

Heat Flow

Daniel Raß

d-rass@web.de

12. Juli 2007

Übersicht

Heat Flow

Einleitung

Heat Equation

Irregular Domains

Poisson Equation

Stefan Problems

Zuerst einige theoretische Grundlagen zur Diskretisierung der Wärmeleitungsgleichung und der Poissongleichung.

Ausgangsgleichung

Ausgehend von Masse-, Impuls- und Energieerhaltung ergibt sich Gleichung der Form

$$\rho e_t + \rho \vec{V} * \nabla e + p \nabla * \vec{V} = \nabla * (k \nabla T) \quad (1)$$

k - Wärmeleitfähigkeit

T - Temperatur

Ausgangsgleichung

Ausgehend von Masse-, Impuls- und Energieerhaltung ergibt sich Gleichung der Form

$$\rho e_t + \rho \vec{V} * \nabla e + p \nabla * \vec{V} = \nabla * (k \nabla T) \quad (1)$$

k - Wärmeleitfähigkeit

T - Temperatur

Annahme:

- ▶ e höchstens von Temperatur abhängig
- ▶ spez. Wärme (bei konstantem Volumen) c_v konstant

Ausgangsgleichung

Ausgehend von Masse-, Impuls- und Energieerhaltung ergibt sich Gleichung der Form

$$\rho e_t + \rho \vec{V} * \nabla e + p \nabla * \vec{V} = \nabla * (k \nabla T) \quad (1)$$

k - Wärmeleitfähigkeit

T - Temperatur

Annahme:

- ▶ e höchstens von Temperatur abhängig
- ▶ spez. Wärme (bei konstantem Volumen) c_v konstant

$$\implies e = e_0 + c_v(T - T_0)$$

e_0 Innere Energie (pro Masseinheit) bei Referenztemperatur T_0

Vereinfachungen

Zusätzlich: $\nabla \vec{V} = 0$ vereinfacht (1) zu:

$$\rho c_v T_t + \rho c_v \vec{V} * \nabla T = \nabla * (k \nabla T) \quad (2)$$

Vereinfachungen

Zusätzlich: $\nabla \vec{V} = 0$ vereinfacht (1) zu:

$$\rho c_v T_t + \rho c_v \vec{V} * \nabla T = \nabla * (k \nabla T) \quad (2)$$

mit $\vec{V} = 0$ sogar zur Standardwärmeleitungsgleichung:

$$\rho c_v T_t = \nabla * (k \nabla T) \quad (3)$$

Diskretisierung

Zeitdiskretisierung explizites Eulerverfahren

$$\frac{T^{n+1} - T^n}{\Delta t} = \frac{1}{\rho c_v} \nabla * (k \nabla T^n) \quad (4)$$

mit Dirichlet- oder Neumann-Randbedingungen

Diskretisierung

Zeitdiskretisierung explizites Eulerverfahren

$$\frac{T^{n+1} - T^n}{\Delta t} = \frac{1}{\rho c_v} \nabla * (k \nabla T^n) \quad (4)$$

mit Dirichlet- oder Neumann-Randbedingungen

Annahme: ρ und c_v konstant; $\hat{k} = \frac{k}{\rho c_v}$

$$\frac{T^{n+1} - T^n}{\Delta t} = \nabla * (\hat{k} \nabla T^n) \quad (5)$$

Diskretisierung

Räumliche Ableitungen: Zentraler Differenzenquotient.

Nachteil: Zeitschrittbeschränkung für Stabilität

$$\Delta t \hat{k} \left(\frac{2}{(\Delta x)^2} + \frac{2}{(\Delta y)^2} + \frac{2}{(\Delta z)^2} \right) \leq 1 \quad (6)$$

Alternative Diskretisierung

Zeitdiskretisierung: implizites Eulerverfahren

$$\frac{T^{n+1} - T^n}{\Delta t} = \nabla * (\hat{k} \nabla T^{n+1}) \quad (7)$$

keine Einschränkung für Δt , wie beim expliziten Verfahren

Alternative Diskretisierung

Zeitdiskretisierung: implizites Eulerverfahren

$$\frac{T^{n+1} - T^n}{\Delta t} = \nabla * (\hat{k} \nabla T^{n+1}) \quad (7)$$

keine Einschränkung für Δt , wie beim expliziten Verfahren

Umformen:

$$T^{n+1} - \Delta t \nabla * (\hat{k} \nabla T^{n+1}) = T^n \quad (8)$$

$\nabla * (\hat{k} \nabla T^{n+1})$ mit zentralem Differenzenquotienten diskretisieren.
Führt zu einem symm. LGS, das einfach mit schnellen linearen solvern gelöst werden kann

Genauigkeit

Gleichung (7): Genauigkeit 1.-Ordnung (Zeit) bzw. 2.-Ordnung (Ort)

Überall Genauigkeit $O((\Delta x)^2)$: $\Delta t \approx (\Delta x)^2$

Wegen Stabilität des impliziten Verfahrens reicht jedoch $\Delta t \approx \Delta x$
 \implies erhebliche CPU-Rechenzeit wird gespart!

Crank-Nicolson

Aus Numerik-Partieller-DGL'en dürfte das Crank-Nicolson-Schema bekannt sein:

$$\frac{T^{n+1} - T^n}{\Delta t} = \frac{1}{2} \nabla * (\hat{k} \nabla T^{n+1}) + \frac{1}{2} \nabla * (\hat{k} \nabla T^n) \quad (9)$$

2.-Ordnung Genauigkeit in Ort und Zeit, $\Delta t \approx \Delta x$

Crank-Nicolson

Aus Numerik-Partieller-DGL'en dürfte das Crank-Nicolson-Schema bekannt sein:

$$\frac{T^{n+1} - T^n}{\Delta t} = \frac{1}{2} \nabla * (\hat{k} \nabla T^{n+1}) + \frac{1}{2} \nabla * (\hat{k} \nabla T^n) \quad (9)$$

2.-Ordnung Genauigkeit in Ort und Zeit, $\Delta t \approx \Delta x$

Umformen:

$$T^{n+1} - \frac{\Delta t}{2} \nabla * (\hat{k} \nabla T^{n+1}) = T^n + \frac{\Delta t}{2} \nabla * (\hat{k} \nabla T^n) \quad (10)$$

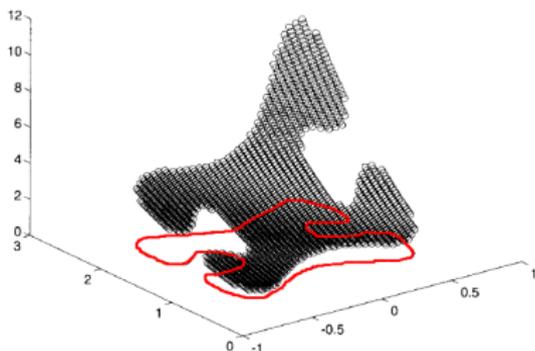
\implies symmetrisches LGS für T_i^{n+1}

Wieder kann man alle räumlichen Ableitungen mit dem (standard) Zentralen Differenzenquotienten berechnen.

Jetzt statt Kartesischem Gebiet Gleichung (3)

$$\rho c_v T_t = \nabla * (k \nabla T)$$

auf einem unregelmässigen Gebiet. Z.B. Inneres der
2-Dimensionalen Skizze



Kreise: Berechnete Lösung; Rote Linie Berechnungsgebiet

Ansatz: Gebiet in kartesisches reguläres Gitter einbetten
 \implies man kann Level Set Methode Φ benutzen, um Rand zu definieren.

Z.B. kann (3) gelöst werden mit Dirichlet-Randbedingungen
 $T = g(\vec{x}, t)$ am Rand, auf dem $\Phi = 0$ gilt.
Ebenso können kompliziertere Randbedingungen benutzt werden

Die räumlichen Ableitungen werden mit Hilfe der Werte von $T = g(\vec{x}, t)$ auf dem Rand berechnet.
Bei Euler (Zeit-)Diskretisierung erhält man als Zeitschrittbeschränkung für Stabilität:

$$\Delta t \hat{k} \left(\frac{2}{(\Theta_1 \Delta x)^2} + \frac{2}{(\Theta_2 \Delta y)^2} + \frac{2}{(\Theta_3 \Delta z)^2} \right) \leq 1 \quad (11)$$

Θ_i Zellenanteil in den jeder räumlichen Dimension für Zellen, die vom Rand geschnitten werden. Es gilt: $0 < \Theta_i \leq 1$

Die räumlichen Ableitungen werden mit Hilfe der Werte von $T = g(\vec{x}, t)$ auf dem Rand berechnet.
Bei Euler (Zeit-)Diskretisierung erhält man als Zeitschrittbeschränkung für Stabilität:

$$\Delta t \hat{k} \left(\frac{2}{(\Theta_1 \Delta x)^2} + \frac{2}{(\Theta_2 \Delta y)^2} + \frac{2}{(\Theta_3 \Delta z)^2} \right) \leq 1 \quad (11)$$

Θ_i Zellenanteil in den jeder räumlichen Dimension für Zellen, die vom Rand geschnitten werden. Es gilt: $0 < \Theta_i \leq 1$

Da Θ_i willkürlich klein sein können $\implies \Delta t$ ebenso klein, also benötigt man implizite Euler Verfahren, z.B. Rückwärts-Euler-Verfahren oder wieder Crank-Nicolson

Poisson-Gleichung

$$\nabla * (\beta(\vec{x})\nabla u(\vec{x})) = f(\vec{x}) \quad (12)$$

mit β positiv, nach unten beschränkt durch $\epsilon > 0$
unregelmäßiges Gebiet, durch Level Set Funktion definiert auf
kartesischem Gitter mit Dirichlet-RB $u = g(\vec{x}, t)$ auf der $\Phi = 0$
Isokontur

Poisson-Gleichung

$$\nabla * (\beta(\vec{x})\nabla u(\vec{x})) = f(\vec{x}) \quad (12)$$

mit β positiv, nach unten beschränkt durch $\epsilon > 0$
unregelmäßiges Gebiet, durch Level Set Funktion definiert auf
kartesischem Gitter mit Dirichlet-RB $u = g(\vec{x}, t)$ auf der $\Phi = 0$
Isokontur

Einfachheitshalber: 1-Dimensionaler Fall: $(\beta u_x)_x = f$

Poisson-Gleichung

$$\nabla * (\beta(\vec{x})\nabla u(\vec{x})) = f(\vec{x}) \quad (12)$$

mit β positiv, nach unten beschränkt durch $\epsilon > 0$
unregelmäßiges Gebiet, durch Level Set Funktion definiert auf
kartesischem Gitter mit Dirichlet-RB $u = g(\vec{x}, t)$ auf der $\Phi = 0$
Isokontur

Einfachheitshalber: 1-Dimensionaler Fall: $(\beta u_x)_x = f$

β, Φ nur auf Gitter bekannt \implies Werte zwischen Knoten definiert
als Durchschnittswert der Knotenpunkte

z.B. $\beta_{i+\frac{1}{2}} = \frac{\beta_i + \beta_{i+1}}{2}$

In Ermangelung von Schnittzellen: standard Diskretisierung

$$\frac{\beta_{i+\frac{1}{2}}\left(\frac{u_{i+1}-u_i}{\Delta x}\right) - \beta_{i-\frac{1}{2}}\left(\frac{u_i-u_{i-1}}{\Delta x}\right)}{\Delta x} = f_i \quad (13)$$

führt zu LGS mit symmetrischer Matrix \implies fast linear solver (z.B. PCG-Verfahren)

Ann. Interfacepunkt x_I liegt zwischen Gitterpunkten x_i und x_{i+1}
mit Dirichlet-RB $u = u_I$ bei x_I

Wir wollen nun die numerischen Lösung im Gebiet links von x_I
berechnen.

Ann. Interfacepunkt x_I liegt zwischen Gitterpunkten x_i und x_{i+1}
mit Dirichlet-RB $u = u_I$ bei x_I

Wir wollen nun die numerischen Lösung im Gebiet links von x_I
berechnen.

(13) ist gültig für alle Unbekannten auf der linken, einschliesslich
 u_{i-1} , aber kann nicht auf x_i angewandt werden, um nach u_i
aufzulösen, da das Teilgebiet links von x_I keinen gültigen Wert für
 u_{i+1} enthält.

Ann. Interfacepunkt x_I liegt zwischen Gitterpunkten x_i und x_{i+1}
mit Dirichlet-RB $u = u_I$ bei x_I

Wir wollen nun die numerischen Lösung im Gebiet links von x_I
berechnen.

(13) ist gültig für alle Unbekannten auf der linken, einschliesslich
 u_{i-1} , aber kann nicht auf x_i angewandt werden, um nach u_i
aufzulösen, da das Teilgebiet links von x_I keinen gültigen Wert für
 u_{i+1} enthält.

Das kann man berichtigen, indem man einen „ghost value“, u_{i+1}^G bei
 x_{i+1} definiert und (13) umformt zu

$$\frac{\beta_{i+\frac{1}{2}} \left(\frac{u_{i+1}^G - u_i}{\Delta x} \right) - \beta_{i-\frac{1}{2}} \left(\frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x} \right)}{\Delta x} = f_i \quad (14)$$

mögliche Kandidaten für u_{i+1}^G sind

$$u_{i+1}^G = u_I \quad (15)$$

mögliche Kandidaten für u_{i+1}^G sind

$$u_{i+1}^G = u_l \quad (15)$$

$$u_{i+1}^G = \frac{u_l + (\Theta - 1)u_i}{\Theta} \quad (16)$$

mögliche Kandidaten für u_{i+1}^G sind

$$u_{i+1}^G = u_l \quad (15)$$

$$u_{i+1}^G = \frac{u_l + (\Theta - 1)u_i}{\Theta} \quad (16)$$

$$u_{i+1}^G = \frac{2u_l + 2(\Theta^2 - 2)u_i + (1 - \Theta^2)u_{i-1}}{\Theta^2 + \Theta} \quad (17)$$

mögliche Kandidaten für u_{i+1}^G sind

$$u_{i+1}^G = u_l \quad (15)$$

$$u_{i+1}^G = \frac{u_l + (\Theta - 1)u_i}{\Theta} \quad (16)$$

$$u_{i+1}^G = \frac{2u_l + 2(\Theta^2 - 2)u_i + (1 - \Theta^2)u_{i-1}}{\Theta^2 + \Theta} \quad (17)$$

$\Theta \in [0,1]$ definiert durch $\Theta = \frac{x_l - x_i}{\Delta x}$, kann berechnet werden als $\Theta = |\frac{\Phi}{\Delta x}|$, da Φ SDF ist, die auf x_l verschwindet.

Da (16) und (17) sich für kleine Θ schlecht verhalten, werden sie für $\Theta \leq \Delta x$ nicht benutzt.

Stattdessen setzt man $u_j = u_l$, was bewirkt, dass das Interface von x_l nach x_j verschoben wird.

Da (16) und (17) sich für kleine Θ schlecht verhalten, werden sie für $\Theta \leq \Delta x$ nicht benutzt.

Stattdessen setzt man $u_j = u_I$, was bewirkt, dass das Interface von x_I nach x_j verschoben wird.

Diese Störung 2.-Ordnung der Interface location verringert nicht die gesamt 2.-Ordnung Genauigkeit der Lösung, die man erreicht, wenn man (13) benutzt um nach den verbleibenden Unbekannten aufzulösen.

Asymmetrische/Symmetrische Diskretisierung

(17) in (13) ergibt für $\beta = 1$

$$\frac{\left(\frac{u_I - u_j}{\Theta \Delta x}\right) - \left(\frac{u_j - u_{j-1}}{\Delta x}\right)}{\frac{1}{2}(\Theta \Delta x + \Delta x)} = f_j \quad (18)$$

Diese Gleichung wird benutzt um numerische Methoden 2.-Ordnung zu erhalten, um „Stefan Probleme“ zu lösen.

Asymmetrische/Symmetrische Diskretisierung

(17) in (13) ergibt für $\beta = 1$

$$\frac{\left(\frac{u_l - u_i}{\Theta \Delta x}\right) - \left(\frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x}\right)}{\frac{1}{2}(\Theta \Delta x + \Delta x)} = f_i \quad (18)$$

Diese Gleichung wird benutzt um numerische Methoden 2.-Ordnung zu erhalten, um „Stefan Probleme“ zu lösen. Alternativ ergibt (16) in (13) eine symmetrische Diskretisierung

$$\frac{\beta_{i+\frac{1}{2}} \left(\frac{u_l - u_i}{\Theta \Delta x}\right) - \beta_{i-\frac{1}{2}} \left(\frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x}\right)}{\Delta x} = f_i \quad (19)$$

Dies ist ebenso von 2.-Ordnung Genauigkeit. Überdies kann man wieder fast linear solver benutzen um das entstehende LGS zu lösen, da es symmetrisch ist.

Um das zu sehen, nehmen wir an, dass in (13) die standard Diskretisierung 2. Ordnung benutzt wird um das LGS für u an jedem Gitterpunkt ausser an x_i zu bekommen

Ebenso wird (14) benutzt um eine lin. Gleichung für u_i aufzustellen, mit neuer Unbekannten u_{i+1}^G , ähnlich (16).

In der Praxis werden (16) und (14) kombiniert um (19) zu erhalten und damit ein LGS.

Lösen des LGS ergibt wohlbestimmte Werte für u an jedem Gitterpunkt im Teilgebiet und einen wohlbestimmten Wert von u_{i+1}^G (aus (16)).

Bezeichne im folgenden \vec{u} als Lösungsvektor, der alle diese Werte von u beinhaltet.

Jetzt: modifiziertes Problem mit Dirichlet-RB: $u_{i+1} = u_{i+1}^G$ bei x_{i+1} ; u_{i+1}^G aus \vec{u}

Jetzt: modifiziertes Problem mit Dirichlet-RB: $u_{i+1} = u_{i+1}^G$ bei x_{i+1} ; u_{i+1}^G aus \vec{u}

Kann mit Standarddiskretisierung aus (13) diskretisiert werden, ausser bei x_i , wo man (14) benutzt. \rightarrow Genauigkeit 2.ter Ordnung

Beachte: (14) ist Standarddiskretisierung 2. Ordnung, wenn Dirichlet-RB $u_{i+1} = u_{i+1}^G$ bei x_{i+1} angenommen werden!

\implies neues LGS kann auf Standardart gelöst werden, um 2. Ordnung Lösung (in jedem Gitterpunkt) zu erhalten.

\vec{u} exakte Lösung des LGS impliziert, dass \vec{u} 2. Ordnung Lösung diese modifizierten Problems ist

$\implies \vec{u}$ kann benutzt werden um die Interface location für mod. Problem zu erhalten.

Der lin. Interpolant, der u_i bei x_i und u_{i+1}^G bei x_{i+1} benutzt, kann die Interface location des exakten x_I vorraussagen.
Interpolationen höherer Ordnung erzeugen höchstens Störung vom vorhergesagten Interface von $O(\Delta x^2)$

Der lin. Interpolant, der u_i bei x_i und u_{i+1}^G bei x_{i+1} benutzt, kann die Interface location des exakten x_I vorraussagen.
Interpolationen höherer Ordnung erzeugen höchstens Störung vom vorhergesagten Interface von $O(\Delta x^2)$
 \implies Interface loc. des mod. Problems höchstens $O(\Delta x^2)$ Störung von der richtigen Interface loc. von x_I
Daher ist \vec{u} 2. Ordnung Lösung eines mod. Problems, bei dem die Interface location in einer Größenordnung von $O(\Delta x^2)$ gestört ist.

Der lin. Interpolant, der u_i bei x_i und u_{i+1}^G bei x_{i+1} benutzt, kann die Interface location des exakten x_I vorraussagen.
Interpolationen höherer Ordnung erzeugen höchstens Störung vom vorhergesagten Interface von $O(\Delta x^2)$
 \implies Interface loc. des mod. Problems höchstens $O(\Delta x^2)$ Störung von der richtigen Interface loc. von x_I
Daher ist \vec{u} 2. Ordnung Lösung eines mod. Problems, bei dem die Interface location in einer Größenordnung von $O(\Delta x^2)$ gestört ist.
Das macht \vec{u} ebenso zu einer (2. Ordnung) Lösung des originalen Problems.

β räumlich variierend

$\Rightarrow \beta_{i+\frac{1}{2}}$ aus (19) kann durch „ghost value“ β_{i+1}^G

festgelegt werden mit der üblichen Approximation $\beta_{i+\frac{1}{2}} = \frac{\beta_i + \beta_{i+1}^G}{2}$.

β räumlich variierend

$\Rightarrow \beta_{i+\frac{1}{2}}$ aus (19) kann durch „ghost value“ β_{i+1}^G

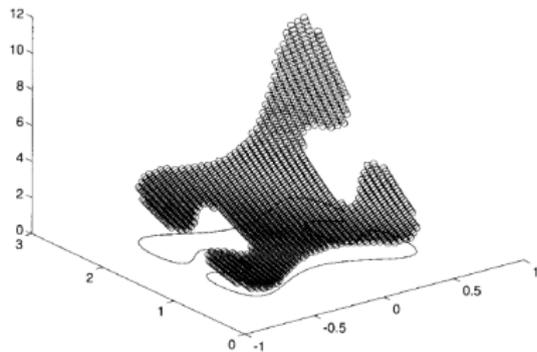
festgelegt werden mit der üblichen Approximation $\beta_{i+\frac{1}{2}} = \frac{\beta_i + \beta_{i+1}^G}{2}$.

Dabei gilt:

$$\beta_{i+1}^G = \frac{\beta_i + (\Theta - 1)\beta_i}{\Theta} \quad (20)$$

(vgl. (16))

In mehreren räumlichen Dimensionen werden die Gleichungen in einer „Dimension-für-Dimension“-Methode diskretisiert. Dabei wird die oben skizzierte 1-Dimensionale Diskretisierung benutzt (für $(\beta u_x)_x, (\beta u_y)_y, (\beta u_z)_z$). Das (schon oben betrachtete) nachfolgende Bild zeigt eine typische Lösung im 2-Dimensionalen mit räumlich variierendem β



Die selben Techniken können benutzt werden um die räumlichen Terme in (10) und (8) zu diskretisieren, um sym. LGS für die Temperatur T_i^{n+1} zu erhalten
Hierauf kann man dann wieder fast linear solver anwenden.

„Stefan Probleme“ modellieren Interfaces an Phasenübergängen
(unreagiertes Material \rightarrow reagiertes Material)

Die Interfacegeschwindigkeit beträgt $W = D * \vec{N}$, wobei

$D = (V_N)_u + S$ gilt, mit Reaktionsgeschwindigkeit S .

Das tiefergestellte u kennzeichnet eine unreaktierte Materialmenge

Unter Berücksichtigung der Effekte der Wärmeleitfähigkeit, und der Annahme $V_N \neq D$ ($d.h.S \neq 0$) erhält man eine sog. Rankine-Hugoniot-Sprungbedingung für die Energieerhaltung:

Unter Berücksichtigung der Effekte der Wärmeleitfähigkeit, und der Annahme $V_N \neq D$ ($d.h.S \neq 0$) erhält man eine sog. Rankine-Hugoniot-Sprungbedingung für die Energieerhaltung:

$$\left[\left(\rho e + \frac{\rho(V_N - D)^2}{2} + p \right) (V_N - D) \right] = [k \nabla T * \vec{N}] \quad (21)$$

Unter Berücksichtigung der Effekte der Wärmeleitfähigkeit, und der Annahme $V_N \neq D$ ($d.h.S \neq 0$) erhält man eine sog. Rankine-Hugoniot-Sprungbedingung für die Engergieerhaltung:

$$\left[\left(\rho e + \frac{\rho(V_N - D)^2}{2} + p \right) (V_N - D) \right] = [k \nabla T * \vec{N}] \quad (21)$$

Diese Gleichung kann man umschreiben zu:

$$-\rho_u S \left(\left[e + \frac{p}{\rho} \right] + \frac{\rho_u^2 S^2}{2} \left[\frac{1}{\rho^2} \right] \right) = [k \nabla T * \vec{N}] \quad (22)$$

indem man die R-H-Sprungbedingung für Masseerhaltung, $[\rho(V_N - D)] = 0$, benutzt

Weitere Annahmen sind:

- ▶ die Enthalpie pro Masseinheit $h = e + \left(\frac{p}{\rho}\right)$ hängt hauptsächlich von der Temperatur ab

Weitere Annahmen sind:

- ▶ die Enthalpie pro Masseinheit $h = e + \left(\frac{p}{\rho}\right)$ hängt hauptsächlich von der Temperatur ab
- ▶ die spezifische Wärme c_p ist bei konstantem Druck konstant

Weitere Annahmen sind:

- ▶ die Enthalpie pro Masseinheit $h = e + \left(\frac{p}{\rho}\right)$ hängt hauptsächlich von der Temperatur ab
- ▶ die spezifische Wärme c_p ist bei konstantem Druck konstant
- ▶ die Enthalpie pro Masseinheit beträgt (bei Referenztemperatur T_0) h_0

Weitere Annahmen sind:

- ▶ die Enthalpie pro Masseinheit $h = e + \left(\frac{p}{\rho}\right)$ hängt hauptsächlich von der Temperatur ab
- ▶ die spezifische Wärme c_p ist bei konstantem Druck konstant
- ▶ die Enthalpie pro Masseinheit beträgt (bei Referenztemperatur T_0) h_0
- ▶ Temperatur verläuft kontinuierlich entlang des Interface

Weitere Annahmen sind:

- ▶ die Enthalpie pro Masseinheit $h = e + \left(\frac{p}{\rho}\right)$ hängt hauptsächlich von der Temperatur ab
- ▶ die spezifische Wärme c_p ist bei konstantem Druck konstant
- ▶ die Enthalpie pro Masseinheit beträgt (bei Referenztemperatur T_0) h_0
- ▶ Temperatur verläuft kontinuierlich entlang des Interface

Weitere Annahmen sind:

- ▶ die Enthalpie pro Masseinheit $h = e + \left(\frac{p}{\rho}\right)$ hängt hauptsächlich von der Temperatur ab
- ▶ die spezifische Wärme c_p ist bei konstantem Druck konstant
- ▶ die Enthalpie pro Masseinheit beträgt (bei Referenztemperatur T_0) h_0
- ▶ Temperatur verläuft kontinuierlich entlang des Interface

$\Rightarrow h = h_0 + c_p(T - T_0)$ und (22) wird zu

$$-\rho_u S([h_o] + [c_p](T_I - T_0) + \frac{\rho_u^2 S^2}{2} [\frac{1}{\rho^2}]) = [k \nabla T * \vec{N}] \quad (23)$$

Wobei $[T] = 0$ gilt und T_I die Interfacetemperatur bezeichnet
Einfachheitshalber: $T_0 =$ Standardreaktionstemperatur (z.B. 0°C bei gefrierendem Wasser)

Für Stefan Probleme nehmen wir an, dass keine Ausbreitung jenseits der Vorderseite stattfindet ($[\rho] = 0$)
Wie verringern also entsprechend die R-H Sprungbedingungen für Masse und Impuls zu $[V_N] = 0$ und $[\rho] = 0$

Für Stefan Probleme nehmen wir an, dass keine Ausbreitung jenseits der Vorderseite stattfindet ($[\rho] = 0$)

Wie verringern also entsprechend die R-H Sprungbedingungen für Masse und Impuls zu $[V_N] = 0$ und $[\rho] = 0$ das vereinfacht (mit $\rho_u = \rho_r = \rho$)(23) zu:

$$-\rho_u S([h_o] + [c_p](T_I - T_0)) = [k \nabla T * \vec{N}] \quad (24)$$

Für Stefan Probleme nehmen wir an, dass keine Ausbreitung jenseits der Vorderseite stattfindet ($[\rho] = 0$)

Wie verringern also entsprechend die R-H Sprungbedingungen für Masse und Impuls zu $[V_N] = 0$ und $[\rho] = 0$ das vereinfacht (mit $\rho_u = \rho_r = \rho$)(23) zu:

$$-\rho_u S([h_o] + [c_p](T_I - T_0)) = [k \nabla T * \vec{N}] \quad (24)$$

setzt man schliesslich noch die Standard-Interface-Randbedingung $T_I = T_0$ ein, so erhält man

$$-\rho_u S[h_o] = [k \nabla T * \vec{N}] \quad (25)$$

Lösen von Stefanproblemen

SP löst man üblicherweise in 3 Schritten:

1. Durch (25) bestimmt man die Interfacegeschwindigkeit.
Dies geschieht durch Berechnung von $T_N = \nabla T * \vec{N}$ in einem Band über dem Interface und anschließender Extrapolation dieser Werte entlang dem Interface, so dass $(T_N)_u$ und $(T_N)_r$ an jedem Gitterpunkt in diesem Band definiert sind
Das erlaubt uns S in einer „Knoten-für-Knoten“-Methode zu berechnen
2. Man benutzt die Level-Set-Methode um das Interface zu seinem neuen Ort zu entwickeln.
3. Die Temperatur wird in jedem Teilgebiet unter Benutzung von Dirichlet-RB für die Temperatur am Interface berechnet.
Durch die Dirichlet-RB wird das Problem in 2 separate Unterprobleme aufgeteilt, die jeweils mit obigen Methoden gelöst werden

Berechnung eines 3-Dimensionalen nach außen wachsenden Interfaces

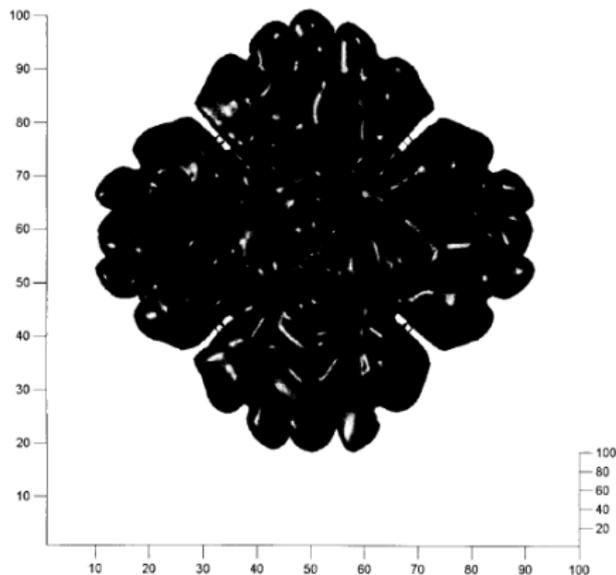


Figure 23.2. Stefan problem in three spatial dimensions. A supercooled material

Berechnung eines 2-Dimensionalen nach außen wachsenden Interfaces

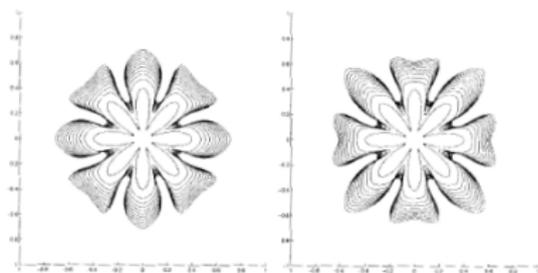


Figure 23.3. Grid orientation effects with anisotropic surface tension. The interface condition is the fourfold anisotropy boundary condition $T = -0.001 \left(\frac{\pi}{8}\right) \sin^4(2(\theta - \theta_0)) \kappa$ with (left) $\theta_0 = 0$ and (right) $\theta_0 = \pi/4$. The shape of the crystal in the right figure is that of the crystal in the left figure rotated by $\pi/4$, demonstrating that the artificial grid anisotropy is negligible.