

Grau en Matemàtiques

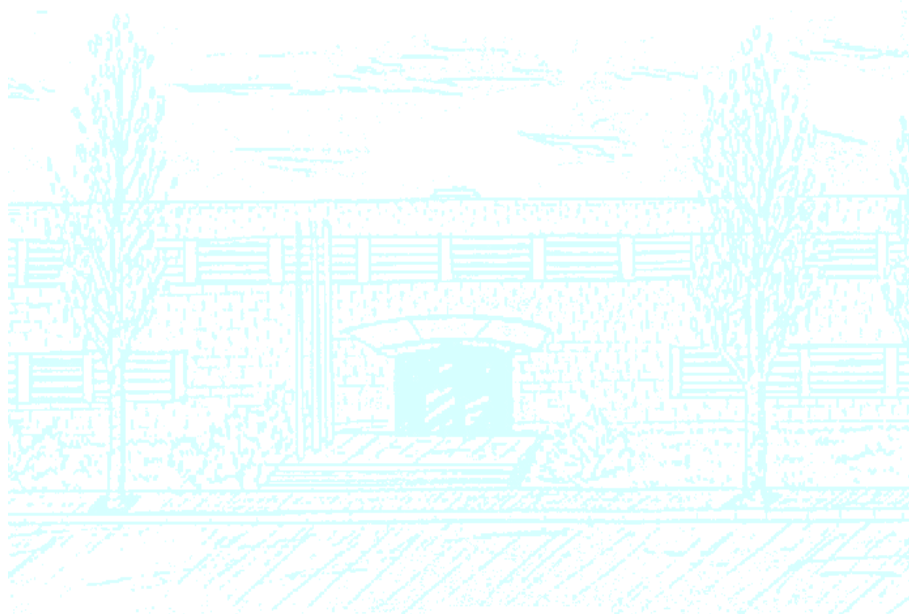
Títol: Solució numèrica del model de camp de fase per al problema d'Stefan

Autor: Agnès Grimal Manero

Director: Esther Sala Lardies, Sonia Fernández Méndez

Departament: Enginyeria Civil i Ambiental

Convocatòria: 2020 - 2021



Universitat Politècnica de Catalunya
Facultat de Matemàtiques i Estadística

Grau en Matemàtiques
Treball de final de grau

Solució numèrica del model de camp de fase per al problema d'Stefan

Agnès Grimal Manero

Supervisat per Esther Sala Lardies i Sonia Fernández Méndez

Juny 2021

Vull agrair a les meves tutores del treball Esther Sala Lardies i Sonia Fernández Méndez pel seu suport i seguiment constant. M'he sentit molt recolzada al llarg de tot el procés. Ha estat un plaer dur a terme aquest projecte amb elles.

Abstract

El problema d'Stefan és un problema d'equacions en derivades parcials amb frontera mòbil. S'usa aquest problema per tractar el fenomen físic del canvi de fase d'un material, tenint la coexistència de dues fases en el mateix domini. Al llarg d'aquest treball es recorda el model "phase field", i la seva interpretació física. La dificultat d'aquest problema requereix l'ús de mètodes numèrics, és per això que s'implementa el mètode d'elements finits i diversos mètodes d'integració temporal per tal de resoldre i obtenir solucions en una dimensió d'aquest problema. S'estudia també la capacitat del model de reproduir diversos processos físics, mitjançant experiments numèrics.

Paraules clau

Model "phase field", problema d'Stefan, mètodes numèrics per EDPs, Mètode d'elements finits

Índex

1	Introducció	1
2	Model pel problema d’Stefan	3
2.1	Model “phase-field”	4
3	Mètodes numèrics	7
3.1	Mètode d’elements finits	7
3.2	Mètodes d’integració en temps	9
3.2.1	Euler	9
3.2.2	Euler enrere	10
3.2.3	Crank Nicolson	11
3.3	Malla no uniforme	13
3.3.1	Refinament adaptatiu	13
4	Condicció inicial ϕ	16
5	Exemple sintètic	18
5.1	Convergència en espai	19
5.2	Convergència en temps	19
5.2.1	Euler endavant	19
5.2.2	Euler enrere	20
5.2.3	Crank Nicolson	20
6	Problema físic amb solució analítica	22
6.1	Precisió en espai	24
6.2	Estabilitat i precisió en temps	26
6.3	Estabilitat refinament adaptatiu	29
6.4	Convergència del model	30
7	Exemples amb interpretació física	32
7.1	Tub ple d’aigua, fred a un extrem	32
7.2	Mig tub gel, mig aigua	34
7.3	Coalescència	36
8	Conclusions i treball futur	39

1 Introducció

El problema d'Stefan va ser introduït per Josef Stefan a [6] en el context de les capes de gel polars, per modelitzar la transició del canvi de fase per passar d'estat sòlid a líquid. És un problema d'equacions en derivades parcials i de frontera lliure, ja que es resol en un domini desconegut delimitat per la posició de la interfície, a priori desconeguda. Així doncs la resolució d'aquest problema descriu la posició de la interfície $I(t)$, que és el punt de contacte entre els possibles estats d'un material, i la temperatura d'aquest material $u(x, t)$ en qualsevol punt de domini i en qualsevol instant de temps.

Al llarg d'aquest treball s'ha considerat un problema de dues fases: la coexistència d'un únic material en estat sòlid i líquid. Un exemple d'aquest problema pot ser com es desfà un glaçó en un got d'aigua. Amb les condicions inicials i de contorn indicades pel problema, la solució mostra com es desfà el gel i la distribució de la temperatura a tot el got a cada instant de temps.

Per la resolució d'aquest problema s'ha considerat el model "phase field" o model de camp de fase, que s'usa per la modelització de problemes amb transformacions de fase. Una de les principals característiques d'aquest model és la variable de fase $\phi(x, t)$ que facilita el càlcul de la posició de la interfície. Es tracta d'una variable definida a tot el domini que rep un valor constant en cadascun dels estats en els que es troba el material i varia de manera abrupta però suau i contínua entre cadascun dels estats. Així doncs, el canvi de fase i per tant la posició de la interfície es troba dintre d'aquesta regió on ϕ canvia entre els valors constants. El gruix de la regió on ϕ canvia es pot regular mitjançant el paràmetre ξ . Una propietat molt important d'aquest model és que està construït de manera que el seu límit, quan $\xi \rightarrow 0$, sigui el model "sharp interface" o d'interfície nítida o marcada, en el qual la interfície és de mesura nul·la. Ambdós models queden explicats amb més detall a la secció 2.

En quant als mètodes numèrics usats per resoldre les EDPs, és necessari considerar mètodes per discretitzar les variables en el sentit espacial i en el sentit temporal. Per al cas d'espai s'ha usat el mètode d'elements finits, amb el que s'aconsegueix l'aproximació de les solucions d'equacions en derivades parcials a partir de la seva forma feble. Un dels principals avantatges d'aquest mètode és la capacitat d'adaptar-se als dominis, ja que permet l'ús de malles no uniformes, característica molt útil en aquest cas, per la necessitat de capturar amb precisió la variació de la variable de fase ϕ allà on es produeix un canvi de fase, podent adaptar la mida de la discretització segons ho requereix la solució.

Per tractar la variable temporalment s'utilitzen tres mètodes diferents. L'objectiu és poder comparar mètodes explícits i mètodes implícits per tal de poder veure les avantatges i inconvenients de cadascun d'ells en aquest problema. En primer lloc els mètodes explícits tenen una implementació més senzilla però són més restrictius ja que cal un pas de temps petit, és a dir, una discretització fina, per garantir l'estabilitat de la solució. En canvi els implícits relaxen les restriccions però tenen un cost computacional més elevat en cada pas.

Els principals objectius d'aquest treball són comprendre la modelització d'un fenomen físic, per tal de poder reproduir situacions realistes i estudiar l'eficiència i aplicabilitat dels

mètodes numèrics considerats.

A la secció 2 es desenvolupa l'explicació del fenomen físic i del model escollit. A partir d'aquest model podem valorar els possibles mètodes numèrics, tant a nivell teòric com en la seva implementació, per tal de veure quin és el que millor s'adapta al model. Al llarg de les seccions 3 i 5 es desenvolupen de manera teòrica els mètodes numèrics escollits i es comprova el funcionament de la seva implementació. Finalment, amb la comprensió del model i la implementació dels mètodes numèrics, al llarg de les seccions 6 i 7 es presenten diferents situacions físiques i es reproduïx la seva solució.

Al llarg del desenvolupament del treball han sorgit altres objectius com l'elaboració d'un criteri adaptatiu per decidir la discretització en espai desenvolupat al llarg de la secció 3.3 o bé l'elecció de la condició inicial per la variable de fase, a la secció 4.

La implementació d'aquest treball ha estat realitzada amb MATLAB. Tant els codis amb la implementació dels diversos mètodes numèrics per resoldre el sistema proposat com tot el material gràfic inclòs en aquest treball, amb figures i gràfics de les solucions obtingudes.

2 Model pel problema d'Stefan

El fenomen físic que es considera al llarg del treball és el problema de la fusió o solidificació, en el que hi ha una regió del domini en estat líquid, en contacte amb una regió en estat sòlid, i separades per la interfície, on s'assoleix la temperatura de fusió per canviar d'un estat a l'altre.

Es considera el domini de longitud L , $\Omega = [0, L]$, on hi ha un material en estat líquid en una certa regió del domini, Ω_l . A la resta del domini Ω_s el material es troba en estat sòlid. Les regions de contacte entre Ω_l i Ω_s són punts aïllats, on hi ha la interfície per cadascun dels canvis de fase. La posició de la interfície I i les regions del domini Ω_l i Ω_s varien amb el temps degut al transport de la calor.

Aquest problema es modelitza amb les anomenades equacions d'Stefan:

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} \left(K \frac{\partial u}{\partial x} \right) \quad x \in \Omega_s(t) \quad (1)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} \left(K \frac{\partial u}{\partial x} \right) \quad x \in \Omega_l(t) \quad (2)$$

$$lv = K \frac{\partial u}{\partial x}(x, t)|_{x \downarrow I(t)} - K \frac{\partial u}{\partial x}(x, t)|_{x \uparrow I(t)} \quad (3)$$

on $u(x, t)$ és la temperatura a la posició x i a temps t i $v = \frac{dI}{dt}$ és la velocitat de la interfície.

(1) i (2) són les equacions de la calor, tant per la regió en estat sòlid com en estat líquid. La velocitat v ve donada per la condició de salt o condició d'Stefan (3). $K = K_s$ a Ω_s i $K = K_l$ a Ω_l on K_s i K_l són les difusivitats tèrmiques en l'estat sòlid i líquid respectivament, que involucren la capacitat calorífica, la densitat i el coeficient de conducció tèrmica del material en qüestió. Al llarg del treball aquests coeficients s'han considerat constants tant en posició com en temps. Finalment, l és la calor latent de solidificació.

Sense pèrdua de generalitat podem suposar que la temperatura de fusió és zero i, per tant, a la posició de la interfície s'assoleix aquesta temperatura

$$u(I(t), t) = 0 \quad \forall t$$

En el cas de considerar un domini tèrmicament aïllat, aleshores no hi ha flux de temperatura al contorn del domini, en aquest cas als extrems $x = 0$ i $x = L$. Això dóna lloc a condicions de Neumann homogènies

$$\frac{\partial u}{\partial x}(a, t) = 0$$

amb $a = 0$ o $a = L$.

També es pot considerar el fet de fixar la temperatura en algun dels extrems del domini, tant de manera constant com variable en temps, donant lloc a condicions de Dirichlet

$$u(a, t) = u_a(t).$$

Les equacions (1), (2) i (3), amb les condicions de contorn del domini i la condició per la temperatura de la interfície donen el model al que ens referim com “sharp interface”. Una de les principals dificultats d’aquest model és la discontinuïtat de la derivada de la temperatura a la interfície, ja que requereix una adaptació constant de la malla adaptada a la posició de la interfície per tal de poder representar de manera acurada aquesta discontinuïtat.

Per fer front a aquesta dificultat, el model “phase-field” introdueix una nova variable ϕ , que pren valors constants en cadascuna de les fases del material i que varia de forma contínua i suau entre les dues fases. En aquesta regió de transició és on es troba la interfície per cadascun dels canvis de fase. El model “phase-field” es construeix de manera que el seu límit sigui el model “sharp interface”.

2.1 Model “phase-field”

El model “phase field” o camp de fase és un model que s’usa en problemes de transformació de fase. L’objectiu principal és determinar com evoluciona la posició de la interfície, és a dir, el punt, o punts, del domini on es produeix un canvi de fase.

Una de les característiques del model “phase field” és l’ús de la variable de fase $\phi(x, t)$, que caracteritza la fase del material en cada punt x i temps t . Està definida a tot el domini i pren un valor constant, per cada fase que es considera per exemple -1 i 1, amb una variació suau, tot i que abrupta, entre els valors constants de cada fase. La variació de ϕ es produeix en la zona al voltant de la interfície. El gruix d’aquesta regió està regulat amb un paràmetre artificial ξ . Així doncs, la funció de fase ϕ ve donada per

$$\phi(x, t) = \begin{cases} 1 & \text{posició } x \text{ a temps } t \text{ en estat líquid} \\ -1 & \text{posició } x \text{ a temps } t \text{ en estat sòlid} \end{cases}$$

i la regió de la interfície doncs ve caracteritzada per $-1 < \phi(x, t) < 1$.

La figura 1 mostra un exemple on es pot veure la variació suau de -1 a 1 en un entorn de la interfície.

L’evolució del fenomen ve descrit pel sistema d’equacions en derivades parcials acoblat

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= c\Delta u - \frac{l}{2} \frac{\partial \phi}{\partial t} + f_1 \\ \alpha \xi^2 \frac{\partial \phi}{\partial t} &= \xi^2 \Delta \phi - \frac{\partial G}{\partial \phi} + f_2 \end{aligned} \quad x \in (0, L) \quad t \in (0, T_{final}) \quad (4)$$

amb condicions inicials

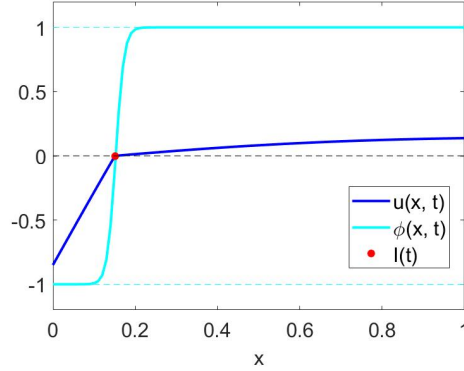


Figura 1: Variables u , ϕ , $I(t)$

$$u(x, 0) = u^0(x) \quad \phi(x, 0) = \phi^0(x)$$

i condicions de contorn apropiades a la frontera.

La primera equació és l'equació de la calor modificada pel terme de la variable de fase assumint que la temperatura de fusió és 0, si cal amb una translació de la temperatura $u(x, t)$. La segona equació modela l'evolució de la variable de fase.

En quant als paràmetres, c és la difusivitat tèrmica, constant en aquest treball, l és la calor latent, α és un paràmetre de relaxació temporal, ξ és un paràmetre relacionat amb el gruix de la regió de la interfície i G es la funció del potencial d'energia, discutit a continuació.

Les funcions f_1 i f_2 són dues funcions auxiliars, utilitzades als exemples sintètics per tal de construir exemples amb solució analítica coneguda. Tret d'aquests exemples, $f_1 = 0$, $f_2 = 0$ per qualsevol dels problemes amb interpretació física.

Els models més utilitzats són els basats en el potencial de Caginalp i en el potencial de Kobayashi. Per al potencial Caginalp es considera la funció

$$G(u, \phi) = \frac{1}{8a}(\phi^2 - 1)^2 - \frac{\Delta s}{2}\phi u \quad (5)$$

El màxim i mínim d'aquesta funció estableixen els valors de les constants que ha de prendre la variable ϕ en cadascuna de les fases. Per la influència del paràmetre a , aquests valors estan lleugerament desplaçats dels 1 i -1 esperats. Per tant, s'ha d'escollir a suficientment petit com per reduir aquest desplaçament. També cal prendre un valor per a de manera que $\frac{\partial G}{\partial \phi}$ tingui tres arrels diferents al voltant de 0, 1 i -1. Caginalp [2] estableix la convergència del model "phase field" amb el potencial de Caginalp al model "sharp interface" quan $\xi \rightarrow 0$ i $a \rightarrow 0$.

Per al potencial Kobayashi, en canvi, es considera la funció

$$G(u, \phi) = \frac{W}{16} \int_0^\phi (r^2 - 1)(r + 2b(u)) dr \quad (6)$$

on $b(u)$ és una funció de la temperatura monòtona creixent que satisfà $|b(u)| < \frac{1}{2}$. Seguint la referència de Wheeler [1] es considera una funció lineal, $b(u) = \frac{6\Delta s}{W}u$, que s'ha provat que és adequada per al model "phase field".

El màxim i mínim de (6), en aquest cas sí són -1 i 1, i determinen altra vegada els valors de les constants que pren la variable ϕ en cada fase.

Tot i que no hi ha cap resultat rigorós conegut per al potencial de Kobayashi quan $\xi \rightarrow 0$, hi ha arguments físics raonables aportats per Kobayashi [3] que suporten la convergència del model "phase field" amb el potencial Kobayashi cap a l'esperat model límit "sharp interface". A més, a [1] també es comprova la convergència d'aquest model en una i en dues dimensions.

Al llarg del treball s'han considerat els següents valors pels paràmetres: $\Delta s = 4$, $a = 1$, $W = 8$ i s'ha considerat la notació $F = -\frac{\partial G}{\partial \phi}$, $F_u = \frac{\partial F}{\partial u}$, $F_\phi = \frac{\partial F}{\partial \phi}$. Així,

$$\begin{aligned} F(u, \phi) &= \frac{1}{2a}(\phi - \phi^3) + \frac{\Delta s}{2}u \\ F_u(u, \phi) &= \frac{\Delta s}{2} \\ F_\phi(u, \phi) &= \frac{1}{2a}(1 - 3\phi^2) \end{aligned} \quad (7)$$

per Caginalp i

$$\begin{aligned} F(u, \phi) &= \frac{W}{16}\phi + \frac{3}{4}\Delta s u - \frac{W}{16}\phi^3 - \frac{3}{4}\Delta s \phi^2 u \\ F_u(u, \phi) &= \left(\frac{3}{4}\Delta s - \frac{3}{4}\Delta s \phi^2\right) \\ F_\phi(u, \phi) &= \left(\frac{W}{16} - \frac{3W}{16}\phi^2 - \frac{3}{2}\Delta s \phi u\right) \end{aligned} \quad (8)$$

per Kobayashi.

3 Mètodes numèrics

Al llarg d'aquesta secció es consideren diferents mètodes numèrics per tal d'obtenir una solució al problema d'Stefan plantejat.

Es discretitza el problema primer en espai, per tal d'obtenir un sistema d'EDOs a resoldre en uns quants punts del domini i posteriorment en temps per tal de resoldre el sistema uns certs instants de temps.

Així doncs es desenvolupa el mètode d'elements finits per tal de tractar les variables en el sentit espacial i posteriorment es consideren tres mètodes per a la integració temporal.

A l'última subsecció es consideren diferents malles per la discretització en espai, per tal d'optimitzar el cost computacional en cadascun dels exemples considerats.

3.1 Mètode d'elements finits

El mètode d'elements finits és un mètode numèric per l'aproximació de la solució d'equacions en derivades parcials a qualsevol domini a partir de la forma feble o forma integral del problema.

Es considera una partició o discretització del domini, generant n elements, que en el cas d'una dimensió són subintervalls, separats per $n+1$ nodes $\{x_i\}_{i=1}^{n+1}$. S'han considerat tant malles uniformes, amb $h := x_i - x_{i-1}$ constant, com malles adaptatives.

Es consideren les equacions (4), amb condicions de contorn de Dirichlet

$$\begin{aligned}u_a &= u(a, t) & u_b &= u(b, t) \\ \phi_a &= \phi(a, t) & \phi_b &= \phi(b, t)\end{aligned}$$

o bé amb condicions de contorn de Neumann homogènies

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial x}(a, t) &= 0 & \frac{\partial u}{\partial x}(b, t) &= 0 \\ \frac{\partial \phi}{\partial x}(a, t) &= 0 & \frac{\partial \phi}{\partial x}(b, t) &= 0\end{aligned}$$

o alguna combinació d'aquestes condicions de contorn.

Per obtenir la forma feble es procedeix de la següent manera. Multiplicant cada equació per una funció v , tal que $v = 0$ als nodes amb condicions de contorn de Dirichlet i integrant en tot el domini (a, b) s'obtenen les següents expressions

$$\begin{aligned}\int_a^b v \frac{\partial u}{\partial t} dx &= c \int_a^b v \Delta u dx - \frac{l}{2} \int_a^b v \frac{\partial \phi}{\partial t} dx + \int_a^b v f_1 dx \\ \alpha \xi^2 \int_a^b v \frac{\partial \phi}{\partial t} dx &= \xi^2 \int_a^b v \Delta \phi dx + \int_a^b v F(u, \phi) dx + \int_a^b v f_2 dx\end{aligned}$$

Integrant per parts el primer terme de la dreta en les dues equacions s'obté

$$c \int_a^b v \Delta u dx = cv \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_a^b - c \int_a^b \frac{dv}{dx} \frac{\partial u}{\partial x} dx$$

$$\xi^2 \int_a^b v \Delta \phi dx = \xi^2 v \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_a^b - \xi^2 \int_a^b \frac{dv}{dx} \frac{\partial \phi}{\partial x} dx$$

Al llarg del treball s'usen condicions contorn de Dirichlet o bé de Neumann homogènies i en ambdós casos, el primer terme que s'avalua a la frontera del domini és zero. En el primer cas ja que s'imposa que $v = 0$ en els punts on hi ha condicions de contorn de Dirichlet. En el segon cas ja que la condició de contorn és $\frac{\partial u}{\partial x} = 0$ o $\frac{\partial \phi}{\partial x} = 0$ allà on s'imposen condicions de Neumann homogènies.

Així doncs, les equacions després d'integrar per parts són:

$$\int_a^b v \frac{\partial u}{\partial t} dx = -c \int_a^b \frac{dv}{dx} \frac{\partial u}{\partial x} dx - \frac{l}{2} \int_a^b v \frac{\partial \phi}{\partial t} dx + \int_a^b v f_1 dx$$

$$\alpha \xi^2 \int_a^b v \frac{\partial \phi}{\partial t} dx = -\xi^2 \int_a^b \frac{dv}{dx} \frac{\partial \phi}{\partial x} dx + \int_a^b v F(u, \phi) dx + \int_a^b v f_2 dx$$
(9)

El domini (a, b) es discretitza en n intervals, és a dir, en $n+1$ nodes x_j , i es considera una base de funcions lineals N_i tal que $N_i(x_j) = \delta_{ij}$ per aproximar les funcions:

$$u(t, x) \approx \sum_{j=1}^{n+1} u_j(t) N_j(x) \quad \frac{\partial u}{\partial t} \approx \sum_{j=1}^{n+1} \frac{du_j}{dt} N_j \quad \frac{\partial u}{\partial x} \approx \sum_{j=1}^{n+1} u_j \frac{dN_j}{dx}$$

$$\phi(t, x) \approx \sum_{j=1}^{n+1} \phi_j(t) N_j(x) \quad \frac{\partial \phi}{\partial t} \approx \sum_{j=1}^{n+1} \frac{d\phi_j}{dt} N_j \quad \frac{\partial \phi}{\partial x} \approx \sum_{j=1}^{n+1} \phi_j \frac{dN_j}{dx}$$

Les equacions (9) s'imposen per $v = N_i(x)$ obtenint el sistema

$$\sum_{j=1}^{n+1} \int_a^b N_i N_j \frac{du_j}{dt} dx = -c \sum_{j=1}^{n+1} \int_a^b N_i' N_j' u_j dx - \frac{l}{2} \sum_{j=1}^{n+1} \int_a^b N_i N_j \frac{d\phi_j}{dt} dx + \sum_{j=1}^{n+1} \int_a^b N_i N_j f_1 dx$$

$$\alpha \xi^2 \sum_{j=1}^{n+1} \int_a^b N_i N_j \frac{d\phi_j}{dt} dx = -\xi^2 \sum_{j=1}^{n+1} \int_a^b N_i' N_j' \phi_j dx + \sum_{j=1}^{n+1} \int_a^b N_i N_j F(u_j, \phi_j) dx + \sum_{j=1}^{n+1} \int_a^b N_i N_j f_2 dx$$

És a dir, s'obté el sistema d'EDOs

$$\mathbf{M} \frac{d\mathbf{u}}{dt} = -c \mathbf{K} \mathbf{u} - \frac{l}{2} \mathbf{M} \frac{d\phi}{dt} + \mathbf{M} f_1$$

$$\alpha \xi^2 \mathbf{M} \frac{d\phi}{dt} = -\xi^2 \mathbf{K} \phi + \mathbf{M} F(\mathbf{u}, \phi) + \mathbf{M} f_2$$

on les matrius es defineixen com

$$M_{i,j} = \int_a^b N_i N_j dx \quad K_{i,j} = \int_a^b N_i' N_j' dx$$

El sistema es pot escriure en forma compacta com

$$\begin{aligned} \mathbf{M} \frac{d\mathbf{u}}{dt} &= \mathcal{L}_2(\mathbf{u}, \phi) - \frac{l}{2} \mathbf{M} \mathcal{L}_1(\mathbf{u}, \phi) \\ \mathbf{M} \frac{d\phi}{dt} &= \mathcal{L}_1(\mathbf{u}, \phi) \end{aligned} \quad (10)$$

amb els operadors

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_1(\mathbf{u}, \phi) &= \frac{1}{\alpha \xi^2} (-\xi^2 \mathbf{K} \phi + \mathbf{M} \mathbf{F}(\mathbf{u}, \phi) + \mathbf{M} f_2) \\ \mathcal{L}_2(\mathbf{u}, \phi) &= -c \mathbf{K} \mathbf{u} + \mathbf{M} f_1 \end{aligned} \quad (11)$$

3.2 Mètodes d'integració en temps

Al llarg d'aquesta secció es consideren diferents mètodes per tal d'integrar en temps el sistema d'EDOs (10).

S'han considerat tres mètodes diferents, un d'explícit, Euler endavant, i dos d'implícits, Euler enrere i Crank Nicolson. Els mètodes explícits són menys costosos en CPU i memòria en cada pas però requereixen algunes condicions d'estabilitat que impliquen passos de temps molt petits, que els poden fer inviabilitats, per requerir massa iteracions. En canvi els implícits solen ser menys restrictius però tenen un cost computacional molt més elevat a cada pas. Tot i això al llarg del treball només s'han utilitzat Euler endavant i Crank Nicolson, ja que Euler enrere és implícit, com Crank Nicolson, però d'ordre inferior. S'ha desenvolupat Euler enrere com a pas intermediari entre els dos mètodes utilitzats.

3.2.1 Euler

El mètode d'Euler és un mètode explícit de primer ordre, on s'usa l'aproximació per la primera derivada $\left. \frac{dv}{dt} \right|_n = \frac{v^{n+1} - v^n}{\Delta t} + O(\Delta t)$. Cal tenir en compte que és condicionalment estable. En aquest cas, per la part lineal del sistema s'ha de verificar $r := \frac{\Delta t}{\Delta x^2} c < \frac{1}{2}$. Tot i això, veurem que degut a la part no lineal del potencial aquesta condició haurà de ser més restrictiva.

Per tal que el mètode sigui explícit, és a dir, que no calgui resoldre un sistema lineal a cada pas, la matriu \mathbf{M} que multiplica les derivades temporals es substitueix per la matriu \mathbf{M}_L , que és una matriu diagonal, on cada element és la suma dels termes d'aquella fila de

la matriu \mathbf{M} del sistema. A més, l'ús d'aquesta matriu relaxa la condició d'estabilitat del sistema.

D'aquesta manera, el sistema (10) es converteix en

$$\begin{aligned}\mathbf{M}_{\mathbf{L}} \frac{du}{dt} &= \mathcal{L}_2(\mathbf{u}, \phi) - \frac{l}{2} \mathbf{M}_{\mathbf{L}} \mathcal{L}_1(\mathbf{u}, \phi) \\ \mathbf{M}_{\mathbf{L}} \frac{d\phi}{dt} &= \mathcal{L}_1(\mathbf{u}, \phi)\end{aligned}\tag{12}$$

Aplicant el mètode d'Euler a aquest sistema s'obté l'esquema explícit per calcular \mathbf{u}^{n+1} i ϕ^{n+1} a partir de \mathbf{u}^n i ϕ^n

$$\begin{aligned}\mathbf{u}^{n+1} &= \mathbf{u}^n + \Delta t \mathbf{M}_{\mathbf{L}}^{-1} (\mathcal{L}_2(\mathbf{u}^n, \phi^n) - \frac{l}{2} \mathbf{M}_{\mathbf{L}} \mathcal{L}_1(\mathbf{u}^n, \phi^n)) \\ \phi^{n+1} &= \phi^n + \Delta t \mathbf{M}_{\mathbf{L}}^{-1} \mathcal{L}_1(\mathbf{u}^n, \phi^n)\end{aligned}\tag{13}$$

3.2.2 Euler enrere

El mètode d'Euler enrere és un mètode implícit de primer ordre, on s'usa l'aproximació per la primera derivada $\left. \frac{dv}{dt} \right|^{n+1} = \frac{v^{n+1} - v^n}{\Delta t} + O(\Delta t)$. És un mètode incondicionalment estable per la part lineal del sistema.

Aplicant el mètode d'Euler enrere a (10) s'obté el següent sistema

$$\begin{aligned}\mathbf{M} \frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} &= \mathcal{L}_2(\mathbf{u}^{n+1}, \phi^{n+1}) - \frac{l}{2} \mathbf{M} \mathcal{L}_1(\mathbf{u}^{n+1}, \phi^{n+1}) \\ \mathbf{M} \frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} &= \mathcal{L}_1(\mathbf{u}^{n+1}, \phi^{n+1})\end{aligned}\tag{14}$$

implícit ja que tots els termes s'avaluen a temps t^{n+1} .

A diferència d'Euler endavant, en aquest cas cal resoldre un sistema no lineal a cada pas de temps, perquè la funció del potencial $\mathbf{F}(\mathbf{u}, \phi)$ està avaluada en les variables \mathbf{u}^{n+1} i ϕ^{n+1} i per als dos potencials considerats és una funció no lineal.

Per resoldre el sistema no lineal s'ha fet servir el mètode de Newton Raphson. Es considera una nova variable que conté en forma de vector les dues incògnites $\mathbf{y} = \begin{bmatrix} \mathbf{u}^{n+1} \\ \phi^{n+1} \end{bmatrix}$ i el residu corresponent a les equacions (14),

$$\mathbf{r}(\mathbf{y}) = \begin{bmatrix} \mathbf{r}_1(\mathbf{y}) \\ \mathbf{r}_2(\mathbf{y}) \end{bmatrix} := \begin{bmatrix} \mathbf{M}\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{M}\mathbf{u}^n + \Delta t [\mathcal{L}_2(\mathbf{u}^{n+1}, \phi^{n+1}) - \frac{l}{2} \mathbf{M} \mathcal{L}_1(\mathbf{u}^{n+1}, \phi^{n+1})] \\ \mathbf{M}\phi^{n+1} - \mathbf{M}\phi^n - \Delta t \mathcal{L}_1(\mathbf{u}^{n+1}, \phi^{n+1}) \end{bmatrix}$$

Calculant les primeres derivades respecte a cadascuna de les variables es defineix el jacobià del residu

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} \mathbf{J}_1 & \mathbf{J}_2 \\ \mathbf{J}_3 & \mathbf{J}_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathbf{r}_1}{\partial \mathbf{u}^{n+1}} & \frac{\partial \mathbf{r}_1}{\partial \phi^{n+1}} \\ \frac{\partial \mathbf{r}_2}{\partial \mathbf{u}^{n+1}} & \frac{\partial \mathbf{r}_2}{\partial \phi^{n+1}} \end{pmatrix}$$

amb les expressions

$$\mathbf{J}_1 = M + \Delta t[\mathbf{cK} + \frac{l}{2\alpha\xi^2}\mathbf{MF}_u(\mathbf{u}^{n+1}, \phi^{n+1})]$$

$$\mathbf{J}_2 = \frac{l\Delta t}{2\alpha\xi^2}[-\xi^2\mathbf{K} + \mathbf{MF}_\phi(\mathbf{u}^{n+1}, \phi^{n+1})]$$

$$\mathbf{J}_3 = -\frac{\Delta t}{2\alpha\xi^2}[\mathbf{MF}_u(\mathbf{u}^{n+1}, \phi^{n+1})]$$

$$\mathbf{J}_4 = M - \frac{\Delta t}{2\alpha\xi^2}[-\xi^2\mathbf{K} + \mathbf{MF}_\phi(\mathbf{u}^{n+1}, \phi^{n+1})]$$

Així doncs, el mètode de Newton Raphson consisteix en, donada l'aproximació inicial \mathbf{y}^0 i una tolerància δ , repetir l'esquema

$$\mathbf{y}^{k+1} = \mathbf{y}^k - \mathbf{J}^{-1}(\mathbf{y}^k)\mathbf{r}(\mathbf{y}^k)$$

fins que l'error $\frac{\|\mathbf{y}^{k+1} - \mathbf{y}^k\|}{\|\mathbf{y}^k\|}$ sigui més petit que δ .

Per calcular la solució en l'instant de temps t^{n+1} s'usa com a primera aproximació $\mathbf{y}^0 = \begin{pmatrix} \mathbf{u}^n \\ \phi^n \end{pmatrix}$ que és conegut.

3.2.3 Crank Nicolson

El mètode de Crank Nicolson és un mètode implícit de segon ordre, on s'usa l'aproximació per la primera derivada $\left. \frac{dv}{dt} \right|^{n+\frac{1}{2}} = \frac{v^{n+1} - v^n}{\Delta t} + O(\Delta t^2)$. És un mètode incondicionalment estable per la part lineal del sistema.

Aplicant el mètode de Crank Nicolson al sistema d'EDOs (10), s'obté el sistema implícit

$$\begin{aligned} \mathbf{M} \frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} &= \frac{1}{2}[\mathcal{L}_2(\mathbf{u}^n, \phi^n) - \frac{l}{2}\mathbf{M}\mathcal{L}_1(\mathbf{u}^n, \phi^n) + \mathcal{L}_2(\mathbf{u}^{n+1}, \phi^{n+1}) - \frac{l}{2}\mathbf{M}\mathcal{L}_1(\mathbf{u}^{n+1}, \phi^{n+1})] \\ \mathbf{M} \frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} &= \frac{1}{2}[\mathcal{L}_1(\mathbf{u}^n, \phi^n) + \mathcal{L}_1(\mathbf{u}^{n+1}, \phi^{n+1})] \end{aligned} \quad (15)$$

Es defineixen dues variables auxiliars més, una per cada equació, amb tots els termes que depenen de les variables \mathbf{u}^n i ϕ^n

$$\mathbf{v}_1 = \mathbf{M}\mathbf{u}^n + \frac{\Delta t}{2}[\mathcal{L}_2(\mathbf{u}^n, \phi^n) - \frac{l}{2}\mathbf{M}\mathcal{L}_1(\mathbf{u}^n, \phi^n)]$$

$$\mathbf{v}_2 = \mathbf{M}\phi^n + \frac{\Delta t}{2}\mathcal{L}_1(\mathbf{u}^n, \phi^n)$$

Torna a ser necessari resoldre un sistema no lineal a cada pas de temps, a causa de la funció del potencial $F(\mathbf{u}, \phi)$, que està avaluada tant en les variables \mathbf{u}^n, ϕ^n com en les $\mathbf{u}^{n+1}, \phi^{n+1}$. Es resol també fent servir el mètode de Newton Raphson, ara amb el residu corresponent a les equacions (15)

$$\mathbf{r}(\mathbf{y}) = \begin{bmatrix} \mathbf{r}_1(\mathbf{y}) \\ \mathbf{r}_2(\mathbf{y}) \end{bmatrix} := \begin{bmatrix} \mathbf{M}\mathbf{u}^{n+1} - \frac{\Delta t}{2}[\mathcal{L}_2(\mathbf{u}^{n+1}, \phi^{n+1}) - \frac{l}{2}\mathbf{M}\mathcal{L}_1(\mathbf{u}^{n+1}, \phi^{n+1})] - \mathbf{v}_1 \\ \mathbf{M}\phi^{n+1} - \frac{\Delta t}{2}\mathcal{L}_1(\mathbf{u}^{n+1}, \phi^{n+1}) - \mathbf{v}_2 \end{bmatrix}$$

i les components del Jacobià

$$\mathbf{J}_1 = \mathbf{M} + \frac{\Delta t}{2}c\mathbf{K} + \frac{l\Delta t}{4\alpha\xi^2}\mathbf{M}\mathbf{F}_u(\mathbf{u}^{n+1}, \phi^{n+1})$$

$$\mathbf{J}_2 = \frac{l\Delta t}{4\alpha\xi^2}[-\xi^2\mathbf{K} + \mathbf{M}\mathbf{F}_\phi(\mathbf{u}^{n+1}, \phi^{n+1})]$$

$$\mathbf{J}_3 = -\frac{\Delta t}{\alpha\xi^2}[\mathbf{M}\mathbf{F}_u(\mathbf{u}^{n+1}, \phi^{n+1})]$$

$$\mathbf{J}_4 = \mathbf{M} - \frac{\Delta t}{\alpha\xi^2}[-\xi^2\mathbf{K} + \mathbf{M}\mathbf{F}_\phi(\mathbf{u}^{n+1}, \phi^{n+1})]$$

3.3 Malla no uniforme

Al llarg del desenvolupament del treball s'han considerat diferents discretitzacions en espai. En primer lloc s'ha considerat una discretització no uniforme però fixada en temps. Es considera la divisió del domini en dues parts, $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2$. Per la necessitat d'una discretització molt fina al voltant de la interfície, és a dir, a la zona $-1 < \phi(x, t) < 1$, la mida dels elements és molt petita i emprar la uniforme a tot el domini seria molt costós computacionalment. Per això només es considera la discretització més fina allà on és necessari, per tal de reduir el temps de càlcul. A la regió del domini Ω_1 s'assumeix que no es produeix cap canvi de fase en cap instant de temps. En aquesta regió es considera una mida d'element Δx_1 constant. En segon lloc, Ω_2 és la regió del domini on es mou la interfície, és per això que cal considerar un $\Delta x_2 \ll \Delta x_1$ constant prou petit per captar la variació de ϕ .

A l'exemple de la figura 2, tal com s'ha fet en els exemples amb interpretació física però sense refinament adaptatiu, es divideix el domini en dues meitats. La interfície es mou a la regió del domini $\Omega_2 = (0, 0.5)$ i es considera $\Delta x_2 = 0.005$. Aquesta és la regió que necessita una mida d'element més petita per tal de captar l'abrupta variació de ϕ . En canvi, a la regió del domini $\Omega_1 = (0.5, 1)$, no es produeix cap canvi de fase, per tant es considera un tamany d'element més gran, $\Delta x_1 = 0.05$. Es manté aquesta discretització per tots els instants de temps. Es consideren doncs solucions amb 61 nodes.

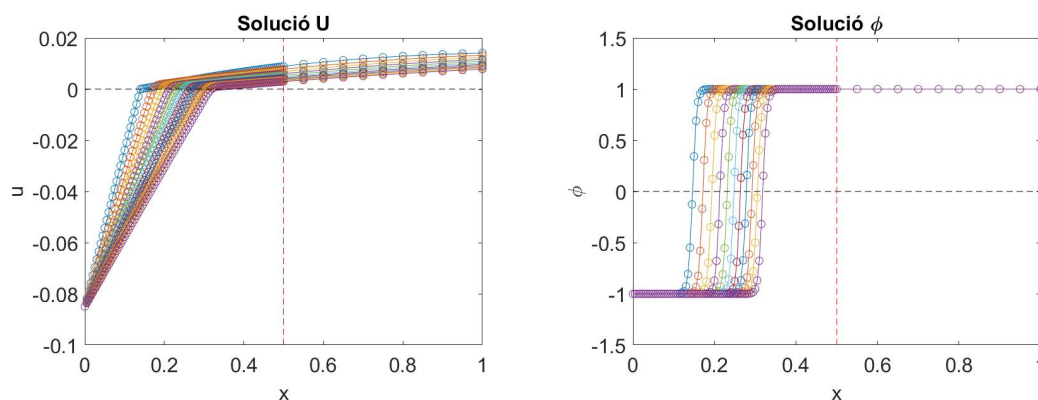


Figura 2: Solució de u (dreta) i ϕ (esquerra) usant el potencial Kobayashi amb els paràmetres $\xi = \Delta x_1 = 0.005$, $\Delta x_2 = 0.05$, $T_{final} = 0.5$, $\Delta t = 6.25 \times 10^{-6}$

Finalment, per tal d'optimitzar encara més la mida del sistema, es considera també una malla variable en temps, discutida a la següent secció.

3.3.1 Refinament adaptatiu

Al llarg d'aquesta secció es desenvolupa un criteri una mica més acurat per decidir la discretització en espai del domini. La motivació d'aquesta estratègia és tractar de distingir

aquelles parts del domini que necessiten una discretització més o menys fina, per tal de poder reproduir la solució de manera prou acurada. L'objectiu és discretitzar únicament la regió necessària en cada instant de temps, per tal de reduir el número de nodes i per tant disminuir de manera dràstica les dimensions de matrius i vectors. A la secció 6.1 s'ha estudiat la necessitat de tenir una discretització prou fina en aquelles parts on la variable ϕ varia de manera abrupta.

Per al refinament adaptatiu es considera una malla base de tot el domini (a, b) , amb mida d'element Δx_1 constant. Usant els elements d'aquesta malla $\{E_i\}$ com a referència, per a cada instant de temps cal mirar quins elements contenen la variació abrupta de ϕ . El criteri per escollir aquests elements és

$$\min_{x \in E_i} |\phi(x)| < 1 - tol.$$

En aquest treball s'usa una tolerància $tol = 0.01$. Un cop escollits els elements, aquests es refinan amb una discretització més fina, amb tamany $\Delta x_2 \ll \Delta x_1$.

A la figura 3 es considera el mateix exemple que a la figura 2, és a dir usant el potencial Kobayashi ara amb refinament adaptatiu amb tamany d'element base $\Delta x_1 = 0.1$ i tamany $\Delta x_2 = \xi = 0.005$ als elements refinats. El pas de temps és $\Delta t = 6.25 \times 10^{-6}$ i amb temps final $T_{final} = 0.5$.

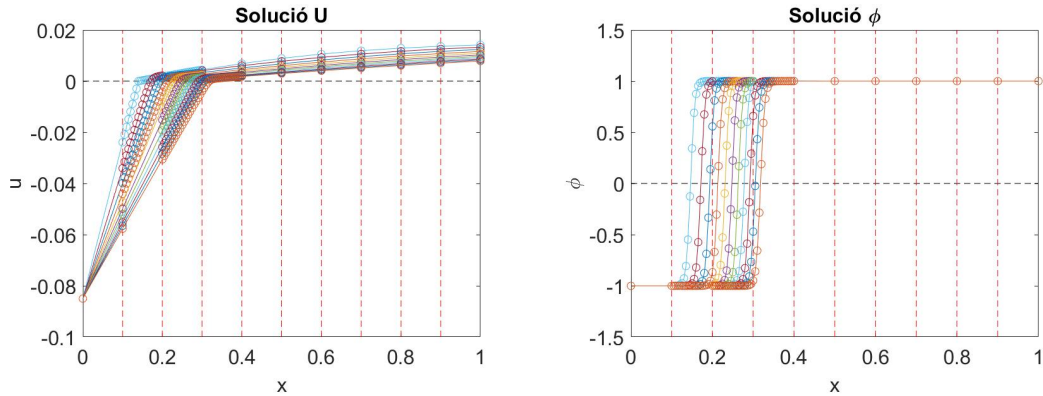


Figura 3: Solució de u (dreta) i ϕ (esquerra) usant el potencial Kobayashi amb refinament adaptatiu, amb malla base $h = 0.1$ i nivell de refinament $\xi = h_2 = 0.005$, $T_{final} = 0.5$, $\Delta t = 6.25 \times 10^{-6}$

Per $\xi = 0.005$, la variació de ϕ es pot produir en un, dos o com a molt tres elements simultàniament. Per tant, les dimensions del problema passen de ser de 61 nodes, per al cas amb malla constant en temps a la figura 2, a 20, 29 o com a molt 38 nodes en cada instant de temps, reduint a menys de la meitat en gairebé tots els instants.

D'altra banda, també cal mencionar que cada vegada que s'afegeix o elimina un dels elements que requereixen discretització fina, cal tornar a calcular les matrius del sistema, en contrast amb el cas de malla constant, en que les matrius només s'han de calcular un cop.

També cal tenir en compte que els elements que cal refinar poden variar en cada instant de temps. Recordem que a l'hora de calcular la solució en temps t^{n+1} s'usa la solució en temps t^n . En cas que els elements que cal refinar no siguin els mateixos en els dos instants de temps, cal projectar la solució en temps t^n per a que les dues solucions tinguin la mateixa malla, només per al càlcul de la solució a temps t^{n+1} . Per tal d'adaptar els vectors, es consideren dues situacions, refinament i desrefinament.

Per al refinament la situació és la següent: la solució ϕ^{n+1} requereix el refinament de l'element E_i amb Δx_2 , en canvi, ϕ^n s'ha calculat sense refinar-lo. Per adaptar ϕ^n es refina l'element E_i amb una interpolació lineal. És a dir, si $E_i = (x_i, x_{i+1})$, $y_i = \phi_i^n$ i $y_{i+1} = \phi_{i+1}^n$, es consideren les variables

$$\mathbf{X} = (x_i, x_i + \Delta x_2, x_i + 2\Delta x_2, \dots, x_{i+1})$$

$$\mathbf{Y} = y_i + \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} (\mathbf{X} - x_i)$$

Per refinar l'element E_i , al vector de valors nodals $\phi^n = (\phi_1^n, \dots, \phi_i^n, \phi_{i+1}^n, \dots, \phi_N^n)$, es substitueixen els valors ϕ_i^n, ϕ_{i+1}^n pel vector \mathbf{Y} .

Per al desrefinament la situació és la següent: la solució ϕ^{n+1} no requereix el refinament de l'element E_i , en canvi, ϕ^n s'ha calculat amb aquest element refinat amb Δx_2 , doncs

$$\phi^n = (\phi_1^n, \dots, \phi_i^n, \phi_{i+\frac{1}{m}}^n, \phi_{i+\frac{2}{m}}^n, \dots, \phi_{i+1}^n, \dots, \phi_N^n)$$

Per adaptar ϕ^n es desrefina l'element eliminant els valors nodals corresponents a nodes interiors a l'element E_i obtenint finalment

$$\phi^n = (\phi_1^n, \dots, \phi_i^n, \phi_{i+1}^n, \dots, \phi_N^n)$$

Per tant, amb aquestes operacions es poden adaptar els vectors d'instant de temps anteriors per tal d'obtenir la solució en elements refinats diferents.

A la secció 6.3 es discuteix si aquesta discretització en espai, tot i reduir el nombre de nodes del sistema, dóna els mateixos resultats, en quant a estabilitat dels mètodes, que una malla constant en temps.

4 Condició inicial ϕ

Generalment es disposa, com a dada, de la temperatura inicial, però no del valor inicial corresponent per la variable de fase ϕ . Així, proposar una metodologia per definir una condició inicial per ϕ ha esdevingut un objectiu d'aquest treball, que es desenvolupa en aquesta secció.

L'estudi d'aquesta secció s'ha fet utilitzant un exemple amb solució analítica, detallat a la secció 6, per tant s'han pogut comparar els resultats amb la solució esperada. Tot i això, s'ha emprat la metodologia proposada a continuació per calcular ϕ^0 en tots els exemples amb interpretació física.

En un primer intent, seguint la metodologia emprada a [5], per la condició inicial ϕ^0 es considera la solució a cada punt de l'equació $\mathbf{F}(\mathbf{u}^0, \phi^0) = 0$, amb la funció \mathbf{F} del potencial que s'utilitzi.

Aquesta condició inicial ϕ^0 no és suau i degut a la forta variació de la derivada de ϕ en la posició de la interfície, es genera una inestabilitat de la temperatura en els primers instants de temps a la regió del canvi de fase. Aquesta inestabilitat es pot veure a la figura 4. Així doncs, amb aquesta condició inicial, no s'han aconseguit els resultats esperats, tant en l'aproximació de les solucions $u(t, x)$ i $\phi(t, x)$, com en la convergència dels mètodes utilitzats.

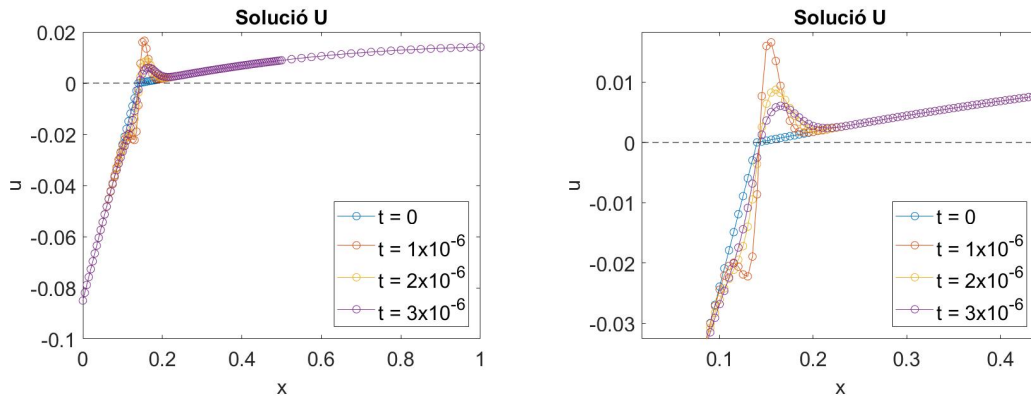


Figura 4: Inestabilitat de la temperatura amb la condició inicial per ϕ , $F(u^0, \phi) = 0$.

Per aquest motiu en aquest treball es proposa una condició inicial per la variable ϕ diferent. Es tracta de resoldre la segona equació (4), negligint el terme $\alpha \xi^2 \frac{\partial \phi}{\partial t} \approx 0$ i prenent $u = u^0$. És a dir, ϕ^0 és solució de l'equació estacionària

$$\xi^2 \Delta \phi + F(u^0, \phi) = 0$$

Les condicions de contorn que s'imposen per la variable ϕ poden variar segons l'exemple que es consideri. Generalment s'han emprat condicions de Neumann homogènies en els dos extrems del domini.

A causa de la funció F , que pot ser tant la del potencial de Caginalp com de Kobayashi, cal resoldre un sistema no lineal. Aquest sistema es resol amb el mètode de Newton Raphson, on en aquest cas, el residu és $\mathbf{r}(\phi) = [-\xi^2 \mathbf{K}\phi + \mathbf{M}\mathbf{F}(\mathbf{u}^0, \phi)] = 0$, i el jacobià $\mathbf{J} = (\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \phi})$. S'usa com a primera aproximació per ϕ^0 la condició inicial considerada a [5], és a dir, resolent $\mathbf{F}(\mathbf{u}^0, \phi^0) = 0$.

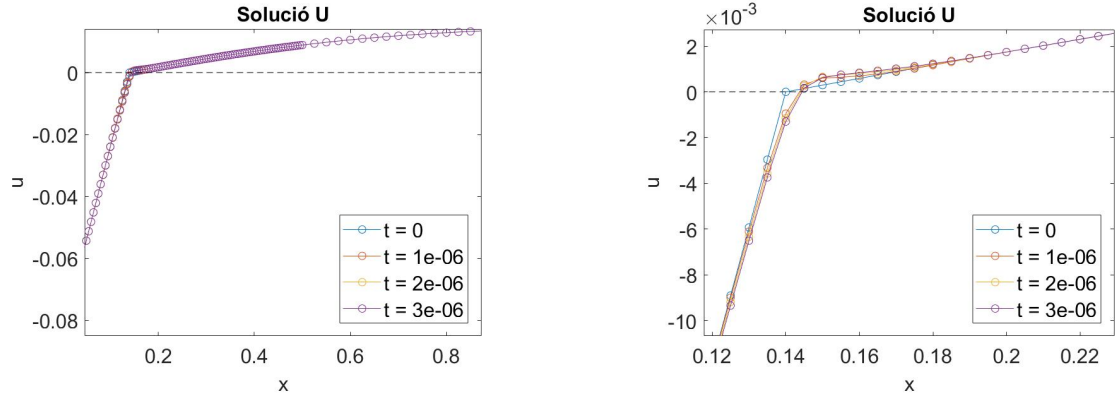


Figura 5: Solució de la temperatura amb la condició inicial ϕ^0 , solució de $-\xi^2 \Delta \phi + F(u^0, \phi) = 0$, sense inestabilitat.

A la figura 5 es pot veure com la condició inicial ϕ^0 ara és suau gràcies a l'efecte de la difusió i no apareix la inestabilitat de la temperatura en cap instant de temps.

5 Exemple sintètic

En aquesta secció es considera un exemple sintètic, usat per comprovar el funcionament del codi per tots els mètodes numèrics que s'han considerat. Així doncs, es fa l'ús de les funcions auxiliars f_1 i f_2 per tal d'adaptar les equacions a unes solucions analítiques conegudes. L'objectiu d'aquest exemple és verificar el funcionament del codi, en cap cas es vol fer una interpretació física dels resultats obtinguts.

Es prenen les solucions

$$u(t, x) = e^{-2ct}x^2 \quad \phi(t, x) = e^{-2ct} \sin(x)$$

i es deriven les expressions de les funcions auxiliars, per tal que les solucions verifiquin les equacions del model "phase field" (4).

Per al potencial de Caginalp, les expressions de les funcions auxiliars són

$$f_1(x, t) = -ce^{-2ct}[2x^2 + 2 + l \sin(x)]$$

$$f_2(x, t) = e^{-2ct}[-2\alpha c \xi^2 \sin(x) + \xi^2 \sin(x) - \frac{1}{2}(\sin(x) - e^{-4ct} \sin^3(x)) - 2x^2]$$

en canvi, les expressions per al potencial Kobayashi són

$$f_1(x, t) = -ce^{-2ct}[2x^2 + 2 + l \sin(x)]$$

$$f_2(x, t) = e^{-2ct}[-2\alpha c \xi^2 \sin(x) - 2\xi^2 + \frac{1}{2}e^{-4ct}x^6 + 3e^{-4ct}x^2 \sin(x) - \frac{1}{2} \sin(x) - 3x^2]$$

S'imposen condicions de contorn de Dirichlet en les dues variables

$$\begin{aligned} u_0 = u(0, t) = 0 & \quad \phi_0 = \phi(0, t) = 0 \\ u_1 = u(1, t) = e^{-2ct} & \quad \phi_1 = \phi(1, t) = e^{-2ct} \sin(1) \end{aligned}$$

i condicions inicials

$$u(x, 0) = x^2 \quad \phi(x, 0) = \sin(x).$$

Per tal de comprovar el funcionament dels mètodes numèrics es defineixen els errors

$$E_u = \|u^h(\cdot, T_{final}) - u(\cdot, T_{final})\| \quad E_\phi = \|\phi^h(\cdot, T_{final}) - \phi(\cdot, T_{final})\|$$

on u^h i ϕ^h són les solucions del mètode dels elements finits, u i ϕ les solucions analítiques i on $\|\cdot\|$ és la norma L_2 de funcions.

Per la discretització en espai s'ha considerat el mètode d'elements finits amb una base lineal, per tant el comportament esperat de l'error és $O(\Delta x^2)$.

Per la discretització en temps es consideren els tres mètodes. Tant per Euler endavant com per Euler enrere, el comportament esperat és $O(\Delta t)$ ja que són de primer ordre. En canvi, Crank Nicolson és de segon ordre, per tant, el comportament esperat és $O(\Delta t^2)$.

A les següents subseccions es discuteix per cadascun dels mètodes, la convergència tant en temps com en espai.

5.1 Convergència en espai

Pel mètode d'elements finits s'espera una convergència d'ordre $O(\Delta x^{p+1})$, on p és el grau d'aproximació. En aquest treball s'ha considerat una base lineal ($p = 1$), per tant s'espera convergència amb errors d'ordre $O(\Delta x^2)$. Si el pas de temps és prou petit com per que l'error d'integració temporal sigui menyspreable, la convergència en espai no depèn del mètode d'integració temporal, és per això que només es mostren els resultats amb el mètode d'Euler endavant.

La figura 6 mostra la convergència en espai, amb $\Delta x = [0.1, 0.05, 0.025, 0.0125]$ i $\Delta t = 4 \times 10^{-6}$ fixe. Es pot veure que per les dues variables el gràfic $\log(E)$ vs $\log(\Delta x)$ és una recta de pendent 2. Per tant, la convergència en espai és l'esperada.

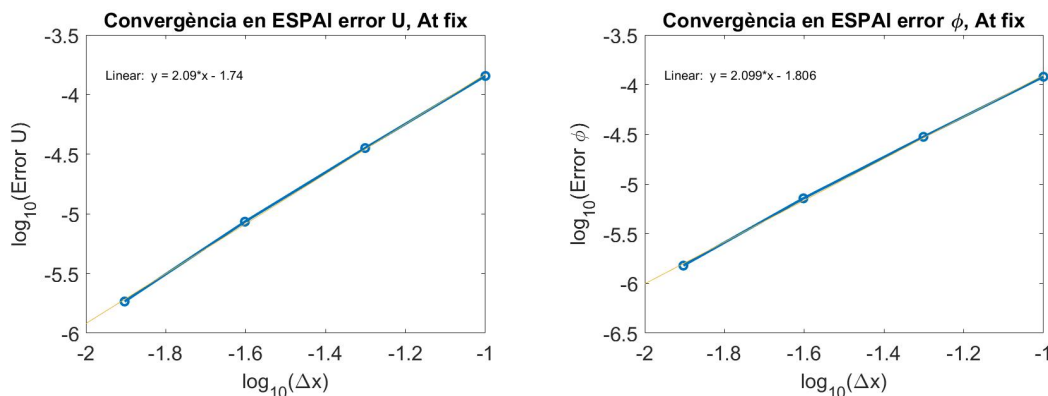


Figura 6: Convergència en espai pel mètode d'Euler endavant amb el potencial Caginalp de u (esquerra) i de ϕ (dreta), amb $\Delta t = 4 \times 10^{-6}$, $T_{final} = 0.2$, $\xi = 1$ i $\Delta x = [0.1, 0.05, 0.025, 0.0125]$

5.2 Convergència en temps

Per tal d'estudiar la convergència en temps, es consideren els tres mètodes d'integració temporal. Per cadascun d'ells s'espera una convergència de l'error diferent.

5.2.1 Euler endavant

Considerant el mètode d'Euler endavant, que és de primer ordre, s'espera $O(\Delta t)$. Per tal de veure la convergència es consideren diferents valors $\Delta t = [\Delta t_1, \Delta t_2, \Delta t_3, \Delta t_4]$ tal que

$\Delta t_i = \frac{\Delta t_{i-1}}{4}$. Com que és un mètode explícit, per Δx molt petit el mètode és inestable. D'altra banda, si es fixa Δx no prou petit, domina l'error i no es veu la convergència en Δt . És per això que per observar la convergència es fa decreixer Δt i Δx alhora. Prenent Δx tal que $\frac{\Delta t}{\Delta x^2} = C$ amb C prou gran, s'espera estabilitat i errors $O(\Delta x^2) + O(\Delta t) = O(\Delta t)$.

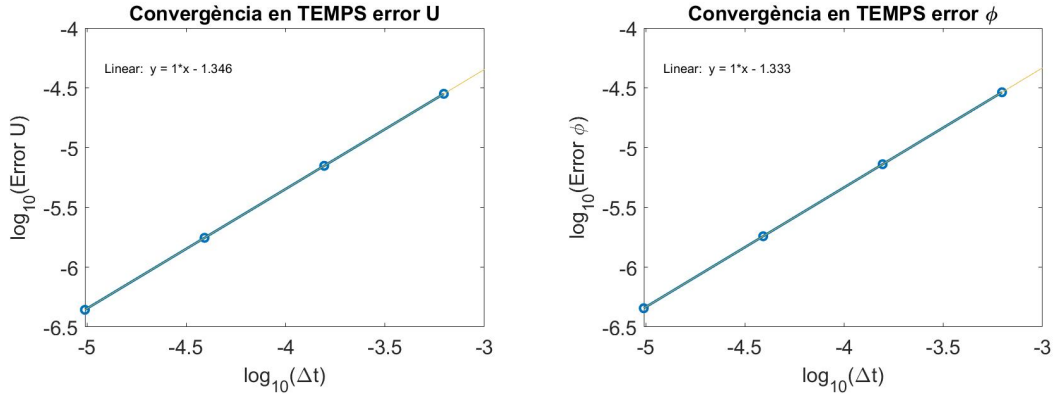


Figura 7: Convergència en temps pel mètode d'Euler endavant amb el potencial Caginalp de u (esquerra) i de ϕ (dreta), amb $\Delta t = [6.25 \times 10^{-4}, 1.5625 \times 10^{-4}, 3.9063 \times 10^{-5}, 9.7656 \times 10^{-6}]$, $T_{final} = 0.2$, $\xi = 1$ i $\Delta x = [0.1, 0.05, 0.025, 0.0125]$

A la figura 7 hi ha els gràfics del $\log(E)$ vs $\log(\Delta t)$ per cadascuna de les variables. En els dos casos el resultat es una recta amb pendent 1. Per tant, el mètode d'Euler convergeix en temps de la manera esperada al ser un mètode d'ordre 1.

5.2.2 Euler enrere

Euler enrere és també de primer ordre, per tant s'espera la mateixa convergència en temps. En aquest cas però, al ser implícit no cal considerar Δt tant petit amb relació a la mida d'element, per tant, es pot considerar Δx constant però prou petit perquè l'error en Δx sigui menyspreable.

A la figura 8 es consideren els gràfics de $\log(E)$ vs $\log(\Delta t)$ per les dues variables. En els dos casos s'obté una recta de pendent 1, tal com s'espera per un mètode de primer ordre.

5.2.3 Crank Nicolson

Crank Nicolson és un mètode de segon ordre, així doncs, s'espera convergència més ràpida que en els dos casos d'Euler.

Altra vegada és un mètode implícit, així doncs no cal considerar un Δt tant petit com per als mètodes explícits. Es consideren doncs quatre valors per la discretització en temps, amb una mida d'element constant per tots ells.

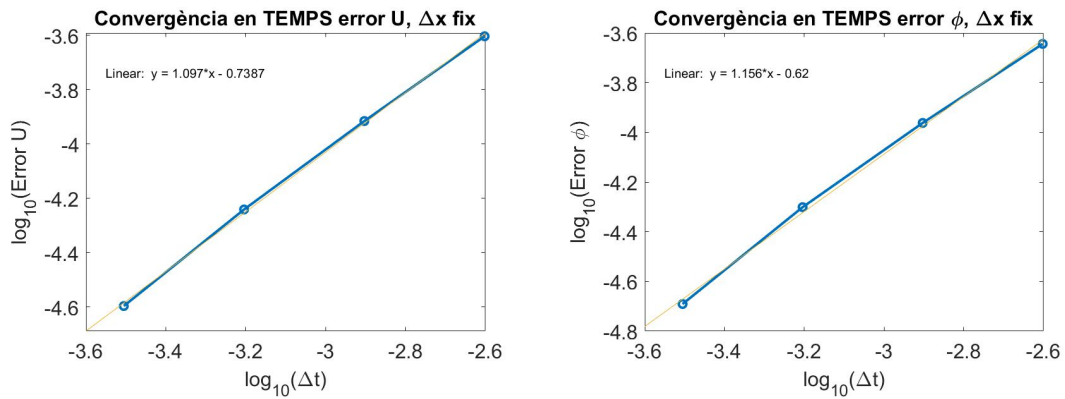


Figura 8: Convergència en temps pel mètode d'Euler enrere amb el potencial Caginalp de u (esquerra) i de ϕ (dreta), amb $\Delta t = [0.025, 0.013, 6.25e - 04, 3.125e - 04]$, $T_{final} = 0.2$, $\xi = 1$ i $\Delta x = 0.05$

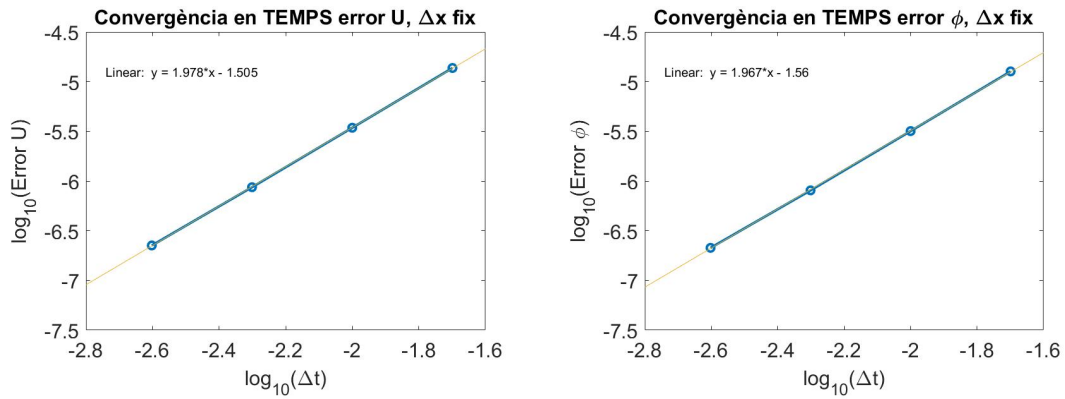


Figura 9: Convergència en temps pel mètode Crank Nicolson amb el potencial Caginalp de u (esquerra) i de ϕ (dreta), amb $\Delta t = [0.025, 0.013, 6.25 \times 10^{-4}, 3.125 \times 10^{-4}]$, $T_{final} = 0.2$, $\xi = 1$ i $\Delta x = 0.05$

A la figura 9 es presenten els gràfics de convergència en temps $\log(E)$ vs $\log(\Delta t)$. Els resultats són una recta de pendent 2 per les dues variables. Així doncs, els resultats són els esperats.

Es pot concloure doncs que la integració en temps és la esperada pels tres mètodes d'integració temporal considerats, primer ordre per Euler endavant i enrere i segon ordre per Crank Nicolson.

En endavant es descarta però el mètode d'Euler enrere per ser Crank Nicolson més precís amb cost i estabilitat equivalent.

6 Problema físic amb solució analítica

En aquesta secció es considera l'exemple de la secció 2.1.1 de [4] per veure el comportament dels diferents mètodes amb un problema amb sentit físic i solució analítica coneguda. Els principals objectius d'aquesta secció han estat els següents:

- En primer lloc, a la secció 6.1 s'estudia quin ha de ser el tamany d'element en funció de ξ , per tal de poder capturar la variació abrupta de ϕ en un problema realista.
- En segon lloc, a la secció 6.2 s'estudia l'estabilitat i precisió en temps. Per fer-ho, es considera el mètode explícit Euler endavant per tal de veure quin és el seu límit d'estabilitat. Posteriorment es considera el mètode implícit Crank Nicolson per valorar si tot i tenir un cost computacional elevat per cada pas, permet augmentar Δt , disminuint el temps de càlcul.
- A la secció 6.3 s'estudia la precisió de la malla adaptativa, per tal de veure si aquest mètode perd precisió en comparació amb una malla constant en temps.
- Finalment, l'objectiu de la secció 6.4 és veure la convergència del model "phase-field" al model "sharp interface". S'espera que en el cas del potencial Caginalp, la solució numèrica calculada amb el model "phase-field" tendeixi a la solució analítica coneguda pel model "sharp-interface" quan $\xi \rightarrow 0$ i $a \rightarrow 0$. En el cas del potencial de Kobayashi, quan $\xi \rightarrow 0$.

Les solucions analítiques conegudes pel model "sharp-interface" són la temperatura $u(x, t)$ i la posició de la interfície $\gamma(t)$ en el temps t :

$$u(x, t) = \begin{cases} C_1 \frac{\operatorname{erf}(\frac{\beta}{2}) - \operatorname{erf}(\frac{x}{2\sqrt{t+t_0}})}{\operatorname{erf}(\frac{\beta}{2})} & x \leq \gamma(t) \\ C_2 \frac{\operatorname{erf}(\frac{\beta}{2}) - \operatorname{erf}(\frac{x}{2\sqrt{t+t_0}})}{\operatorname{erfc}(\frac{\beta}{2})} & x \geq \gamma(t) \end{cases} \quad (16)$$

$$\gamma(t) = \beta\sqrt{t+t_0} \quad (17)$$

Seguint l'exemple de [4], s'han resolt les equacions (4) en el domini $x \in [0, 1]$ i els paràmetres utilitzats són

$$\begin{aligned} C_1 &= -0.085 & C_2 &= -0.015 \\ t_0 &= 0.1256 & \beta &= 0.396618 \end{aligned}$$

Es pot veure un exemple de la solució obtinguda pels dos potencials que es consideren, Caginalp (7) a la figura 10 i Kobayashi (8) a la figura 11. En els dos casos es consideren els següents paràmetres, temps final $T_{final} = 0.5$, pas de temps $\Delta t = 6.25 \times 10^{-6}$ i $\xi = 0.005$.

Es pot observar com amb el potencial de Kobayashi els valors extrems de ϕ són -1 i 1, mentre que amb Caginalp el valor a $x = 0$ arriba a ser menor que -1. En qualsevol cas, els dos models capturen bé l'evolució de la posició de la interfície.

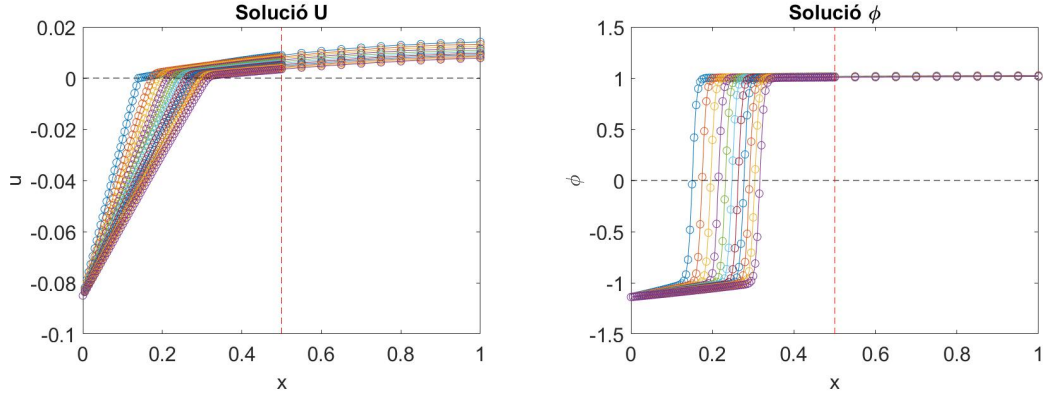


Figura 10: Solució de u (dreta) i ϕ (esquerra) usant el potencial Caginalp amb els paràmetres $\xi = \Delta x_1 = 0.005, \Delta x_2 = 0.05, T_{final} = 0.5, \Delta t = 6.25 \times 10^{-6}$

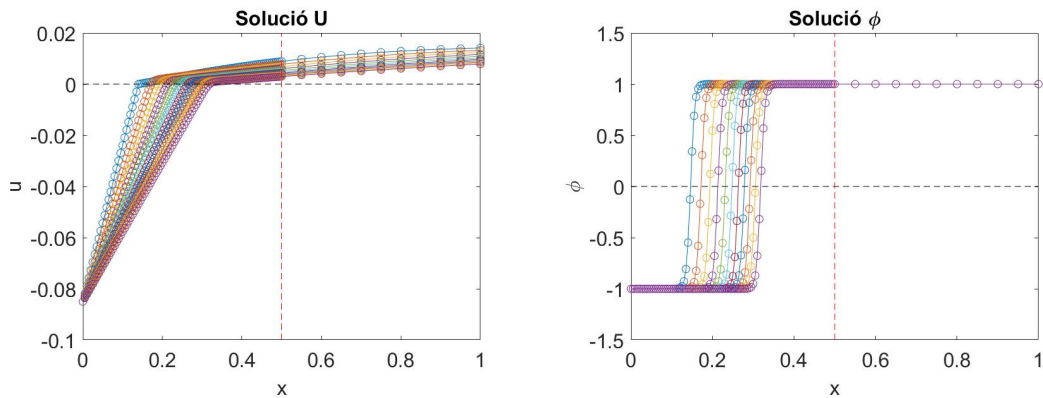


Figura 11: Solució de u (dreta) i ϕ (esquerra) usant el potencial Kobayashi amb els paràmetres $\xi = \Delta x_1 = 0.005, \Delta x_2 = 0.05, T_{final} = 0.5, \Delta t = 6.25 \times 10^{-6}$

Per les figures 10 i 11, s'ha considerat una discretització en espai no uniforme però constant en temps. És necessària una discretització molt fina en espai per tal de captar la forta variació de ϕ en el punt de tall $\phi = 0$, és a dir, a la regió del canvi de fase. Així doncs, com en cap cas s'ha considerat un temps final més gran de $T_{final} = 0.5$, és pot veure a les figures 10 i 11 que a partir del punt $x = 0.5$ no és necessària una discretització tan fina.

Per tant, s'ha dividit l'interval $(0, 1)$ en dues parts. En primer lloc $(0, 0.5)$, que necessita una discretització fina, amb Δx_1 constant al llarg de tot l'interval. En els següents apartats es discuteix quin és el Δx_1 necessari. En segon lloc $(0.5, 1)$, on es pot considerar una

discretització més grollera. S'ha utilitzat $\Delta x_2 = 0.05$ o bé $\Delta x_2 = 0.025$.

Per la temperatura, la condició inicial que es considera és $u^0 = u(x, 0)$, on la funció $u(x, t)$ és la solució coneguda (16). En el contorn, es consideren condicions de Dirichlet en els dos extrems, $u_0 = u(0, t)$, i $u_1 = u(1, t)$, també imposades amb la solució analítica.

Per la variable ϕ es considera la condició inicial ϕ^0 proposada a la secció 4 i amb condicions de contorn de Dirichlet en els dos extrems, emprant el potencial F, (7) o bé (8). A l'extrem $x = 0$, s'imposa $F(u_0, \phi_0) = 0$ per trobar ϕ_0 . Similarment, a l'extrem $x = 1$, s'imposa $F(u_1, \phi_1) = 0$ per trobar ϕ_1 .

6.1 Precisió en espai

Tot i que es verifiquin les condicions d'estabilitat en temps de cada mètode, per una ξ fixada si la discretització en espai no és prou fina, també s'observen oscil·lacions numèriques. Es tracta d'una inestabilitat no relacionada amb la integració temporal, que s'observa en el mètode d'elements finits en problemes amb un front vertical que no es pot representar correctament amb la malla considerada.

A les figures 12 i 13 hi ha la solució amb $\Delta t = 1 \times 10^{-5}$ per $\xi = 0.01$ i $\xi = 0.005$ respectivament. En cada cas, a l'esquerra es mostra la solució amb $\Delta x_1 = \frac{10}{3}\xi$ i a la dreta amb $\Delta x_1 = 2\xi$.

Podem veure que és necessari un tamany d'element suficientment petit per tal d'obtenir una solució sense oscil·lacions numèriques.

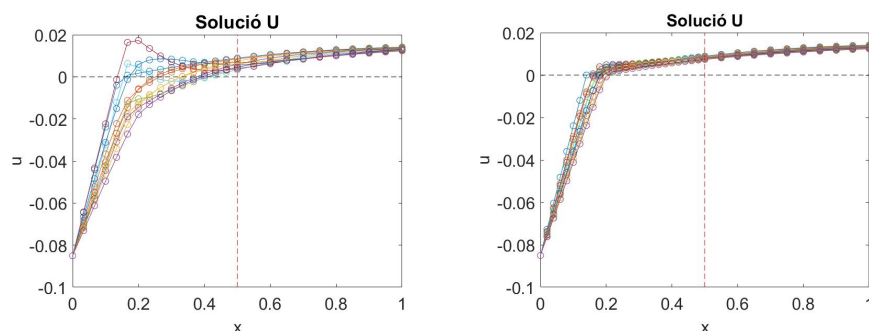


Figura 12: Solució per la u amb el mètode d'Euler amb $\xi = 0.01$, $\Delta t = 1 \times 10^{-5}$, $T_{final} = 0.1$ i $\Delta x_1 = 0.033$ (esquerra), $\Delta x_1 = 0.02$ (dreta) sense oscil·lacions

De manera empírica, s'ha pogut comprovar que donada ξ , cal verificar, a part de l'estabilitat del mètode d'integració temporal, que el tamany de malla a la regió on evoluciona la interfície és $\Delta x_1 \leq 2\xi$, per evitar oscil·lacions.

Per tal de veure la convergència en espai, s'ha fixat un Δt suficientment petit com per assegurar que l'error en temps és menyspreable i no afecta als resultats. Tal com es veu a la figura 14, s'han considerat tres valors diferents de ξ i per cada cas, quatre valors de $\Delta x_1 = [2\xi, \xi, \frac{1}{2}\xi, \frac{1}{4}\xi]$. Podem veure que en els tres casos l'error es manté gairebé constant.

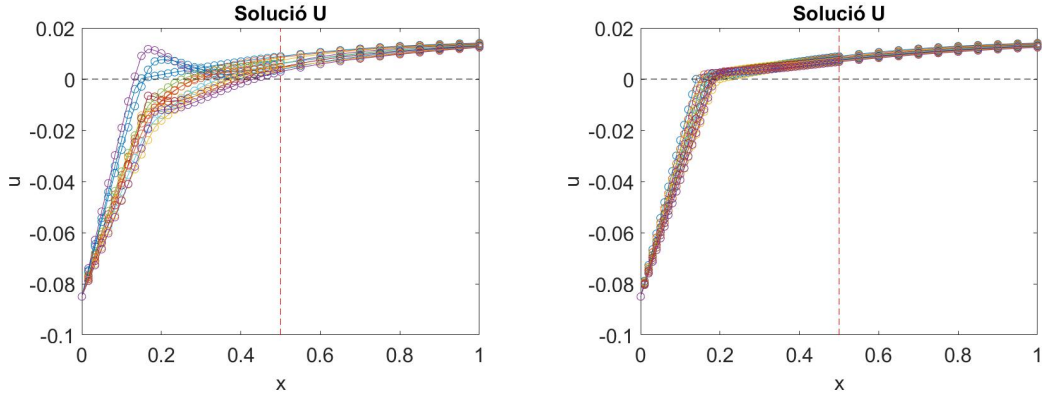


Figura 13: Solució per la u amb el mètode d'Euler amb $\xi = 0.005$, $\Delta t = 1 \times 10^{-5}$, $T_{final} = 0.1$ i $\Delta x_1 = 0.01667$ (esquerra), $\Delta x_1 = 0.01$ (dreta) sense oscil·lacions

l'únic valor que s'allunya de la recta constant és $\Delta x_1 = 2\xi$. Així que podem concloure que per $\Delta x_1 \leq \xi$ l'error de discretització en espai és també menyspreable i l'error que veiem és l'error de model, és a dir, la diferència entre la solució del model "phase-field" i la solució analítica del model "sharp-interface". Com era d'esperar, l'error de model es redueix en disminuir ξ .

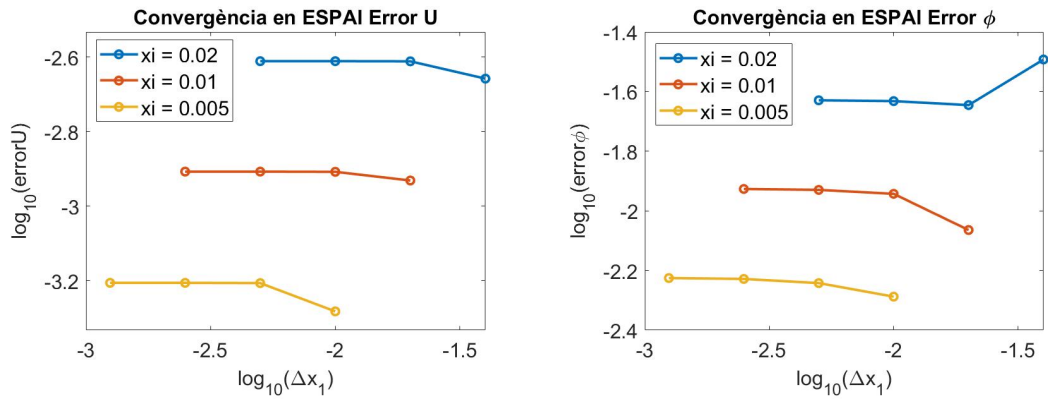


Figura 14: Convergència de u (esquerra) i de ϕ (dreta) en espai pel mètode d'Euler amb el potencial Kobayashi amb $\Delta t = 1 \times 10^{-7}$, $T_{final} = 0.1$, $\xi = [0.02, 0.01, 0.005]$ i $\Delta x_1 = [2\xi, \xi, \frac{1}{2}\xi, \frac{1}{4}\xi]$

Així doncs, hem vist que amb $\Delta x_1 = \xi$ tenim una malla suficientment fina per obtenir una solució sense oscil·lacions numèriques, i que ja ens dona l'error de model. Tot i que es refini la malla, no s'obindrà una solució més acurada. Per aquest motiu, a partir d'ara es considerarà una malla amb $\Delta x_1 = \xi$ a on hi hagi variació de ϕ .

6.2 Estabilitat i precisió en temps

L'objectiu d'aquesta secció és determinar un pas de temps Δt per cadascun dels mètodes d'integració temporal, per tal d'obtenir la solució amb la màxima precisió possible, és a dir, per tenir només error de model i no pas de precisió numèrica. Es considera el tamany d'element $\Delta x_1 = \xi$ que, tal com s'ha discutit a la secció anterior, és prou fi per assolir la màxima precisió del model.

En primer lloc, considerem Δt_0 tal que $\frac{\Delta t_0}{\Delta x_1^2} c = \frac{7}{16}$. Es proposa aquest valor ja que es pren de referència $\frac{\Delta t}{\Delta x_1^2} c < \frac{1}{2}$, condició d'estabilitat del mètode d'Euler per alguns dels termes lineals de l'equació. Tot i això, amb $\frac{\Delta t}{\Delta x_1^2} c = \frac{1}{2}$ la solució no és estable, ja que els termes no lineals del potencial fan més restrictiva la condició d'estabilitat. El valor $\frac{7}{16}$ és el més gran amb el qual s'obté una solució estable.

La figura 15 mostra l'error per $\xi = [0.02, 0.01, 0.005]$, amb $\Delta x_1 = \xi$ i quatre valors per $\Delta t = [\Delta t_0, \frac{1}{2}\Delta t_0, \frac{1}{4}\Delta t_0, \frac{1}{8}\Delta t_0]$, amb $\Delta t_0 = \frac{7}{16}\Delta x_1^2$. Excepte per al cas $\Delta t = \Delta t_0$, l'error és constant perquè l'error en temps és també menyspreable en comparació amb l'error de model. A més, el comportament és molt similar per als tres valors de ξ considerats.

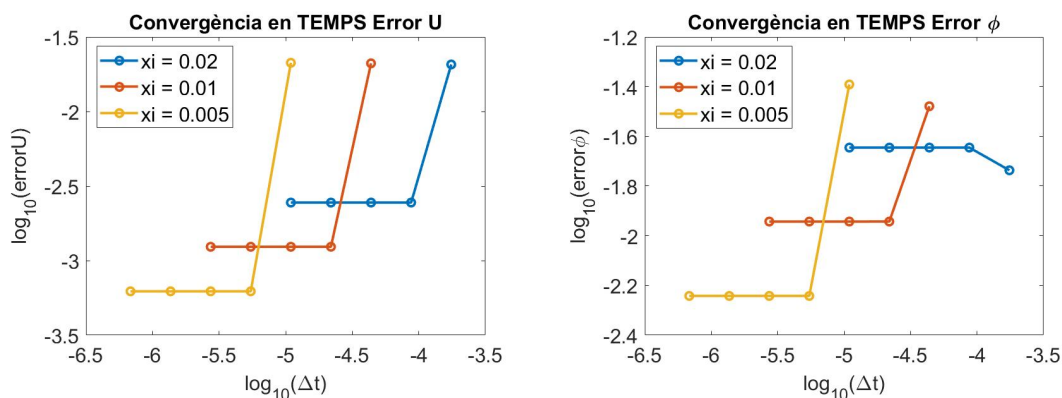


Figura 15: Convergència en temps pel mètode d'Euler amb el potencial Kobayashi de u (esquerra) i de ϕ (dreta), amb $\xi = \Delta x_1 = [0.02, 0.01, 0.005]$, $\Delta t = [\Delta t_0, \frac{1}{2}\Delta t_0, \frac{1}{4}\Delta t_0, \frac{1}{8}\Delta t_0]$ on $\Delta t_0 = \xi^2 \frac{7}{16}$ i $T_{final} = 0.1$.

A la figura 16 es pot veure la solució per als paràmetres $\Delta x_1 = \xi = 0.01$, $T_{final} = 0.1$ i $\Delta t = \Delta t_0 = 4.3745 \times 10^{-5}$, és a dir, $\Delta t = \xi^2 \frac{7}{16}$, el valor per al qual l'error s'allunya de la recta constant que s'obté amb Δt més petits. Es pot veure que la solució no és l'esperada.

Per aquest motiu es considera un segon cas on Δt_0 tal que $\frac{\Delta t_0}{\Delta x_1^2} = \frac{1}{4}$. Tal com es veu a la figura 17, s'han considerat els mateixos valors de $\xi = \Delta x_1 = [0.02, 0.01, 0.005]$ i quatre valors per $\Delta t = [\Delta t_0, \frac{1}{2}\Delta t_0, \frac{1}{4}\Delta t_0, \frac{1}{8}\Delta t_0]$. Tornem a veure en aquest cas que per cada valor de ξ l'error és gairebé constant. Així, l'error que veiem és la diferència entre la solució obtinguda amb el model "phase-field" i la solució analítica del model "sharp interface" que es redueix amb $\xi \rightarrow 0$, i no del mètode d'integració o de la discretització temporal. A la figura 11 es

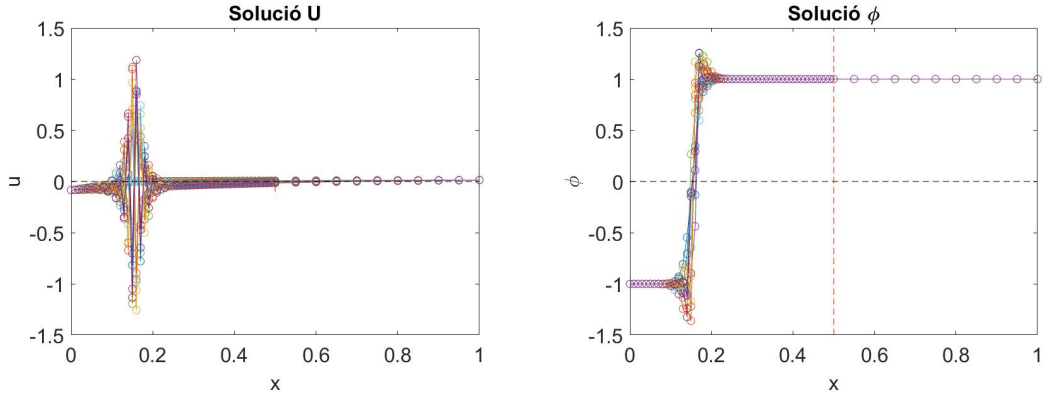


Figura 16: Solució pel mètode d'Euler amb el potencial Kobayashi de les variables u i ϕ per als paràmetres $\Delta x_1 = \xi = 0.01$, $T_{final} = 0.1$ i $\Delta t = 4.3745 \times 10^{-5}$.

pot veure, per al cas $\xi = 0.005$ com en aquest cas, per la discretització en temps menys fina que s'ha considerat, és a dir $\Delta t = \frac{\xi^2}{4} = 6.2500 \times 10^{-6}$, la solució obtinguda és l'esperada.

Veiem doncs que considerant un Δt tal que $\frac{\Delta t}{\Delta x_1^2} = \frac{1}{4}$ n'hi ha prou, ja que tot i que es consideri una discretització en temps més fina, no s'obté una solució més acurada.

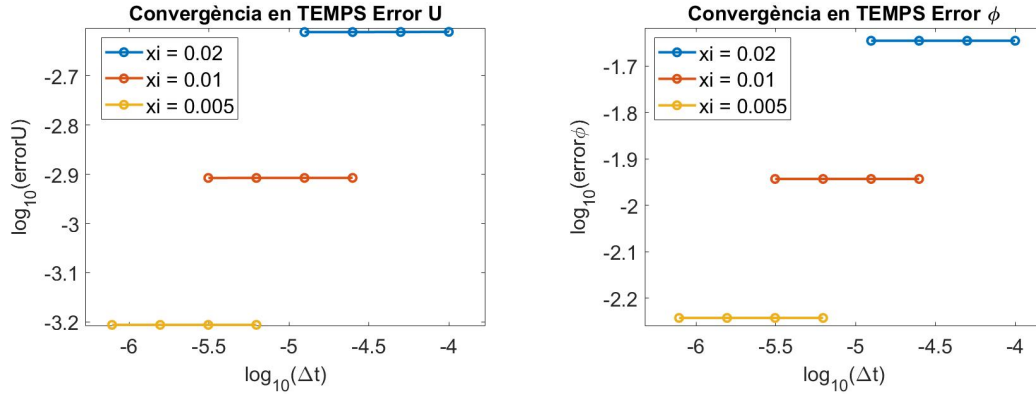


Figura 17: Convergència en temps pel mètode d'Euler amb el potencial Kobayashi de u (esquerra) i de ϕ (dreta), amb $\Delta x_1 = \xi = [0.02, 0.01, 0.005]$, $T_{final} = 0.1$, $\Delta t_0 = \frac{\Delta x_1^2}{4}$ i $\Delta t = [\Delta t_0, \frac{\Delta t_0}{2}, \frac{\Delta t_0}{4}, \frac{\Delta t_0}{8}]$.

Es considera també el mètode implícit Crank Nicolson, per tal de veure si es pot tenir en compte una discretització en temps més grollera.

A la figura 18 es tornen a considerar tres valors diferents de $\xi = \Delta x_1 = [0.02, 0.01, 0.005]$ i quatre valors per $\Delta t = [\Delta t_0, \frac{\Delta t_0}{2}, \frac{\Delta t_0}{4}, \frac{\Delta t_0}{8}]$ amb $\Delta t_0 = \frac{T_{final}}{10}$ i $T_{final} = 0.1$. Tal com ha passat en el cas anterior, l'error és constant per tots els Δt considerats, i decreix a mida que decreix ξ . Doncs, es torna a veure l'error del model i no del mètode d'integració en temps o

de la discretització temporal.

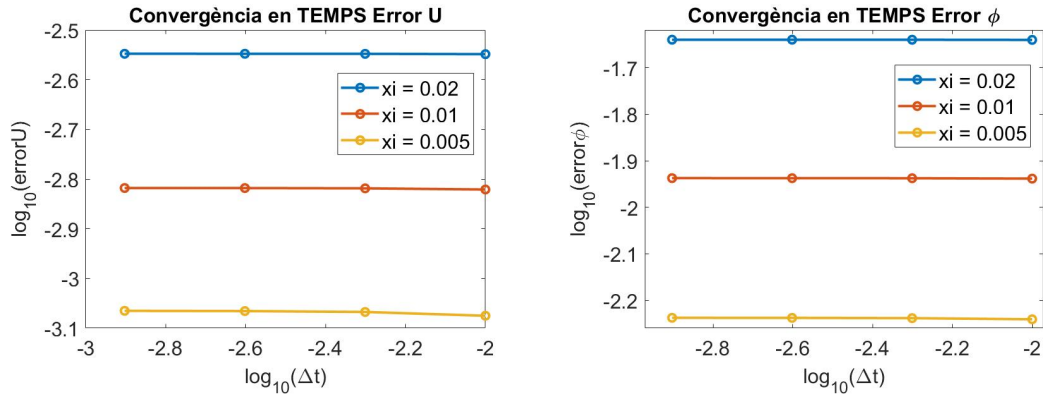


Figura 18: Convergència en temps pel mètode de Crank Nicolson amb el potencial Kobayashi de u (esquerra) i de ϕ (dreta), $\Delta x_1 = \xi = [0.02, 0.01, 0.005]$, $T_{final} = 0.1$, $\Delta t_0 = \frac{T_{final}}{10}$ i $\Delta t = [0.01, 0.005, 0.0025, 0.00125]$

També podem concloure que tot i que Crank Nicolson té un cost computacional més elevat en cada pas que Euler endavant, pel fet de resoldre un sistema no lineal a cada iteració, permet utilitzar un Δt més gran, i per tant fer molts menys passos.

El Δt més gran que es considera és ξ . No es considera Δt més gran ja que a la solució de la temperatura apareixen inestabilitats. A la figura 19 es considera el cas $\xi = \Delta x_1 = 0.005$ i $\Delta t = 0.02$. A la figura de la dreta es veuen les oscil·lacions de la temperatura.

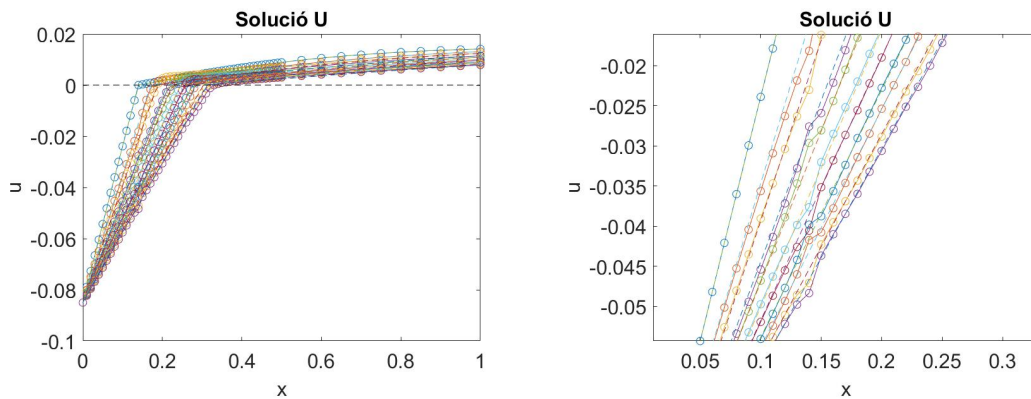


Figura 19: Solució de la temperatura, amb oscil·lacions pel mètode de Crank Nicolson amb el potencial Kobayashi de u (esquerra) i un zoom de la solució (dreta), amb els paràmetres $\xi = \Delta x_1 = 0.005$, $\Delta t = 0.02$ i $T_{final} = 0.5$

A partir d'ara es considerarà doncs, pel mètode d'Euler Δt tal que $\frac{\Delta t}{\Delta x_1^2} = \frac{1}{4}$, és a dir, com $\Delta x_1 = \xi$, $\Delta t = \frac{\xi^2}{4}$. En canvi, pel mètode de Crank Nicolson $\Delta t = \xi$. Amb aquests valors, la

solució ja és tant acurada com ho permet el model.

Per tant doncs, es pot concloure que per al mètode explícit Euler endavant, hi ha l'avantatge de que el cost computacional a cada pas de temps és baix, però al ser explícit, li cal una discretització en temps molt fina. Per altra banda, el mètode implícit Crank Nicolson permet usar una discretització en temps no tant fina, reduint dràsticament el nombre d'iteracions en temps, a canvi però cada iteració té un cost computacional molt més elevat per haver de resoldre a cada pas de temps un sistema no lineal.

En ambdós casos també es pot concloure que tant en la discretització en espai com en la discretització en temps, quan és prou fina per ser estable i no tenir oscil·lacions numèriques, aleshores ja és tant precisa com el model ho permet, fent que tot i que es discretitzi de manera més fina no s'aconsegueixi una solució més acurada.

6.3 Estabilitat refinament adaptatiu

Per tal de verificar l'estabilitat també amb refinament adaptatiu, es consideren els resultats amb el mètode de Crank Nicolson per tal de comparar els resultats obtinguts amb els de malla constant en temps.

Per a la precisió en espai es confirma que per $\Delta x_2 = \xi$ la solució ja és tant acurada com el mètode permet.

A la figura 20 s'han considerat els mateixos paràmetres que a la figura 14: tres valors diferents de ξ i per cada cas, quatre valors de nivell de refinament $\Delta x_2 = [2\xi, \xi, \frac{1}{2}\xi, \frac{1}{4}\xi]$. Podem veure que en els tres casos l'error es manté gairebé constant i que a mesura que ξ és més petita, també ho és l'error. El resultat és molt similar al cas no adaptatiu.

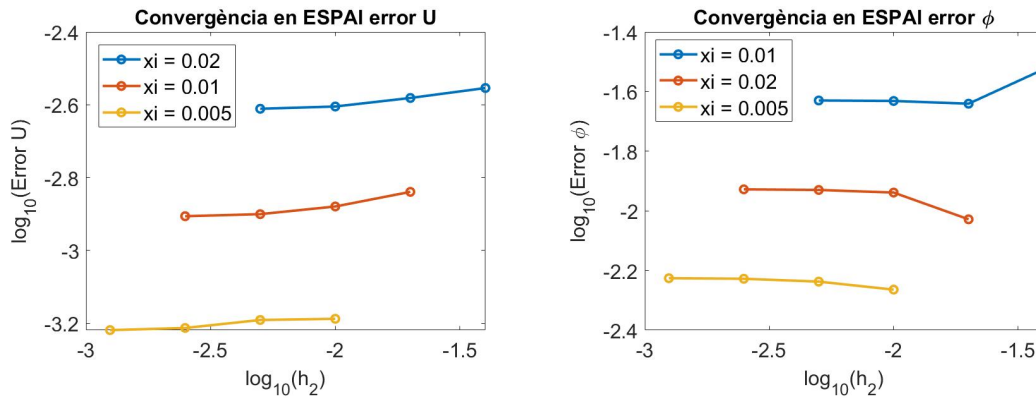


Figura 20: Convergència en espai pel mètode Crank Nicolson amb el potencial Kobayashi de u (esquerra) i de ϕ (dreta), amb refinament adaptatiu, malla base $h = 0.1$, nivell de refinament $\Delta x_2 = [2\xi, \xi, \frac{1}{2}\xi, \frac{1}{4}\xi]$, $\Delta t = 1 \times 10^{-5}$, $T_{final} = 0.1$, i tres valors $\xi = [0.02, 0.01, 0.005]$

Similarment per la estabilitat en temps de la figura 21, es consideren els mateixos paràmetres que a la figura 18, amb els tres valors $\xi = [0.02, 0.01, 0.005]$, nivell de refinament $\Delta x_2 = \xi$ i $\Delta t = [\Delta t_0, \frac{\Delta t_0}{2}, \frac{\Delta t_0}{4}, \frac{\Delta t_0}{8}]$ amb $\Delta t_0 = \frac{T_{final}}{10}$ i $T_{final} = 0.1$. L'error és gairebé constant en els tres casos, de manera similar al càlcul no adaptatiu.

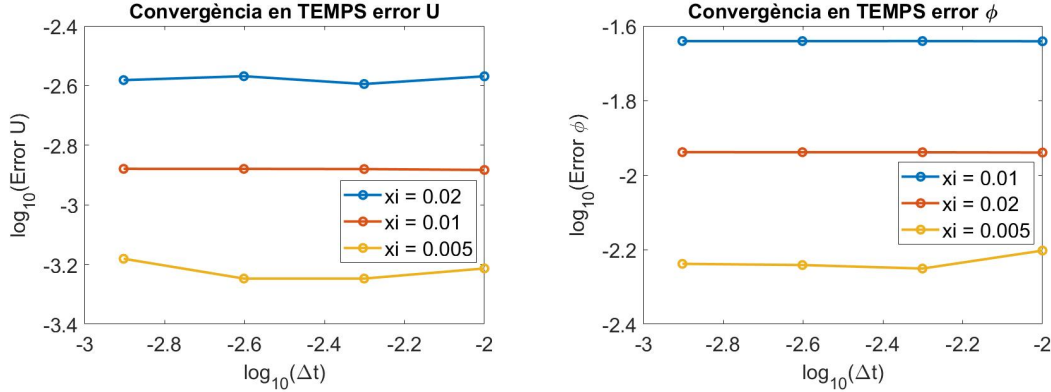


Figura 21: Convergència en temps pel mètode de Crank Nicolson amb el potencial Kobayashi de u (esquerra) i de ϕ (dreta) amb refinament adaptatiu, malla base $h = 0.1$, nivell de refinament $\Delta x_2 = \xi = [0.02, 0.01, 0.005]$, $T_{final} = 0.1$, $\Delta t_{inicial} = \frac{T_{final}}{10}$ i $\Delta t = [0.01, 0.005, 0.0025, 0.00125]$

Així doncs, en ambdós casos les conclusions són les mateixes que en les seccions 6.1 i 6.2. En primer lloc, amb aquest mètode s'estalvien nodes i no es perd precisió. En segon lloc, tant en temps com en espai, un cop es considera una discretització prou fina com per reproduir la solució, aquesta ja mostra l'error del model i tot i que es discretitzi de manera més fina no s'obté una solució més acurada. Per tant, per tal d'obtenir una solució més propera a la que s'obté amb el model "sharp interface", cal considerar ξ menor.

6.4 Convergència del model

Al llarg de les seccions 6.1 i 6.2 s'estudia la precisió i estabilitat tant en espai com en temps dels mètodes. S'ha pogut veure que un cop la discretització és prou fina, l'error es manté constant. En tots els casos però, també es veu que a mida que es consideren valors de ξ més petits, també decreix l'error. S'ha deduït doncs que l'error que es veu és l'error del model.

L'objectiu d'aquesta secció és estudiar la convergència del model "phase-field" a l'esperat model límit "sharp interface" per $\xi \rightarrow 0$.

La figura 22 mostra l'error de model en funció de ξ , per $\xi = [0.02, 0.01, 0.005]$ amb $\Delta x_1 = \xi$ i $\Delta t = \frac{\Delta x_1^2}{4}$, que són els paràmetres discutits a les seccions anteriors amb el mètode d'Euler per tal d'obtenir estabilitat i absència d'oscil·lacions numèriques i que l'error de discretització sigui menyspreable.

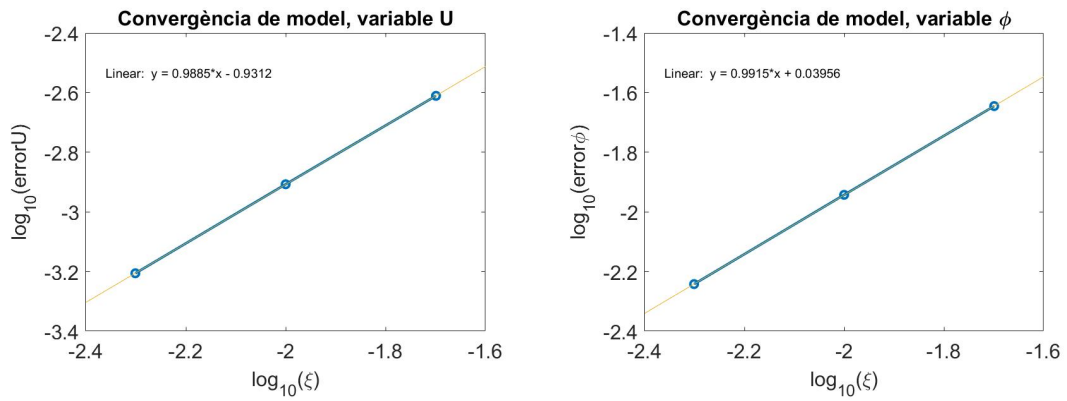


Figura 22: Convergència del model, amb el mètode d'Euler i potencial Kobayashi. Paràmetres $\xi = [0.02, 0.01, 0.005]$, $\Delta x_1 = \xi$ i $\Delta t = \frac{\Delta x_1^2}{4}$.

Amb els resultats obtinguts, es pot concloure que la convergència del model “phase-field” al model “sharp interface” és lineal per $\xi \rightarrow 0$.

7 Exemples amb interpretació física

Un cop s'ha verificat el funcionament de cadascun dels mètodes a la secció 5 i la convergència del model “phase field” a la solució esperada a la secció 6, al llarg d'aquesta secció es consideren diferents exemples amb interpretació física. En cap dels següents exemples es disposa d'una solució analítica del problema.

El principal objectiu d'aquesta secció és estudiar el comportament del model “phase-field” i dels mètodes numèrics a l'hora de reproduir certs fenòmens físics. Al treball [5] es troben algunes dificultats a l'hora de crear i destruir interfícies i també en la coalescència de dues interfícies. Es tracten tots aquests fenòmens en diferents exemples per tal de veure el comportament de cadascun dels mètodes, usant paràmetres similars als de la secció 6.

En tots els exemples es consideren els mètodes d'Euler i Crank Nicolson amb refinament adaptatiu.

7.1 Tub ple d'aigua, fred a un extrem

L'objectiu és obtenir el comportament per al cas físic en que inicialment un tub és ple d'aigua amb temperatura $u^0 > 0$, i s'aplica en un dels extrems una temperatura prou baixa com per tenir un canvi de fase. Es considera un tub o una barra de longitud $L = 4$, així doncs el domini és $[0, L] = [0, 4]$. Per tal d'obtenir un canvi de fase s'imposa que un dels extrems tingui temperatura per sota de la temperatura de fusió.

Així doncs es considera la següent condició inicial per la temperatura,

$$u(x, 0) = 1 \tag{18}$$

Per la variable de fase ϕ , es calcula la condició inicial discutida a la secció 4.

Per a les condicions de contorn, en un extrem, per exemple l'esquerre, es fixa la temperatura. És a dir, s'imposa condició de Dirichlet a $x = 0$. En canvi a l'altre extrem s'imposa que no hi hagi flux de temperatura. És a dir, condició de Neumann homogènia.

Les condicions per la temperatura són doncs,

$$\begin{aligned} u(0, t) &= -1 \\ \frac{\partial u}{\partial x}(4, t) &= 0 \end{aligned}$$

Per la variable de fase ϕ s'imposen condicions de Neumann homogènies als dos extrems del domini

$$\frac{\partial \phi}{\partial x}(0, t) = \frac{\partial \phi}{\partial x}(4, t) = 0 \tag{19}$$

Tal com s'ha vist a la secció 6.3, per al mètode explícit és necessari un Δt suficientment petit com per obtenir estabilitat, un cop s'aconsegueix, l'error en temps és constant i per tant, tot i que es consideri Δt més petit, s'obté la mateixa precisió. El mètode implícit també

requereix Δt prou petit per poder reproduir la solució, però per l'implícit el pas de temps pot ser més gran que per l'explícit.

Amb aquest exemple s'ha pogut veure que per tal de crear una interfície és necessari un Δt molt més petit amb els dos mètodes, és a dir, en els primers instants de temps en què $u_0 < 0$ s'ha de generar la interfície, amb $\phi < 0$ per algun x . En aquests primers instants fins generar la interfície cal un Δt prou petit. Tot i això un cop la interfície està creada es pot seguir amb el Δt discutit amb anterioritat a les seccions d'estabilitat.

Els resultats es mostren a la figura 23.

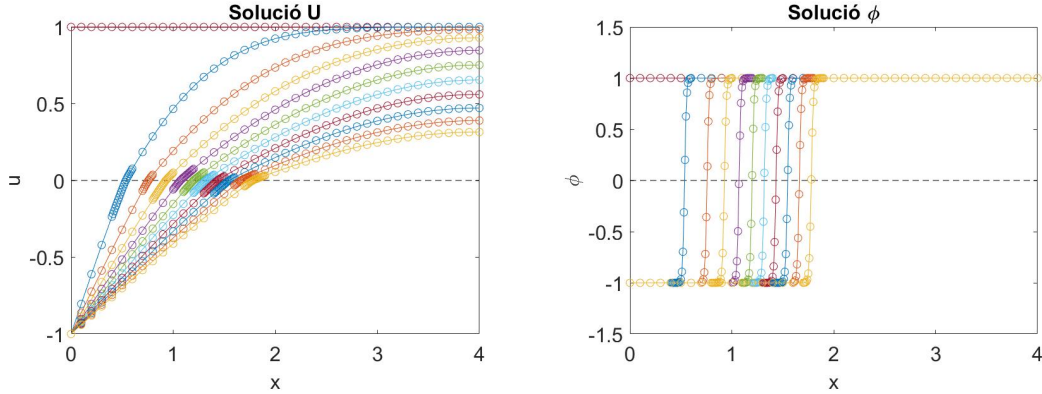


Figura 23: Solució de u (dreta) i ϕ (esquerra) usant el potencial Kobayashi amb refinament adaptatiu, amb malla base $h = 0.1$ i nivell de refinament $\xi = \Delta x_2 = 0.01$, $T_{final} = 5$, $\Delta t = 5 \times 10^{-5}$ i mètode de Crank Nicolson

Per al mètode d'Euler, un cop la interfície està creada, amb $\Delta t = \frac{\xi^2}{4} = 2.5 \times 10^{-5}$ ja s'obté màxima precisió, en canvi per crear interfície és necessari Δt d'ordre 10^{-8} o inclús menor. Per temes de capacitat computacional no s'ha pogut considerar Δt inferior a 5×10^{-7} i no s'ha pogut obtenir solució.

En canvi, per al mètode Crank Nicolson amb $\Delta t = \xi = 0.01$ ja s'assolia màxima precisió, i en aquest cas ha estat necessari disminuir el pas de temps fins $\Delta t = 5 \times 10^{-5}$ a l'inici per tal de poder generar interfície.

Tal com s'espera, amb la temperatura de l'extrem esquerre fixada, la regió de gel es va fent cada vegada més gran avançant cap a la dreta.

Es conclou que tot i que existeix una discretització temporal òptima per l'evolució de la interfície, en cas de ser necessari crear una interfície és necessari disminuir el pas de temps durant la generació.

7.2 Mig tub gel, mig aigua

L'objectiu en aquest cas és modelar el comportament per al cas físic en què inicialment hi ha mig tub congelat, amb temperatura $u_1 < 0$ constant, i mig tub amb aigua amb temperatura $u_2 > 0$ també constant. Fixant la temperatura a l'extrem gelat, amb el pas del temps s'espera que la part congelada sigui cada vegada més gran.

Es considera la següent condició inicial per la temperatura

$$u(x, 0) = \begin{cases} -1 & x < 2 \\ 1 & x > 2 \end{cases}$$

per tal de tenir gel a l'esquerra i aigua a la dreta com es mostra a la figura 24.

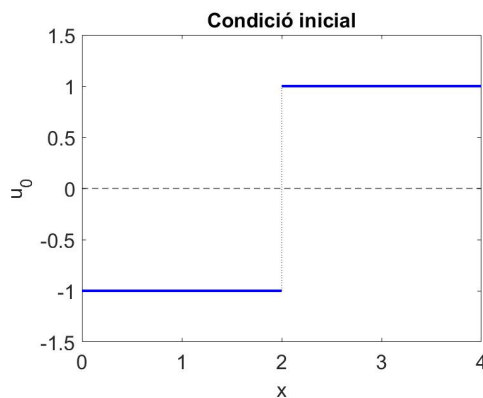


Figura 24: Condició inicial discontinua

La condició inicial de ϕ , es calcula com es discuteix a la secció 4.

Per les condicions de contorn, es fixa la temperatura a l'extrem esquerre, és a dir la temperatura a l'extrem gelat i a l'extrem $x = 4$ s'imposa que no hi hagi flux de temperatura. És a dir,

$$\begin{aligned} u(0, t) &= -1 \\ \frac{\partial u}{\partial x}(4, t) &= 0 \end{aligned}$$

Per la variable ϕ s'imposen condicions de Neumann homogènies als dos extrems del domini (19).

Similarment al que hem vist a l'exemple de la secció 7.1, podem veure que per la creació de la interfície a partir d'una condició inicial discontinua, torna a ser necessari un Δt molt més petit del que és necessari un cop la interfície ja esta creada.

En canvi, si es considera una condició inicial continua com, per exemple, a la figura 25,

$$u(x, 0) = \begin{cases} -1 & 0 < x < 1.9 \\ -1 + 10(x - 1.9) & 1.9 \leq x \leq 2.1 \\ 1 & 2.1 < x < 4 \end{cases}$$

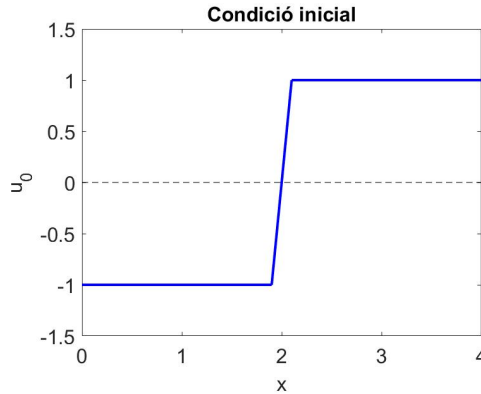


Figura 25: Condicció inicial contínua

no és necessari un Δt tant petit a l'hora de generar la interfície.

També es pot veure que si la interfície arriba a un extrem del domini abans de T_{final} , és a dir, en un dels extrems s'ha de destruir la interfície, aleshores torna a ser necessari un Δt més petit, com en el cas anterior.

Podem veure la situació dels dos casos, creació i destrucció de la interfície a la figura 26. Inicialment, la temperatura és discontinua, així que a l'hora de crear la interfície cal un Δt prou petit, per aquest exemple cal $\Delta t = 2.5 \times 10^{-5}$ per Euler i $\Delta t = 10^{-4}$ per Crank Nicolson. Un cop està creada, el mètode funciona amb els mateixos Δt discutits a les seccions 6.2 i 6.3, tant per al cas explícit com per l'implícit.

A temps $t^* = 10.4509$, la temperatura $u(4, t^*) < 0$, i així $u(x, t) < 0 \forall x \in [0, 4], \forall t \geq t^*$. Així doncs, cal "destruir" la interfície. En aquest cas torna a ser necessari el mateix Δt de la creació de la interfície.

Podem concloure doncs que per la generació i destrucció d'interfícies és necessari un Δt molt més petit que per a l'evolució del problema. A més si s'ha de generar la interfície a partir d'una temperatura discontinua cal disminuir també el pas de temps Δt .

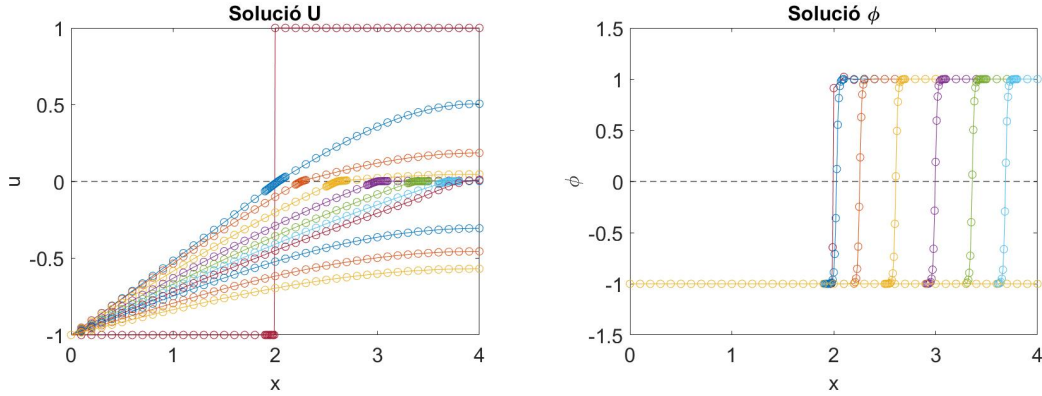


Figura 26: Solució de u (dreta) i ϕ (esquerra) usant el potencial Kobayashi amb refinament adaptatiu, amb malla base $h = 0.1$ i nivell de refinament $\xi = \Delta x_2 = 0.01$, $T_{final} = 15$, $\Delta t = 1 \times 10^{-4}$, mètode de Crank Nicolson

7.3 Coalescència

En aquest exemple es considera la situació física en que la part central del domini és líquida i els dos extrems són gel. Fixant la temperatura en els dos extrems s'espera que el domini es vagi congelant des dels extrems fins al centre.

Aquest exemple implica l'existència de dues interfícies en el mateix domini. L'objectiu és veure quin és el comportament de les interfícies a l'hora de trobar-se i veure si és necessari considerar Δt més petits com els considerats als exemples de les seccions 7.1 i 7.2, en els que s'ha vist la necessitat de disminuir el pas de temps per tal de crear i destruir interfícies.

Es considera un domini $[0, 1]$ i com a condició inicial la funció discontinua de la figura 27

$$u(x, 0) = \begin{cases} -2 & 0 < x < 0.3 \\ 2 & 0.3 \leq x \leq 0.7 \\ -2 & 0.7 < x < 1 \end{cases}$$

Per la condició inicial de la variable ϕ es considera altra vegada la discutida a la secció 4.

Per les condicions de contorn de la temperatura, es fixa el valor -2 als dos extrems. És a dir, condicions de Dirichlet,

$$\begin{aligned} u(0, t) &= -2 \\ u(1, t) &= -2 \end{aligned}$$

En canvi per la variable ϕ s'imposen condicions de Neumann homogènies als dos extrems:

$$\frac{\partial \phi}{\partial x}(0, t) = \frac{\partial \phi}{\partial x}(1, t) = 0$$

De la mateixa manera que a l'exemple de la secció 7.2, en aquest cas s'han de crear dues interfícies a partir d'una funció discontinua. Aleshores, a l'inici és necessari considerar una

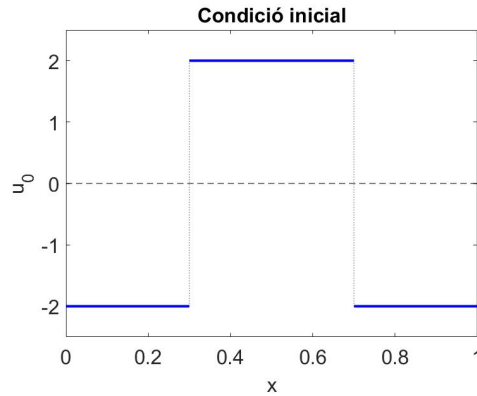


Figura 27: Condicció inicial discontinua

discretització en temps més fina del que s'ha discutit a les seccions 6.2 i 6.3. A més, quan les dues interfícies s'ajunten, també cal tenir en compte la destrucció d'aquestes interfícies, que tot i que no sigui en un extrem del domini, desapareixen. A la figura 28 es pot veure el comportament de la temperatura i les interfícies.

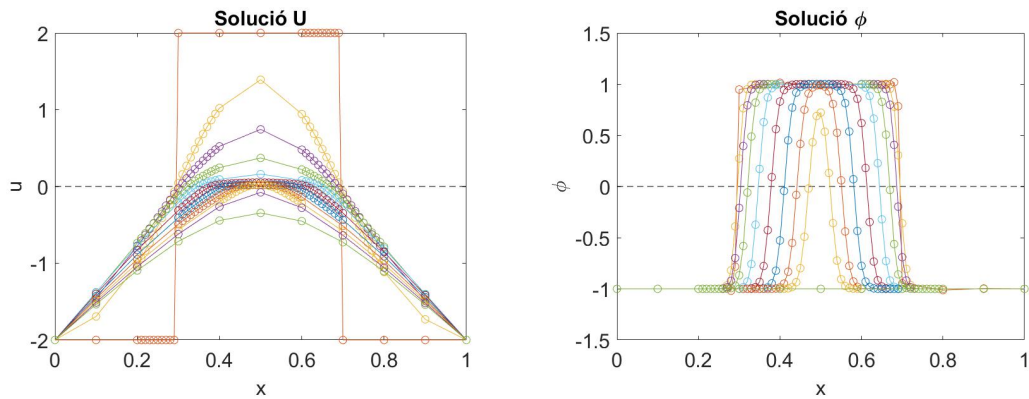


Figura 28: Solució de u (dreta) i ϕ (esquerra) usant el potencial Kobayashi amb refinament adaptatiu, amb malla base $h = 0.1$ i nivell de refinament $\xi = \Delta x_2 = 0.01$, $T_{final} = 0.1$, $\Delta t = 1.25 \times 10^{-5}$, mètode d'Euler endavant

Pel mètode d'Euler ha estat necessari considerar una discretització temporal amb $\Delta t = 1.25 \times 10^{-5}$. Comparant amb l'exemple anterior, el de la secció 7.2, en que es necessitava $\Delta t = 2.5 \times 10^{-5}$, podem veure que no ha estat necessari reduir gaire el pas de temps per al cas de la coalescència de dues interfícies. Tot i això, com en tots els exemples considerats de creació i destrucció d'interfícies, sí és necessari disminuir el pas de temps en els instants en que es produeixen aquests fets.

Per tant, en tots els exemples amb interpretació física hem vist que per la creació i

destrucció d'interfícies és necessari considerar Δt molt més petits dels discutits per l'evolució d'interfícies existents. És per això que és convenient usar un mètode amb pas de temps variable, per tal de disminuir el pas de temps només quan sigui necessari, és a dir, per la creació i destrucció d'interfícies. Per la resta de temps, tal com es veu a les seccions 6.2 i 6.3, no cal pas de temps tant petit, ja que amb $\Delta t = \frac{\xi^2}{4}$ per Euler i $\Delta t = \xi$ per Crank Nicolson ja s'obté la màxima precisió del model.

8 Conclusions i treball futur

Fent referència als principals objectius del treball, les conclusions es poden dividir en tres seccions, del model, dels mètodes numèrics i la seva implementació, i dels exemples amb interpretació física.

En relació amb la comprensió del model escollit, al llarg de la secció 2 s'elabora la construcció del model "phase field", per tal d'entendre no només les característiques pròpies d'aquest model sinó també la interpretació física de cadascun dels paràmetres i variables plantejades, que ha permès elaborar i entendre els exemples amb interpretació física de les seccions 6 i 7. Així s'han pogut veure els avantatges i limitacions que presenta aquest model, amb la presència de la variable de fase ϕ , principal característica i diferència respecte del model "sharp interface", veient finalment a la secció 6.4 la convergència lineal del model "phase field" al model límit "sharp interface" quan $\xi \rightarrow 0$.

En quant als mètodes numèrics per resoldre les EDPs del model, es pot diferenciar, tal com s'ha fet al llarg de tot el treball, en dues parts. Per tractar la variable en sentit espacial, l'elecció del mètode d'elements finits ha permès considerar diferents discretitzacions en espai, adaptades per poder capturar la variable de fase ϕ , elaborant finalment un mètode de refinament adaptatiu a la secció 3.3.1. En referència també als paràmetres numèrics, a la secció 6.1 es troba el límit d'estabilitat $\Delta x = \xi$, amb el qual s'assoleix també la màxima precisió limitada pel model. Per tractar la variable en sentit temporal s'han considerat tres mètodes diferents. Això ha permès comparar-los i veure les avantatges i inconvenients que presenta cadascun d'ells. També s'ha trobat experimentalment el límit d'estabilitat per cada mètode a la secció 6.2, assolint també màxima precisió. S'ha comprovat el funcionament dels codis de tots aquests mètodes al llarg de la secció 5, obtenint els resultats i la convergència esperats en tots els casos.

Finalment, s'han pogut estudiar diferents exemples amb interpretació física, que han permès obtenir solucions realistes i comprendre millor els resultats obtinguts. A la secció 7 es consideren tres exemples diferents amb els que s'ha pogut concloure que alguns fenòmens, com la creació i destrucció d'interfícies, requereixen un pas de temps més petit.

Respecte a les propostes de treball futur, una opció interessant per ser la de considerar paràmetres no constants. Al llarg d'aquest treball tots els paràmetres físics del model s'han considerat constants, sense l'opció de diferenciar els paràmetres segons la fase del material. Es proposa doncs implementar la possibilitat que els paràmetres físics variïn segons la temperatura o la fase en la que es troba el material en aquell punt.

Una altre proposta interessant, seguint les conclusions que s'han obtingut a la secció 7, és la implementació d'un mètode amb pas de temps variable. S'ha vist el límit d'estabilitat temporal per cadascun dels mètodes d'integració temporal, amb el qual s'assoleix precisió màxima quan la interfície evoluciona. Tot i això, és necessari reduir el pas de temps per crear i destruir interfícies. Per això pot ser interessant implementar un mètode que permeti adaptar el pas de temps segons ho requereixi el problema, sense assumir una discretització en temps massa fina allà on no és necessària.

Finalment, una altra proposta és la implementació d'aquests mètodes en dues o tres dimensions, que permetria obtenir solucions més properes a situacions reals.

Referències

- [1] G. McFadden A. Wheeler, W. Boettinger. Phase-field model for isothermal phase transition in binary alloys. *Physical Review*, 1992.
- [2] G. Caginalp. An analysis of a phase field model of a free boundary. *Department of Mathematics and Statistics, University of Pittsburgh*, 1983.
- [3] R. Kobayashi. Modeling and numerical simulations of dendritic crystal growth. *Physica D.*, 1993.
- [4] L.A.Quiros J.N.Reddy K.S. Surana, A.D.Joy. Mathematical models and numerical solutions of liquid-solid and solid-liquid phase change. *Journal of Thermal Engineering*, 2015.
- [5] M. Orteu. A finite element method solution to the phase-field model of the stefan problem. *Department of Civil and Environmental Engineering, Polytechnic University of Catalonia*, 2020.
- [6] J. Stefan. Über die theorie der eisbildung, insbesondere über die eisbildung im polarmeere. *Annalen der Physik*, Vol. 278, 1891.