $\phi(x, t)$ entscheidet darüber, ob sich der Punkt x in der flüssigen Phase Ω^c oder in der festen Phase Ω befindet, siehe Gleichung (7).

$$\phi(x, t) = \begin{cases} +d & , x \in \Omega^c \\ 0 & , x \in \Gamma \\ -d & , x \in \Omega \end{cases} \quad (7)$$

In Abbildung 2 ist für eine kreisförmige Phasengrenze beispielhaft eine signed-distance Funktion dargestellt. Die linke Abbildung zeigt die signed-distance Funktion selbst, während in der rechten Abbildung ein Contourplot der linken Abbildung dargestellt ist. In dem Contourplot kann sehr einfach der Abstand zwischen den einzelnen Contourlinien abgelesen werden.

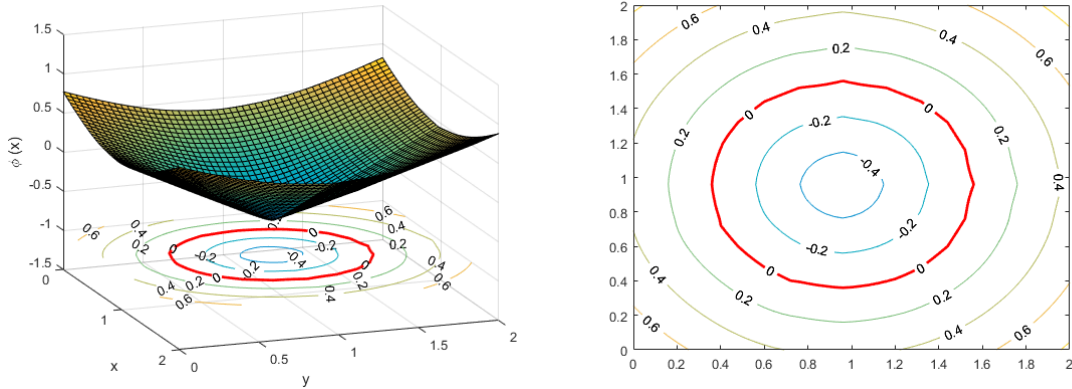


Abbildung 2: Beispielplot einer signed distance Funktion mit Contourplot

Die Idee hinter der Level Set Methode ist nun $\phi(x, t)$ mit der korrekten Geschwindigkeit V an der Phasengrenze zu bewegen und das Temperaturfeld $T(x, t)$ mit der neuen, implizit gespeicherten, Phasengrenze Γ zu aktualisieren.

3.2 Update der Level Set Funktion

Die Level Set Funktion wird mit Hilfe einer Advektionsgleichung verschoben, wobei die Advektionsgeschwindigkeit der Schmelz- bzw. Erstarrungsrate entspricht, siehe Gleichung (8). Die Geschwindigkeitsfunktion F ist eine stetige Erweiterung von V auf das gesamte Gebiet D .

$$\phi_t + F|\nabla\phi| = 0 \tag{8}$$

Aus Gleichung (5) und der Definition von $\mathbf{n} = \frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|}$ folgt

$$V = -[\nabla T] \mathbf{n} = -[\nabla T] \frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|} \tag{9}$$

wobei der Sprung in ∇T von der flüssigen in die feste Phase berechnet wird, vergleiche Gleichung (3). Die Approximation von $[\nabla T]$ basiert auf der Approximation von T in vier Koordinatenrichtungen, die kartesischen Koordinaten x und y , sowie die um 45° gedrehten Koordinaten η und ζ , siehe Abbildung 3.

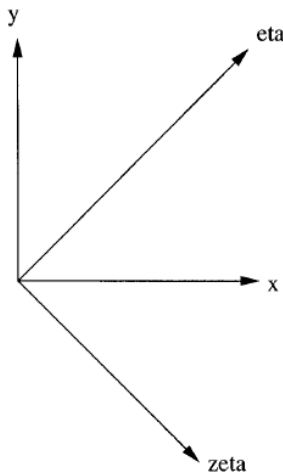


Abbildung 3: Darstellung der vier Koordinatenrichtungen x , y , η und ζ

Jede Approximation des Sprungs in der Ableitung von T in einer der vier Koordinatenrichtungen kann durch eine Advektionsgleichung stetig von der Phasengrenze aus erweitert werden, siehe Gleichungen (10) - (13). Dabei ist $u^1 = \left[\frac{\partial T}{\partial x} \right]$, $u^2 = \left[\frac{\partial T}{\partial y} \right]$, $u^3 = \left[\frac{\partial T}{\partial \eta} \right]$ und $u^4 = \left[\frac{\partial T}{\partial \zeta} \right]$.

$$u_t^1 + S(\phi\phi_x)u_x^1 = 0 \tag{10}$$

$$u_t^2 + S(\phi\phi_y)u_y^2 = 0 \tag{11}$$

$$u_t^3 + S(\phi\phi_\eta)u_\eta^3 = 0 \tag{12}$$

$$u_t^4 + S(\phi\phi_\zeta)u_\zeta^4 = 0 \tag{13}$$

$S : \mathbb{R} \rightarrow \{-1, 0, 1\}$ ist die Vorzeichenfunktion,

$$S(x) = \begin{cases} 1 & , x > 0 \\ 0 & , x = 0 \\ -1 & , x < 0 \end{cases} \tag{14}$$

Um Instabilitäten zu vermeiden definieren wir F als arithmetisches Mittel zwischen den kartesischen Koordinaten x und y und den rotierten Koordinaten η und ζ

$$F = \sum_{i=1}^4 u^i \frac{\phi_{x_i}}{|\nabla\phi|} \tag{15}$$

wobei $x_1 = x$, $x_2 = y$, $x_3 = \eta$ und $x_4 = \zeta$ gilt.

3.3 (Re)Initialisierung der signed distance Funktion

Für den Start der Berechnung stellt sich die Frage, wie eine signed-distance Funktion $\phi(x, t)$ zu vorgegebener Randkurve Γ initialisiert werden kann. Zusätzlich ist es notwendig die signed-distance Funktion zu reinitialisieren, falls durch die Verschiebung der Phasengrenze, siehe Kapitel 3.2, ϕ keine signed-distance Funktion mehr ist.

Durch Iteration der Gleichung

$$\phi_t = S(\phi_0)(1 - |\nabla\phi|) \tag{16}$$

kann eine Funktion ϕ_0 zu einer signed distance Funktion entwickelt werden. Die Nullstellenmenge, und damit die Position der Phasengrenze Γ , von ϕ_0 bleibt erhalten.

3.4 Update des Temperaturfeldes

Die Integration von Gleichung (4) ist in einem einphasigen Gebiet durch einfache Methoden, zum Beispiel ein fünf Punkte Differenzen Schema mit Vorwärtseuler, möglich. In einem zweiphasigen Gebiet gibt es jedoch ein Problem durch den Sprung des Temperaturgradienten an der Phasengrenze. Damit ist eine Approximation des Temperaturgradienten in der Nähe der Phasengrenze durch ein Standard Finiten Differenzen Schema nicht ohne große Fehler möglich. Da ϕ eine signed distance Funktion ist kann der Wert dieser Funktion verwendet werden um festzustellen ob sich ein Punkt x in der Nähe der Phasengrenze befindet. Zusätzlich kann mit Hilfe von ϕ der Abstand eines Punktes x zur Phasengrenze in x beziehungsweise y-Richtung interpoliert werden. Dadurch ist es möglich zwei Interpolationspolynome P_L und P_R auf der rechten und linken Seite, beziehungsweise auf der oberen und unteren Seite, der Phasengrenze zu berechnen. Zweifache Differenzierung dieser Polynome führt zu der gesuchten Approximation von T_{xx} beziehungsweise T_{yy} in der Nähe der Phasengrenze.

4 Diskretisierung

Für die Diskretisierung der in Kapitel 2 und 3 vorgestellten Gleichungen wird eine quadratische Box mit Seitenlänge L und äquidistanter Gitterweite $h = \Delta x = \Delta y = \frac{L}{M}$ betrachtet, wobei $(M+1)^2$ die Gesamtanzahl der Gitterpunkte ist. Die Zeitschrittweite wird mit Δt bezeichnet. Dazu werden die folgenden Definitionen im restlichen Kapitel verwendet

$$\begin{aligned} x_{i,j} &= ((i-1)h, (j-1)h) \\ \phi_{i,j} &= \phi(x_{i,j}) \\ T_{i,j} &= T(x_{i,j}) \\ i, j &= 1, \dots, M+1 \end{aligned}$$

4.1 Diskretisierung des Updates der Level Set Funktion

Aus Kapitel 3.2 ist hier noch einmal kurz die Vorgehensweise beim Update der Level Set Funktion zusammengefasst.

1. Approximation des Temperatursprungs in die vier Koordinatenrichtungen, siehe Kapitel 4.1.1.
2. Stetige Erweiterung des Temperatursprungs ausgehend von der Phasengrenze, siehe Kapitel 4.1.2.
3. Berechnung der Geschwindigkeitsfunktion F , siehe Kapitel 4.1.3.
4. Lösen der Advektionsgleichung für ϕ , siehe Kapitel 4.1.4.

4.1.1 Approximation des Temperatursprungs

Zur Approximation des Temperatursprungs werden vier Felder u^1 , u^2 , u^3 und u^4 , Notation siehe Kapitel 3.2, berechnet. An Gitterpunkten auf oder in der Nähe der Phasengrenze approximieren diese vier Felder den Sprung in $\frac{\partial T}{\partial x}$, $\frac{\partial T}{\partial y}$, $\frac{\partial T}{\partial \eta}$ und $\frac{\partial T}{\partial \zeta}$ über die Phasengrenze Γ . An Gitterpunkten die weiter von Γ entfernt sind, sind $u^1 - u^4$ normalerweise nahe an null. In Abbildung 4 ist beispielhaft solch ein Feld für eine Dimension aufgezeigt. Es ist deutlich zu erkennen dass der absolute Wert des Temperatursprungs in der Nähe der Phasengrenze am größten ist.

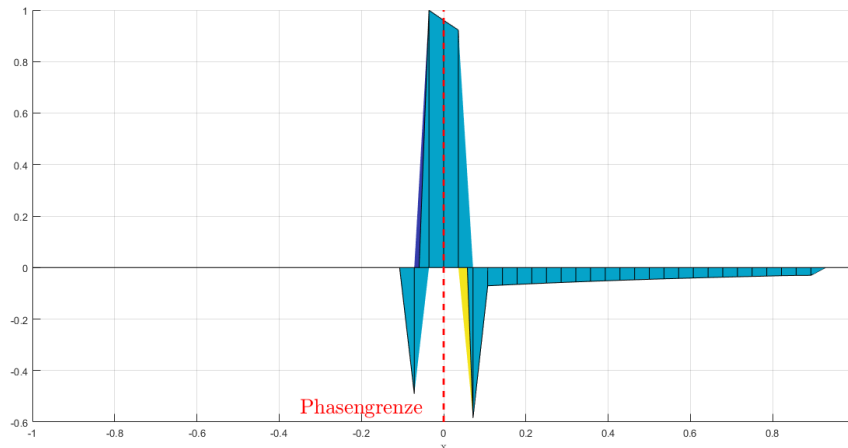


Abbildung 4: Beispiel für ein Feld des Temperatursprungs in einer Dimension

Die Diskretisierung für $u^1 - u^4$ sieht wie folgt aus

$$\begin{aligned}
u_{i,j}^1 &= -S_{i,j}(\phi_x)((T_{i+2,j} - T_{i+1,j}) - (T_{i-1,j} - T_{i-2,j}))/h \\
u_{i,j}^2 &= -S_{i,j}(\phi_y)((T_{i,j+2} - T_{i,j+1}) - (T_{i,j-1} - T_{i,j-2}))/h \\
u_{i,j}^3 &= -S_{i,j}(\phi_\eta)((T_{i+2,j+2} - T_{i+1,j+1}) - (T_{i-1,j-1} - T_{i-2,j-2}))/(\sqrt{2}h) \\
u_{i,j}^4 &= -S_{i,j}(\phi_\zeta)((T_{i+2,j-2} - T_{i+1,j-1}) - (T_{i-1,j+1} - T_{i-2,j+2}))/(\sqrt{2}h)
\end{aligned}$$

wobei S erneut die Vorzeichenfunktion ist. Die Vorzeichenfunktion ist notwendig um zu garantieren das der Sprung konsistent von der festen in die flüssige Phase berechnet wird.

4.1.2 Stetige Erweiterung des Temperatursprungs

Für die stetige Erweiterung des Temperatursprungs auf ganz D werden die Advektionsgleichungen (10) - (13) bis zu einem stationären Endwert gelöst ($t \rightarrow \infty$), siehe dazu auch [2]. Jedoch ist es für die korrekte Ausbreitung der Level Set Funktion ausreichend die folgenden Gleichungen für einige wenige Zeitschritte mit einer CFL-Zahl von $cfl = 0.5$ zu berechnen

$$\begin{aligned}
u_{i,j}^{1,(new)} &= u_{i,j}^{1,(old)} - cfl * (u_{i,j}^{1,(old)} - u_{i-1,j}^{1,(old)}) \quad \text{falls } S_{i,j}(\phi\phi_x) > 0 \\
u_{i,j}^{1,(new)} &= u_{i,j}^{1,(old)} + cfl * (u_{i+1,j}^{1,(old)} - u_{i,j}^{1,(old)}) \quad \text{falls } S_{i,j}(\phi\phi_x) < 0
\end{aligned}$$

wobei die Gleichungen für $u^2 - u^4$ äquivalent gebildet werden. Für den zweiten Term in den beiden obigen Gleichungen ist es auch möglich ein ENO Schema gleicher oder höherer Ordnung für größere Stabilität zu verwenden. Genauere Informationen zu den ENO Schemata findet sich zum Beispiel in [3].

In Abbildung 5 ist solch eine stetige Erweiterung von Abbildung 4 dargestellt. Es ist zu erkennen das der Wert für $x = 0$ (also die Position der Phasengrenze) in Abbildung 4 stetig in die linke und rechte Richtung in Abbildung 5 erweitert wurde.

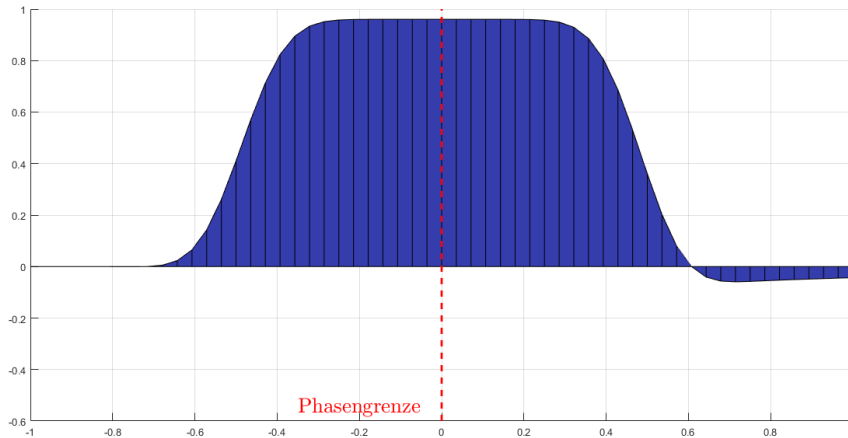


Abbildung 5: Beispiel für eine stetige Erweiterung eines Feldes des Temperatursprungs in einer Dimension

4.1.3 Berechnung der Geschwindigkeitsfunktion F

Die beiden folgenden Gleichungen gelten gleichermaßen

$$\begin{aligned}
F_{i,j} &= u_{i,j}^1 \left(\frac{\phi_x}{|\nabla\phi|} \right)_{i,j} + u_{i,j}^2 \left(\frac{\phi_y}{|\nabla\phi|} \right)_{i,j} \\
F_{i,j} &= u_{i,j}^3 \left(\frac{\phi_\eta}{|\nabla\phi|} \right)_{i,j} + u_{i,j}^4 \left(\frac{\phi_\zeta}{|\nabla\phi|} \right)_{i,j}
\end{aligned}$$

Bilden des arithmetischen Mittels liefert

$$F_{i,j} = \frac{1}{2} \left(u_{i,j}^1 \left(\frac{\phi_x}{|\nabla\phi|} \right)_{i,j} + u_{i,j}^2 \left(\frac{\phi_y}{|\nabla\phi|} \right)_{i,j} + u_{i,j}^3 \left(\frac{\phi_\eta}{|\nabla\phi|} \right)_{i,j} + u_{i,j}^4 \left(\frac{\phi_\zeta}{|\nabla\phi|} \right)_{i,j} \right)$$

$$\Rightarrow F_{i,j} |\nabla\phi|_{i,j} = \frac{1}{2} (u_{i,j}^1 (\phi_x)_{i,j} + u_{i,j}^2 (\phi_y)_{i,j} + u_{i,j}^3 (\phi_\eta)_{i,j} + u_{i,j}^4 (\phi_\zeta)_{i,j}) \quad (17)$$

4.1.4 Diskretisierung der Advektionsgleichung

Mit den Gleichungen (8) und (17) folgt

$$\phi_t = -\frac{1}{2} (u_{i,j}^1 (\phi_x)_{i,j} + u_{i,j}^2 (\phi_y)_{i,j} + u_{i,j}^3 (\phi_\eta)_{i,j} + u_{i,j}^4 (\phi_\zeta)_{i,j})$$

welches mit einem Runge Kutta Schema dritter Ordnung in der Zeit und einem ENO Schema zweiter Ordnung im Raum gelöst wird. Wichtig ist, dass diese Gleichung nur für einen Hauptzeitschritt Δt berechnet wird. Das Runge Kutta Schema hat für die allgemeine Gleichung $\phi_t = \mathcal{L}(\phi)$ die folgende Form

$$\begin{aligned} \phi^{(1)} &= \phi^{(0)} + \Delta t \hat{\mathcal{L}}(\phi^{(0)}) \\ \phi^{(2)} &= \frac{3}{4} \phi^{(0)} + \frac{1}{4} (\phi^{(1)} + \Delta t \hat{\mathcal{L}}(\phi^{(1)})) \\ \phi^{(3)} &= \frac{1}{3} \phi^{(0)} + \frac{2}{3} (\phi^{(2)} + \Delta t \hat{\mathcal{L}}(\phi^{(2)})) \end{aligned}$$

wobei $\hat{\mathcal{L}}$ die diskrete Form von \mathcal{L} ist.

4.2 Diskretisierung der (Re)Initialisierung der signed distance Funktion

In zwei Dimensionen kann Gleichung (16) geschrieben werden als

$$\phi_t = S(\phi_0) (1 - \sqrt{\phi_x^2 + \phi_y^2})$$

Eine Möglichkeit zur Diskretisierung dieser Gleichung ist die sogenannte Godunov Methode

$$\phi_{i,j}^{N+1} = \phi_{i,j}^N - \Delta t S_\epsilon(\phi_{i,j}^0) G(\phi_{i,j}^N)$$

mit

$$\begin{aligned} a &\equiv D_x^- \phi_{i,j} = (\phi_{i,j} - \phi_{i-1,j})/h \\ b &\equiv D_x^+ \phi_{i,j} = (\phi_{i+1,j} - \phi_{i,j})/h \\ c &\equiv D_y^- \phi_{i,j} = (\phi_{i,j} - \phi_{i,j-1})/h \\ d &\equiv D_y^+ \phi_{i,j} = (\phi_{i,j+1} - \phi_{i,j})/h \\ S_\epsilon(\phi_{i,j}) &= \frac{\phi_{i,j}}{\sqrt{\phi_{i,j}^2 + \epsilon^2}} \end{aligned}$$

und

$$G(\phi_{i,j}) = \begin{cases} \sqrt{\max((a^+)^2, ((b^-)^2)) + \max((c^+)^2, ((d^-)^2))} - 1 & , \text{if } \phi_{i,j}^0 > 0 \\ \sqrt{\max((a^-)^2, ((b^+)^2)) + \max((c^-)^2, ((d^+)^2))} - 1 & , \text{if } \phi_{i,j}^0 < 0 \\ 0 & , \text{otherwise} \end{cases}$$

Die Verwendung von S_ϵ statt S dient zur Vermeidung von Divisionen durch null, wobei $\epsilon = 2h$ gewählt wird. Um höhere Ordnung zu erzielen können die einseitigen Differenzen von ϕ_x und ϕ_y durch ENO Schemata höherer Ordnung ersetzt werden. Zur Zeitsdiskretisierung wird das Runge Kutta Schema aus Kapitel 4.1.4 verwendet. Da die hier verwendete Zeitschrittweite Δt_{reinit} unabhängig von der Hauptschrittweite Δt ist, wird $\Delta t_{reinit} = h/5$ gewählt. Nähere Informationen zu dem Schema und zur Bedeutung von $a^{+/-}$ etc. finden sich in [4].

4.3 Diskretisierung der Temperaturgleichung

Zur Lösung der Temperaturgleichung wird ein implizites Verfahren verwendet. In Punkten die sich weit von der Phasengrenze entfernt befinden wird ein Standard fünf Punkte Schema verwendet

$$\frac{T_{i,j}^{n+1} - T_{i,j}^n}{\Delta t} = \frac{T_{i+1,j}^{n+1} - 2T_{i,j}^{n+1} + T_{i-1,j}^{n+1}}{h^2} + \frac{T_{i,j+1}^{n+1} - 2T_{i,j}^{n+1} + T_{i,j-1}^{n+1}}{h^2} \quad (18)$$

Für Punkte die in der Nähe der Phasengrenze liegen wird zunächst der Abstand zur Phasengrenze selbst berechnet.

Beispielhaft sei $x_f \in \Gamma$ wobei gelten soll $x_{i,j} \leq x_f \leq x_{i+1,j}$. Die Abstände

$$x_{i+1,j} - x_f = \left(\frac{\phi_{i+1,j}}{\phi_{i+1,j} - \phi_{i,j}} \right) h = r_1 h$$

$$x_f - x_{i,j} = - \left(\frac{\phi_{i,j}}{\phi_{i+1,j} - \phi_{i,j}} \right) h = r_2 h$$

werden verwendet um zwei Interpolationspolynome P_L und P_R zu konstruieren. Beide Polynome sind lediglich abhängig von x . P_L wird konstruiert mit Hilfe der Variablen $h, r_2, T(x_f), T_{i,j}, T_{i-1,j}$ etc. und P_R mit Hilfe der Variablen $h, r_1, T(x_f), T_{i+1,j}, T_{i+2,j}$ etc. In Abbildung 6 ist dieses Szenario für P_L dargestellt.

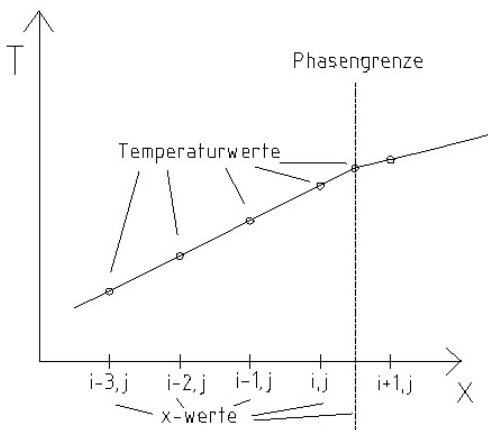


Abbildung 6: Beispiel für die Konstruktion von P_L

Durch P_L kann nun die zweite Ableitung an der Stelle $x_{i,j}$ approximiert werden $P_L''(x_{i,j}) \approx T_{xx}(x_{i,j})$. Eine Möglichkeit diese Polynome implizit zu bestimmen ist mit Hilfe der Vandermonde Matrix V .

$$V = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^{n-1} \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \dots & x_2^{n-1} \\ \dots & \dots & \dots & \ddots & \dots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \dots & x_n^{n-1} \end{pmatrix}$$

Die Koeffizienten \mathbf{c} eines Polynoms vom Grad $n-1$ das die Funktion $f(x)$ interpoliert können mit der Gleichung

$$V\mathbf{c} = f \quad (19)$$

bestimmt werden, wobei $f = (f(x_1), \dots, f(x_n))$ ist.
Angewendet auf das obige Beispiel ergibt sich

$$\begin{aligned} (x_1, \dots, x_n) &= (x_f, x_{i,j}, x_{i-1,j}, \dots, x_{i-n+2,j}) \\ (f(x_1), \dots, f(x_n)) &= (T(x_f)^{n+1}, T_{i,j}^{n+1}, \dots, T_{i-n+2,j}^{n+1}) \end{aligned}$$

Für ein Polynom dritten Grades ($n=4$) ergibt sich damit folgende Approximation der zweiten Ableitung

$$T_{xx}(x_{i,j}) \approx 6c_4x_{i,j} + 2c_3 \quad (20)$$

Durch Verwendung der Gleichungen (19) und (20) können die gesuchten Polynome P_L und P_R nun implizit bestimmt und damit die gesuchten Approximation für T_{xx} und äquivalent T_{yy} berechnet werden. Dazu werden diese Gleichungen in das LGS des Standard fünf Punkte Schemas, siehe Gleichung (18), integriert. Sei

$$Ax = b$$

das LGS des Standard fünf Punkte Schemas mit

$$\begin{aligned} x &= (T(x_{1,1})^{n+1}, T(x_{2,1})^{n+1}, \dots, T(x_{M+1,M})^{n+1}, T(x_{M+1,M+1})^{n+1}) \\ b &= (T(x_{1,1})^n, T(x_{2,1})^n, \dots, T(x_{M+1,M})^n, T(x_{M+1,M+1})^n) \end{aligned}$$

Dann ergibt sich ein modifiziertes LGS

$$\begin{aligned} \tilde{A}\tilde{x} &= \tilde{b} \\ \tilde{A} &= \begin{pmatrix} A_1 & A_2 \\ A_3 & A_4 \end{pmatrix} \\ \tilde{x} &= \begin{pmatrix} x \\ c \end{pmatrix} \\ \tilde{b} &= \begin{pmatrix} b \\ b_2 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

wobei $A_1 = A$ ist. In der Matrix A_2 stehen die Koeffizienten aus der Approximation der Ableitung, siehe Gleichung (20), und in der Matrix A_3 werden die Koeffizienten vor den Temperaturwerten T^{n+1} geschrieben, siehe Gleichung (19). Die Vandermonde Matrix V befindet sich in der Matrix A_4 . Der Vektor b_2 enthält neben vielen Nulleinträgen lediglich die Werte $T(x_f)$.

Eine weitere Möglichkeit der Berechnung findet sich in [2], wobei hier das LGS $Ax = b$ nicht erweitert werden muss.

Die Zeititeration wird nun so lange durchlaufen bis die Lösung konvergiert, das heißt bis die folgende Ungleichung

$$\sum_{i,j=1}^{M+1} (T_{i,j}^{n+1} - T_{i,j}^n) < tol \quad \text{mit } tol = 1.0 \cdot 10^{-12}$$

erfüllt ist.

4.4 Algorithmus

Der vollständige Algorithmus sieht nun wie folgt aus

1. Initialisierung der Temperatur $T(x, 0)$ und der Level Set Funktion $\phi(x, 0)$
2. Update der Level Set Funktion $\phi(x, t)$
3. Reinitialisierung der Level Set Funktion $\phi(x, t)$
4. Integration des Temperaturfeldes $T(x, t)$
5. Wiederholung der Schritte 2)-4) bis zum Endzeitpunkt T

5 Ergebnisse

Eine analytische Lösung des Stefan Problems für $V = const$ ist gegeben durch

$$T(x, t) = \begin{cases} -1 + e^{-V(x-Vt)} & , x > Vt \\ 0 & , x \leq Vt \end{cases}$$

wobei die Phasengrenze parametrisiert ist durch

$$\Gamma(t) = \{x = Vt, y = s\} \quad , s \in \mathbb{R}$$

In Abbildung 7 ist diese Lösung für $V = 1$ und $t = 0$ dargestellt.

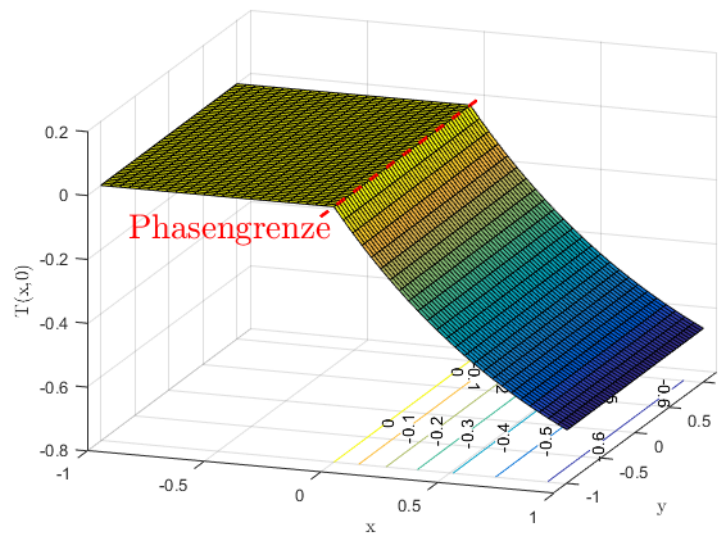


Abbildung 7: Analytische Lösung für das Stefan Problem

In den Tabellen 5 und 6 sind die Ergebnisse eigener Berechnungen aufgezeigt. Die Rechnungen wurden für die Parameter $V = 1$, $T = 5 \cdot 10^{-4}$ und $\Delta t = 1 \cdot 10^{-5}$ durchgeführt. In Tabelle 5 wurden Finite Differenzen erster Ordnung sowie das Upwind Verfahren erster Ordnung verwendet, während in Tabelle 6 Finite Differenzen zweiter Ordnung und ENO Schemata zweiter Ordnung verwendet wurden.

Gridpoints	calc. Interface Position	$\ T - T^n\ _{L^1}$	Conv. Rate
20	$4.1054 \cdot 10^{-4}$	$1.0429 \cdot 10^{-4}$	-
40	$4.5293 \cdot 10^{-4}$	$5.7189 \cdot 10^{-5}$	0.8668
80	$4.7589 \cdot 10^{-4}$	$2.9889 \cdot 10^{-5}$	0.9361
160	$4.8785 \cdot 10^{-4}$	$1.5222 \cdot 10^{-5}$	0.9734

Tabelle 5: *Finite Differenzen und Upwind Verfahren erster Ordnung*

Gridpoints	calc. Interface Position	$\ T - T^n\ _{L^1}$	Conv. Rate
20	$4.0836 \cdot 10^{-5}$	$1.0684 \cdot 10^{-4}$	-
40	$4.5383 \cdot 10^{-5}$	$5.6105 \cdot 10^{-5}$	0.9292
80	$4.7925 \cdot 10^{-4}$	$2.5728 \cdot 10^{-5}$	1.1248
160	$4.9508 \cdot 10^{-4}$	$6.1668 \cdot 10^{-6}$	2.0607

Tabelle 6: *Finite Differenzen und ENO Schemata zweiter Ordnung*

In beiden Tabellen lässt sich eine Konvergenz des Fehlers ablesen, wobei in der letzten Berechnung von Tabelle 6 sogar eine Konvergenzordnung von zwei zu erkennen ist. Hingegen scheint in Tabelle 5 die erwartete Konvergenzordnung von 1 erreicht zu werden. Auffällig ist jedoch der relativ große Fehler in der Position der Phasengrenze. Die analytisch berechnete Position der Phasengrenze ist $x = VT = 5 \cdot 10^{-4}$. Vor allem für eine geringe Anzahl an Gitterpunkten weicht der berechnete Wert jedoch sehr deutlich ab.

Literatur

- [1] S. Chen, B. Merriman, S. Osher, and P. Smereka (1997). A Simple Level Set Method for Solving Stefan Problems, *Journal of Computational Physics* 135, 8–29 (1997)
- [2] Stanley Osher and Ronald P. Fedkiwy (2000). Level Set Methods: An Overview and Some Recent Results, *Journal of Computational Physics* 169, 463–502 (2001)
- [3] Chi-Wang Shu (1997). Essentially Non-Oscillatory and Weighted Essentially Non-Oscillatory Schemes for Hyperbolic Conservation Laws, *NASA/CR-97-206253 ICASE Report No. 97-65* (1997)
- [4] M. Sussman, P. Smereka, and S. Osher, (1994). A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow, *Journal of Computational Physics* 114, 146 (1994)