

Numerische Simulation dendritischen Kristallwachstums

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades

doctor rerum naturalium

(Dr.rer.nat.)

genehmigt durch die Fakultät für Mathematik
der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg

von Dipl. Math. Rüdiger Müller

geb. am 25. 7. 1971 in Neuss

Gutachter:

Prof. Dr. Gerald Warnecke

Prof. Dr. Klaus Kassner

Prof. Dr. Alfred Schmidt

Eingereicht am: 2. 3. 2005

Vertheidigung am: 5. 9. 2005

2025
2024
2023
2022
2021
2020
2019
2018
2017
2016
2015
2014
2013
2012
2011
2010
2009
2008
2007
2006
2005
2004
2003
2002
2001
2000
1999
1998
1997
1996
1995
1994
1993
1992
1991
1990
1989
1988
1987
1986
1985
1984
1983
1982
1981
1980
1979
1978
1977
1976
1975
1974
1973
1972
1971
1970
1969
1968
1967
1966
1965
1964
1963
1962
1961
1960
1959
1958
1957
1956
1955
1954
1953
1952
1951
1950
1949
1948
1947
1946
1945
1944
1943
1942
1941
1940
1939
1938
1937
1936
1935
1934
1933
1932
1931
1930
1929
1928
1927
1926
1925
1924
1923
1922
1921
1920
1919
1918
1917
1916
1915
1914
1913
1912
1911
1910
1909
1908
1907
1906
1905
1904
1903
1902
1901
1900

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Grundlagen zur Modellbildung	5
2.1	Kurven und Flächen	5
2.2	Scharfe und diffuse Grenzflächen	10
2.3	Thermodynamische Grundlagen	12
2.3.1	Volumengleichungen	13
2.3.2	Oberflächeneffekte	16
2.4	Vereinfachte dimensionslose Modellgleichungen	19
2.5	Lösungstheorie und Grenzflächenstabilität	21
3	Stationärer Nadelkristall	23
3.1	Stationäres Problem	24
3.2	Die Ivantsov-Lösung	26
3.3	Überblick über die Selektionstheorie	28
3.3.1	Selektionstheorie MSC	29
3.3.2	Eingeprägte Strömung	31
3.4	Separationslösung höherer Ordnung	34
3.4.1	Lösungen der Differentialgleichungen	34
3.4.2	Randbedingungen	37
3.5	Stationäre Simulation mit Finiten Elementen	42
3.5.1	Grundzustand mit Ivantsov-Lösung	44
3.5.2	Geschwindigkeitsselektion als Minimierungsproblem	49
4	Grenzflächendynamik	53
4.1	Geometrische partielle Differentialgleichungen	54
4.2	Singularitäten, verallgemeinerte Lösungen	58
4.3	Explizite Grenzflächen-Verfahren	61
4.4	Level-Set-Methode	64
4.5	Phasenfeld-Methode für Kristallwachstum	68

5	Vorgaben auf inneren Flächen	73
5.1	Stationärer Fall	75
5.2	Höhere Ordnung	82
5.3	Wärmeleitungsgleichung	87
6	Implementierung und numerische Tests	95
6.1	Das Software-Paket ug	95
6.2	Diskretisierung mit inneren Vorgaben	101
6.3	Numerische Tests der Level-Set-Verfahren	105
6.3.1	Level-Set-Gleichung	105
6.3.2	Fast-Marching Level-Sets	114
6.3.3	Geometrieberechnung	118
6.4	Implementierung der Level-Set-Verfahren	121
7	Simulation dendritischen Wachstums	127
7.1	Bestimmung und Fortsetzung der Geschwindigkeit	128
7.2	Numerische Ergebnisse	131
7.3	Bewertung und Ausblick	137
Anhang		139
A.1	Parabelkoordinaten	139
A.2	Transformierte Gleichungen, Ivantsov-Lösung	142
A.3	Oseensche Umströmung der Parabel	144
A.4	Selbstkonsistente Form und Störungsansatz	146
A.5	Integralbeziehungen mit Oberflächentermen	149
A.6	Modifizierte Massen und Steifigkeitsmatrizen	151
A.7	Level-Set-Algorithmus	152
Literaturverzeichnis		157

Kapitel 1

Einleitung

Das Aussehen *dendritischer Kristalle* ist praktisch jedem bekannt von der Form der Schneekristalle, die entstehen, wenn Wasser zu Eis gefriert. Solche komplizierten, baumartig verzweigten Strukturen sind typisch für das *Erstarren unterkühlter Schmelzen*, insbesondere treten dendritische Kristalle beim Erstarren von Metallschmelzen auf. Die gleichen Phänomene finden sich auch in anderen Zusammenhängen wie der Elektrodeposition oder bei wachsenden Kulturen von Mikroorganismen.

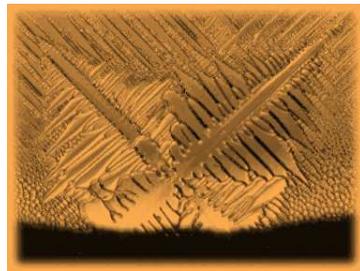


Abbildung 1.1: Beispiele für dendritische Kristalle. Links: Schneekristall (Foto: H. Uyeda, <http://radar.sci.hokudai.ac.jp/crystal/gallery.html>). Rechts: Dendrit in Edelstahl (Foto: L.A. Boatner u.a., Oak Ridge National Laboratory, USA).

Die Beschreibung und Modellierung von Phasenübergängen bei Erstarungsprozessen wie dem Kristallwachstum kann auf einem weiten Bereich von Längenskalen ansetzen, siehe Abbildung 1.2. Auf der kleinsten Skala lagern sich einzelne frei bewegliche Atome an ein Kristallgitter an, als nächstes wächst die

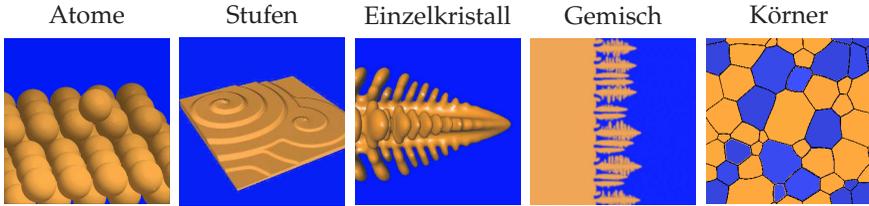


Abbildung 1.2: Kristallwachstum bzw. Erstarrungsprozesse auf verschiedenen Skalen.

festen Phase in Stufenformationen, deren Kantenhöhen im Bereich der Molekülgröße liegt, und darüber treten Einzelkristalle auf, deren Oberfläche als glatt angenommen wird. Auf weiter vergrößerten Skalen werden Phasengemische behandelt, die bei komplexen Formationen vieler Kristalle die jeweiligen Anteile der beiden Phasen in einem gewissen Ausschnitt angeben, und zuletzt bilden sich Körner mit unterschiedlichen mikroskopischen Eigenschaften aus.

In dieser Arbeit werden *Einzelkristalle* auf einer mesoskopischen Skala behandelt, die aus der Schmelze eines reinen Materials wachsen, also nicht aus Gemischen verschiedener Substanzen. Es wird angenommen, daß der Transport im Volumen um Größenordnungen langsamer als die Phasenumwandlung an der Grenzfläche erfolgt. Aus diesem Grund läßt sich ein *Kontinuumsmodell* mit einer *scharfen Grenzfläche* als Trennung der Phasen zugrunde legen. Auf den übrigen Skalen sind Modelle mit einer Übergangszone zwischen den Phasen vorzuziehen.

Technologisch ist das Verständnis des dendritischen Kristallwachstums von Interesse, weil diese Mikrostrukturen das makroskopische Materialverhalten von Werkstoffen bestimmen. In der theoretischen Physik ist das dendritische Wachstum ein wichtiges Beispiel für *Strukturbildungsprozesse*, bei denen komplexe Strukturen aus einem anfänglich homogenen Zustand entstehen. Von besonderem Interesse sind dabei Erkenntnisse über die *Selektion* bestimmter reproduzierbarer stationärer Wachstumszustände der Kristallspitzen und die Bestimmung des Übergangs zwischen verschiedenen *Morphologien*, d.h. unterschiedlichen ausgedehnten Wachstumsmustern. Mathematisch stellt das zugehörige, stark nichtlineare *modifizierte Stefan-Problem* eine wichtige Beispielaufgabe aus dem Bereich der *Probleme mit bewegter Grenzfläche* dar. Neben einer parabolischen Differentialgleichung sind dabei auf einer Grenzfläche Bedingungen sowohl für die Werte der Lösungsfunktion als auch für ihre Normalableitung zu erfüllen. Trotzdem ist das Problem nicht überbestimmt, denn die Grenzflächenposition ist a priori unbekannt und als Teil der vollständigen Problemlösung zu bestimmen.

Die numerische Simulation des dendritischen Wachstums ist wegen des hohen Rechenaufwands noch immer eine Herausforderung. Eine gute Übersicht über die Entwicklung der numerischen Methoden für das Kristallwachstum gibt [JT96]. Darüber hinaus wurde in [Sch93] ein Front-Tracking-Verfahren mit Finiten Elementen zur Berechnung dreidimensionaler Dendriten angegeben. Während früher die Speicherplatzbegrenzungen eher einen Einsatz von Randintegral-Methoden zur Dimensionsreduktion nahelegten, z.B. [SGM88] und auch [Ihl96], ermöglichte es die mit der Zeit gewachsene Speicherkapazität der Computer, zusätzliche Einflüsse und Feldgrößen einzubeziehen. So läßt sich mit der *Phasenfeld-Methode* das Problem mit scharfer Grenzfläche in ein einfacheres Problem mit steilen Fronten in den Lösungsfunktionen umwandeln. Dazu wird eine Approximation des mathematischen Modells vorgenommen, wobei eine zusätzliche Feldgröße im Volumen benötigt wird. Erweiterungen des mathematischen Modells um Strömungseinflüsse in der flüssigen Phase behandeln [GMN99, BS00, UMK03] und Verallgemeinerungen auf Multiphasen-Systeme [NW00, LKP01].

In dieser Arbeit wird mit dem *Level-Set* eine zusätzliche Feldgröße im Volumen zur Darstellung der Grenzfläche genutzt, aber diese anders als bei der Phasenfeld-Methode als scharfe Fläche beibehalten, womit die Randbedingungen dort explizit in die Methode einfließen.

Aufbau der Arbeit und Resultate

Kapitel 2 dient dazu, das konkrete mathematische Modell für diese Arbeit zu formulieren und eine Beschreibung von dessen qualitativen Eigenschaften und der thermodynamischen Herleitung der Modellgleichungen zu geben. Hierbei liegt der Akzent auf einer einheitlichen Darstellungsweise für Zwei-Phasen-Systeme mit scharfer oder diffuser Grenzfläche, welche jeweils durch eine Ordnungsgröße im Volumen charakterisiert sind. Zuvor muß auf die mathematische Beschreibung von Flächen eingegangen werden. Die mathematische Beschreibung der Grenzflächenbewegung wird erst in *Kapitel 4* behandelt, zusammen mit einer Darstellung verschiedener numerischer Verfahren für Probleme mit bewegten Rändern oder Grenzflächen. Insbesondere wird auf Front-Tracking-, Level-Set- und Phasenfeld-Verfahren eingegangen.

Die stationäre Beschreibung des Wachstumszustands eines Nadelkristalls ohne Seitenarme ist Gegenstand von *Kapitel 3*. Dabei wird nach Kriterien zur Selektion bestimmter Dendriten gesucht. In Abschnitt 3.4 werden Separationslösungen der Differentialgleichungen für die parabelförmige dendritische Platte bestimmt, wobei hier die Teillösungen nicht einzeln als globale Beschreibungen eines Nadelkristalls interpretierbar zu sein brauchen. Die Reihenentwicklung einer Lösung führt auf eine Modifikation der Beziehung zwischen der Unterkühlung und der Péclet-Zahl, es verbleibt allerdings eine Inkonsistenz mit der Ste-

fan-Bedingung auf der Grenzfläche. Eine darauf aufsetzende Anwendung eines Prinzips maximaler Geschwindigkeit gibt keine brauchbare Selektions-Aussage. In Abschnitt 3.5 wird ersichtlich, daß bei Beibehaltung der Parabelform durch Minimierung des verbleibenden Konsistenzfehlers in einer stationären Finite-Elemente Simulation keine Aussage über die Auswahl der wachsenden Dendriten zu erreichen ist. Dies kann auch nicht durch Einbeziehung einer eingepprägten Strömung in der flüssigen Phase gelingen und bekräftigt damit den Bedarf nach instationären Berechnungen, die im weiteren zu erarbeiten sind.

In *Kapitel 5* wird ein Verfahren zur Behandlung von Dirichlet-Bedingungen auf Flächen im Inneren von Gebieten bei nicht daran angepaßten Gittern entwickelt und numerisch getestet. Es wird für stationäre Probleme festgestellt, daß das Verfahren bei einem stückweise linearen Ansatz die gleiche Fehlerordnung und Stabilität aufweist, wie bei Einsatz von an die Grenzfläche angepaßten Gittern zu erwarten ist. In Abschnitt 5.2 wird der Einsatz von Elementen höherer Ordnung untersucht. Die Fehleranalyse ergibt, daß das Verfahren die maximale Ordnung $3/2$ eines quadratischen Finite-Elemente-Ansatzes bei polygonaler Randapproximation erreicht, aber nicht durch krummlinige Elemente an der Grenzfläche auf zweite Ordnung verbessert werden kann. In Abschnitt 5.3 wird das Verfahren auf den instationären Fall übertragen. Dabei werden für die Zeitdiskretisierung Kombinationen des expliziten und des impliziten Euler-Verfahrens eingesetzt. Für Probleme ohne Grenzfläche zeichnet sich das Crank-Nicolson-Verfahren durch absolute Stabilität bei einer gegenüber den anderen Kombinationen verbesserten Fehlerordnung aus. Es zeigt sich, daß eine bewegte Grenzfläche bei Anwendung des Crank-Nicolson-Verfahrens Oszillationen in der numerischen Lösung hervorruft, wodurch die Fehlerordnung auf die des impliziten Euler-Verfahrens reduziert wird.

Kapitel 6 beschreibt die Implementierung der vorgestellten Verfahren auf Basis des Software-Pakets *ug*. Auch die in dieser Arbeit als Teilkomponenten genutzten Diskretisierungen von Level-Set- und Fast-Marching-Verfahren waren zu implementieren und numerisch zu testen. In der Regel werden Level-Set-Verfahren eingesetzt, wo Einflüsse vom Gebietsrand auf die Grenzfläche vernachlässigbar sind. In Abschnitt 6.3.1 wird das Verhalten der Diskretisierungen am Gebietsrand analysiert und eine Methode für die Realisierung symmetrischer Randbedingungen für die Level-Set-Gleichung angegeben und numerisch verifiziert.

In *Kapitel 7* werden die zuvor vorgestellten Verfahrenskomponenten für die instationäre Simulation dendritischer Strukturen zusammengefügt. Es stellen sich dabei Dendriten in der Nähe der theoretischen Vorhersagen ein, die aber in ihrem stationären Wachstumszustand und den Seitenarmen auch Einfluß von numerischen Diskretisierungen aufweisen.

Kapitel 2

Grundlagen zur Modellbildung

In dieser Arbeit wird für das dendritische Kristallwachstum ein einfaches mathematisches Modell benötigt. Das übliche *Kontinuumsmodell* mit *scharfer Grenzfläche* kann weitgehend ad hoc gerechtfertigt werden, wobei für mathematische Details auf [Lan80, Pel88] verwiesen sei. Eine detaillierte Darstellung der Modellierung von Kristallwachstum mit scharfer Grenzfläche in zwei Raumdimensionen ist in [Gur93] zu finden.

Die Wahl eines solchen Modells setzt voraus, daß die Erstarrung aus der Schmelze eines reinen Materials beschrieben werden soll, nicht aus Gemischen verschiedener Substanzen. Es ist allerdings auf anderen Modellierungs-Skalen oder bei der späteren Approximation des Modells möglich, auch ein Gemisch der beiden verschiedenen Phasen zuzulassen. Auf die damit verbundene Phasenfeld-Methode wird in Abschnitt 4.5 eingegangen.

Dieses Kapitel soll nicht nur das mathematische Modell für diese Arbeit begründen, sondern auch die verschiedenen Modellierungsansätze zusammenfassen und verknüpfen. Der thermodynamischen Modellierung sind zwei Abschnitte über die Beschreibung von Flächen und deren geometrischen Eigenschaften sowie über allgemeine Zwei-Phasen-Systeme vorangestellt.

Eine Einbeziehung von Strömung in der flüssigen Phase findet sich z.B. in [GMN99, BS00] für eine scharfe Grenzfläche bzw. in [BDS⁺99] für den Phasenfeld-Ansatz.

2.1 Kurven und Flächen

Kurven und Flächen sind gewisse niederdimensionale Teilmengen des umgebenden Raumes, die sich auf unterschiedliche Art und Weise beschreiben lassen. Naheliegend ist die explizite Parametrisierung einer $d - k$ -dimensionalen Fläche

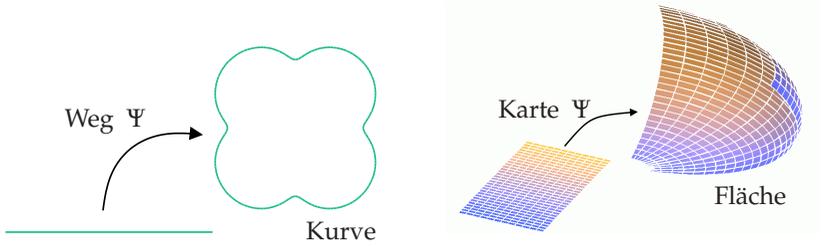


Abbildung 2.1: Parametrisierung einer Kurve durch einen Weg (links) und einer Fläche mittels einer Kartenabbildung (rechts).

mittels einer Abbildung

$$\Psi : \mathcal{D}_\Psi \subseteq \mathbb{R}^{d-k} \mapsto \Gamma \subseteq \mathbb{R}^d, \quad k, d \in \mathbb{N}, \quad k < d. \quad (2.1)$$

Die Dimension des Urbildes \mathcal{D}_Ψ gibt die Dimension der Fläche an, und die Kodimension k ist die Differenz zur Dimension des vollen Raumes. Als Flächen bzw. oft als Hyperflächen werden Objekte der Kodimension 1, also Dimension $d - 1$, bezeichnet. Die parametrisierende Abbildung heißt Karte. Eindimensionale Objekte, d.h. solche mit Kodimension $d - 1$, werden als Kurven und die zugehörige Abbildung als Weg bezeichnet. Im zweidimensionalen Raum fallen die beiden Begriffspaare zusammen. Mit der Vorgabe eines Bildbereichs ist natürlich die Abbildung nicht bestimmt. Daher müssen alle folgenden geometrischen Eigenschaften unabhängig von der Wahl der Parameterabbildung Ψ sein.

In dieser Arbeit sind nur *geschlossene Flächen* von Interesse, die sich *nicht selbst schneiden* können. Bei Einschränkung auf ein endliches Volumen müssen dadurch entstehende Ränder der Flächen auf dem Rand des eingeschränkten Gebiets liegen. Solche Flächen lassen sich als die Grenze auffassen, die den zu betrachtenden Raum in Teilgebiete unterteilen, die jeweils zu einer von *zwei Phasen* gehören.

Wichtige geometrische Eigenschaften einer stückweise glatten Fläche sind die lokale *Orientierung* im Raum – sie wird durch die Orientierung der berührenden Tangentialebenen angegeben – und die *Krümmung* κ , die an jeder Stelle durch die Radien der sich an die Fläche anschmiegenden Kreise bestimmt wird. Während im zweidimensionalen Raum die Krümmung bis auf das Vorzeichen eindeutig als $\kappa = 1/R$ definiert ist, gibt es im dreidimensionalen Fall verschiedene Möglichkeiten. Die Radien R_1 und R_2 des größten und des kleinsten Kreises geben die Hauptkrümmungen, mit denen sich die *mittlere Krümmung* $\kappa_M := 1/R_1 + 1/R_2$ und die *Gaußsche Krümmung* $\kappa_G := 1/(R_1 R_2)$ definieren lassen. Im Rahmen dieser Arbeit ist mit Krümmung stets die mittlere

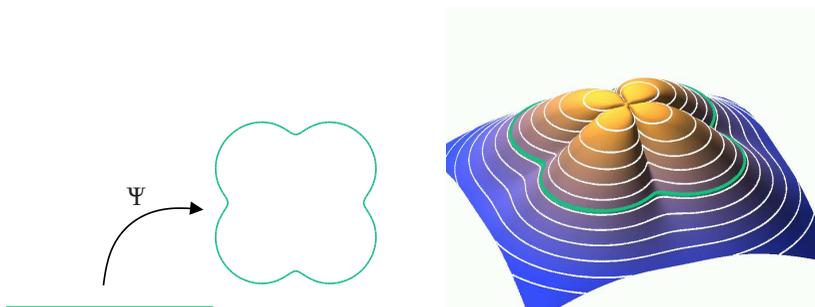


Abbildung 2.2: Darstellung der gleichen Kurve durch eine Parametrisierung (links) und in der Level-Set-Beschreibung als Höhenmenge (rechts).

Krümmung gemeint. Eine *Normale* n auf Γ ist ein Einheitsvektor, der senkrecht zur Tangentialebene steht. Bei Flächen der Kodimension 1 ist sie bis auf das Vorzeichen eindeutig festgelegt.

Für die Bestimmung der geometrischen Größen einer Fläche mit Kodimension 1 benötigen wir die *Tangentialableitung* einer auf dem Volumen definierten Funktion f . Sie ist definiert als der um die Projektion auf die Normale korrigierte Gradient

$$\underline{\nabla}_{\Gamma} f := \nabla f - \langle \nabla f, n \rangle n.$$

Weiterhin wird für ein Vektorfeld $F = (f_1, \dots, f_d)$ der Laplace-Beltrami-Operator auf Γ komponentenweise definiert als

$$(\underline{\Delta}_{\Gamma} F)_j := \sum_{i=1}^d \left(\underline{\nabla}_{\Gamma} (\underline{\nabla}_{\Gamma} f_j)_i \right)_i.$$

Nach [GT98] erhalten wir die geometrischen Größen mit Hilfe der identischen Abbildung id_{Γ} auf einer Fläche Γ als

$$\underline{\Delta}_{\Gamma} \text{id}_{\Gamma} = \kappa n. \quad (2.2)$$

Besser geeignet für eine explizite formelmäßige Beschreibung der geometrischen Größen ist eine implizite Definition der Flächen Γ als Nullstellenmenge einer *Level-Set-Funktion* Φ :

$$\Gamma = \left\{ x \in \mathbb{R}^d \mid \Phi(x) = 0 \right\}. \quad (2.3)$$

Dabei ist in einer offenen Umgebung von Γ zu fordern, daß fast überall $\nabla \Phi \neq 0$ gilt. Prinzipiell können so Flächen beliebiger Kodimension k beschrieben werden. Um mit Hilfe des Satzes über implizite Funktionen wiederum die Existenz

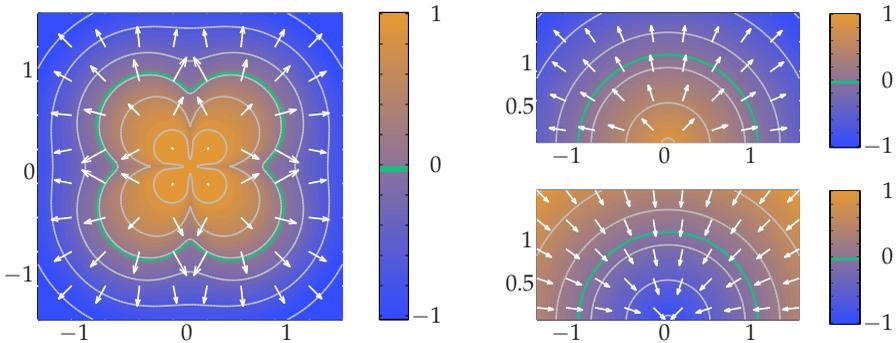


Abbildung 2.3: Links: Kurve als Nullstellenmenge, Höhenlinien und die negativen Gradienten. Rechts: Quellen und Senken des Normalen-Vektorfeldes bei Krümmung der Kurve.

einer Kartenabbildung zu sichern, ist aber Γ als Nullstellenmenge von k Funktionen Φ_i zu beschreiben. Das ist gleichbedeutend damit, eine Fläche der Kodimension k als Schnitt von k Flächen der Kodimension 1 zu beschreiben.

Weil der Gradient einer Funktion mehrerer Veränderlicher stets senkrecht zu den Höhenlinien steht, ist die Normalenrichtung einer Fläche stets durch den normierten Gradienten gegeben. Es wird hier die Normale so gewählt, daß sie in Richtung des stärksten *Abstiegs* von Φ weist. Weiterhin können die Normalen so zu einem Vektorfeld auf dem gesamten Raum fortgesetzt werden. Wie in Abb. 2.3 zu sehen ist, weist dieses Vektorfeld der Normalen bei einer Krümmung der Fläche Γ Quellen bzw. Senken auf. Daher ist es naheliegend, die Krümmung als proportional zur Divergenz des Normalen-Vektorfeldes anzunehmen. Für d -dimensionale Kugeln Γ mit Radius R kann beispielsweise

$$\Phi(x) = -\|x\| + R$$

gewählt werden, für $\|x\| = R$ ist $\Phi = 0$. Es folgt dann

$$n = \frac{x}{\|x\|}, \quad \operatorname{div}(n(x)) = \frac{d}{\|x\|} - \frac{\langle x, x \rangle}{\|x\|^3} = \frac{d-1}{\|x\|},$$

womit dann der Proportionalitätsfaktor festgelegt ist.

Definition:¹ Für eine als Nullstellenmenge der Level-Set-Funktion Φ ge-

1. Diese Vereinbarungen stellen die Übereinstimmung mit den meisten Arbeiten der Literatur zum Kristallwachstum sicher. Sie müßten aber in einem der beiden Punkte mit entgegengesetztem Vorzeichen getroffen werden, um analog zum stabilen Problem der Wärmeleitung $\theta_t - \Delta\theta = 0$ den stabilen Fall des Krümmungsflusses als $V - \kappa = 0$ zu formulieren; siehe Abschnitt 4.1.

gebene Fläche sind Normale n und mittlere Krümmung κ an jeder Stelle

$$n(x) := -\frac{\nabla\Phi(x)}{\|\nabla\Phi(x)\|}, \quad (2.4a)$$

$$\kappa(x) := \frac{1}{d-1} \operatorname{div}(n(x)). \quad (2.4b)$$

Die Verträglichkeit mit (2.2) läßt sich durch Einsetzen leicht nachprüfen. Eine Formel für die Krümmung läßt sich explizit aus der Funktion Φ bestimmen

$$\begin{aligned} (d-1)\kappa &= \operatorname{div} \left(-\frac{\nabla\Phi}{\|\nabla\Phi\|} \right) = \frac{-\Delta\Phi}{\|\nabla\Phi\|} + \frac{1}{2} \frac{\langle \nabla\Phi, \nabla(\|\nabla\Phi\|^2) \rangle}{\|\nabla\Phi\|^3} \\ &= \frac{-\Delta\Phi \|\nabla\Phi\|^2}{\|\nabla\Phi\|^3} + \frac{\sum_{i=1}^d \partial_i\Phi (\partial_i\Phi \partial_i^2\Phi + \sum_{k \neq i} \partial_k\Phi \partial_i\partial_k\Phi)}{\|\nabla\Phi\|^3} \\ &= \frac{\sum_{i=1}^d \sum_{k \neq i} (\partial_i\Phi \partial_k\Phi \partial_i\partial_k\Phi - \partial_i^2\Phi (\partial_k\Phi)^2)}{\|\nabla\Phi\|^3}. \end{aligned}$$

Dabei wurde benutzt, daß

$$\frac{1}{2} \partial_i \sum_{k=1}^d (\partial_k\Phi)^2 = \sum_{k=1}^d \partial_k\Phi \partial_i\partial_k\Phi = \partial_i\Phi \partial_i^2\Phi + \sum_{k \neq i} \partial_k\Phi \partial_i\partial_k\Phi.$$

Nach eventueller Drehung der Koordinaten gibt es stets eine lokale Darstellung von Flächen der Kodimension 1 als Graphen einer Funktion:

$$\Gamma = \left\{ (x, \gamma(x))^T \in \mathbb{R}^d \mid x \in \mathcal{D}_\Gamma \subseteq \mathbb{R}^{d-1} \right\}.$$

Diese Beschreibungsweise liegt zwischen den beiden bisher genannten, denn daraus lassen sich einfach sowohl eine Parametrisierung als auch die Level-Set-Funktion bestimmen

$$\Psi(x) = (x, \gamma(x))^T, \quad \Phi(x, y) := \gamma(x) - y. \quad (2.5)$$

Die Normale läßt sich so gemäß (2.4a) ausdrücken als

$$n = \frac{(-\nabla_x \gamma, 1)}{\sqrt{1 + \|\nabla_x \gamma\|^2}}, \quad (2.6a)$$

und die Krümmung ist nach (2.4b)

$$(d-1)\kappa = \operatorname{div}_{(x,y)} \left(\frac{(-\nabla_x \gamma, 1)}{\sqrt{1 + \|\nabla_x \gamma\|^2}} \right) = \operatorname{div}_x \left(\frac{-\nabla_x \gamma}{\sqrt{1 + \|\nabla_x \gamma\|^2}} \right). \quad (2.6b)$$

2.2 Scharfe und diffuse Grenzflächen

Dieser Abschnitt dient zur universellen Beschreibung vielfältiger Zwei-Phasen-Systeme. Jede der Phasen kann dabei beispielsweise eine feste, flüssige oder gasförmige Phase sein, und diese können mischbar oder nicht mischbar sein. Stellvertretend wird im weiteren aber von einem fest-flüssig-System ausgegangen. In einem Gebiet $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$, $d = 2, 3$ nehme die feste Phase ein Teilgebiet Ω^+ ein, und das Teilgebiet Ω^- sei mit der flüssigen Phase ausgefüllt. Dazwischen wird entweder eine Fläche Γ als *scharfe Grenzfläche* angenommen oder eine Übergangszone mit positivem Volumen. Letzteres wird dann als eine *diffuse Grenzfläche* Γ bezeichnet. Weiterhin gelte folgende **Konvention**:

- (N) Die Normale auf die Phasengrenze weist stets von Ω^+ nach Ω^- .
- (K) Die Krümmung wird positiv gezählt, wo Ω^+ konvex ist, also wenn der Mittelpunkt des Krümmungskreises in Ω^+ liegt.

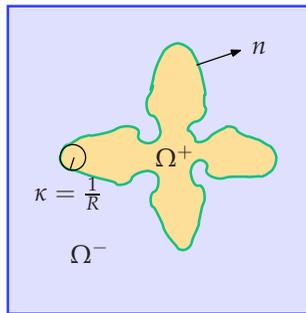


Abbildung 2.4: Teilgebiete eines Zwei-Phasen-Systems und Andeutung einer Normale n und eines Krümmungskreises.

Aus einer Parametrisierung der Grenzfläche ist es nicht unmittelbar möglich, die Phasenzugehörigkeit jedes Raumpunktes zu ermitteln. Es wäre dazu eine Verbindungsgerade zu einem Punkt bekannter Phasenzugehörigkeit zu ziehen und zu prüfen, ob diese eine gerade oder ungerade Anzahl von Schnitten mit der Grenzfläche aufweist. Daher werden Parametrisierungen an dieser Stelle nicht weiter berücksichtigt. In Kapitel 4 wird darauf aber noch einmal eingegangen, nämlich bei der Beschreibung von bewegten Flächen und damit verbundenen numerischen Verfahren für Zwei-Phasen-Systeme.

Stattdessen dient hier eine Funktion als Ordnungsgröße, die in jedem Punkt über den Phasenzustand Auskunft gibt. Die erste naheliegende Wahl dafür ist die charakteristische Funktion $\chi_{\Omega^+}(x)$ der Menge Ω^+ oder, als symmetrische Variante, die Phasen-Indikatorfunktion $\Phi(x) = 2\chi_{\Omega^+}(x) - 1$. Da diese Funktio-

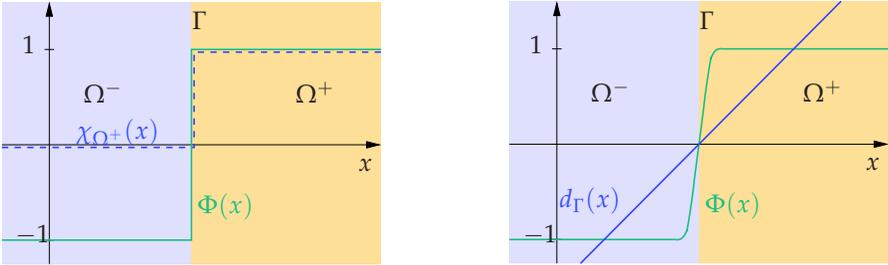


Abbildung 2.5: Beschreibung einer scharfen Grenzfläche. Links: Charakteristische Funktion $\chi_{\Omega^+}(x)$ und Phasen-Indikatorfunktion $\Phi(x)$. Rechts: Beispiel für Level-Set-Funktion $\Phi(x)$ und vorzeichenbehaftete Abstandsfunktion $d_\Gamma(x)$.

nen unstetig sind, würden bei den weiteren Rechnungen oftmals glatte Approximationen daran benötigt. Deshalb gibt es die Möglichkeit, weitgehend beliebige, nahe der Grenzfläche monotone, stetige Funktionen Φ zuzulassen, die über das Vorzeichen eine Zuordnung jedes Punktes im Raum zu den Phasen ermöglichen:

$$\Omega^+ = \{x \in \Omega \mid \Phi(x) > 0\}, \quad \Omega^- = \{x \in \Omega \mid \Phi(x) < 0\}. \quad (2.7)$$

Die Grenzfläche ist dann, wie in Abschnitt 2.1, die Höhenmenge der Level-Set-Funktion Φ . Dabei wird Γ mit der Höhenmenge zum Wert $\Phi = 0$ identifiziert, ähnlich wie die Grenze zwischen Festland und Meer bei der Höhe 0m über N.N. verläuft. Eine weitere vorteilhafte Eigenschaft dieser Beschreibung ist, daß Vereinigungen bzw. Durchschnitte von Teilmengen des Raumes durch Maximum- bzw. Minimum-Bildung der zugehörigen Level-Set-Funktionen bestimmt werden können. Für glatte Level-Set-Funktionen sind die getroffenen Vereinbarungen (N) und (K) verträglich mit den Definitionen (2.4). Im unstetigen Fall sind dazu noch Glättungen und Grenzübergang nötig.

Bei einer diffusen Grenzfläche ist das Erreichen eines Schwellwertes – hier o.B.d.A. bei ± 1 – das Kriterium, anhand dessen sich die Punkte $x \in \Omega$ den Phasen oder der Übergangszone zuordnen lassen. Somit ist

$$\Omega^+ = \{x \in \Omega \mid \Phi(x) > 1\}, \quad \Omega^- = \{x \in \Omega \mid \Phi(x) < -1\}. \quad (2.8)$$

Es kann dabei, wie in den Bilder 2.5 und 2.6 zu sehen ist, durchaus die gleiche Funktion sowohl eine scharfe als auch eine diffuse Grenze beschreiben. Der Unterschied liegt in der Interpretation im Rahmen der weiteren Modellierung. Auch bei diffuser Grenzfläche lassen sich die Normale und Krümmung mit (2.4) definieren.

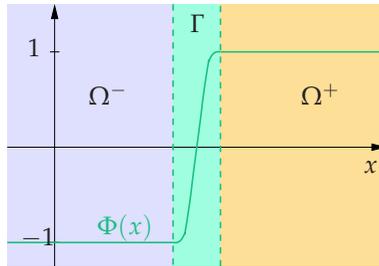


Abbildung 2.6: Phasen-Indikatorfunktion $\Phi(x)$ für diffuse Grenzfläche.

2.3 Thermodynamische Grundlagen

Dieser Abschnitt ist in vielen Teilen allgemeiner gefaßt, als es für die späteren Anwendungen nötig ist. Mit einer übergreifenden Beschreibung der Modellierungsprinzipien soll ermöglicht werden, im Abschnitt 4.5 Gemeinsamkeiten und Unterschiede zwischen dem in dieser Arbeit vorgestellten Level-Set-Verfahren und der Phasenfeld-Methode aufzuzeigen. Der zusätzliche Aufwand hält sich dabei in Grenzen und führt auch nicht zu einem zu starken Verlust an Übersichtlichkeit. Der Fall der scharfen Grenzfläche, mit den dabei gültigen Randbedingungen, wird in den Unterabschnitten jeweils vertieft. Die Reduktion auf ein einfaches Modell für den praktischen Einsatz erfolgt in Abschnitt 2.4.

Es wird eine allgemeine, glatte oder auch unstetige, Funktion Φ als Ordnungsgröße benutzt. Für den Fall der scharfen Grenzfläche können alle von Φ abhängigen Funktionen unstetig sein. Alle hier nur formal durchgeführten Rechenschritte lassen sich durch distributionelle Ableitungen [Hör83, RY95, Rud91] und mit variationellen Ungleichungen [Nau84, Vis96] rechtfertigen.

Zuerst sind einige Größen einzuführen² und deren konstitutive Zusammenhänge in einer Weise festzulegen, die hinreichend ist, um kompatibel mit der Thermodynamik, d.h. mit deren beiden Hauptsätzen zu sein. Wir definieren

absolute Temperatur:	T , stetig auf ganz Ω ,
Dichte der inneren Energie:	$e = e(T, \Phi)$,
Entropiedichte:	$s = s(T, \Phi)$,
Wärmefluß:	$Q = Q(\nabla T, \Phi)$.

Als eine daraus abgeleitete Größe wird die *Dichte der freien Energie* eingeführt:

2. Wenn anstatt konstanten Volumens konstanter Druck angenommen wird, läßt sich die Modellierung in gleicher Weise durchführen, nur sind die innere Energie durch die Enthalpie und die freie Energie durch die Gibbs'sche freie Energie zu ersetzen.

$$f(T, \Phi) := e(T, \Phi) - T s(T, \Phi). \quad (2.9)$$

Für die Kompatibilität der getroffenen Definitionen mit der Thermodynamik ist wie in [Gur93] zu fordern, daß $s = -\frac{\partial f}{\partial T}$ gilt. Durch Einsetzen in (2.9) folgt

$$e = f - T \frac{\partial f}{\partial T}. \quad (2.10)$$

Es ist zu sehen, daß alle Terme von f , die linear in T sind, keinen Einfluß auf e haben. Wichtige Konstanten als Bezugsgrößen sind

$$\text{Schmelztemperatur:} \quad T_m, \text{ mit } f(T_m, -1) = f(T_m, +1), \quad (2.11a)$$

$$\text{Latente Wärme:} \quad l := e(T_m, -1) - e(T_m, 1), \quad (2.11b)$$

wobei die Werte $\Phi = \pm 1$ als stellvertretend zur Bezeichnung der festen bzw. flüssigen Phase zu verstehen sind.

2.3.1 Volumengleichungen

Für die Dichte der inneren Energie wird eine Erhaltungsgleichung angesetzt, die Änderungen von e nur aufgrund des Wärmeflusses zuläßt

$$\partial_t e + \operatorname{div} Q = 0. \quad (2.12)$$

Zweckmäßig sind die folgenden Definitionen mit den konstitutiven Annahmen

$$\text{Spezifische Wärmekapazität:} \quad c_v = c_v(\Phi) := \frac{\partial e}{\partial T}, \quad (2.13a)$$

$$\text{Dichte der latenten Wärme:} \quad \tilde{l} = \tilde{l}(T, \Phi) := 2 \frac{\partial e}{\partial \Phi}. \quad (2.13b)$$

Die Erhaltungsgleichung ist dann

$$0 = \partial_t e + \operatorname{div} Q = \frac{\partial e}{\partial T} \partial_t T + \frac{\partial e}{\partial \Phi} \partial_t \Phi + \operatorname{div} Q = c_v \partial_t T + \frac{1}{2} \tilde{l} \partial_t \Phi + \operatorname{div} Q.$$

Für die Dichte der inneren Energie e wird jetzt ein spezieller Ansatz gemacht, der einer *Linearisierung um die Schmelztemperatur* T_m entspricht und die latente Wärme aus (2.11b) einbezieht

$$e := (T - T_m) c_v(\Phi) - \frac{1}{2} l h(\Phi). \quad (2.14)$$

Dabei ist h eine in Φ monotone Funktion, die wegen (2.11b) zwischen den beiden Phasenzuständen $\Phi = -1$ und $\Phi = 1$ die Höhendifferenz 2 aufweisen muß

$$\frac{h(1) - h(-1)}{2} = 1. \quad (2.15)$$

Geeignet als Wahl für h sind insbesondere $h(\Phi) = \Phi$ bei diffuser und $h(\Phi) = \text{sign}(\Phi)$ bei scharfer Grenzfläche und stetiger Ordnungsgröße Φ . Somit ist die immer noch sehr allgemeine Form der Erhaltungsgleichung

$$\begin{aligned} 0 &= c_v \partial_t T + (T - T_m) \partial_t c_v - \frac{1}{2} l \partial_t h + \text{div } Q & (2.16) \\ &= c_v \partial_t T + \frac{1}{2} \underbrace{[2(T - T_m) \partial_\Phi c_v - l \partial_\Phi h]}_{=\tilde{l}} \partial_t \Phi + \text{div } Q. \end{aligned}$$

Bei phasenabhängiger spezifischer Wärmekapazität c_v ist die Dichte \tilde{l} der latenten Wärme also abhängig von Temperatur und Phasenzustand. Wenn wir für $c_v(\Phi)$ einen zu (2.14) ähnlichen Ansatz

$$c_v(\Phi) := \bar{c}_v + \hat{c}_v h(\Phi) \quad (2.17)$$

mit dem Mittelwert \bar{c}_v und der Sprunghöhe \hat{c}_v machen, erhalten wir aus (2.16)

$$c_v \partial_t T + \frac{1}{2} [2(T - T_m) \hat{c}_v - l] \partial_t h(\Phi) + \text{div } Q = 0. \quad (2.18)$$

Scharfe Grenzfläche

Die Phasen-Indikatorfunktion kann nach wie vor stetig oder unstetig sein, aber die davon abhängigen Größen e , Q , s und f dürfen jetzt, im Falle der scharfen Grenzfläche, nur noch von dem Vorzeichen $\text{sign}(\Phi)$ abhängen. Für eine bei 0 stetige Ordnungsgröße Φ wird

$$h(\Phi) = \text{sign}(\Phi)$$

gewählt.³ Die spezifische Wärmekapazität nimmt in den jeweiligen Teilgebieten Ω^\pm bestimmte konstante Werte $c_v^\pm := \bar{c}_v \pm \hat{c}_v$ an. Setzen wir dies in die Bilanzgleichung (2.16) bzw. (2.18) ein, folgt

$$c_v \partial_t T + \left((T - T_m) \hat{c}_v - \frac{1}{2} l \right) \partial_t \text{sign}(\Phi) + \text{div } Q = 0, \quad \text{in } \Omega. \quad (2.19)$$

Innerhalb jedes der beiden Teilgebiete Ω^- und Ω^+ ist offensichtlich

$$c_v^\pm \partial_t T + \text{div } Q = 0 \text{ in } \Omega^\pm.$$

Ein beliebiges Kontrollvolumen $K \subseteq \Omega$ kann in die beiden Teile $K^+ := K \cap \Omega^-$ und $K^- := K \cap \Omega^+$ zerlegt werden. Mit dem Gaußschen Satzes bekommen wir

$$\int_{K^\pm} c_v^\pm \partial_t T \, dx dt + \int_{\partial K^\pm} \langle Q, n \rangle \, dS(x) dt = 0. \quad (2.20)$$

3. Der allgemeine unstetige Fall soll hier nicht weiter berücksichtigt werden, es ist dabei lediglich die insgesamt richtige Sprunghöhe bei $\Phi = 0$ einzustellen.

Aufgrund der Festlegung (N) in Abschnitt 2.2, der zufolge die Normale auf Γ in Richtung von Ω^+ nach Ω^- orientiert ist, gilt

$$\int_{\partial K^\pm} \langle Q, n \rangle dS(x) = \int_{\partial K \cap \Omega^\pm} \langle Q, n \rangle dS(x) \pm \int_{K \cap \Gamma} \langle Q, n \rangle dS(x).$$

Um Beiträge der beiden Teile des Kontrollvolumens zusammenzufassen, definieren wir den Sprung einer Größe Q bei Übergang über die Grenzfläche Γ als

$$[Q]_\Gamma := Q^+ - Q^- \quad (2.21)$$

und erhalten so, unter Verwendung von (2.20),

$$\begin{aligned} 0 &= \int_K c_v \partial_t T dx + \int_K \operatorname{div} Q dx \\ &= \int_{K^+} c_v \partial_t T dx + \int_{\partial K^+} \langle Q, n \rangle dS(x) + \int_{K^-} c_v \partial_t T dx + \int_{\partial K^-} \langle Q, n \rangle dS(x) \\ &= \int_K c_v \partial_t T dx + \int_{\partial K} \langle Q, n \rangle dS(x) + \int_{K \cap \Gamma} [Q, n]_\Gamma dS(x). \end{aligned}$$

Integrieren wir Gleichung (2.19) über ein hinreichend kleines, aber festes Kontrollvolumen $K \subseteq \Omega$ und ein Zeitintervall $[t_0, t_1]$ und setzen dies ein, so folgt

$$\int_{t_0}^{t_1} \int_{K \cap \Gamma(t)} [Q, n]_\Gamma dS(x) dt = \int_{t_0}^{t_1} \int_K \left((T - T_m) \widehat{c}_v - \frac{1}{2} l \right) \partial_t \operatorname{sign}(\Phi) dx dt. \quad (2.22)$$

Am Anfang des Abschnittes wurde bei den Konstitutiv-Beziehungen die Stetigkeit der Temperatur T vorausgesetzt. In jedem Punkt (t^*, x^*) mit der Temperatur $T^* := T(t^*, x^*)$ läßt sich deshalb zu beliebig kleinem $\mu > 0$ eine hinreichend kleine Umgebung $[t_0, t_1] \times K$ finden, in der stets gilt, $|T - T^*| \leq \mu$. Mit einem im asymptotischen zu μ proportionalen Term $O(\mu)$ können wir die rechte Seite in (2.22) schreiben als

$$\left((T^* - T_m) \widehat{c}_v - \frac{1}{2} l + O(\mu) \right) \int_{t_0}^{t_1} \partial_t \int_K \operatorname{sign}(\Phi) dx dt$$

und erhalten mit (A.32) aus Anhang A.5 aus der Gleichung (2.22) nun

$$\begin{aligned} &\int_{t_0}^{t_1} \int_{K \cap \Gamma(t)} [Q, n]_\Gamma dS(x) dt \\ &= \left(2(T^* - T_m) \widehat{c}_v - l + O(\mu) \right) \int_{t_0}^{t_1} \int_{K \cap \Gamma(t)} V dS(x) dt. \end{aligned}$$

Auf der rechten Seite bezeichnet dabei V die *Normalgeschwindigkeit* der Phasengrenze $\Gamma(t)$. Da die obige Beziehung in jedem Punkt (t^*, x^*) für beliebige hinreichend kleine Kontrollvolumina und Zeitintervalle gilt, erhalten wir mit $\mu \rightarrow 0$ zusätzlich zur Erhaltungsgleichung in beiden Teilgebieten Ω^\pm eine Randbedingung auf der Grenzfläche Γ , die *Stefan-Bedingung*

$$0 = c_v^\pm \partial_t T + \operatorname{div} Q \quad \text{in } \Omega^\pm \text{ und} \quad (2.23a)$$

$$- [Q]_\Gamma = \left(l - 2(T - T_m) \hat{c}_v \right) V \quad \text{auf } \Gamma. \quad (2.23b)$$

2.3.2 Oberflächeneffekte

Aus der Kompatibilitätsbeziehung (2.10) erhalten wir durch Ableiten und Einsetzen der Definition der spezifischen Wärmekapazität aus (2.13)

$$\frac{\partial^2 f}{\partial T^2} = -\frac{c_v}{T}.$$

Die Lösung dieser Differentialgleichung hat die allgemeine Form

$$f(T, \Phi) = -T \ln(T) c_v(\Phi) + T k_1(\Phi) + k_2(\Phi).$$

Aus dem Ansatz (2.14) für die Dichte der inneren Energie e folgt für den Parameter k_2 die Bedingung $k_2 = -c_v(\Phi) T_m - \frac{1}{2} l h(\Phi)$. Um weiterhin die Bedingung (2.11a) zur Festlegung der Schmelztemperatur T_m zu erfüllen, sollte $f(T_m, \cdot)$ unabhängig vom Phasenzustand sein, wozu $k_1 := \ln(T_m) c_v(\Phi) + c_v(\Phi) + \frac{l}{2 T_m} h(\Phi)$ gewählt wird. Dies führt insgesamt auf

$$f(T, \Phi) = -T \ln \left(\frac{T}{T_m} \right) c_v(\Phi) + (T - T_m) c_v(\Phi) + \frac{T - T_m}{2 T_m} l h(\Phi). \quad (2.24)$$

Es wird nun gefordert, daß das Zwei-Phasen-System sich in einer Weise zeitlich entwickelt, daß dabei die freie Energie minimiert wird.⁴ Dazu wird das Funktional \mathcal{F} der freien Energie definiert als

$$\mathcal{F}(T, \Phi) := \int_\Omega f(T, \Phi) dx \quad (2.25)$$

und dann mit der Fréchet-Ableitung von \mathcal{F} und einem Relaxationsparameter ω eine variationelle Gleichung formuliert:

$$\int_\Omega \omega \varphi \frac{\partial}{\partial t} \Phi dx = -\frac{\delta}{\delta \Phi} \mathcal{F}(T, \Phi)_{[\varphi]}, \quad \text{für alle Testfunktionen } \varphi. \quad (2.26)$$

4. Bei örtlich veränderlicher Temperatur ist eigentlich statt der Minimierung der freien Energie die Entropie zu maximieren. Das Vorgehen hier entspricht dem beim Phasenfeld-Ansatz, der ebenfalls mit einer freien Energie \mathcal{F} formuliert wird und dabei kompatibel mit der Thermodynamik ist [PF93].

Es ist nun zu sehen, daß auch ohne eine treibende Kraft durch die Unterkühlung, d.h. für konstante Temperatur $T = T_m$, die innere Energie auf Ω beliebig gesenkt werden könnte, indem Ω^+ , und damit die Oberfläche Γ , beliebig wächst. Es ist deshalb in der Definition von \mathcal{F} ein Term hinzuzufügen, der Oberflächeneffekte beschreibt. Hierzu ist ein geeigneter *Modellansatz* nötig, der von der Richtung des Gradienten, also der Grenzflächengeometrie, und dem gewichteten Betrag des Gradienten, also letztlich der Oberflächengröße, abhängt. Ein möglicher Ansatz ist z.B.

$$\mathcal{F}(T, \Phi) := \int_{\Omega} f(T, \Phi) + S_{\Gamma}(\nabla\Phi) dx, \quad (2.27a)$$

$$S_{\Gamma}(\Phi, \nabla\Phi) := w_{\varepsilon} \left(\frac{\nabla\Phi}{\|\nabla\Phi\|} \right) \|\nabla h(\Phi)\|, \quad (2.27b)$$

mit $S_{\Gamma}(\nabla\Phi = 0) = 0$ in einer Weise, daß S_{Γ} zumindest stetig ist. Dabei läßt sich eine Anisotropie der Oberflächenspannung in der Funktion w_{ε} modellieren.

Bei dem Phasenfeld-Ansatz gibt es die weitere Einschränkung, daß die Ordnungsgröße Φ nur zwischen den Werten ± 1 interpolieren soll. Dazu kann dem Funktional der freien Energie (2.27a) ein weiterer Term $\mathcal{W}(\Phi)$ hinzugefügt werden, der einem Zwei-Mulden- oder Zwei-Hindernis-Potential entspricht. Die konkrete Form des gewählten Potentials wird erst bei einer Verallgemeinerung auf Mehrphasen-Systeme wichtig, um den genauen Verlauf der erlaubten Phasenübergänge im Detail festzulegen [NW00, LKP01]. Anders als in (2.27b) wird beim Phasenfeld-Ansatz mit

$$S_{\Gamma}(\nabla\Phi) := w_{\varepsilon}^2 \left(\frac{\nabla\Phi}{\|\nabla\Phi\|} \right) \|\nabla\Phi\|^2$$

eine in $\nabla\Phi$ homogene Funktion der Ordnung 2 verwendet.⁵ Wir erhalten so für Φ eine Allen-Cahn-Gleichung. Durch solche nichtlinearen Reaktions-Diffusions-Gleichungen lassen sich bistabile Systeme beschreiben, bei denen sich makroskopisch die Phasengrenze lokal proportional zu ihrer mittleren Krümmung bewegt [AC79, ESS92].

Scharfe Grenzfläche

Eine von den vorangegangenen Abschnitten unabhängige Herleitung der allgemeineren mechanischen und thermodynamischen Zusammenhänge an der scharfen Grenzfläche in zwei Raumdimensionen gibt es in [Gur93]. Nach Linearisierung wird dort die Temperatur auf der Grenzfläche durch die Gibbs-Thom-

5. Dagegen wird im Zusammenhang mit dem Hauptkrümmungsfluß von Flächen eine vom Grad 1 homogene Funktion wie in (2.27b) gefordert, vergleiche Abschnitt 4.1.

son-Bedingung

$$T|_{\Gamma} = T_m \left(1 - \frac{\tilde{\gamma}_\varepsilon + \tilde{\gamma}_\varepsilon''}{l} \kappa - \frac{\tilde{\beta}_\varepsilon}{l} V \right) \quad (2.28)$$

bestimmt. Dabei ist $\varepsilon \geq 0$ der Anisotropie-Parameter, der die Stärke der Richtungsabhängigkeit der Oberflächengrößen $\tilde{\gamma}_\varepsilon$ und $\tilde{\beta}_\varepsilon$ bestimmt, wobei $\varepsilon = 0$ den isotropen, d.h. richtungsunabhängigen Fall bezeichnet. Weiter steht $\tilde{\gamma}_\varepsilon$ für die anisotrope Oberflächenspannung, $\tilde{\gamma}_\varepsilon''$ für deren zweite Ableitung bezüglich der Raumorientierung und $\tilde{\beta}_\varepsilon$ ist ein kinetischer Koeffizient.

Die obige Modellierung der Oberflächeneffekte in dem Funktional der freien Energie wird an dieser Stelle nur in einem einfachen Gleichgewichtszustand untersucht. Dieser Zustand muß isotherm sein, also ist T konstant. Weiterhin wird angenommen, daß c_v konstant und die Oberflächenspannung isotrop ist, also $\varepsilon = 0$ und damit $\tilde{\gamma}_0'' = 0$ gilt. Das läßt sich beispielsweise durch $S_\Gamma := \frac{\tilde{\gamma}_0}{2(d-1)} \|\nabla h(\Phi)\|$ modellieren, wobei d für die Raumdimension steht. Die freie Energie \mathcal{F} gemäß (2.27a) ist dann, bis auf einen nur von der Temperatur T abhängigen Anteil, gegeben durch

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(T, \Phi) &= \int_{\Omega} \frac{T-T_m}{2T_m} l h(\Phi) + \frac{\tilde{\gamma}_0}{2(d-1)} \|\nabla h(\Phi)\| dx \\ &= \frac{T-T_m}{2T_m} l \left(\int_{\Omega^+} h(\Phi) dx + \int_{\Omega^-} h(\Phi) dx \right) + \frac{\tilde{\gamma}_0}{2(d-1)} \int_{\Omega} |h'(\Phi)| \|\nabla \Phi\| dx \\ &= \frac{T-T_m}{2T_m} l \left(\int_{\Omega^+} 1 dx + \int_{\Omega^-} -1 dx \right) + \frac{\tilde{\gamma}_0}{d-1} \int_{\Omega} \delta(\Phi) \|\nabla \Phi\| dx, \end{aligned}$$

wobei wieder $h(\Phi) = \text{sign}(\Phi)$ eingesetzt wurde. Das zweite Integral gibt nach Anhang A.5 gerade die Größe der Oberfläche von Γ an. Es folgt

$$\mathcal{F}(T, \Phi) = \frac{T-T_m}{2T_m} l \left(\text{Vol}_d(\Omega^+) - \text{Vol}_d(\Omega^-) \right) + \frac{\tilde{\gamma}_0}{d-1} \text{Vol}_{d-1}(\Gamma).$$

In dem speziellen Fall eines kugelförmigen inneren Gebiets Ω^+ läßt sich die freie Energie \mathcal{F} in Abhängigkeit vom Radius r formulieren. Mit der Bezeichnung Σ_d für Oberflächengröße der d -dimensionalen Einheitskugel ist

$$\mathcal{F}(T, r) = \tilde{\gamma}_0 \frac{\Sigma_d}{d-1} r^{d-1} + \frac{T-T_m}{T_m} l \left(\frac{\Sigma_d}{d} r^d - \frac{1}{2} \text{Vol}_d(\Omega) \right).$$

Im Gleichgewichtszustand muß in (2.26) die Ableitung verschwinden, und es ist

$$0 \stackrel{!}{=} \frac{\partial}{\partial r} \mathcal{F} = \Sigma_d \tilde{\gamma}_0 r^{d-2} + l \frac{T-T_m}{T_m} \Sigma_d r^{d-1}.$$

Daraus erhalten wir die Beziehung

$$-\tilde{\gamma}_0 \frac{1}{r} = \frac{T - T_m}{T_m} l,$$

der wir insbesondere wieder die Gibbs-Thomson-Bedingung

$$T|_{\Gamma} = T_m \left(1 - \frac{\tilde{\gamma}_0}{l} \kappa \right) \quad \text{auf } \Gamma \quad (2.29)$$

entnehmen können, da die mittlere Krümmung einer Kugeloberfläche mit Radius r gerade $\kappa = 1/r$ ist.

Im Rahmen dieser Arbeit wird ein lokales thermodynamisches Gleichgewicht an der Phasengrenze angenommen, wodurch der kinetische Koeffizient $\tilde{\beta}_\varepsilon$ in (2.28) verschwindet. Für das Phasenfeld-Modell mit diffuser Grenzfläche wird z.B. in [KR98, Alm99] durch Anpassen von asymptotischen Entwicklungen die Konvergenz gegen (2.28) im Limes scharfer Grenzfläche gezeigt.

2.4 Vereinfachte dimensionslose Modellgleichungen

Mit dem Ziel der Entdimensionalisierung der Modellgleichungen werden jetzt zwei vereinfachende Festlegungen getroffen. Der Wärmefluß hänge linear vom Gradienten der Temperatur ab

$$Q(\nabla T, \Phi) = -k(\Phi) \nabla T,$$

und die spezifische Wärmekapazität habe die Form

$$c_v(\Phi) = \overline{c}_v + \hat{c}_v h(\Phi).$$

Aus der Erhaltungsgleichung (2.16) bekommen wir dann

$$(\overline{c}_v + \hat{c}_v h) \partial_t T - \operatorname{div}(k \nabla T) + (T - T_m) \partial_t (\hat{c}_v h) - \frac{1}{2} l \partial_t h = 0. \quad (2.30)$$

Da der Phasenübergang nicht augenblicklich bei Erreichen der Schmelztemperatur T_m stattfindet, liegt die Temperatur T_∞ in weiter Entfernung des betrachteten Kristalls unterhalb von T_m . Die charakteristische Größe ist die dimensionslose *Unterkühlung*

$$\mathcal{U} := \frac{\overline{c}_v}{l} (T_m - T_\infty). \quad (2.31)$$

In gleicher Weise wird die Temperatur entdimensioniert:

$$\vartheta := \frac{\overline{c}_v}{l} (T - T_\infty) = \frac{\overline{c}_v}{l} (T - T_m) + \mathcal{U}. \quad (2.32)$$

Nun wird der Diffusionskoeffizient als $D(\Phi) := \frac{k(\Phi)}{c_v}$ definiert. In der dimensionslosen Temperatur ausgedrückt und nach Division durch l , ist die Gleichung (2.30)

$$\left(1 + \frac{\widehat{c}_v}{c_v} h(\Phi)\right) \partial_t \vartheta - \operatorname{div}(D(\Phi) \nabla \vartheta) + \left[(\vartheta - \mathcal{U}) \frac{\widehat{c}_v}{c_v} - \frac{1}{2}\right] \partial_t h(\Phi) = 0, \quad (2.33)$$

wobei $T - T_m = \frac{1}{c_v}(\vartheta - \mathcal{U})$ verwendet wurde. Speziell unter der im weiteren verwendeten Annahme konstanter spezifischer Wärmekapazität, d.h. $\widehat{c}_v = 0$, gilt

$$\partial_t \vartheta - \operatorname{div}(D(\Phi) \nabla \vartheta) - \frac{1}{2} \partial_t h(\Phi) = 0. \quad (2.34)$$

Die Dichte der inneren Energie e gemäß dem Ansatz (2.14) und die daraus resultierende Dichte der freien Energie f nach (2.24) sind in den dimensionslosen Größen und mit der Definition $\vartheta_0 := \vartheta(T=0) = -\frac{\widehat{c}_v}{T} T_\infty$:

$$\frac{1}{l} e(\vartheta, \Phi) = \vartheta \left(1 + \frac{\widehat{c}_v}{c_v} h(\Phi)\right) - \frac{1}{2} h(\Phi) \quad (2.35a)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{l} f(\vartheta, \Phi) &= \left[(\vartheta - \vartheta_0) \ln \left(\frac{\vartheta - \vartheta_0}{\mathcal{U} - \vartheta_0}\right) - (\mathcal{U} - \vartheta)\right] \left(1 + \frac{\widehat{c}_v}{c_v} h(\Phi)\right) \\ &+ \frac{\vartheta - \mathcal{U}}{\mathcal{U} - \vartheta_0} \frac{h(\Phi)}{2}. \end{aligned} \quad (2.35b)$$

Das in (2.26) zu minimierende Funktional $\mathcal{F}(\vartheta, \Phi)$ kann unter der Annahme $\widehat{c}_v = 0$ vereinfacht werden, da die nur temperaturabhängigen Terme von f aus (2.35b) bei der Fréchet-Ableitung wegfallen. Damit erhalten wir inklusive der Oberflächenbeiträge S_Γ

$$\mathcal{F}(\vartheta, \Phi) = \int_\Omega S_\Gamma(\nabla \Phi) + \frac{\vartheta - \mathcal{U}}{\mathcal{U} - \vartheta_0} \frac{h(\Phi)}{2} dx. \quad (2.36)$$

Scharfe Grenzfläche

Mit Annahme einer scharfen Grenzfläche läßt sich die Gleichung (2.33) wiederum als eine Diffusionsgleichung in beiden Teilgebieten mit der Stefan-Bedingung (2.23b) auf der Grenzfläche formulieren:

$$\begin{aligned} \partial_t \vartheta &= D^\pm \Delta \vartheta && \text{in } \Omega^\pm(t), \quad t \in [0, t^*], \\ [D^\pm \vartheta]_\Gamma &= \left(1 - 2 \frac{\widehat{c}_v}{l} (\vartheta - \mathcal{U})\right) V && \text{auf } \Gamma(t), \quad t \in [0, t^*]. \end{aligned}$$

Dazu kommt noch die Gibbs-Thomson-Bedingung nach (2.29)

$$\frac{l}{c_v}(\vartheta - \mathcal{U}) = T - T_m = -\frac{T_m(\tilde{\gamma}_\varepsilon + \tilde{\gamma}_\varepsilon'')}{l}\kappa - \frac{T_m}{l}\beta_\varepsilon V \quad \text{auf } \Gamma(t).$$

Mit der Definition der *Kapillaritätslänge* als $d_\varepsilon := \frac{T_m \bar{c}_v}{l^2}(\tilde{\gamma}_\varepsilon + \tilde{\gamma}_\varepsilon'')$ und analog $\beta_\varepsilon := \frac{T_m \bar{c}_v}{l^2}\tilde{\beta}_\varepsilon$ erhalten wir in den dimensionlosen Größen

$$\vartheta|_\Gamma = \mathcal{U} - d_\varepsilon \kappa - \beta_\varepsilon V \quad \text{auf } \Gamma(t). \quad (2.37)$$

Die Oberflächenspannung bewirkt über ein lokales Absenken der Schmelztemperatur eine Verringerung der lokalen Temperaturanstiege und damit eine Verlangsamung des Wachstums. Eine anisotrope Oberflächenspannung muß diesen Effekt in den Vorzugsrichtungen abschwächen. Als einfache Modellierung von Anisotropie mit 4-facher Symmetrie wird oftmals

$$d_\varepsilon := d_0 A_\varepsilon(\alpha) := d_0(1 - \varepsilon \cos(4\alpha)) \quad (2.38)$$

gewählt, wobei α der Winkel zwischen der Oberflächen-Normale und einer vorgegebenen Richtung ist.

Vereinfachend werden jetzt noch die Annahme $c_v^+ = c_v^-$, $k^+ = k^-$, und damit $D^+ = D^-$, sowie $\beta_\varepsilon = 0$ getroffen. Zur Beschreibung eines wachsenden dendritischen Kristalls wird nun ein Lösungspaar (ϑ, Γ) von

$$\vartheta_t = D\Delta\vartheta \quad \text{in } \Omega \setminus \Gamma(t) = \Omega^-(t) \cup \Omega^+(t), \quad t \in [0, t^*], \quad (2.39a)$$

$$D[\partial_n \vartheta]_\Gamma = V \quad \text{auf } \Gamma(t), \quad t \in [0, t^*], \quad (2.39b)$$

$$\vartheta|_\Gamma = \mathcal{U} - d_\varepsilon \kappa \quad \text{auf } \Gamma(t), \quad t \in [0, t^*] \quad (2.39c)$$

mit geeigneten Anfangsbedingungen und Vorgaben an das Verhalten der Temperatur im Fernfeld des Kristalls gesucht. Die Größen V und κ sowie n und d_ε sind dabei keine unabhängigen Variablen, sondern durch die Grenzfläche Γ bestimmt.

2.5 Mathematische Lösungstheorie und Grenzflächenstabilität

Das Lösen von (2.39) stellt mathematisch ein Problem vom Stefan-Typ dar. Neben einem solchen *zweiphasigen Stefan-Problem* spielt in anderen Zusammenhängen auch das *einphasige Stefan-Problem* eine Rolle, das schon auf einem der Teilgebiete, z.B. Ω^- , vollständig formuliert werden kann, da auf dem anderen Teilgebiet die Diffusion vernachlässigt wird. Das *klassische Stefan-Problem* besitzt keine geometrischen Einflüsse in der Randbedingung (2.39c), sondern statt

dessen wird dort eine konstante Grenzflächentemperatur vorgeschrieben. Das durch (2.39) gegebene Problem wird im Gegensatz dazu genauer als *modifiziertes Stefan-Problem* mit Gibbs-Thomson-Bedingung bezeichnet. Dabei wurde für (2.39) vereinfachend von einem symmetrischen Modell mit gleichen Koeffizienten in beiden Teilgebieten ausgegangen, bei dem es weiterhin keine *kinetische Unterkühlung* durch einen Term βV in (2.39c) gibt.

Überblicke über die mathematische Lösungstheorie des Stefan-Problems sind beispielsweise in [Mei92, EPS03] zu finden. Demnach besitzt das klassische Stefan-Problem eine eindeutige, globale verallgemeinerte Lösung, und unter weiteren Bedingungen lassen sich klassische Lösung erhalten.

Für das modifizierte Stefan-Problem mit Gibbs-Thomson-Bedingung wurde die Existenz verallgemeinerter Lösungen nachgewiesen [Luc90], die allerdings mehrdeutig sind. Für kleine Zeitintervalle gibt es verschiedene Nachweise der Existenz eindeutiger klassischer Lösungen [Rad91, Sch02, EPS03]. Daneben sichert [EPS03] für ein vorgegebenes festes Zeitintervall die Existenz und Eindeutigkeit klassischer – sogar analytischer – Lösungen. Allerdings muß dabei von entsprechend kleinen Anfangswerten, d.h. sowohl kleiner Temperatur als auch kleiner Krümmung der Grenzfläche, ausgegangen werden.

Grenzflächenstabilität und Seitenarme

Zur Untersuchung der Stabilität der Phasengrenze wird eine ebene Grenzfläche mit infinitesimalen sinusförmigen Auslenkungen gestört. Es zeigt sich [MS63], daß langwellige Störungen, d.h. solche mit einer Wellenlänge λ oberhalb von

$$\lambda_{MS} = 2\pi\sqrt{d_0L},$$

durch ein von (2.39) bestimmtes System verstärkt werden, was als *Mullins-Sekerka-Instabilität* bezeichnet wird. Die feinwelligen Störungen werden dagegen aufgrund der Oberflächenspannung gedämpft. Ohne Berücksichtigung der Oberflächenspannung wirken alle Störungen instabil.

Die vielfachen Verzweigungen dendritischer Kristalle in einige Hauptarme mit vielen Seitenarmen lassen sich mit einer selektiven Verstärkung von Störungen durch diese Instabilität erklären. In [Lan87, BT95] wird thermisches Rauschen als Ursache der Störungen untersucht und das Wachstum der Amplitude von Seitenarmen theoretisch vorhergesagt. Daraus läßt sich als besser meßbare Größe der Abstand D_1 von der Spitze eines Hauptarms bis zum ersten wesentlichen Seitenarm ableiten. Dieser Abstand D_1 hat sich experimentell als eine charakteristische Größe dendritischer Kristalle herausgestellt [BB96, CKL⁺99] und liegt dabei in einer mit [BT95] verträglichen Größenordnung.

Kapitel 3

Stationärer Nadelkristall

Trotz der prinzipiellen Instabilität der Grenzfläche ist das dendritische Wachstum kein völlig beliebiger Prozeß, sondern es werden experimentell Dendriten vorhersagbarer Struktur, d.h. mit parabelförmiger Spitze der Hauptarme und jeweils einem bestimmten Abstand der Spitze zu den ersten Seitenarmen, beobachtet. Die Entstehung der Seitenarme wird mit einer Verstärkung von Störungen des Nadelkristalls durch die Oberflächeninstabilität erklärt.¹ Dabei gibt es zwei Ansätze für die Ursache der Störungen:

1. Thermisches Rauschen, dies wird in [Lan87, BT95] theoretisch analysiert und durch experimentelle Arbeiten [BB96] sowie numerische Simulation mit der Phasenfeld-Methode [KR99] unterstützt.
2. Oszillationen in der Geschwindigkeit der Kristallspitze, wofür in [L⁺02] ein erster experimenteller Hinweis gefunden wurde.

Für die theoretische Beschreibung kann oft von vernachlässigbaren Störungen ausgegangen und eine solche Dendritenspitze zu einem unendlich ausgedehnten parabelförmigen Kristall ohne Seitenarme abstrahiert bzw. fortgesetzt werden. Dieser wird als *Nadelkristall* bezeichnet.

Charakteristische Größen eines dendritischen Kristalls bzw. eines Nadelkristalls sind Krümmungsradius R und Wachstumsgeschwindigkeit V_{tip} der Kristallspitze. Diese sind gemäß experimentellen Beobachtungen reproduzierbar und daher durch die Materialeigenschaften und die Unterkühlung \mathcal{U} eindeutig festgelegt. Die Selektion bestimmter Kristalle gilt als weitgehend theoretisch verstanden. Dabei wird in der Anisotropie der Oberflächenspannung die dafür bestimmende Größe gesehen.

Die Verifikation der theoretischen Selektions-Vorausagen ist schwierig. Insbesondere kann ein Materialparameter wie die Anisotropie ϵ im Experiment

1. Alternativ gibt es eine selbstähnliche globale Wellenbeschreibung der Grenzfläche, die von Anfang an die Seitenarme enthält [XY99]. Diese Theorie ist aber umstritten.

nicht beliebig variiert werden, und der Vergleich verschiedener Materialien birgt große Unsicherheiten bei der Interpretation von experimentellen Daten. Um die Gültigkeit der Selektionstheorie für einen Nadelkristall zu bestätigen, sind deshalb methodisch unabhängige analytische Zugänge und numerische Simulationen wichtig und werden in diesem Kapitel untersucht.

In diesem Kapitel wird die zweidimensionale dendritische Platte untersucht. Bei Annahme eines rotationssymmetrischen dreidimensionalen Kristalls träte ein zusätzlicher Term in den Differentialgleichungen auf. Für die korrekte Beschreibung dreidimensionaler Dendriten ist aber die Abweichung von der Rotationssymmetrie wichtig.

3.1 Stationäres Problem

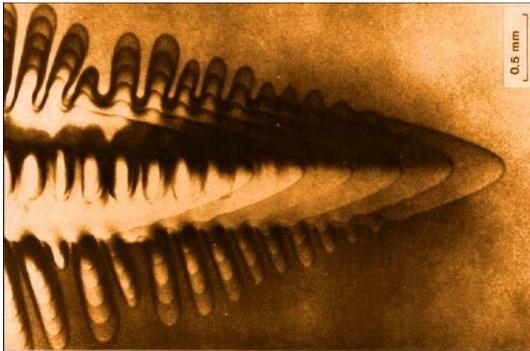


Abbildung 3.1: Mehrfachbelichtung eines wachsenden Kristalls [GM93].

Abbildung 3.1 zeigt in einer Überlagerung von Momentaufnahmen das typische Wachstumsverhalten eines dendritischen Kristalls. Dabei behält die Kristallspitze während sie sich in Wachstumsrichtung bewegt ihre Parabelform bei. Die Seitenarme wachsen entlang ihrer eigenen, unbewegten Achsen.

Innerhalb eines gewissen mitbewegten Beobachtungsfensters dagegen erscheint die wachsende Kristallspitze unverändert, wie in Abbildung 3.2 skizziert ist. Alle zeitabhängig veränderlichen Vorgänge finden außerhalb dieses Fensters statt und haben nur vernachlässigbaren Einfluß auf die Vorgänge innerhalb des Fensters oder wirken nur in stationärer Weise auf das Innere. Sie können daher durch eine *stationäre Ersatzbeschreibung* berücksichtigt werden. Beispielsweise durch eine geeignete Fortsetzung der Kristallspitze ohne Seitenarme, den Nadelkristall.

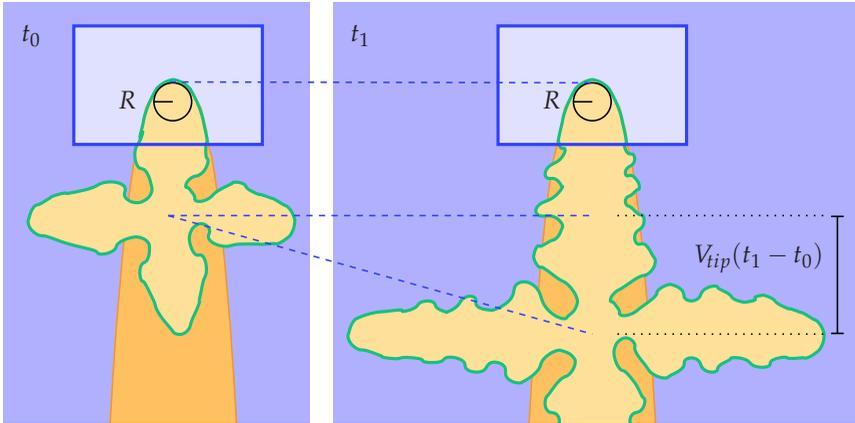


Abbildung 3.2: Dendritisches Wachstum mit stationärer Kristallspitze und die Idealisierung zu einem parabelförmigen Nadelkristall.

In einem (\tilde{x}, \tilde{y}) -Koordinatensystem bewege sich die Kristallspitze mit der Geschwindigkeit V_{tip} in positive y -Richtung. In dem *mitbewegten Koordinatensystem* mit $x := \tilde{x}$ und $y := \tilde{y} - V_{tip} t$ ist das Temperaturfeld dann

$$\vartheta(t, x, y) = \vartheta(t, \tilde{x}, \tilde{y} - V_{tip} t) := \tilde{\vartheta}(t, \tilde{x}, \tilde{y}).$$

Die Annahme einer stationären Bewegung zieht das Verschwinden der Zeitableitung nach sich, d.h. $\vartheta_t = 0$.² Aus der Diffusionsgleichung (2.39a), wenn sie in $\tilde{\vartheta}$ aufgeschrieben wurde, folgt so

$$0 = D\Delta\tilde{\vartheta} + V_{tip}\partial_y\tilde{\vartheta}. \tag{3.1}$$

Diese Differentialgleichung wird im wesentlichen durch die *Diffusionslänge* $L := \frac{2D}{V_{tip}}$ bestimmt. Im weiteren Verlauf wird noch eine räumliche Skalierung zweckmäßig sein, durch die der Spitzenradius auf 1 normiert wird. Dazu werden die Koordinaten $(x, y) := \frac{1}{R}(\tilde{x}, \tilde{y})$ definiert, wodurch ein Faktor $\frac{1}{R}$ in den Differentialgleichungen zu jeder Ableitung, d.h. bei höheren Ableitungen entsprechend der Ordnung mehrfach, und in der Gibbs-Thomson-Beziehung der Krümmung hinzugefügt wird. Zur Vereinfachung der Modellgleichungen lassen sich noch

2. Alternativ kann auch ein Ansatz für eine *selbstähnliche Lösung* gemacht werden. Dann ist $\vartheta(x, y) := \tilde{\vartheta}(x, y - V_{tip}t)$. Diese Argumentation führt auf dieselbe Gleichung (3.1). Weil die Phasengrenze so zu jedem Zeitpunkt durch entsprechende Verschiebung der Ausgangsgestalt gegeben ist, muß der Kristall notwendig als einseitig unbeschränkt vorausgesetzt werden.

die *Péclet-Zahl* p und ein *Selektionsparameter* σ einführen, die üblicherweise als

$$p := \frac{V_{ip}R}{2D}, \quad \sigma := \frac{d_0}{pR} \quad (3.2)$$

definiert werden. Dabei ist d_0 der Koeffizient aus der Festlegung der Kapillari-
tätslänge als $d_\varepsilon = d_0 A_\varepsilon$ in (2.38). Wir erhalten somit als mathematisches Modell
für einen Nadelkristall mit gleichbleibender Oberflächengestalt das stationäre
Randwertproblem für die Temperatur ϑ :

$$0 = \Delta\vartheta + 2p\partial_y\vartheta \quad \text{in } \Omega \setminus \Gamma, \quad (3.3a)$$

$$[\partial_n\vartheta]_\Gamma = 2p \langle e_y, n \rangle \quad \text{auf } \Gamma, \quad (3.3b)$$

$$\vartheta|_\Gamma = \mathcal{U} - p\sigma A_\varepsilon \kappa \quad \text{auf } \Gamma \quad (3.3c)$$

und Abklingbedingung an ϑ oder Vorgabe von ϑ auf $\partial\Omega$.

Neben \mathcal{U} und der Materialgröße ε enthält das Modell nur noch die Parameter
 p und σ , aus denen eindeutig der Zustand eines stationär wachsenden Kristalls
bestimmt werden kann:

$$R(p, \sigma) = \frac{d_0}{p\sigma}, \quad V_{ip}(p, \sigma) = \frac{2D}{d_0} p^2 \sigma. \quad (3.4)$$

3.2 Die Ivantsov-Lösung

Wir gehen jetzt von einem *parabelförmigen* Nadelkristall aus. Durch die Wahl
einer bestimmten vorgegebenen Grenzflächenform reduziert sich das nichtlineare
Stefan-Problem mit freier Grenzfläche auf ein lineares Problem.

Mit *Randangepaßten Koordinaten*, den Parabelkoordinaten (ξ, η) aus (A.3),
wird die Phasengrenze durch die Koordinatenfläche $\eta = 1$ beschrieben. Die
partielle Differentialgleichung und die Randbedingungen auf Γ sind dann laut
(A.13) und (A.17) aus dem Anhang A.2 konkret

$$0 = 2\xi\partial_\xi^2\vartheta + (1 - 2p\xi)\partial_\xi\vartheta + 2\eta\partial_\eta^2\vartheta + (1 + 2p\eta)\partial_\eta\vartheta \quad \text{in } \Omega \setminus \Gamma, \quad (3.5a)$$

$$[\partial_{e_\eta}\vartheta(\xi, 1)]_\Gamma = p \quad \text{auf } \Gamma, \quad (3.5b)$$

$$\vartheta(\xi, 1)|_\Gamma = \mathcal{U} - p\sigma \left(\frac{1}{(1 + \xi)^{3/2}} - \varepsilon \frac{\xi^2 - 6\xi + 1}{(1 + \xi)^{7/2}} \right) \quad \text{auf } \Gamma \quad (3.5c)$$

und Abklingbedingung oder Vorgabe auf $\partial\Omega$.

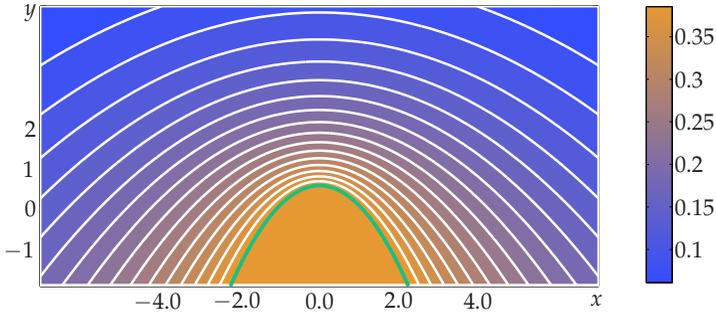


Abbildung 3.3: Ivantsov-Lösung für einen isothermen parabelförmigen Nadelkristall bei $p=0.1$, d.h. $\mathcal{U} \approx 0.405565$. Phasengrenze Γ ist grün hervorgehoben.

Wir suchen jetzt eine globale analytische Lösung für einen Nadelkristall. Dies gelingt mit der Ivantsov-Lösung [Iva47] allerdings nur für ein vereinfachtes Modell, bei dem die *Oberflächeneffekte vernachlässigt* werden. Nachdem in der Gibbs-Thomson-Beziehung (3.5c) der krümmungsabhängige Term weggelassen worden ist, sind die Randbedingungen, und damit auch die Lösung, unabhängig von ξ . Es bleibt lediglich das Problem

$$2\eta\vartheta_0''(\eta) + (1+2p)\vartheta_0'(\eta) = 0 \quad \text{für } 1 \neq \eta \in \mathbb{R}_+, \quad (3.6a)$$

$$[\vartheta_0'(1)]_\Gamma = p, \quad \vartheta_0(1)|_\Gamma = \mathcal{U} \quad (3.6b)$$

mit einer gewöhnlichen Differentialgleichung übrig. Die analytische Lösung ist, wie im Anhang A.2 gezeigt wird, die *Ivantsov-Lösung*

$$\vartheta_0(\eta) := e^p \sqrt{p\pi} \begin{cases} \operatorname{erfc}(\sqrt{p}) & \text{für } \eta \leq 1, \\ \operatorname{erfc}(\sqrt{p\eta}) & \text{für } \eta \geq 1. \end{cases} \quad (3.7)$$

Die Gibbs-Thomson-Beziehung liefert den Zusammenhang

$$\mathcal{U} = \vartheta_0(1) = e^p \sqrt{p\pi} \operatorname{erfc}(\sqrt{p}), \quad (3.8)$$

aus dem durch Auflösen der Gleichung eine Abhängigkeit der Form $p = p(\mathcal{U})$ folgt. Mit der Péclet-Zahl ist allerdings nur das Produkt von R und V_{tip} festgelegt. Weil der σ -abhängige Term, und damit die auf die Kristalloberfläche bezogene Längenskala d_ε , bei der Vereinfachung des Modells weggelassen wurde, kann der genaue Wachstumszustand des Nadelkristalls nicht gemäß (3.4) bestimmt werden. Eine Verallgemeinerung auf isotherme elliptische Paraboloiden führt zu

einer Korrektur der Unterkühlungs-Péclet-Zahl-Beziehung, abhängig vom Verhältnis der Längen der Hauptachsen [HC61]. Es bleibt aber die gleiche Unbestimmtheit des stationären Zustands bestehen.

3.3 Überblick über die Selektionstheorie

Zur Festlegung des stationären Wachstumszustandes (R, V_{tip}) sind die Einbeziehung von Oberflächeneffekten und physikalischer Prinzipien nötig. Überblicke über die Entwicklung der Theorie zur Selektion von Dendriten und numerische Verfahren zu deren Verifikation sind beispielsweise in [GM93, BB96, JT96] zu finden. Einige Aspekte werden im folgenden beschrieben, um einen Hintergrund für die Abschnitte 3.4 und 3.5 zu liefern.

Eine um Kapillaritäts-Effekte korrigierte Oberflächentemperatur führt im Rahmen einer Separationslösung [GS67, Tri70] oder in der selbstkonsistenten Form von Nash und Glicksmann [NG74] zu einer Beziehung $V_{tip} = V_{tip}(R)$. Die Hypothese maximaler Geschwindigkeit, d.h. der am schnellsten wachsende Dendrit verdränge die anderen, eröffnet so die Möglichkeit einer Selektionsaussage. Derartige Vorhersagen wurden aber experimentell widerlegt, siehe [GM93].

Vielmehr scheint demnach das dynamische Verhalten der Dendriten für die Selektion entscheidend zu sein, unter anderem z.B. die Stabilität der Grenzflächengestalt gegenüber Störungen. Oberflächeneffekte erlauben aufgrund einer Lösbarkeitsbedingung, der *Microscopic-Solvability-Condition* (MSC), nicht mehr beliebige Kombinationen aus R und V_{tip} , sondern nur noch eine diskrete Menge [BM91]. Eine Stabilitätsanalyse läßt davon genau eine zu und legt so den Selektionsparameter fest:³

$$\sigma = \sigma^* := \frac{1}{\lambda_0} \varepsilon^{\frac{7}{4}}, \quad (3.9)$$

mit einem numerisch bestimmten Eigenwert $\lambda_0 \approx 0.42$. Die Diskrepanzen zwischen diesen Vorhersagen und experimentellen Messungen ließen sich im wesentlichen auf den Einfluß der durch die Gravitation verursachten Strömung in der flüssigen Phase zurückführen. Bei Experimenten unter Mikrogravitationsbedingungen im Weltraum konnte diese Störung im wesentlichen beseitigt werden, trotzdem blieben gerade bei kleinen Unterkühlungen noch Differenzen zwischen Messungen und den theoretischen Aussagen [GKW94, L⁺99].

Zum Auflösen dieser Unstimmigkeiten sind einige Annahmen der Selektionstheorie in Frage zu stellen. Beispielsweise ist in Experimenten der beobach-

3. Eine gleiche Festlegung des Selektionsparameters wie (3.9) gab es schon vorher mit der *Hypothese marginaler Stabilität*, d.h. die ausgewählte Dendritenform befinde sich an der Grenze zwischen stabilen und instabilen Grenzflächenformen [LM78].

tete Selektionsparameter σ^* aus 3.9 bei geringer Unterkühlung nicht mehr konstant [GKW94]. Anstelle von \mathcal{U} wird oft die Péclet-Zahl p als freier Parameter benutzt, auch wenn sie außer im Fall der isothermen Ivantsov-Parabel nicht allein aus der Unterkühlung festgelegt ist und nicht klar ist, wie sie dann aus den Parametern berechnet wird. Einige Experimente legen nahe, in drei Dimensionen anstatt der Parabelform oder von Approximationen 4. Ordnung eher einen Verlauf der Phasengrenze gemäß $y \sim |x|^\beta$ mit einem $\beta = 1.67$ anzunehmen [BB96]. Im Experiment ist immer thermisches Rauschen vorhanden, das ein Wachstum reiner Nadelkristalle ausschließt. Nach einer anfänglichen transienten Phase wird eine weitgehend konstante Wachstumsgeschwindigkeit erreicht [LKG99]. Dann sind aber auch schon die Seitenarme entwickelt, und diese haben nach [L⁺99] Einfluß bis zur Kristallspitze.

3.3.1 Selektionstheorie MSC

Als Ausgangspunkt wird hier zuerst die selbstkonsistente Form nach Nash und Glicksman [NG74] hergeleitet. Das mathematische Modell (2.39) läßt sich so umformulieren, daß die Stefan-Randbedingung durch einen distributionellen Quellterm in der partiellen Differentialgleichung ersetzt wird. Es bezeichne δ_Γ das singuläre Längenmaß bezüglich der Grenzfläche Γ .⁴ Wie in Abschnitt 2.4 erhalten wir

$$\vartheta_t = D\Delta\vartheta - V\delta_\Gamma \quad \text{in } [0, t^*] \times \Omega, \quad (3.10a)$$

$$\vartheta|_\Gamma = \mathcal{U} - d_\varepsilon\kappa \quad \text{auf } \Gamma(t), \quad t \in [0, t^*]. \quad (3.10b)$$

Im Fall einer selbstähnlichen Lösung, d.h. stationären Wachstums, wird aus den Modellgleichungen (3.3) ganz analog

$$0 = \Delta\vartheta + 2p\partial_y\vartheta - 2p\langle e_y, n \rangle \delta_\Gamma \quad \text{in } \Omega, \quad (3.11a)$$

$$\vartheta|_\Gamma = \mathcal{U} - p\sigma A_\varepsilon\kappa \quad \text{auf } \Gamma. \quad (3.11b)$$

Eine spezielle Lösung der inhomogenen Gleichung (3.11a) erhalten wir aus dem Faltungsintegral des Quellterms mit der Fundamentallösung G der Gleichung⁵

$$\begin{aligned} \vartheta(x, y) &= \iint_{(\xi, \eta) \in \Omega} G(x - \xi, y - \eta) 2p \langle e_y, n \rangle \delta_\Gamma(\xi, \eta) d\xi d\eta \\ &= \int_\Gamma G(x - \xi, y - \eta) 2p \langle e_y, n \rangle d\Gamma \quad \text{für } (x, y) \in \Omega. \end{aligned} \quad (3.12)$$

4. Zur Berechnung kann diese durch $\delta_\Gamma(x) = \delta(d_\Gamma(x))$ auf die Anwendung der eindimensionalen Diracsche δ -Distribution auf die vorzeichenbehaftete Abstandsfunktion d_Γ bzgl. der Fläche Γ zurückgeführt werden, wobei $\|\nabla d_\Gamma\| = 1$ gilt.

5. Die Funktion G wird auch als Greensche Funktion der Gleichung für den gesamten Raum, hier \mathbb{R}^2 , bezeichnet. Analog erhalten wir eine Lösung von (3.10a) mittels des Duhamelschen Prinzips aus einer Faltung des Quellterms mit der Fundamentallösung der Wärmeleitungs-Gleichung.

Die Fundamentallösung G für den Operator $\Delta + 2p\partial_y$ ist Anhang A.4

$$G(x, y) = \frac{1}{2\pi} e^{-py} K_0(p \|(x, y)\|), \quad (3.13)$$

wobei K_0 die modifizierte Bessel-Funktion 0-ter Ordnung ist. In (3.12) kann auf der Phasengrenze $\Gamma(t)$ die Gibbs-Thomson-Randbedingung (3.11b) eingesetzt werden. Damit erhalten wir die selbstkonsistente, aber implizite Beschreibung des Problems, aus der das Temperaturfeld völlig eliminiert wurde:

$$\mathcal{U} - p\sigma A_\varepsilon \kappa = 2p \int_\Gamma G(x - \xi, y - \eta) \langle e_y, n \rangle d\Gamma \quad \text{für } (x, y) \in \Gamma. \quad (3.14)$$

Nun wird angenommen, daß auch bei Einfluß von Oberflächeneffekten die Abweichung der Phasengrenze von der Parabelform gering ist und es damit immer noch eine globale Parametrisierung der Grenzfläche als *Graph einer Funktion* gibt. Es sei

$$\gamma(x) := \gamma_0(x) + \gamma_\varepsilon(x) \quad \text{und} \quad \Gamma = \{(x, \gamma(x)) \mid x \in \mathbb{R}\}, \quad (3.15)$$

wobei $\gamma_0(x) = -x^2/2$ die Parametrisierung der Ivantsov-Parabel ist und γ_ε eine kleine Störung darstellt. Durch Einsetzen der Parametrisierung von Γ wird das Integral in (3.14) unabhängig von Störungen stets auf das gleiches Parameterintervall bezogen und es ist

$$\mathcal{U} - p\sigma A_\varepsilon \kappa = 2p \int_{\xi \in \mathbb{R}} G(x - \xi, y - \gamma(\xi)) d\xi \quad \text{für } x \in \mathbb{R}. \quad (3.16)$$

Die Ivantsov-Lösung (3.7) erfüllt diese Gleichung, hier speziell mit der konstanten linken Seite \mathcal{U} . Die Differenz von (3.16) mit dieser Gleichung für den ungestörten Fall führt auf

$$-A_\varepsilon \sigma \kappa = 2 \int_{\xi \in \mathbb{R}} G(x - \xi, \gamma(x) - \gamma(\xi)) - G(x - \xi, \gamma_0(x) - \gamma_0(\xi)) d\xi. \quad (3.17)$$

Auf der linken Seite kann die Krümmung in Abhängigkeit von x und $\gamma_\varepsilon(x)$ ausgedrückt werden. Auf der rechten Seite werden im Rahmen der Selektionstheorie Näherungen und Asymptotiken für verschwindende Péclet-Zahl $p \ll 1$ benutzt. Im nachhinein werden die resultierenden Aussagen auch wieder für größere Péclet-Zahlen gerechtfertigt, solange $p\sqrt{\varepsilon} \ll 1$ ist. Details der folgenden Rechnungen sind [BM91, Ih96, Kas96] zu entnehmen und werden auch teilweise in Anhang A.4 aufgeführt. Wir erhalten insgesamt aus (3.17)

$$A_\varepsilon \sigma \frac{\gamma_\varepsilon''(x) - 1}{(1 + (\gamma_\varepsilon' - x)^2)^{\frac{3}{2}}} = \frac{1}{2\pi} \int_{\xi \in \mathbb{R}} \frac{(\gamma_\varepsilon(x) - \gamma_\varepsilon(\xi))(x + \xi)}{(x - \xi) \left(1 + \frac{1}{4}(x + \xi)^2\right)} d\xi.$$

Um das Integral auf der rechten Seite zu lösen, wird ein Ansatz $\gamma_\varepsilon := \gamma_\varepsilon^+ + \gamma_\varepsilon^-$ gemacht, wobei γ_ε^\pm die in der oberen bzw. in der unteren Halbebene holomorphe Fortsetzung der Funktionen γ_ε sei. Mit Hilfe des Residuensatzes folgt

$$A_\varepsilon \sigma \frac{\gamma_\varepsilon''(x) - 1}{(1 + (\gamma_\varepsilon' - x)^2)^{\frac{3}{2}}} = \frac{i}{1 + x^2} \left(\left[(x + i)\gamma_\varepsilon^+(-x + 2i) + (x - i)\gamma_\varepsilon^-(x) \right] - \left[(x + i)\gamma_\varepsilon^+(x) + (x - i)\gamma_\varepsilon^-(-x - 2i) \right] \right). \quad (3.18)$$

Von hier aus können nun zwei Richtungen weiterverfolgt werden:

Als erstes können auf der linken Seite von (3.18) die Anisotropie von A_ε und alle Ableitungen von γ_ε vernachlässigt werden. Nach Multiplikation der Gleichung mit $-i(1 + x^2)$ besitzt der links verbleibende Term ebenfalls eine Darstellung aus jeweils in der oberen bzw. unteren Halbebene holomorphen Fortsetzungen der Form

$$\sigma i(1 + x^2)^{-\frac{1}{2}} = \sigma \Phi^+(x) + \sigma \Phi^-(x).$$

Durch Indexverschiebungen erhalten wir eine Reihendarstellung der Formkorrektur als

$$\gamma_\varepsilon(x) = 2\sigma \sum_{k=0}^{\infty} \Re \left(\frac{\Phi^-(x - i4k)}{x - i4k} + \frac{\Phi^+(-x + i4k + 2i)}{-x + i4k + 3i} \right), \quad (3.19)$$

mit dem wichtigen Ergebnis, daß der Korrekturterm sich proportional zu σ verhält. In der Nähe der Kristallspitze läßt sich die Formkorrektur durch einen Term 4. Ordnung in der Parametrisierung der Phasengrenze approximieren.

Als zweites lassen sich mit der vollständigen rechten Seite von (3.18) notwendige Lösbarkeitsbedingungen suchen. Dafür werden die Variablen um die singuläre Stelle $x = i$ reskaliert und für diese Transformation unter Verwendung weiterer Näherungen eine Differentialgleichung aufgestellt. Die daraus erhaltenen Lösungen müssen dann Anpassungsbedingungen an die oben gefundene erfüllen. Unter Vernachlässigung der Anisotropie ist das nicht möglich und mit deren Einbeziehung gibt es eine diskrete Menge von Lösungen, verbunden mit Eigenwerten $\lambda_j = \varepsilon^{\frac{7}{4}}/\sigma, j \in \mathbb{N}_0$. Durch eine Stabilitätsanalyse läßt sich der Eigenwert λ_0 als einzig zulässiger auswählen und damit die Selektion der Dendriten festlegen.

3.3.2 Eingeprägte Strömung

Eine Strömung in der flüssigen Phase in Ω^- wird allgemein durch die inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen modelliert. Es sei Ω^- ein unendliches Außengebiet, in dem sich für große y die Strömung asymptotisch einem konstanten

Strömungsfeld in negative e_y -Richtung annähere. Auf der Grenzfläche Γ zum ruhenden Festkörper sind Haft-Randbedingungen zu stellen.⁶ Für das Geschwindigkeitsfeld u der Strömung und den Druck P bedeutet dies:

$$u_t + (\nabla u)u - \nu \Delta u = -\frac{1}{\rho} \nabla P \quad \text{in } [0, t^*] \times \Omega^-(t), \quad (3.20a)$$

$$\operatorname{div} u = 0 \quad \text{in } [0, t^*] \times \Omega^-(t), \quad (3.20b)$$

$$u|_{\Gamma(t)} = 0, \quad \lim_{y \rightarrow \infty} u = -u_\infty e_y \quad \text{für } t \in [0, t^*]. \quad (3.20c)$$

Analytische Ergebnisse erfordern wieder eine Reihe vereinfachender Annahmen. Anstatt des weit komplexeren Falls freier, durch Dichteunterschiede getriebener Konvektion wird zur Vereinfachung von einer *eingepprägten* Strömung ausgegangen, um die Auswirkung auf Selektionsaussagen aus Abschnitt 3.3.1 zu untersuchen. In der Arbeit [BP89], die eine wichtig Referenz in der Literatur darstellt, beispielsweise für [TA00, TBKL01, UMK03], wird von einem stationär wachsenden, parabelförmigen Nadelkristall ausgegangen. Die Abweichung von der Parabelform wird vernachlässigt und die Oseen-Näherung für die Strömung u verwendet, siehe auch Anhang A.3. Wenn das mit der Kristallspitze mitbewegte Koordinatensystem in dem Strömungsfeld mitberücksichtigt wird, ist in der Differentialgleichung (3.1) für die Temperatur ϑ der Advektionsterm $+2p\partial_y\vartheta$ durch $-\langle \nabla\vartheta, u \rangle$ zu ersetzen. Bei der Reskalierung auf Spitzenradius 1 ist zu beachten, daß die Geschwindigkeit u ebenfalls auf die Größe von R bezogen wird. Damit lautet Gleichung (3.3a) nun

$$0 = \Delta\vartheta - 2\frac{R}{2D} \langle \nabla\vartheta, uR \rangle.$$

Bei Übergang zu Parabelkoordinaten ist der Advektionsterm

$$-2\frac{R}{2D} \langle \nabla\vartheta, uR \rangle = -2\frac{R}{2D} \frac{1}{\sqrt{\xi} + \eta} \left(\sqrt{\xi} \langle uR, e_\xi \rangle \frac{\partial}{\partial \xi} \vartheta + \sqrt{\eta} \langle uR, e_\eta \rangle \frac{\partial}{\partial \eta} \vartheta \right).$$

Eine Separationslösung mit einem Produktansatz für die Temperatur ϑ kann es nur geben, wenn die Komponenten von u bezüglich der Parabelkoordinaten gewisse Bedingungen erfüllen. Bei dem speziellen Separationsansatz

$$u(\xi, \eta) := \frac{u_\infty}{R} \left(\frac{\sqrt{\eta} X_u(\xi) Y'_u(\eta)}{\sqrt{\xi} + \eta} e_\xi - \frac{\sqrt{\xi} X'_u(\xi) Y_u(\eta)}{\sqrt{\xi} + \eta} e_\eta \right), \quad (3.21)$$

6. In dem mit der Kristallspitze mitbewegten Koordinatensystem entspricht das einer nichtverschwindenden Vorgabe für die Geschwindigkeit auf der Grenzfläche, siehe A.23c.

der nach (A.11) besonders einfach die Divergenzfreiheit sicherstellt, ist dann der entsprechende, in (3.5a) einzufügende, Advektionsterm

$$-2p_u \left(\sqrt{\xi} \eta X_u Y_u' \frac{\partial}{\partial \xi} \vartheta - \sqrt{\xi} \eta X_u' Y_u \frac{\partial}{\partial \eta} \vartheta \right),$$

wobei $p_u := \frac{Ru_\infty}{2D}$ die Péclet-Zahl bezüglich der Strömung ist. Für eine Separation der Temperaturgleichung mit diesem Advektionsterm muß dann sowohl $\sqrt{\eta} Y_u'(\eta)$ unabhängig von η als auch $\sqrt{\xi} X_u'(\xi)$ unabhängig von ξ sein.

Bei Annahme einer von ξ unabhängigen Lösung ϑ analog zu Abschnitt 3.2, und damit isothermen Randbedingungen auf Γ , ist nur die zweite Bedingung zu erfüllen. Dazu wird $X_u(\xi) = \sqrt{\xi}$ gewählt. Die verbleibende gewöhnliche Differentialgleichung ist dann analog zu (3.6) und (A.18)

$$0 = 2\eta \vartheta_{0,\mu}'(\eta) + (1 + p_u \sqrt{\eta} Y_u(\eta)) \vartheta_{0,\mu}'(\eta). \quad (3.22)$$

Diese lineare gewöhnliche Differentialgleichung erster Ordnung in $\vartheta_{0,\mu}'$ besitzt zusammen mit der Stefan-Bedingung (3.5b) die Lösung

$$\vartheta_{0,\mu}'(\eta) = -p e^{-\int_1^\eta \frac{1}{2s} + p_u \frac{Y_u(s)}{2\sqrt{s}} ds} = \frac{p}{\sqrt{\eta}} e^{-p_u \int_1^\eta \frac{Y_u(s)}{2\sqrt{s}} ds}.$$

Nach der Integration dieser Beziehung erhalten wir wegen des erforderlichen Abklingens von $\vartheta_{0,\mu}$ für $\eta \rightarrow \infty$

$$\vartheta_{0,\mu}(\eta) = p \int_\eta^\infty \frac{1}{\sqrt{\tau}} e^{-p_u \int_1^\tau \frac{Y_u(s)}{2\sqrt{s}} ds} d\tau.$$

Ein spezieller Lösungsansatz gemäß [BP89] für eine Oseensche Strömung, mit $Y_u(\eta) := 2(1 + V_{tip}/u_\infty)\sqrt{\eta} - 2g(\eta)$ und einer Funktion g gemäß (A.27), führt auf

$$\vartheta_{0,\mu}(\eta) = p e^{p+p_u} \int_\eta^\infty \frac{1}{\sqrt{\tau}} e^{-(p+p_u)\tau + p_u \int_1^\tau \frac{g(s)}{\sqrt{s}} ds} d\tau. \quad (3.23)$$

Daraus ist für $\eta = 1$ analog zu (3.8) ein Zusammenhang $\mathcal{U} = \mathcal{U}(p, p_u)$ gegeben, der sich bei Auflösen nach p wie eine strömungsbedingte Modifikation der auf den Kristall bezogenen Péclet-Zahl auswirkt:

$$\mathcal{U} = p e^{p+p_u} \int_1^\infty \frac{1}{\sqrt{\tau}} e^{-(p+p_u)\tau + p_u \int_1^\tau \frac{g(s)}{\sqrt{s}} ds} d\tau. \quad (3.24)$$

Weiterhin wird in [BP89] eine Modifikation der asymptotischen Abhängigkeit des Selektionsparameters von der Anisotropie angegeben:

$$\frac{1}{\sigma^*} = \varepsilon^{-\frac{7}{4}} \left(1 + \frac{a(Re)}{\varepsilon^{3/4}} \frac{d_0 u_\infty}{2D p} \right)^{\frac{11}{14}}. \quad (3.25)$$

Daraus lassen sich für große Prandtl-Zahlen asymptotische Beziehungen für den selektierten Wachstumszustand ableiten [Kas00]:

$$V_{tip} \sim \mathcal{U}^{\frac{4}{3}} u_\infty^{\frac{2}{3}} \quad \text{und} \quad R \sim \mathcal{U}^{-\frac{2}{3}} u_\infty^{-\frac{1}{3}}.$$

3.4 Separationslösung höherer Ordnung

Wie in Abschnitt 3.2 erwähnt, verbleibt nach der Vorgabe einer festen Gestalt der Grenzfläche Γ ein lineares Problem. Solche Probleme können oft durch einen Separationsansatz, Reihenentwicklung der Randwerte und Überlagerung der Teillösungen gelöst werden. Im Gegensatz zu Arbeiten wie [Iva47, HC61, Tri70] geht es hier aber nicht um eine globale Nadelkristall-Lösung: Alles unterhalb einer Ebene in einer gewissen Entfernung von der Kristallspitze läßt sich nicht in einem stationären Modell berücksichtigen, und die stationäre Ersatzbeschreibung für die Wirkung dieser Vorgänge auf die Spitze muß selber keine Interpretation als Nadelkristall besitzen. Es wird hier nur verlangt, daß die Phasengrenze nahe der Kristallspitze durch eine Parabel gegeben ist, auch wenn sie sich als ganzes nicht als Graph einer Funktion beschreiben läßt. Im Unterschied zu diesem Abschnitt beschränken sich [Iva47, HC61] auf den Fall isothermer Grenzflächen, und [Tri70] geht von dreidimensionalen, aber rotationssymmetrischen Nadelkristallen aus, was auf zu diesem Abschnitt unterschiedliche Differentialgleichungen und Lösungsfunktionen führt.

3.4.1 Lösungen der Differentialgleichungen

Die partielle Differentialgleichung (3.5a) des stationären Modells läßt sich mit dem Produktansatz $\vartheta(\xi, \eta) := X(\xi)Y(\eta)$ separieren. Es verbleiben die zwei gewöhnlichen Differentialgleichungen

$$-pnX = 2\xi X'' + (1 - 2p\xi) X', \quad (3.26a)$$

$$+pnY = 2\eta Y'' + (1 + 2p\eta) Y', \quad (3.26b)$$

mit dem noch unbestimmten Separationsparameter n . Die Ivantsov-Lösung ϑ_0 aus Abschnitt 3.2 ist bereits eine spezielle Teillösung für $n = 0$, die mit der

vorausgesetzten Grenzflächenform konsistent ist. Als linear unabhängigen allgemeinen Lösungen von (3.26) liefert das Computeralgebra-System `maple` [Gar01]

$$X_n(\xi) = A_n \frac{M_{\frac{2n+1}{4}, \frac{1}{4}}(p\xi)}{\xi^{\frac{1}{4}}} + B_n \frac{W_{\frac{2n+1}{4}, \frac{1}{4}}(p\xi)}{\xi^{\frac{1}{4}}},$$

$$Y_n(\eta) = E_n \frac{M_{-\frac{2n+1}{4}, \frac{1}{4}}(p\eta)}{\eta^{\frac{1}{4}}} + F_n \frac{W_{-\frac{2n+1}{4}, \frac{1}{4}}(p\eta)}{\eta^{\frac{1}{4}}},$$

mit Konstanten A_n, B_n, E_n und F_n , die durch die Randbedingungen des Problems zu bestimmen sind, und den Whittaker-Funktionen $M_{m,k}$ und $W_{m,k}$ [WW96, Wei]. Diese konfluenten hypergeometrischen Funktionen sind für beliebige Parameter m und k definiert. Für die hier relevanten Spezialfälle ist es aber weitgehend möglich, die Lösungsfunktionen einfacher und konkreter darzustellen. Die Gestalt der gefundenen Lösungen motiviert den Übergang zu neuen Variablen $t = p\xi$ bzw. $t = p\eta$. Damit erhalten wir als neuen Ausgangspunkt aus den Gleichungen (3.26)

$$0 = t\tilde{X}''(t) + \left(\frac{1}{2} - t\right)\tilde{X}'(t) + \frac{n}{2}\tilde{X}(t), \quad (3.27a)$$

$$0 = t\tilde{Y}''(t) + \left(\frac{1}{2} + t\right)\tilde{Y}'(t) - \frac{n}{2}\tilde{Y}(t). \quad (3.27b)$$

Zuerst folgen daraus mit einem weiteren Koordinatenwechsel $\tilde{X}(t) =: u(\sqrt{t})$ bzw. $\tilde{Y}(t) =: v(\sqrt{t})$ die Gleichungen

$$0 = u''(z) - 2z u'(z) + 2n u(z), \quad (3.28a)$$

$$0 = v''(z) + 2z v'(z) - 2n v(z). \quad (3.28b)$$

Die erste dieser Gleichungen ist die Hermitesche Differentialgleichung, die für $n \in \mathbb{N}_0$ die Hermite-Polynome

$$H_n(z) := (-1)^n \frac{\sqrt{\pi}}{2} e^{z^2} \frac{d^{n+1}}{dz^{n+1}} \operatorname{erf}(z) \quad \text{für } n \in \mathbb{N}_0, z \in \mathbb{R}. \quad (3.29)$$

als Lösung besitzen [Leb73]. Mit diesen Polynomen, als Polynome auf \mathbb{C} aufgefaßt, sind dann auch die Polynome

$$\tilde{H}_n(z) := (i)^{-n} H_n(iz) \quad \text{für } n \in \mathbb{N}_0, z \in \mathbb{C}$$

wohldefiniert. Sie haben reelle Koeffizienten und lösen die zweite Differentialgleichung (3.28b). Alternativ lassen sich Lösungen von (3.28b) auch durch die mehrfachen Integrale der Fehlerfunktion ausdrücken [AS72].

$$\begin{array}{l|l}
H_0(z) = 1 & \tilde{H}_0(z) = 1 \\
H_1(z) = 2z & \tilde{H}_1(z) = 2z \\
H_2(z) = 4z^2 - 2 & \tilde{H}_2(z) = 4z^2 + 2 \\
H_3(z) = 8z^3 - 12z & \tilde{H}_3(z) = 8z^3 + 12z \\
H_4(z) = 16z^4 - 48z^2 + 12 & \tilde{H}_4(z) = 16z^4 + 48z^2 + 12 \\
H_5(z) = 32z^5 - 160z^3 + 120z & \tilde{H}_5(z) = 32z^5 + 160z^3 + 120z \\
H_6(z) = 64z^6 - 480z^4 + 720z^2 - 120 & \tilde{H}_6(z) = 64z^6 + 480z^4 + 720z^2 + 120
\end{array}$$

Tabelle 3.1: Hermite-Polynome $H_n(z)$ und davon abgeleitete Polynome $\tilde{H}_n(z)$.

Für die beiden linearen Differentialgleichungen zweiter Ordnung in (3.27) bleibt noch jeweils die andere Lösung zu bestimmen, die von der oben gefundenen linear unabhängig ist. Mit der Definition $w(t) := \sqrt{t}\tilde{X}(t)$ folgt aus (3.27a) die verallgemeinerte oder zugeordnete Laguerresche Differentialgleichung

$$0 = zw''(z) + (\alpha + 1 - z)w'(z) + \lambda w(z),$$

wobei hier $\alpha = \frac{1}{2}$ und $\lambda = \frac{n-1}{2}$ ist. Deren Lösungen sind die verallgemeinerten Laguerreschen Polynome $L_\lambda^\alpha(t)$ [EMOT53]. Aufgrund der Beziehung

$$L_m^{\frac{1}{2}}(z) = \frac{e^z}{m!\sqrt{z}} \frac{d^m}{dz^m} \left(e^{-z} z^{m+\frac{1}{2}} \right) \quad \text{für } m \in \mathbb{N}_0$$

sind für ungerade n und $m = (n-1)/2$ die $w_n(z) = L_m^{\frac{1}{2}}(z)$ Polynome vom Grad m , die stets alle Potenzen in z enthalten. Ansonsten sind die Lösungen allgemeine transzendente Funktionen. Für die Gleichung (3.28b) läßt sich die zweite Lösung \tilde{v} mit der d'Alembertschen Methode der Ordnungsreduktion aus der bereits ermittelten Lösung $v = \tilde{H}_n(z)$ herleiten:

$$\tilde{v}(z) = \tilde{H}_n(z) \int_z^\infty \frac{e^{-s^2}}{\left(\tilde{H}_n(s)\right)^2} ds. \quad (3.30)$$

Diese zweite Lösung ist für gerades n wohldefiniert, sogar bis $z = 0$, denn die Koeffizienten der Hermite-Polynome sind gegeben durch [Leb73]

$$H_{2n}(z) = (2n)! \sum_{\nu=0}^n \frac{(-1)^\nu (2)^{2(n-\nu)}}{\nu!(2(n-\nu))!} z^{2(n-\nu)}, \quad (3.31a)$$

$$H_{2n+1}(z) = (2n+1)! \sum_{\nu=0}^n \frac{(-1)^\nu (2)^{2(n-\nu)+1}}{\nu!(2(n-\nu)+1)!} z^{2(n-\nu)+1}. \quad (3.31b)$$

Beide Familien von Polynomen, H_n und \tilde{H}_n , enthalten für gerades n nur gerade x -Potenzen und für ungerades n nur ungerade Potenzen. Aus (3.31) folgt, daß alle Koeffizienten der Polynome \tilde{H}_n positiv sind. Sie können somit nur für ungerades n eine reelle Nullstelle haben, die dann einfach ist und bei $z = 0$ liegt.⁷ Der Integrand in (3.30) besitzt also für $s \geq 0$ keine Polstellen und läßt sich daher, mit einer geeigneten Konstante $C(n)$, gegen $C(n) e^{-s^2}$ abschätzen. Die allgemeinen Lösungen von (3.26) für $n \in \mathbb{N}$ sind somit

$$X_n(\xi) = A_n H_n(\sqrt{p\xi}) + B_n \frac{1}{\sqrt{p\xi}} L_{\frac{n-1}{2}}^{\frac{1}{2}}(p\xi), \tag{3.32a}$$

$$Y_n(\eta) = E_n \tilde{H}_n(\sqrt{p\eta}) + F_n \tilde{H}_n(\sqrt{p\eta}) \int_{\sqrt{p\eta}}^{\infty} \frac{e^{-s^2}}{(\tilde{H}_n(s))^2} ds. \tag{3.32b}$$

3.4.2 Randbedingungen

Anhand des qualitativen Verhaltens der Lösungsfunktionen aus (3.32) und mit Hilfe der Randbedingungen aus (3.5) sind nun die geeigneten Ansatzfunktionen auszuwählen.

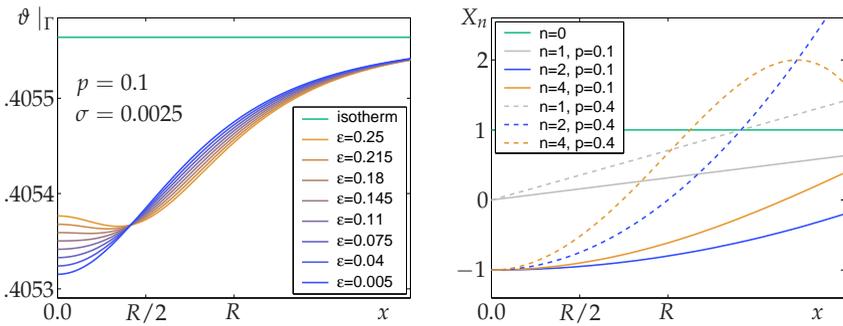


Abbildung 3.4: Links: Randwerte auf Γ in Abhängigkeit von der Anisotropie ε . Rechts: Ansatzfunktionen $X_n(\xi) = H_n(\sqrt{p\xi})$ bei verschiedener Péclet-Zahl p . Zur Darstellung wurde der rechte Ast der Parabel Γ über x parametrisiert.

Die Symmetrie des Problems bezüglich $x = 0$ erfordert, daß die Lösungen

7. Nachdem diese Nullstelle gegebenenfalls abdividiert worden ist, verbleibt eine in z gerade Funktion. Alle anderen, stets konjugiert komplex auftretenden Nullstellen müssen daher rein imaginär sein. Damit sehen wir wiederum, daß die Hermite-Polynome n reelle Nullstellen haben, die symmetrisch um 0 liegen.

sich gerade fortsetzen lassen. Mit (A.10) erhalten wir die Bedingung

$$0 \stackrel{!}{=} \lim_{x \rightarrow 0} \partial_{e_x} \vartheta(\xi, \eta) = 2 \lim_{x \rightarrow 0} \left[\frac{\sqrt{\xi \eta}}{\xi + \eta} \left(\frac{\partial \vartheta}{\partial \xi}(\xi, \eta) + \frac{\partial \vartheta}{\partial \eta}(\xi, \eta) \right) \right]. \quad (3.33)$$

Wegen des Produktansatzes $\vartheta(\xi, \eta) = X(\xi)Y(\eta)$ reicht es, auf der Grenzfläche Γ , also für $\eta = 1$, sicherzustellen, daß gilt

$$0 \stackrel{!}{=} \lim_{\xi \rightarrow 0} (\sqrt{\xi} X'_n(\xi)).$$

Damit können in (3.32a) für $X_n(\xi)$ nur die Hermite-Polynome H_n mit geradem Index n im Ansatz enthalten sein. Die Lösungsanteile mit den Laguerre-Polynomen scheiden aus, da die $L^\lambda_\lambda(z)$ für $z \rightarrow 0$ beschränkt sind und diese mit einem für $\xi \rightarrow 0$ unbeschränkt wachsenden Faktor $1/\sqrt{p\xi}$ multipliziert werden.

Beide Anteile des Ansatzes (3.32b) für $Y_n(\eta)$ werden nun einzeln analysiert. Dazu betrachten wir zuerst Teillösungen der partiellen Differentialgleichung (3.5a) der Form

$$\vartheta_{2n}(\xi, \eta) = H_{2n}(\sqrt{p\xi}) \tilde{H}_{2n}(\sqrt{p\eta}), \quad \text{für } n \in \mathbb{N}. \quad (3.34)$$

Diese Teillösungen sind in der flüssigen Phase, also für $\eta > 1$, ungeeignet. Denn mit dem in η polynomialen Anteil \tilde{H}_n wachsen die Beträge beispielsweise unbeschränkt für $x = 0$, d.h. $\xi = 0$, wenn y , und damit auch η , gegen ∞ geht.

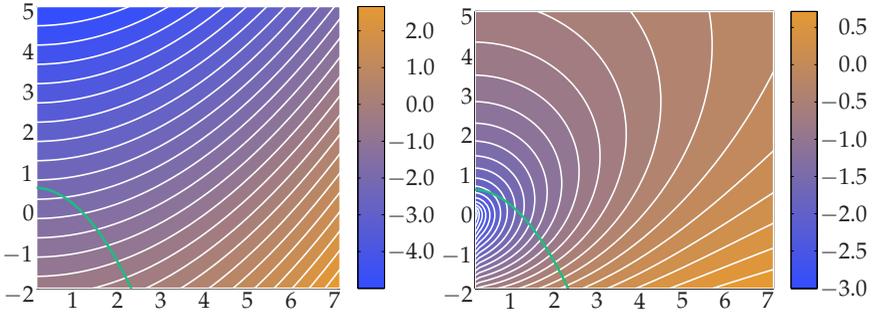


Abbildung 3.5: Teillösungen $\vartheta_2(x, y)$: Links gemäß (3.34), rechts gemäß (3.35).

Der andere Ansatz für Y_{2n} in (3.32b) führt auf die Teillösungen

$$\vartheta_{2n}(\xi, \eta) = H_{2n}(\sqrt{p\xi}) \tilde{H}_{2n}(\sqrt{p\eta}) \int_{\sqrt{p\eta}}^{\infty} \frac{e^{-s^2}}{(\tilde{H}_{2n}(s))^2} ds, \quad \text{für } n \in \mathbb{N}. \quad (3.35)$$

Diese weisen nun in der flüssigen Phase ein mit η exponentiell fallendes Verhalten auf. Damit ist dann sichergestellt, daß das Produkt $\vartheta_{2n}(\zeta, \eta) := X_{2n}(\zeta)Y_{2n}(\eta)$ abklingt, wenn y konstant ist und x gegen ∞ geht. Allerdings erfordert die Symmetriebedingung an $x = 0$ nach (3.33) in der festen Phase für $y < 0$, wenn also stets $\zeta > 0$ ist,

$$0 \stackrel{!}{=} \lim_{\eta \rightarrow 0} (\sqrt{\eta} Y'_n(\eta)).$$

Dies ist aber mit den Funktionen aus (3.35) nicht gewährleistet.

Die beiden in den jeweiligen Teilgebieten zulässigen Ansätze können zu stetigen Teillösungen

$$\vartheta_{2n}(\zeta, \eta) = H_{2n}(\sqrt{p\zeta}) \begin{cases} \tilde{H}_{2n}(\sqrt{p\eta}) \int_{\sqrt{p}}^{\infty} \frac{e^{-s^2}}{(\tilde{H}_{2n}(s))^2} ds, & \text{für } \eta \leq 1, n \in \mathbb{N}, \\ \tilde{H}_{2n}(\sqrt{p\eta}) \int_{\sqrt{p\eta}}^{\infty} \frac{e^{-s^2}}{(\tilde{H}_{2n}(s))^2} ds, & \text{für } \eta \geq 1, n \in \mathbb{N}. \end{cases} \quad (3.36)$$

kombiniert werden. Die Ableitungen des η -abhängigen Faktors $Y_{2n}(\eta)$ sind

$$Y'_{2n} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{p}{\eta}} \begin{cases} \tilde{H}'_{2n}(\sqrt{p\eta}) \int_{\sqrt{p}}^{\infty} \frac{e^{-s^2}}{(\tilde{H}_{2n}(s))^2} ds, & \eta < 1, \\ \tilde{H}'_{2n}(\sqrt{p\eta}) \int_{\sqrt{p\eta}}^{\infty} \frac{e^{-s^2}}{(\tilde{H}_{2n}(s))^2} ds - \frac{e^{-p\eta}}{\tilde{H}_{2n}(\sqrt{p\eta})}, & \eta > 1, \end{cases}$$

was auf der Phasengrenze Γ , also bei $\eta = 1$, zu einem Sprung in der Normalableitung von ϑ_{2n} führt. Nach (A.10) ist

$$\begin{aligned} [\partial_n \vartheta_{2n}(\zeta, 1)]_{\Gamma} &= \frac{1}{\sqrt{1+\zeta}} [\partial_{\eta} \vartheta_{2n}(\zeta, 1)]_{\Gamma} = \frac{X_{2n}(\zeta)}{\sqrt{1+\zeta}} [Y'_{2n}(1)]_{\Gamma} \\ &= -\frac{\sqrt{p} e^{-p}}{2\tilde{H}_{2n}(\sqrt{p})} \frac{H_{2n}(\sqrt{p\zeta})}{\sqrt{1+\zeta}}, \end{aligned}$$

wodurch die Stefan-Bedingung (3.5b) verletzt wird, die einen von ζ unabhängigen Sprung der Normalableitung fordert.

Insgesamt haben wir keine mit allen Randbedingungen konsistenten globalen Lösungen erhalten, wobei das Scheitern *dieses* Ansatzes nicht ausschließt, daß solche Lösungen existieren. Der Koordinatenursprung ist sowohl ein singulärer Punkt des Koordinatensystems⁸ als auch der Lösungsfunktionen (3.35).

8. Ein orthogonales Koordinatensystem aus Parabeln gleicher Krümmung und Hyperbeln hat keine solche Singularität, die Separation der Differentialgleichung ist aber nicht offensichtlich.

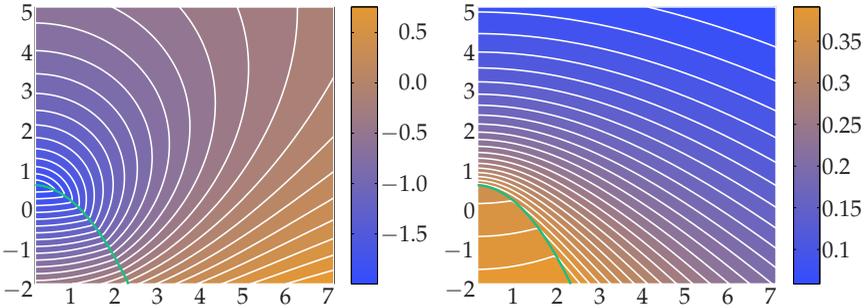


Abbildung 3.6: Links: $\vartheta_2(x, y)$ gemäß (3.36). Rechts: Überlagerung mit der Ivantsov-Lösung zu $p = 0.1$.

Die zugehörige Singularität in der partiellen Differentialgleichung wurde bei der Herleitung von (3.5) abdividiert. Daher ist es naheliegend, die Gültigkeit der in (3.35) gefundenen Lösungen auf einen Bereich einzuschränken, der eine Umgebung der Kristallspitze, aber nicht den Koordinatenursprung enthält. Für diese sind dann mit anderen Mitteln geeignete Fortsetzungen zu bestimmen. Allerdings weist beispielsweise eine solche Teillösung ϑ_2 an der Kristallspitze einen Wärmefluß von der Grenzfläche weg nach innen auf. Bei einem stationär wachsenden Kristall erfordert das aber eine mit y stets fallende Temperatur, was physikalisch nicht sinnvoll ist.

Trotz der Inkonsistenz mit der Stefan-Bedingung auf Γ wird nun der Lösungsansatz

$$\vartheta(\zeta, \eta) = \vartheta_0(\eta) + \sum_{n=1}^{\infty} A_{2n} \vartheta_{2n}(\zeta, \eta) \quad (3.37)$$

gemacht, mit der Ivantsov-Lösung ϑ_0 aus (3.7) als Grundmode und höheren Moden ϑ_{2n} gemäß (3.36).

Nun können auf $\eta = 1$ stückweise stetige Randwertvorgaben, die in der transformierten Variablen $z = \sqrt{p\zeta}$ mit dem Gewicht e^{-z^2} über \mathbb{R} integrierbar sind, bezüglich der orthogonalen Hermite-Polynome H_n entwickelt werden. Als Randwert-Vorgabe auf Γ folgt aus (3.5c)

$$\begin{aligned} \vartheta(\bar{\zeta}(z), 1) &= \vartheta\left(\frac{z^2}{p}, 1\right) = \mathcal{U} - p\sigma \left(\frac{1}{\left(1 + \frac{z^2}{p}\right)^{3/2}} - \varepsilon \frac{\left(\frac{z^2}{p}\right)^2 - 6\frac{z^2}{p} + 1}{\left(1 + \frac{z^2}{p}\right)^{7/2}} \right) \\ &= \mathcal{U} - p^{5/2}\sigma \left(\frac{1}{(p + z^2)^{3/2}} - \varepsilon \frac{z^4 - 6pz^2 + p^2}{(p + z^2)^{7/2}} \right) \end{aligned} \quad (3.38)$$

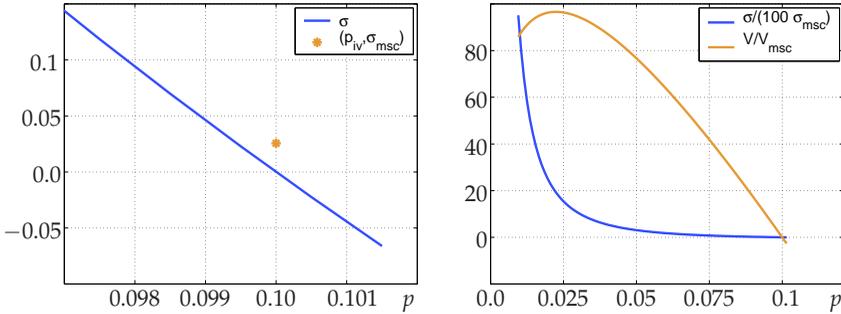


Abbildung 3.7: Links: Ausschnitt des Verlaufs des Selektionsparameters σ über der Péclet-Zahl p um die Vorhersage der Selektionstheorie MSC. Rechts: Maximum der Geschwindigkeit.

$$=: \mathcal{U} - p^{5/2} \sigma b_\varepsilon(p, z).$$

Aus der Reihen-Entwicklung erhalten wir eine Bedingung für den in ξ konstanten Anteil

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \vartheta(\xi(z), 1) H_0(z) e^{-z^2} dz &= \int_0^\infty \vartheta_0(1) 1 e^{-z^2} dz = e^p \sqrt{p\pi} \operatorname{erfc}(\sqrt{p}) \int_0^\infty e^{-z^2} dz \\ &= \mathcal{U} \int_0^\infty e^{-z^2} dz - p^{5/2} \sigma \int_0^\infty b_\varepsilon(p, z) e^{-z^2} dz. \end{aligned}$$

Daraus folgt mit $\int_0^\infty e^{-z^2} dz = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$ und der Definition $B_{0,\varepsilon}(p) := \int_0^\infty b_\varepsilon(p, z) e^{-z^2} dz$

$$\sigma_\varepsilon \mathcal{U}(p) = \frac{\sqrt{\pi} \mathcal{U} - e^p \sqrt{p\pi} \operatorname{erfc}(\sqrt{p})}{p^{5/2} B_{0,\varepsilon}(p)}. \quad (3.39)$$

Anstatt des einfachen Unterkühlungs-Péclet-Zahl-Zusammenhangs (3.8) haben wir nun durch Umkehrung von (3.39) eine kompliziertere Abhängigkeit vom Selektionsparameter σ , der noch unbestimmt ist. Der Verlauf von σ über der Péclet-Zahl p ist in Abbildung 3.7 angegeben. Da nach (3.4) die Geschwindigkeit V_{tip} der Kristallspitze proportional zu $p^2 \sigma$ ist, ließe sich mit der Hypothese maximaler Geschwindigkeit ein selektierter Wachstumszustand (p, σ^*) bestimmen. Dieser läge aber um zwei Größenordnungen neben den Vorhersagen der Selektionstheorie und ist auch aufgrund der in Abschnitt 3.3 erwähnten Experimente nicht angemessen. Eine andere Möglichkeit zur Festlegung der noch unbestimmten Parameter besteht darin, den mit dem Ansatz (3.37) verbundenen Konsistenzfehler bezüglich der Stefan-Bedingung zu minimieren, siehe dazu auch Abschnitt 3.5.2.

Grundsätzlich ist festzustellen, daß, bei Berücksichtigung von Oberflächeneffekten, eine Verringerung der Péclet-Zahl p gegenüber dem isothermen Fall der Ivantsov-Nadel angemessen ist. Die Koeffizienten in der Reihendarstellung (3.37) klingen sehr langsam ab. Dies wird mit geringer werdender Péclet-Zahl immer schlechter und schließt die praktische Verwendung des Ansatzes aus.

3.5 Stationäre Simulation mit Finiten Elementen

Es soll hier die Möglichkeit untersucht werden, durch numerische Simulation mit Finiten Elementen eine methodisch unabhängige Bestätigung der auf asymptotischer Analyse approximativer Probleme beruhenden Selektionstheorie zu erreichen.

Während das mathematische Modell (3.3) von unbeschränktem Volumen der beiden Phasen ausgeht, erfordert die Finite-Elemente-Simulation Rechengebiete mit endlicher Größe. Innerhalb eines geeigneten beschränkten Gebiets Ω um die Kristallspitze seien den beiden Phasen die Teilgebiete Ω^+ bzw. Ω^- zugeordnet. Die Grenzfläche ist $\Gamma = \partial\Omega^+ \setminus \partial\Omega = \partial\Omega^- \setminus \partial\Omega$. Der äußere Rand $\partial\Omega$ wurde durch die Einschränkung auf ein Gebiet endlicher Größe künstlich in das Problem eingefügt. Es kann dabei stets die Symmetrie bezüglich der y -Achse ausgenutzt werden.

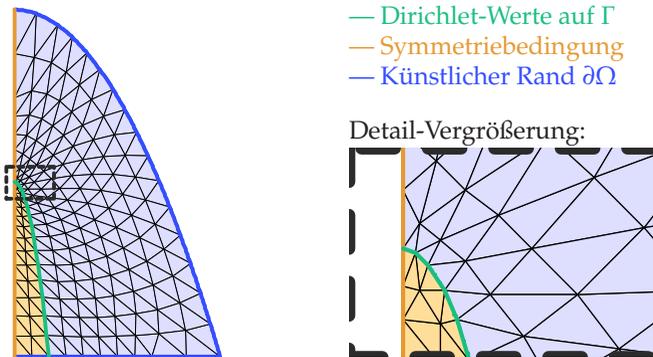


Abbildung 3.8: Numerisches Rechengebiet mit Startgitter.

Findet die Diffusion so wie beim isothermen Nadelkristall nur in einem der Volumina Ω^+ oder Ω^- statt, so kann dort ein Cauchy-Problem mit den zwei Randbedingungen aus (3.3) bzw. (3.5) gestellt werden. Ein solches Cauchy-Problem ist aber im allgemeinen nicht korrekt gestellt [Eva98], da die stetige

Abhängigkeit der Lösung von den Daten auf Γ dabei nicht gesichert ist und ist daher nicht für die Approximation mit Finiten Elementen geeignet. Mit einem Dirichlet-Problem aus der Gibbs-Thomson-Beziehung auf Γ und geeigneten verträglichen Vorgaben der Funktionswerte auf $\partial\Omega$ erhalten wir dagegen ein korrekt gestelltes Problem, d.h. Existenz und Eindeutigkeit der Lösung sowie deren stetige Abhängigkeit von den Randdaten. Die Lösung hat dann die Form von (3.37) im Abschnitt 3.4. Allerdings ist überhaupt nicht klar, wie die Randwertvorgabe auf $\partial\Omega$ zu stellen ist. Auch ist die Stefan-Bedingung im allgemeinen nicht mehr zu erfüllen. Wir können lediglich im nachhinein die Konsistenz des getroffenen Ansatzes, bestehend aus Gebietsform und gewählter Randwertvorgabe, mit der Stefan-Bedingung überprüfen. Zu diesem Zweck wird ein Funktional für den Konsistenzfehler der numerischen Lösung ϑ_h des Dirichlet-Problems eingeführt:

$$\mathcal{E}(\vartheta_h) := \sqrt{\int_{|x| < \Xi} \left(\frac{[\partial_n \vartheta_h]_\Gamma - 2p \langle e_y, n \rangle}{2p} \right)^2 dx}. \quad (3.40)$$

Bei Einschränkung nur auf parabelförmige Grenzflächen läßt sich das Fehlerfunktional umformen zu

$$\mathcal{E}(\vartheta_h) = \sqrt{\int_{\xi < \Xi} \left(\frac{[\partial_{e_\eta}(\vartheta_h - \vartheta_0)]_\Gamma}{2p} \right)^2 d\xi} = \sqrt{\int_{\xi < \Xi} \left(\frac{V - V_0}{V_{tip}} \right)^2 d\xi}, \quad (3.41)$$

wobei V_0 die Normalgeschwindigkeit des parabelförmigen Ivantsov-Nadelkristalls mit dem zugehörigen Temperaturfeld ϑ_0 ist.

Den Untersuchungen dieses Abschnitts liegt die Vermutung zugrunde, daß der selektierte stationäre Wachstumszustand die mit dem Funktional \mathcal{E} gemessene Inkonsistenz minimiert, solange die stationäre Beschreibung nur nahe genug an den tatsächlichen Vorgängen liegt. Auf diese Art müßte sich dann auch noch eine Bestätigung der Selektionstheorie finden lassen, die mit instationären Simulations-Methoden nicht möglich ist. Denn auch die zu höheren Eigenwerten gehörenden Dendriten würden zu lokalen Minima des Konsistenzfehlers führen, obwohl sie dynamisch instabil und daher instationär nicht zu erzeugen sind. Dieser Ansatz hat sich aber insgesamt nicht als erfolgreich erwiesen.

Die Implementierung der numerischen Verfahren erfolgte unter Einbindung des Software-Pakets `ug`, auf das in Abschnitt 6.1 eingegangen wird. Zur Lösung der linearen Gleichungssysteme wird ein adaptives Mehrgitterverfahren mit unvollständiger Zerlegung als Glätter eingesetzt. Rückschlüsse auf die Konditionszahl des Gleichungssystems geben die beobachteten Reduktionsraten des iterativen Gleichungslösers, bei denen sich eine deutliche Abhängigkeit von

der Güte des Gitters feststellen ließ. Bei einer einfachen diffusionsartigen Gitterglättung aus u_g werden jeweils die Position jedes inneren Knotens mit denen der umliegenden Knoten gemittelt. Dies kann bei nichtkonvexen Teilgebieten zu Fehlern im Gitter führen, die ein Versagen des iterativen Löser nach sich ziehen können. Deshalb wurde in der Nähe der Kristallspitze die nichtkonvexe Gebietsberandung des äußeren Gebiets an einer Kugel gespiegelt, um zu einer konvexen Berandung zu kommen. Dann kann die einfache Glättung vorgenommen und danach wieder an der Kugel gespiegelt werden. Mit zunehmender Entfernung von der Spitze wird dieses Vorgehen mit dem üblichen kombiniert und gegenüber diesem immer schwächer gewichtet. Weiterhin wurde ein modifizierter, an [Ver96] angelehnter, Fehlerindikator zur Gitteradaption entwickelt. Dabei wird für ein Dirichlet-Problem

$$\begin{aligned} -\operatorname{div}(A\nabla\vartheta) + \langle \nabla\vartheta, b \rangle &= f && \text{in } \Omega, \\ \vartheta &= 0 && \text{auf } \partial\Omega \end{aligned}$$

der Fehler der numerischen Lösung ϑ_h auf jedem Element T , mit der Fläche $|T|$ und den Seiten $S \in \mathcal{S}(T)$, mit der Länge $|S|$ geschätzt durch den Indikator

$$E_T := \sum_{S \in \mathcal{S}(T)} |S| \| \langle A\nabla\vartheta_h, \nabla\vartheta_h \rangle_S \|_{L^2(S)}^2 + |T| \left(\|f\|_{L^2(T)}^2 + \|\langle \nabla\vartheta_h, b \rangle\|_{L^2(T)}^2 \right).$$

3.5.1 Grundzustand mit Ivantsov-Lösung

Bei vernachlässigten Oberflächeneffekten, oder im Falle $\sigma = 0$, verbleibt als einziger Parameter in dem Problem (3.5) die Péclet-Zahl p , die die Reichweite der Diffusion bestimmt. Daher sollte die Größe des numerischen Rechengebietes Ω mit der Péclet-Zahl p skaliert werden.

Für die folgenden Rechnungen wurde $p = 0.1$ gewählt. Die zugehörige Unterkühlung eines isothermen Ivantsov-Kristalls ist durch (3.8) festgelegt zu $\mathcal{U} \approx 0.405565$. Mit der Wahl von $\varepsilon = 0.075$ bestimmt die Selektionstheorie gemäß (3.9) $\sigma \approx 0.0256$. Nach der Festlegung der weiteren Parameter als $D = 0.75$ und $d_\varepsilon = 0.0025$ erhalten wir aus (3.4) $R \approx 0.976859$ und $V_{tip} \approx 0.153553$.

Diskretisierung des Randwertproblems

Mit der Ivantsov-Lösung ϑ_0 aus (3.7) ist die exakte analytische Lösung für den isothermen Nadelkristall bekannt. Diese wird für die Vorgabe von Dirichlet-Daten auf Γ und $\partial\Omega$ benutzt. Das resultierende Randwertproblem

$$0 = \Delta\vartheta + 2p\partial_y\vartheta \quad \text{in } \Omega, \tag{3.42a}$$

$$\vartheta|_{\Gamma} = \mathcal{U} \quad \text{und} \quad \vartheta|_{\partial\Omega} = \vartheta_0, \tag{3.42b}$$

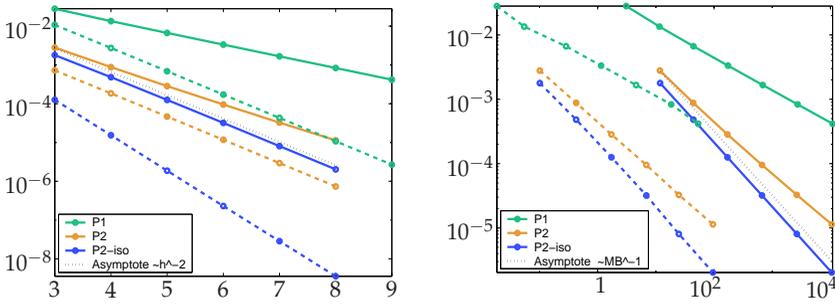


Abbildung 3.9: Rechts: Fehler in der H^1 -Norm und der L^2 -Norm (gestrichelt) über Anzahl der Gitterverfeinerungen. Links: H^1 -Fehler über Speicherbedarf in Megabyte und Rechenzeit in Minuten (gestrichelt).

wurde mit verschiedenen Typen von Finiten Elementen numerisch gelöst.

In Abbildung 3.9 ist das asymptotische Fehlerverhalten aufgezeigt, das mit der Theorie der Finiten Elemente übereinstimmt [Cia91, BS96]. Für lineare $P1$ -Elemente sehen wir eine mit der Gitterweite linear fallende H^1 -Norm des Fehlers. Bei quadratischen $P2$ -Ansatzfunktionen verbessert sich die Ordnung zunächst nur auf $\frac{3}{2}$. Hier dominiert der Fehler durch die stückweise lineare Gebietsapproximation an der gekrümmten Grenzfläche. Werden dort krummlinig berandete isoparametrische $P2$ -Elemente verwendet, so verbessert sich die asymptotische Ordnung des H^1 -Fehlers auf 2. Darüber hinaus ist zu erkennen, daß sich die Fehlerordnung auch jeweils auf die Verfahrenseffizienz bezüglich Speicheraufwand und Rechenzeit übertragen läßt.

Rekonstruktion der Geschwindigkeit

Infolge der für die Ivantsov-Lösung getroffenen Annahme einer selbstähnlichen Lösung ist die Grenzflächengeschwindigkeit in y -Richtung über den gesamten Verlauf von ζ konstant gleich V_{ip} . Die Normalgeschwindigkeit ist die Projektion auf die Normalenrichtung, also nach (A.10) $V = \langle V_{ip} e_y, n \rangle = \frac{V_{ip}}{\sqrt{1+\zeta}}$. Damit werden die Verhältnisse in größerer Entfernung zur Kristallspitze weniger stark gewichtet, siehe Abbildung 3.10.

Die Vorgabe der Ivantsov-Lösung als Dirichlet-Daten sichert für das kontinuierliche Problem (3.42) die Verträglichkeit mit der Stefan-Bedingung (3.5b). Konsistenzfehler der berechneten Normalgeschwindigkeit der Grenzfläche sind daher allein auf die Diskretisierung und die Rekonstruktion der Gradienten zurückzuführen. Die Normalgeschwindigkeit wird hier aus der elementweisen Rekonstruktion der Gradienten in den Kantenmittelpunkten berechnet, da bei Ver-

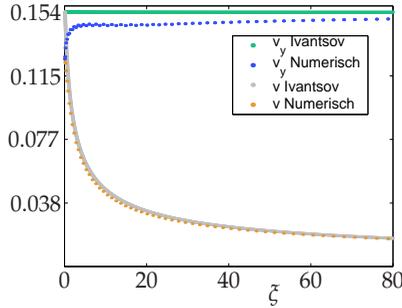


Abbildung 3.10: Grenzflächengeschwindigkeit in y -Richtung und in Normalenrichtung über der Parabel-Koordinate ζ .

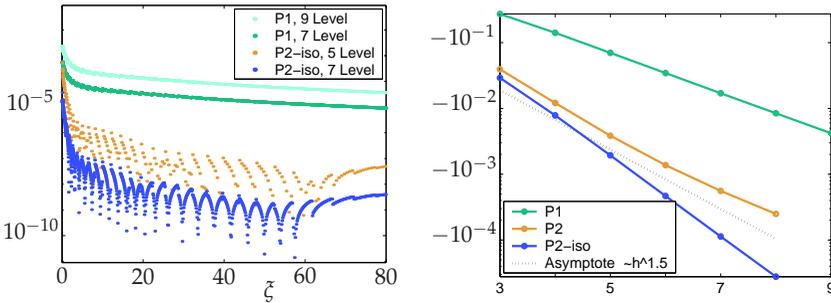


Abbildung 3.11: Links: Betrag des Fehler der Grenzflächengeschwindigkeit. Rechts: L^2 -Norm des Fehlers über der Anzahl der Gitterlevel.

wendung von $P1$ - oder $P2$ -Elementen die Gradienten auch innerhalb der einzelnen Teilgebiete nicht stetig in den Gitterknoten sind. Dies führt mit $P1$ -Elementen zu einer systematisch zu niedrig berechneten Geschwindigkeit, wie in Abbildung 3.11 zu sehen ist.⁹ Während an der Kristallspitze immer zu niedrige Werte berechnet werden, wenn auch die Abweichung bei $P2$ -Elementen deutlich kleiner ausfällt als bei $P1$ -Elementen, liefern in weiterer Entfernung von der Spitze die $P2$ -Elemente leicht zu große Geschwindigkeiten. Wie in Abbildung 3.11 zu sehen ist, zeigt der Konsistenzfehler der Lösungen mit der Stefan-Bedingung in

9. Bei einem linearen $P1$ -Ansatz auf Dreieckselementen ist der Gradient elementweise konstant und approximiert daher am besten die Steigung der numerischen Lösung im Elementmittelpunkt. Es entsteht ein Fehler in der Größenordnung der Gitterweite. Durch verbesserte Rekonstruktion über mehrere Elemente ließen sich die Fehler verringern und die Ordnung verbessern.

der L^2 -Norm bei fortgesetzter Gitterverfeinerung die gleiche asymptotische Ordnung, die auch bei der Diskretisierung des Dirichlet-Problems für den Fehler in der H^1 -Norm beobachtet wird. Bei der Darstellung in Abbildung 3.11 links ist die logarithmische Skala zu beachten. Sie verstärkt im unteren Bereich die Streuung der Werte, die auf Einflüsse des größten Basisgitters hindeutet.

Fehlerhafte Randwertvorgaben

Im allgemeinen, also bei nichtkonstanter Oberflächentemperatur, stimmt die Temperatur auf dem künstlichen Rand $\partial\Omega$ nicht mehr mit der Ivantsov-Lösung ϑ_0 überein. Es ist aber naheliegend, das gleiche asymptotische Abklingverhalten der Temperatur wie im Fall des isothermen Ivantsov-Kristalls zu erwarten und daher trotzdem ϑ_0 als Vorgabe zu nutzen. Zur Untersuchung des Einflusses von daraus resultierenden Fehlern wird hier angenommen, daß die Fehler in den Randdaten die Größenordnung der Vorgabe ϑ_0 haben, was eine starke Überschätzung der Fehler sein sollte. Betrachten wir die Differenz $\Theta := \vartheta - \vartheta_0$, der Lösung ϑ des durch Oberflächeneinflüsse gestörten Problems (3.42) zur Ivantsov-Lösung ϑ_0 des ungestörten, dann erfüllt Θ das Randwertproblem

$$0 = \Delta\Theta + 2p\partial_y\Theta \quad \text{in } \Omega, \tag{3.43a}$$

$$\Theta|_{\Gamma} = 0, \quad \text{und} \quad \Theta|_{\partial\Omega} = (\vartheta - \vartheta_0)|_{\partial\Omega} \approx -\vartheta_0|_{\partial\Omega}. \tag{3.43b}$$

Weil die Ivantsov-Lösung ϑ_0 die Stefan-Bedingung erfüllt, ist der resultierende Sprung der Normalableitung an der Grenzfläche $[\partial_{e_\eta}\Theta]_{\Gamma} = [\partial_{e_\eta}\vartheta]_{\Gamma}$ als von der Störung der Randdaten verursachte Inkonsistenz zu betrachten.

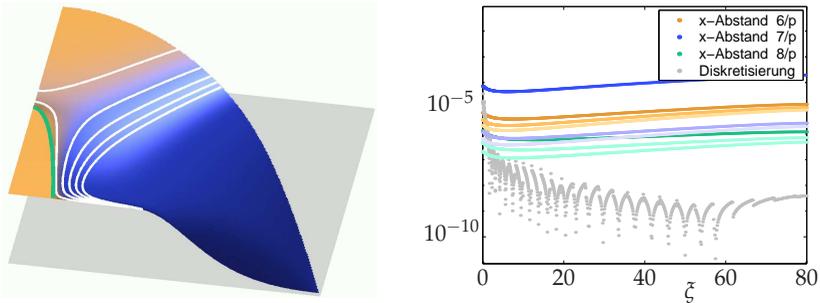


Abbildung 3.12: Fehlerhafte Vorgaben auf dem oberen Rand. Links: Lösung von (3.43) mit einigen Höhenlinien. Rechts: Inkonsistenz in Abhängigkeit von der Entfernung des Randes und Diskretisierungsfehler aus Abb. 3.11 zum Vergleich.

Es sind drei Abschnitte des Randes $\partial\Omega$ zu unterscheiden: das Fernfeld auf

dem oberen seitlichen Rand sowie auf dem unteren Rand jeweils ein Teilstück innerhalb der festen Kristallphase und eins von der Grenzfläche zum Fernfeld. Bei der Untersuchung L^2 -Norm des Sprungs in den Normalableitungen an der Grenzfläche zeigt die Asymptotik für geringer werdende Gitterweiten jeweils, daß die Inkonsistenzen bezüglich der Stefan-Bedingung ausschließlich von den Randbedingungen und nicht von der Diskretisierung dieses Problems (3.43) bestimmt sind.

Fehler der Dirichlet-Daten auf dem oberen Rand zum Fernfeld werden durch den Advektionsterm in der Differentialgleichung vergleichsweise stark zur Kristallspitze transportiert. Andererseits klingen ja die Phänomene des Kristallwachstums in dieser Richtung zum oberen Gebietsrand hin schnell ab, wodurch die anzunehmenden Fehler dort gering sind. Insgesamt lassen sich die Konsistenzfehler bezüglich der Stefan-Bedingung, die durch falsche Vorgaben auf dem oberen Rand verursacht sind, auch an der Kristallspitze unter die Fehler drücken, die durch die Diskretisierung von (3.42) hervorgerufen sind, und um Größenordnungen davon trennen.

In Rechnungen wurden der x -Abstand vom unteren Endpunkt der Parabel Γ zum rechten Gebietsrand und der y -Abstand vom Scheitelpunkt der Parabel zum oberen Gebietsrand um Vielfache der inversen Péclet-Zahl variiert. Die unterschiedlichen Farben kennzeichnen in Abbildung 3.12 unterschiedliche Entfernungen zum seitlichen unteren Rand, heller werdende Linien zeigen die Verringerung der Inkonsistenz bei Vergrößerung des y -Abstandes der Kristallspitze zum oberen Gebietsrand. Die dunkle blaue Linie zeigt einen Ausreißer aufgrund der ungünstigen Gittergeometrie und der dadurch bei der Gitterglättung auftretenden Probleme.

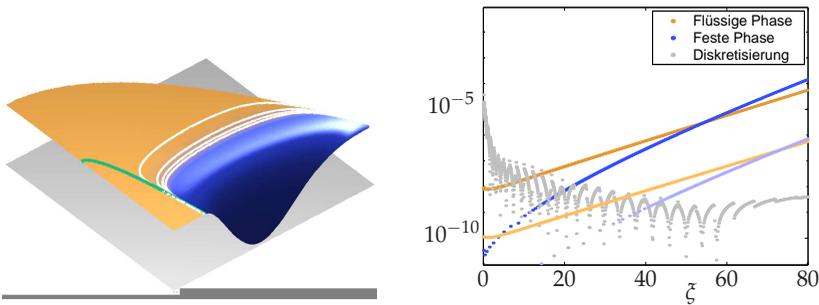


Abbildung 3.13: Einfluß von Fehlern der Daten auf dem unteren Rand. Hellere Farben korrespondieren jeweils zu größerer Entfernung des Randes.

Auf dem unteren Rand sind die Unsicherheiten bei der Wahl der Randda-

ten größer, allerdings werden dortige Fehler durch den advektiven Einfluß von der Kristallspitze weggedrängt und wirken somit vorwiegend am Schaft, wie in Abbildung 3.13 zu sehen ist. Auch diese Fehler lassen sich um Größenordnungen von den anderen Diskretisierungsfehlern trennen und haben damit keinen wesentlichen Einfluß auf die Kristallspitze.

3.5.2 Geschwindigkeitsselektion als Minimierungsproblem

Bei parabelförmiger Grenzfläche Γ sind durch die Ivantsov-Lösung jeweils Neumann-Daten auf Γ und Dirichlet-Daten auf der restlichen Berandung von Ω^+ und Ω^- festgelegt. Da das gemischte Dirichlet-Neumann-Problem auf den jeweiligen Teilgebieten korrekt gestellt ist, kann es keine mit diesen Vorgaben konsistente Lösung geben, die auf der Phasengrenze Γ von dem konstanten Wert \mathcal{U} abweicht. Bei Berücksichtigung des $p\sigma$ -abhängigen Oberflächenterms in der Gibbs-Thomson-Beziehung ist also von einem nichtverschwindenden Konsistenzfehler bezüglich der Stefan-Bedingung auszugehen. Es soll nun die Möglichkeit untersucht werden, bei vorgegebener Parabelform der Grenzfläche das zugehörige Fehlerfunktional \mathcal{E} aus (3.40) bzw. (3.41) zu minimieren, um die selektierte Geschwindigkeit zu finden, da im Rahmen der Selektionstheorie der Geometriefehler zumeist als vernachlässigbar angesehen wird.

Feste Materialparameter sind D , ε und d_ε . Die Péclet-Zahl $p = 0.1$ wird vorgegeben und daraus $\mathcal{U} = \mathcal{U}(p)$ gemäß (3.8) berechnet. Jetzt kann noch σ um die Vorhersage $\sigma^* = \frac{1}{\lambda_0} \varepsilon^{\frac{7}{4}}$ variiert werden. Bei Wahl der Materialparameter wie oben und $p = 0.1$ ist $\sigma^* \approx 0.00256$. Es sei ϑ_σ die Lösung des vollständigen Problems (3.5) für den Nadelkristall mit Oberflächeneffekten, und wir betrachten analog zum vorherigen Abschnitt $\Theta_\sigma := \vartheta_\sigma - \vartheta_0$. Dann erfüllt Θ_σ das Randwertproblem

$$0 = \Delta \Theta_\sigma + 2p \partial_y \Theta_\sigma \quad \text{in } \Omega, \quad (3.44a)$$

$$\Theta_\sigma|_{\Gamma} = -p\sigma A_\varepsilon \kappa \quad \text{und} \quad \Theta_\sigma|_{\partial\Omega} = (\vartheta_\sigma - \vartheta_0)|_{\partial\Omega} \approx 0. \quad (3.44b)$$

Für die numerische Berechnung können die Dirichlet-Werte auf $\partial\Omega$ weitgehend durch 0 ersetzt werden. Nur beim Übergang von $\partial\Omega$ zu Γ ist ein zu σ proportionaler Sprung mit einer Funktion h glatt zu interpolieren. Damit haben die Randbedingungen statt (3.44b) die Form

$$\Theta_\sigma|_{\Gamma} = -p\sigma A_\varepsilon \kappa \quad \text{und} \quad \Theta_\sigma|_{\partial\Omega} = 0 + \sigma h. \quad (3.45)$$

Offensichtlich ist jetzt Θ_σ linear abhängig von σ , d.h. $\Theta_{\mu\sigma} = \mu \Theta_\sigma \forall \mu \in \mathbb{R}$. Wiederum offensichtlich ist damit das Fehlerfunktional $\mathcal{E}(\vartheta_\sigma)$ aus (3.41) linear abhängig von σ , denn es ist

$$\mathcal{E}(\vartheta_\sigma) = \frac{1}{2p} \left(\int_{\tilde{\xi} < \Xi} \left([\partial_{e_\eta} \Theta_\sigma]_{\Gamma} \right)^2 d\tilde{\xi} \right)^{1/2}. \quad (3.46)$$

Es ist also nur ein lokales und globales Minimum bei $\sigma = 0$ zu erwarten. Das ist nach (3.4) der irrelevante Fall $R = \infty$ und $V_{tip} = 0$. Tatsächlich zeigen die Rechnungen einen mit σ linearen Verlauf des Fehlerfunktional, wie Abbildung 3.14 zu entnehmen ist. Die stationäre Kristallspitze liefert so keine Möglichkeit, eine Selektion von Dendriten vorherzusagen!

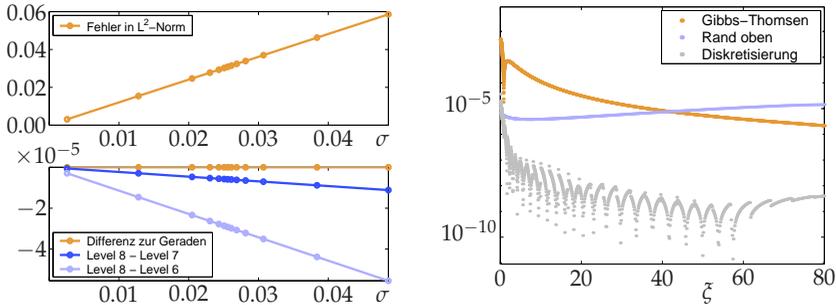


Abbildung 3.14: Links: L^2 -Norm des Fehler bei Variation von V_{tip} und Abweichung gegenüber einer Geraden. Rechts: Konsistenzfehler durch Oberflächeneffekte.

Es sind nun nach dem Scheitern dieses Ansatzes mögliche Schwächen des Vorgehens und Alternativen zu überdenken:

Durch eine andere Wahl der approximativen Randbedingungen in (3.45) ließe sich zwar die lineare Abhängigkeit der Lösung aufbrechen, aber das Verhalten an der Kristallspitze nur wenig beeinflussen. Die Inkonsistenz bezüglich der Stefan-Bedingung an der Kristallspitze ist in den Rechnungen von den Oberflächeneffekten in der Gibbs-Thomson-Beziehung bestimmt, die anderen Fehlerinflüsse sind davon um Größenordnungen getrennt, siehe Abbildungen 3.14 und 3.13.

Während bei der Selektionstheorie zunächst die Kleinheit der Péclet-Zahl vorausgesetzt werden muß, wobei die hier getroffene Wahl $p = 0.1$ unter Umständen nicht klein genug ist, ist der Minimierungsansatz mit dem Randwertproblem (3.44) unabhängig von der konkreten Größe von p . Aus praktischen Gründen kann die Péclet-Zahl nicht beliebig klein gewählt werden, da dann die Abstände der Ränder zur Kristallspitze sehr groß gewählt werden müssen. Insbesondere wird der Aufwand zum Glätten der Gitter in der nichtkonvexen flüssigen Phase dann unverträglich.

Die Einbeziehung einer Oseenschen Strömung nach Abschnitt 3.3.2 ändert an der linearen Abhängigkeit der Lösung von σ nichts. Zu gegebenen Péclet-Zahlen p und p_u lassen sich die zugehörige Unterkühlung $\mathcal{U}(p, p_u)$ nach (3.24)

und das Strömungsfeld u bestimmen. Mit (3.23) gibt es wieder eine exakte Lösung $\vartheta_{0,u}$ für das Temperaturfeld des isothermen Nadelkristalls. Es sei nun $\vartheta_{\sigma,u}$ die Lösung mit Oberflächeneffekten, und wir betrachten analog zu oben $\Theta_{\sigma,u} := \vartheta_{\sigma,u} - \vartheta_{0,u}$. Dann erfüllt $\Theta_{\sigma,u}$ das Randwertproblem

$$0 = \Delta \Theta_{\sigma,u} + 2p \partial_y \Theta_{\sigma,u} - 2p_u \langle \nabla \Theta_{\sigma,u}, u / u_\infty \rangle \quad \text{in } \Omega, \quad (3.47a)$$

$$\Theta_{\sigma,u} |_{\Gamma} = -p \sigma A_\varepsilon \kappa \quad \text{und} \quad \Theta_{\sigma,u} |_{\partial\Omega} = (\vartheta_{\sigma,u} - \vartheta_{0,u}) |_{\partial\Omega} \approx 0. \quad (3.47b)$$

Nach einer zu (3.45) analogen glatten Interpolation der Randbedingungen (3.47b) ist die Lösung des Randwertproblems (3.47) und damit der mit $\mathcal{E}(\vartheta_{\sigma,u})$ gemessene Konsistenzfehler linear abhängig von σ .

Ein anderer Ansatz besteht darin, ε und \mathcal{U} vorzugeben und daraus $p_{\varepsilon,\mathcal{M}}(\sigma)$ durch Umkehren von (3.39) in Abschnitt 3.4 zu berechnen. Es sei $\vartheta_{0,\varepsilon,\mathcal{M}}$ die zu $p_{\varepsilon,\mathcal{M}}(\sigma)$ gehörende Ivantsov-Lösung und $\vartheta_{\varepsilon,\mathcal{M}}$ sei die Lösung bei Berücksichtigung der Oberflächeneffekten. Wir betrachten zur Minimierung des Konsistenzfehlers analog zu oben die Differenz $\Theta_{\varepsilon,\mathcal{M}} := \vartheta_{\varepsilon,\mathcal{M}} - \vartheta_{0,\varepsilon,\mathcal{M}}$. Dann erfüllt $\Theta_{\varepsilon,\mathcal{M}}$ das Randwertproblem

$$0 = \Delta \Theta_{\varepsilon,\mathcal{M}} + 2p_{\varepsilon,\mathcal{M}}(\sigma) \partial_y \Theta_{\varepsilon,\mathcal{M}}, \quad \text{in } \Omega, \quad (3.48a)$$

$$\Theta_{\varepsilon,\mathcal{M}} |_{\Gamma} = -p_{\varepsilon,\mathcal{M}}(\sigma) \sigma A_\varepsilon \kappa, \quad \text{und} \quad \Theta_{\varepsilon,\mathcal{M}} |_{\partial\Omega} = (\vartheta_{\varepsilon,\mathcal{M}} - \vartheta_{0,\varepsilon,\mathcal{M}}) |_{\partial\Omega} \approx 0. \quad (3.48b)$$

Mit (3.48) wurde die lineare Abhängigkeit der Lösung des Randwertproblems von σ aufgebrochen, was die Möglichkeit nicht mehr ausschließt, lokale Minima von $\mathcal{E}(\vartheta_{\varepsilon,\mathcal{M}})$ zu finden. Aber Abbildung 3.14 legt nahe, daß die Oberflächeneffekte eine Formänderung der Phasengrenze Γ bewirken. Die Randbedingung macht eine mit σ proportionale Formänderung wie in Abschnitt 3.3.1 plausibel. Ließe sich nun ein Minimum des Konsistenzfehlers finden, dann ist immer noch unklar, ob, und wenn ja, wie dies durch die Formkorrektur verschoben wird.

Wird für die Phasengrenze Γ eine Formkorrektur berücksichtigt, so gibt es keine exakte Lösung ϑ_0 für einen *isothermen* Nadelkristall mehr. Das Funktional $\mathcal{E}(\vartheta)$ für den Konsistenzfehler ist jetzt gemäß (3.40) zu bestimmen. Auch für nichtverschwindendes σ muß das Funktional \mathcal{E} bei der exakten Lösung ϑ eines nicht parabelförmigen, *nicht isothermen* Nadelkristalls ein lokales und absolutes Minimum $\mathcal{E}(\vartheta) = 0$ annehmen. Die Formkorrektur kann entsprechend Abschnitt 3.3.1 als proportional zu σ und an der Kristallspitze in der Größenordnung von σ angenommen werden. Der konkrete Verlauf der Korrektur kann statt Verwendung von (3.19) angenähert werden, z.B. durch einen Term 4. Ordnung oder durch Interpolation der Asymptotiken aus (3.19) für $x \rightarrow 0$ und $x \rightarrow \infty$. In dem zu untersuchenden Randwertproblem (3.3) für ϑ treten neben den vorgegebenen Parametern \mathcal{U} und ε noch die Parameter p und σ auf, wobei p nicht mehr wie bei der Ivantsov-Parabel durch Umkehrung von (3.8) als $p = p(\mathcal{U})$ festgelegt ist. Wird nun trotzdem p gemäß (3.8) festgelegt, verbleibt nur ein Parameter

σ , der durch Minimierung des Konsistenzfehlers auf der Grenzfläche zu bestimmen ist. Ein Erfolg dieses Vorgehens ist aber nicht von vornherein sichergestellt, denn die getroffenen Annahmen für Stärke und Verlauf der Formkorrektur sowie für die Péclet-Zahl p könnten das gesuchte Minimum verdecken oder in von σ abhängiger Weise verschieben. Alternativ – oder zur Überprüfung dieser Annahmen – könnte über einen zwei- oder dreidimensionalen Parameterraum minimiert werden, wodurch das Vorgehen insgesamt deutlich aufwendiger würde. Unter numerischen Gesichtspunkten ist es ungünstig, nicht ähnlich wie oben Randwertprobleme für eine Differenz $\Theta := \vartheta - \vartheta_0$ lösen zu können, weil in dem Falle Θ in der Regel um Größenordnungen kleiner als die Lösung ϑ_0 des isothermen Nadelkristalls ist.

Auch nach einer erfolgreichen Selektionssausage durch die Minimierung stationärer Probleme ist noch die Relevanz dieser Ergebnisse für reale Dendriten mit störungsbedingten Seitenarmen zu diskutieren. Es verbleibt die Unsicherheit, ob die gemachten Vereinfachungen und Idealisierungen, wie Vernachlässigung der Seitenarme, unendliche Ausdehnung des Nadelkristalls oder auch das Verschwinden des kinetischen Koeffizienten, nicht das richtige Minimum verdecken würden.

Kapitel 4

Grenzflächendynamik

Beim instationären Kristallwachstum ist neben der zeitlichen Beschreibung des Temperaturfeldes das Nachverfolgen der Grenzflächenbewegung ein weiterer Bestandteil der Problemlösung. *Topologieänderungen*, also das Zusammenwachsen oder Abtrennen von Teilen der Phasen, sind hierbei im Gegensatz zu *Durchdringungen* der Grenzfläche grundsätzlich erlaubt.

Bei der numerischen Lösung eines Problems mit ruhender Grenzfläche läßt sich diese am genauesten und besonders einfach berücksichtigen, wenn das verwendete Gitter der gegebenen Randgeometrie der Teilgebiete Ω^- und Ω^+ angepaßt ist. In der Regel erfordert das die Verwendung unstrukturierte Gitter. Steht die Benutzung einfacher Algorithmen auf kartesischen Gittern im Vordergrund, so müssen zusätzlich Bedingungen auf Grenzflächen und Gebietsrändern im Inneren von Elementen bzw. Zellen berücksichtigt werden, beispielsweise mit der *Imersed-Boundary-Method* [Pes77].

Sind die Teilgebiete zeitlich veränderlich, so kann versucht werden, sie auf zeitlich unveränderliche Referenzgebiete abzubilden und damit die bewegte Grenzfläche auf eine stehende. Dieser als *Arbitrary Lagrangian-Eulerian* (ALE) bezeichnete Ansatz wird hier nicht weiter verfolgt. Denn durch den physikalischen Hintergrund wird er zwar bei durch Masseerhaltung bestimmten Problemen nahegelegt, beispielsweise der Deformation von Körpern und damit verbundenen Strömungen [QTV00, MT01], nicht aber bei Umwandlungsprozessen wie beispielsweise Erstarrung oder Verbrennung. Ein Verfahren dieser Art wird in [Sch02] für das einseitige Modell des dendritischen Wachstums vorgestellt und analysiert, wobei darauf hingewiesen wird, daß es jeweils nur für kurze Zeitintervalle einsetzbar ist und dann neue Referenzgebiete gewählt werden müssen. Topologieänderungen der Teilgebiete lassen sich mit Methoden wie ALE prinzipiell nicht berücksichtigen.

Dem stehen Ansätze für bewegte Grenzflächen gegenüber, die das für die Volumengleichungen verwendete Gitter von der sich zeitlich ändernden Geo-

metrie der Teilvolumina Ω^- und Ω^+ entkoppeln und stattdessen an dem festen Gebiet $\Omega = \Omega^- \cup \Omega^+$ ausrichten. Das erlaubt dann entweder den Einsatz kartesischer Gitter, mit dazugehörigen einfachen, genauen und effizienten Algorithmen, oder eine flexiblere Verteilung der Gitterpunkte. So wird das Phasenumwandlungsproblem mit scharfer Grenzfläche in [BMR01] durch eine Enthalpie-Formulierung in ein Problem mit einer steilen Front umgewandelt und dann mit einer *Moving-Mesh*- oder *r*-Methode [MM81, LCHR03] das Gitter nach dem qualitativen Verhalten der Lösung, jedoch ohne Einschränkungen durch Gebietsgrenzen, angepaßt. Die Phasenfeld-Methode, auf die im Abschnitt 4.5 eingegangen wird, benutzt ebenfalls eine solche Umformulierung auf ein Problem mit einer bewegten Front. Sie beruht aber auf einer Modellierung des Kristallwachstums mit einer diffusen Grenzfläche.

Explizite Grenzflächen-Verfahren wie *Front-Tracking* oder die *Segment-Projektions*-Methode, bei denen für die Grenzfläche eigene niederdimensionale Gitter benutzt werden, sind in Abschnitt 4.3 dargestellt. Als Alternativen dazu gibt es verschiedene Ansätze zur impliziten Beschreibung von Γ , beispielsweise durch *Volumen- oder Masseanteile* einzelner Phasen oder eine abstrakte Level-Set-Funktion wie in Abschnitt 4.4. Während sich mit abstrakten Level-Set-Funktionen die geometrischen Größen der Grenzfläche Γ besser bestimmen lassen, sind Volumen- und Masseanteile von Vorteil bei Problemen, die Masseerhaltung der Phasen erfordern, beispielsweise Transportprobleme wie Zweiphasenströmungen. Hierfür wurde z.B. die *Volume-Of-Fluid*-Methode (VOF) [HN81] entwickelt, die Volumenanteile auf einem kartesischen Gitter benutzt. Weiterhin gibt es für die Massenerhaltung kombinierte Verfahren, so in [SP00] eine Kombination VOF-Level-Set oder das Partikel-Level-Set-Verfahren in [EFF02]. Dieser Aspekt spielt hier aber im weiteren keine Rolle mehr.

4.1 Geometrische partielle Differentialgleichungen

Bei der Formulierung eines *geometrischen Problems* wird zu einer gegebenen Fläche die weitere zeitliche Entwicklung festgelegt durch die Vorgabe der Normalgeschwindigkeit $x_t = v = Vn$ in Abhängigkeit von Ort, Zeit und den geometrischen Eigenschaften der Fläche n und κ . Wichtige Beispiele hierfür sind

$$\begin{array}{ll} \text{konstante Normalgeschwindigkeit:} & V = 1, \\ \text{Krümmungsfluß:} & V = -\kappa. \end{array}$$

Aus dieser geometrischen Aufgabestellung soll nun eine Beschreibung der Grenzflächenbewegung als Problem partieller Differentialgleichungen abgeleitet werden.

Wir können die Bewegung einer Fläche Γ nachverfolgen, indem wir die Bahnen $x(t)$ realer oder gedachter infinitesimaler Partikel in der Fläche beobachten. Weil die Beschreibung einer Fläche nicht eindeutig ist, wie in Abschnitt 2.1 dargestellt, ist dies auch von ihrer Bewegung nicht zu erwarten. Offensichtlich füllt eine auf der Stelle um ihre eigene Achse rotierende Kugel stets die gleiche Teilmenge des Raumes aus. Eine Bewegung in Tangentialrichtung ändert also die Fläche nicht. In der Level-Set-Beschreibung von Flächen liegt ein Punkt, der sich mit der Fläche Γ mitbewegt, stets in der Nullstellenmenge der Level-Set-Funktion Φ . Entlang der Bahn eines solchen Punktes $x(t)$ gilt daher

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial}{\partial t} \Phi(t, x(t)) = \Phi_t(t, x) + \langle \nabla \Phi(t, x), x_t \rangle \\ &= \Phi_t(t, x) + \langle \nabla \Phi(t, x), V(t, x, n, \kappa) n \rangle \\ &= \Phi_t(t, x) - V(t, x, n, \kappa) \|\nabla \Phi(t, x)\|, \end{aligned}$$

wobei im letzten Schritt die Definition (2.4a), $n = -\frac{\nabla \Phi}{\|\nabla \Phi\|}$, eingesetzt wurde. Diese Gleichung läßt sich auf beliebige Punkte im Raum übertragen, und wir erhalten die *Level-Set-Gleichung*¹

$$\Phi_t - V \|\nabla \Phi\| = 0 \quad \text{in } [0, T] \times \Omega. \quad (4.1)$$

Falls die Normalgeschwindigkeit nicht von der Krümmung abhängt, ist dies eine vollständig nichtlineare Gleichung erster Ordnung vom Hamilton-Jacobi-Typ. Ist andererseits V abhängig von der Krümmung, so ist (4.1) eine vollständig nichtlineare Gleichung zweiter Ordnung. Speziell für den Krümmungsfluß $V = -\kappa$ ist es günstig, die Gleichung (4.1) in der Form

$$\frac{\Phi_t}{\|\nabla \Phi\|} = \kappa = -\operatorname{div} \left(\frac{\nabla \Phi}{\|\nabla \Phi\|} \right)$$

zu schreiben, um so eine Variationsformulierung zu erhalten, obwohl die Gleichung nicht in Divergenzform ist:

$$\int_{\Omega} \frac{\varphi \Phi_t}{\|\nabla \Phi\|} dx = \int_{\Omega} \frac{\langle \nabla \varphi, \nabla \Phi \rangle}{\|\nabla \Phi\|} dx \quad \text{für alle } \varphi \in H_0^1(\Omega), t \in [0, T].$$

Dies ist in Analogie zum parabolischen Fall der Wärmeleitung zu sehen, bei dem die Nenner verschwinden. Der Krümmungsfluß hat eine ähnliche glättende Wirkung wie die lineare Diffusion, so daß sich beliebige geschlossene ebene Ausgangskurven auf mit der Zeit verschwindende Kreise zurückziehen [Gra87]. Die

1. Aufgrund der Festlegung der Normalenrichtung in $-\nabla \Phi$ -Richtung tritt in dieser Gleichung vor V im Vergleich zu einem Großteil der Literatur über Level-Set-Methoden das umgekehrte Vorzeichen auf.

Verallgemeinerung auf anisotrope mittlere Krümmung, wie in Abschnitt 2.1, ist einfach und steht auch in einer Beziehung zur Phasenfeld-Methode in Abschnitt 4.5.

Wenn dies durch den Modellierungshintergrund nahegelegt wird, kann aufgrund äußerer Einflüsse, also nicht der Geometrie von Γ , eine Advektion der Punkte auf der Fläche auch in tangentialer Richtung zugelassen werden. Ein solches Advektionsfeld w sollte nicht auf die Normalen projiziert, sondern gesondert berücksichtigt werden. Die Geschwindigkeit der Partikel auf Γ ist dann $x_t = v = Vn + w$, woraus analog zu (4.1) folgt

$$\Phi_t + \langle \nabla \Phi, w \rangle - V \|\nabla \Phi\| = 0 \quad \text{in } [0, T] \times \Omega. \quad (4.2)$$

Die Level-Set Gleichung (4.1) oder (4.2) wird durch eine Vorgabe

$$\Phi(0, x) = \Phi_0(x) \quad \text{für } x \in \Omega \quad (4.3)$$

zu einem Anfangswertproblem vervollständigt. Die implizite Annahme der Level-Set-Beschreibung von Flächen, daß die Nullstellenmenge eine niederdimensionale Teilmenge des Raumes sei, ist nicht durch die Gleichungen (4.1) und (4.3) sichergestellt. Vielmehr können Nullstellenmengen der Anfangswertvorgabe ein Inneres entwickeln, was als *fattening* bezeichnet wird [BNP98].

Graphen

Bei einer Beschreibung der bewegten Fläche als Graph erhalten wir mit (2.5) auf analogem Wege das Anfangswertproblem

$$\gamma_t + V \sqrt{1 + \|\nabla_x \gamma\|^2} = 0 \quad \text{in } [0, T] \times \Omega, \quad (4.4a)$$

$$\gamma(0, x) = \gamma_0(x) \quad \text{für } x \in \Omega. \quad (4.4b)$$

Auch in diesem Fall ist bekannt, daß die Grapheneigenschaft nicht bewahrt bleiben muß, sondern es beispielsweise zu Abschnürungen mit vertikaler Tangente kommen kann.

Parametrisierung

Bei einer Parametrisierung der Grenzfläche Γ ist die Geschwindigkeit von Partikeln darauf durch $v = \partial_t \Psi$ gegeben. Das Anfangswertproblem wird auf dem niederdimensionalen Parameterbereich gestellt

$$\Psi_t = Vn + w \quad \text{in } [0, T] \times \mathcal{D}_\Psi, \quad (4.5a)$$

$$\Psi(0, s) = \Psi_0(s) \quad \text{für } s \in \mathcal{D}_\Psi. \quad (4.5b)$$

Für die geometrische Aufgabestellung einer vorgegebenen Normalgeschwindigkeit V ist die Normalenrichtung hier explizit anzugeben, nur im Fall des Krümmungsflusses $V = -\kappa$ ist nach (2.2)

$$\Psi_t = \underline{\Delta}_{\Gamma(t)} \text{id}_{\Gamma(t)} \circ \Psi \quad \text{in } [0, T] \times \mathcal{D}_\Psi,$$

und wir erhalten wieder eine Variationsformulierung des Problems [GT98], die die Beziehung des Krümmungsflusses zur Wärmeleitung illustriert

$$\int_{\Omega} \Psi_t \varphi \, dx = \int_{\Omega} \left\langle \underline{\nabla}_{\Gamma(t)} \Psi, \underline{\nabla}_{\Gamma(t)} \varphi \right\rangle dx \quad \forall \varphi \in C_0^1(\Omega), t \in [0, T]. \quad (4.6)$$

Stationäre Level-Set Beschreibung

Bei einer Fläche, die sich ausschließlich in entweder positiver oder negativer Normalenrichtung bewegt, gibt es alternativ neben der Level-Set-Formulierung mit dem Anfangswertproblem aus (4.1) und (4.3) eine stationäre Formulierung als Randwertproblem. Wegen der monotonen Bewegung der Fläche $\Gamma(t)$ läßt sich jedem Ort x eine eindeutige Zeit $t =: -\Phi(x)$ zuordnen, zu der dieser erstmals von $\Gamma(t)$ erreicht wird. Die Fläche ist also wieder zu jedem Zeitpunkt t Höhenlinie – oder allgemeiner Isomenge – einer Funktion Φ , nur nicht mehr notwendigerweise zum Wert 0. Somit ist die Flächennormale analog zu (2.4a) durch $n = -\frac{\nabla\Phi}{\|\nabla\Phi\|}$ gegeben.

Wenn wir die Bahn eines Punktes $x(t)$ aus der Grenzfläche mitverfolgen, dann gilt dabei stets $\Phi(x(t)) = -t$. Mit der Vorgabe einer zeitunabhängigen Normalgeschwindigkeit $x_t = V(x, n, \kappa) n$ folgt damit

$$-1 = \frac{\partial}{\partial t} \Phi(x(t)) = \langle \nabla \Phi, x_t(t) \rangle = V \langle \nabla \Phi, n \rangle.$$

Wir bekommen das stationäre Randwertproblem²

$$V \|\nabla \Phi\| = 1 \quad \text{in } \Omega, \quad (4.7a)$$

$$\Phi(x) = 0 \quad \text{auf } \Gamma(0), \quad (4.7b)$$

mit einer Differentialgleichung, die vom Eikonal-Typ ist, wenn V nur vom Ort x abhängt. Die Zeit des ersten Erreichens eines Punktes im Raum ist ein direktes Maß für dessen mit der Erreichbarkeit gewichteten Abstand von der Ausgangsfläche $\Gamma(0)$. Läßt sich jeder Punkt gleich gut erreichen, so bewegt sich die Fläche mit konstanter Geschwindigkeit in Normalenrichtung. Aufgrund der Vorzeichenkonventionen ist für die Berechnung der vorzeichenbehafteten Abstandsfunktion $\Phi = d_\Gamma$, mit $d_\Gamma > 0$ in Ω^+ und $d_\Gamma < 0$ in Ω^- die Normalgeschwindigkeit $V = 1$ zu wählen, und wir erhalten aus (4.7a)

$$\|\nabla d_\Gamma\| = 1 \quad \text{in } \Omega. \quad (4.8)$$

2. Das Vorzeichen der Geschwindigkeit V ist in diesem Fall im Einklang mit der Literatur.

4.2 Singularitäten, verallgemeinerte Lösungen

Bei Vorgabe konstanter Normalgeschwindigkeit kann eine bewegte Fläche innerhalb endlicher Zeit eine Ecke entwickeln, obwohl sie anfangs glatt ist. Weil mit dem Auftreten von Ecken die Normalenrichtung nicht mehr überall wohldefiniert ist, kann das Problem der Grenzflächenbewegung ab diesem Zeitpunkt keine klassische bzw. starke Lösung mehr haben.

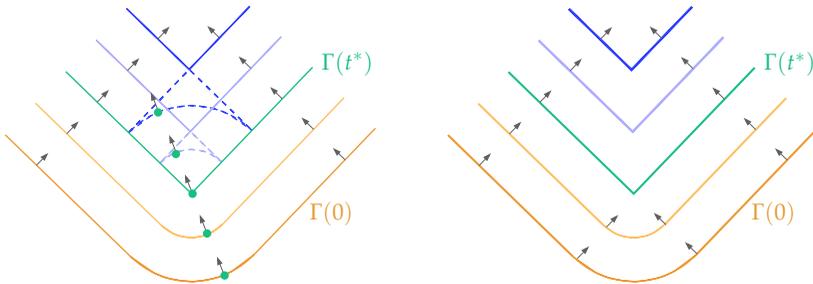


Abbildung 4.1: Entstehen einer Ecke und Fortsetzung der Lösung: links mit Schwalbenschwanz, rechts Entropielösung.

In dem Beispiel in Abbildung 4.1 ist die Geschwindigkeit des markierten Partikels in der Fläche Γ stets in Betrag und Richtung konstant. Somit könnten wir eine verallgemeinerte Lösung des geometrischen Problems definieren, indem alle Partikel mit konstanter Geschwindigkeit über die entstandene Ecke weitergeführt werden. Nun durchdringt die Fläche sich aber selbst und besitzt nicht mehr an allen Stellen den gleichen Abstand von der Anfangsfläche. Dieser hier unerwünschte Effekt lässt sich durch Abschneiden der Überfaltungen beseitigen, und wir gelangen so zu einer anderen verallgemeinerten Lösung. Es verschwinden nun Informationen über die Gestalt der Ausgangsfläche, was die Bezeichnung als *Entropielösung* nahelegt.

Wird der Geschwindigkeitsvorgabe ein beliebig kleiner negativer Krümmungsterm zugefügt, so bleibt eine anfangs glatte Fläche glatt. Denn wo sich sonst eine Ecke bilden würde, sorgt nun die Krümmung für eine größere Geschwindigkeit, mit der die Selbstdurchdringung verhindert wird. Mit immer kleiner werdender Korrektur nähern sich die Lösungen der so modifizierten Probleme dann tatsächlich der Entropielösung an, weshalb man diese auch als *Viskositätslösung* bezeichnen kann.

Mit den Singularitäten der Flächen und verallgemeinerten Lösungen des geometrischen Problems stellt sich die Frage nach verallgemeinerten Lösungen der zugehörigen geometrischen partiellen Differentialgleichungen. Das Entste-

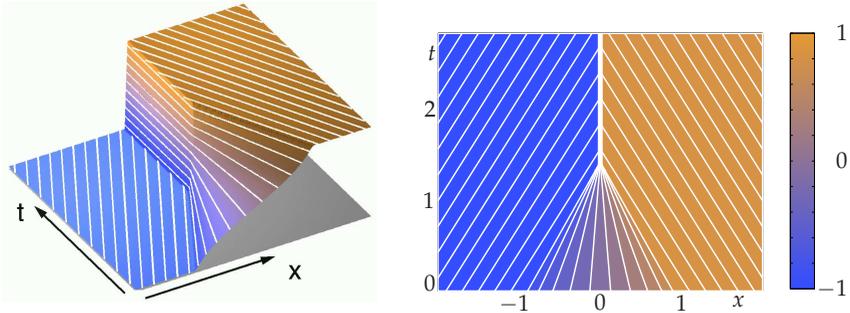


Abbildung 4.2: Entstehen einer Stoßfront in der Lösung bei dem Beispiel in Abb. 4.1. Links dreidimensionale Darstellung, rechts Draufsicht.

hen von Singularitäten aus glatten Anfangszuständen und Entropielösungen als Limes von Lösungen viskos modifizierter Gleichungen sind im Zusammenhang mit hyperbolischen Erhaltungsgleichungen bekannt [Eva98, War99].

In dem obigen Beispiel aus Abbildung 4.1 läßt sich die Fläche Γ als Graph einer Funktion $\gamma : \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}$ beschreiben. Dann gilt mit (4.4a) und der Vorgabe $V = 1$

$$\partial_t \gamma + 1 \sqrt{1 + (\partial_x \gamma)^2} = 0.$$

Nun leiten wir formal die Gleichung nach x ab, vertauschen die Reihenfolge der Differentiation und definieren $u := \partial_x \gamma$. Damit erhalten wir eine skalare Erhaltungsgleichung mit der konvexen Flußfunktion $F(u) = \sqrt{1 + u^2}$

$$u_t + \left(\sqrt{1 + u^2} \right)_x = u_t + (F(u))_x = 0.$$

Mögliche Anfangswerte zur Beschreibung der Situation in Abbildung 4.1 sind

$$\gamma(0, x) = \begin{cases} -x & \text{für } x < -1 \\ \sqrt{2 - x^2} & \text{für } |x| \leq 1 \\ x & \text{für } x > 1, \end{cases} \quad \text{bzw. } u(0, x) = \begin{cases} -1 & \text{für } x < -1 \\ \frac{-x}{\sqrt{2 - x^2}} & \text{für } |x| \leq 1 \\ 1 & \text{für } x > 1. \end{cases} \quad (4.9)$$

Entlang der charakteristischen Linien ist die Lösung der Erhaltungsgleichung konstant. Der Anstieg der charakteristischen Grundkurven in der (x, t) -Ebene ist durch den jeweiligen Anfangswert festgelegt als $1/F_u(u)$. Zum Zeitpunkt $t = \sqrt{2}$ treffen sich alle charakteristischen Grundkurven zu Anfangspunkten aus $x \in [-1, 1]$. Es kommt zu einem Sprung in der Lösungsfunktion, einem Stoß. Die Stoßgeschwindigkeit s ist mit der Rankine-Hougoniot-Bedingung

durch die Sprunghöhe der links- und rechtsseitigen Werte u_L und u_R sowie der zugehörigen der Flüsse festgelegt

$$(u_L - u_R)s - (F(u_L) - F(u_R)) = 0.$$

In diesem konkreten Fall, mit Anfangswerten aus (4.9), ist die Flußdifferenz Null, und es folgt $s = 0$. Setzen wir für die Geschwindigkeit $V = 1 - \mu\kappa$ ein, so erhalten wir die modifizierte Erhaltungsgleichung mit einem nichtlinearen viskosen Term auf der rechten Seite

$$u_t + \left(\sqrt{1 + u^2} \right)_x = \mu \left(\frac{u_x}{1 + u^2} \right)_x,$$

deren glatte Lösungen für $\mu \rightarrow 0$ gegen die Entropielösung des entsprechenden Anfangswertproblems gehen.

Bei dem Problem einer vorspringenden Ecke und Bewegung mit konstanter Geschwindigkeit ist die verallgemeinerte Lösung durch die Vorschrift gegeben, daß alle Punkte den gleichen Abstand von der Ausgangskurve haben sollen. Ecken der Fläche korrespondieren bei der Beschreibung durch einen Graph mit Unstetigkeiten der Ableitung. Für die Ableitungen haben wir eine Erhaltungsgleichung hergeleitet. Während spitze Einbuchtungen dabei mit Stößen in Beziehung zu setzen sind, gehören zu vorstehenden Ecken Verdünnungsfächer in der Lösung der Erhaltungsgleichung, wie in Abbildung 4.3 dargestellt ist.

Auch wenn keine globale Beschreibung durch Graphen möglich ist, beispielsweise für geschlossene Grenzflächen, gibt es einen analogen Zusammenhang. Aus einer allgemeinen Hamilton-Jacobi-Gleichung in einer Raumdimension erhalten wir durch formales Ableiten stets eine skalare Erhaltungsgleichung.

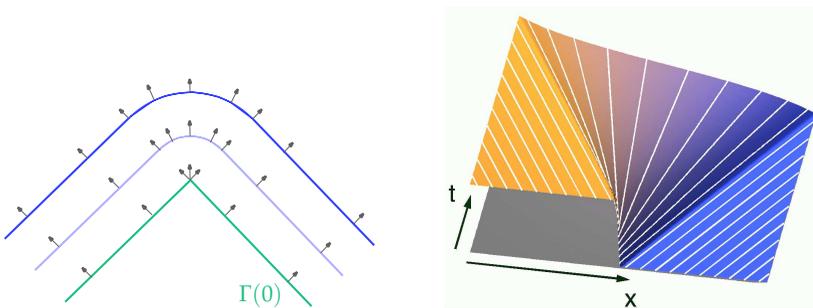


Abbildung 4.3: Links: Glättung einer Ecke bei Bewegung mit konstanter Geschwindigkeit. Rechts: Verdünnungsfächer der zugehörigen Erhaltungsgleichung.

Im Fall der eindimensionalen Level-Set-Gleichung, die im Vergleich zum gerade betrachteten Fall nur die Bewegung von Grenzpunkten auf einer Geraden beschreibt, ist die Flußfunktion dann aber *nichtkonvex*. Bei höherer Raumdimension $d > 1$ führt die Umformung der *skalaren* Hamilton-Jacobi-Gleichung auf ein *System* von entsprechend d Erhaltungsgleichungen.

Anstatt über den Umweg zugeordneter Probleme von Erhaltungsgleichungen, lassen sich die verallgemeinerten Lösungen direkt mit der Theorie der *Viskositätslösungen* vollständig nichtlinearer partieller Differentialgleichungen charakterisieren. Dabei werden alle vorkommenden Ableitungen von der gesuchten Lösung Φ auf glatte Testfunktionen φ verlagert und die punktweise Erfüllung von Ungleichungen gefordert [CL83, Eva98].

Definition: Φ ist *Viskositätslösung* der Hamilton-Jacobi-Gleichung

$$\Phi_t(t, x) + H(x, \nabla\Phi(t, x)) = 0 \quad \text{in } [0, \infty) \times \mathbb{R}^d,$$

wenn an jeder Stelle $(t^*, x^*) \in [0, \infty) \times \mathbb{R}^d$, gilt:

1. Jedes $\varphi \in C^\infty([0, \infty) \times \mathbb{R}^d)$, so daß $\Phi - \varphi$ ein lokales *Maximum* in (t^*, x^*) hat, erfüllt $\varphi_t + H(x^*, \nabla\varphi(t^*, x^*)) \leq 0$,
2. Jedes $\varphi \in C^\infty([0, \infty) \times \mathbb{R}^d)$, so daß $\Phi - \varphi$ ein lokales *Minimum* in (t^*, x^*) hat, erfüllt $\varphi_t + H(x^*, \nabla\varphi(t^*, x^*)) \geq 0$.

Diese Definition von Viskositätslösung einer Hamilton-Jacobi-Gleichung ist gerechtfertigt, da gezeigt wurde, daß

- diese bei verschwindender Viskosität übereinstimmt mit dem Limes der Lösungen der modifizierten Gleichungen,
- eine glatte Lösung auch eine Viskositätslösung ist,
- die verallgemeinerte Lösung eindeutig ist und
- die starke Lösung dort mit der Viskositätslösung übereinstimmt, wo diese glatt ist.

Weiterhin läßt sich auf ähnliche Weise die Viskositätslösung für die Eikonalgleichung (4.7a) zur stationären Beschreibung einseitig gerichteter Grenzflächenbewegung definieren [CL83].

4.3 Explizite Grenzflächen-Verfahren

Die Grenzfläche wird bei diesen Verfahren durch die explizite Angabe der Koordinaten von darin liegenden Punkten beschrieben. In der numerischen Rechnung wirkt sich das vorteilhaft aus. Einerseits ist so die gegenüber dem Volumen geringere Dimension der Fläche für den Rechenaufwand bestimmend, andererseits ist die Position der Grenzfläche mit großer Genauigkeit verfügbar, da sie explizit vorliegt und keine Rekonstruktion der Grenzfläche benötigt wird.

Die Implementierung der Verfahren muß zwangsläufig stärkere Unterschiede zwischen dem zwei- und dem dreidimensionalen Fall aufweisen als andere Verfahren. Bei 2D-Rechnungen ist es sehr einfach möglich, Knoten in die Grenzfläche einzufügen oder daraus zu entfernen, denn es gibt dort nur eine Vorher-Nachher-Beziehung der Punkte. Im dreidimensionalen Fall sind Nachbarschaften viel komplizierter und es müssen stark deformierte Gitter, mit sehr stumpfen oder spitzen Winkeln oder sogar Überschneidungen, verhindert werden.

Im Kontrast zu anderen Verfahren läßt sich unterschiedliches Grenzflächenverhalten modellieren. Bei Bedarf können Teile von Grenzflächen aufgetrennt, zusammengefügt oder entfernt werden. Topologieänderungen der Phasen bedürfen also eines aktiven Eingreifens. Selbstdurchdringungen der Grenzfläche sind prinzipiell möglich und müssen bei Problemen wie der Erstarrung aktiv unterdrückt werden. Diese beiden Aufgaben sind wiederum im dreidimensionalen Fall wesentlich schwieriger.

Front-Tracking-Verfahren

Front-Tracking-Verfahren benutzen eine Parametrisierung der Grenzfläche und folgen damit einem Ansatz von mit der Grenzfläche mitbewegten Lagrange-schen Koordinaten.

Beim Kristallwachstum wird mit der Stefan-Bedingung (2.39b) nur eine Bewegung der Phasengrenze in Normalenrichtung vorgegeben. Die Orientierung der Front-Tracking-Verfahren an der Bewegung von Partikeln führt nach Abschnitt 4.2 zu einer Neigung, bei Auftreten von Ecken der Grenzfläche Schwalbenschwänze mit Selbstdurchdringung auszubilden. Aus diesem Grund, und um starke Verzerrungen des verwendeten Gitters zu vermeiden, sind Nachbearbeitungsschritte zum tangentialen Ausgleichen der Gitterknoten nötig, die sich auch als das Zufügen des Terms w in der Differentialgleichung (4.5a) auffassen lassen.

Front-Tracking-Verfahren wurden zur Berechnung von zweidimensionalen dendritischen Kristallen mit Finite-Differenzen-Methoden auf einem festen kartesischen Gitter für die Volumengleichungen kombiniert. In [JT96] wird zur Berücksichtigung der Oberflächenterme die *Imersed-Boundary-Method* [Pes77] benutzt. Dabei werden Singularitäten, in diesem Fall durch einen distributionellen Quellterm wie in (2.33), durch Regularisierung auf Knoten in der Nachbarschaft der Phasengrenze interpoliert. Die Zeitschrittweite ist aus Stabilitätsgründen begrenzt durch die örtliche Gitterweite und darüber hinaus durch die Forderung, daß Γ sich nicht um mehr als $\frac{1}{10}$ der Gitterweite bewegen darf. In [UMS99, UMK03] wird die Grenzfläche scharf beibehalten in dem Sinn, daß die Wirkung der Oberflächeneinflüsse jeweils auf eine Gitterzelle beschränkt ist. Dabei wird im Gegensatz zur *Imersed-Interface-Method* [LL94] die Notwendigkeit von lokal gedrehten Gittern vermieden. In [ZH01] wird ein Finite-Elemente-

Verfahren auf einem kartesischen Gitter benutzt. Die Stefan-Bedingung wird in der schwachen Form durch ein Linienintegral berücksichtigt, für das numerisch elementweise die einseitigen Ableitungen der Temperatur von außerhalb des Elements zu approximieren sind.

Bei nichtverschwindendem kinetischen Koeffizient $\beta \neq 0$ hat die Gibbs-Thomson-Bedingung (2.39c) die Form eines Hauptkrümmungsflusses mit Quellterm. Damit bietet sich eine Finite-Elemente-Approximation der Variationsformulierung (4.6) an. In [Sch93] wurden so zwei- und dreidimensionale Kristalle auf adaptiv verfeinerten unstrukturierten Gittern berechnet. Es wird dabei eine halbimplizite Zeitdiskretisierung vorgenommen, bei der die Tangentialableitungen stets auf der gegebenen Oberfläche des letzten Zeitschritts berechnet werden

$$\int_{\Omega} \left(\Psi^{(n+1)} - \Psi^{(n)} \right) \varphi \, dx = \Delta t \int_{\Omega} \left\langle \nabla_{\Gamma^{(n)}(t)} \Psi^{(n+1)}, \nabla_{\Gamma^{(n)}(t)} \varphi \right\rangle dx.$$

Die starken Deformationen der Kristalloberfläche erfordern dabei ein Knotenschieben, um Verzerrungen des Gitters auszugleichen.

Segment-Projektions-Methode

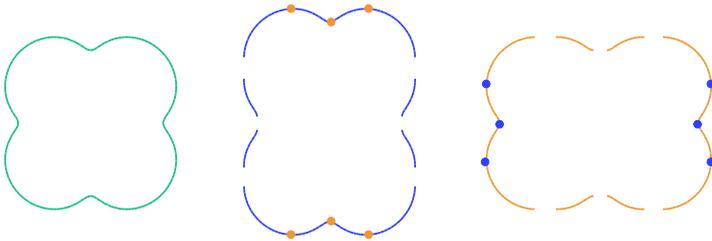


Abbildung 4.4: Aufteilung einer Kurve (links) in x -Segmente (mitte) und y -Segmente (rechts). Die markierten Extrema der Segmente geben die Trennstellen für die jeweils andere Aufteilung an.

Die Segment-Projektions-Methode [TE03] wurde entwickelt, um den Vorteil der Rechnung mit niederdimensionalen Grenzflächenobjekten mit Eulerschen Koordinaten auf einem festen Gitter zu kombinieren. Dazu wird im zweidimensionalen Fall eine Grenzfläche, das ist dann eine Kurve, aufgeteilt in überlappende Segmente, die jeweils als Graphen über der x - bzw. y -Achse dargestellt werden können. Wie in Abbildung 4.4 skizziert, wird die Aufteilung so vorgenommen, daß die lokalen Extrema der x -Segmente gerade die Trenn- bzw. Verbindungsstellen für die y -Segmente sind und umgekehrt. Auf diese Weise

werden stets mehr Segmente benutzt als die minimale Anzahl, die zur lokalen Darstellung als Graphen nötig ist.

Auf jedem Advektionsschritt der Grenzfläche folgt die Neuaufteilung der Segmente. Dabei sind jeweils wieder die Extrema der Segmente zu suchen, und es können, abhängig vom Modellierungs-Hintergrund, Topologieänderungen der Phasen vorgenommen werden. Danach ist noch eine Interpolation der jeweils überlappenden Segmente nötig, um die Grenzflächenbeschreibung konsistent zu halten.

Das Verfahren läßt sich auch im dreidimensionalen Fall anwenden. Dann werden drei überlappende Sätze von Segmenten aus Graphen über den Koordinatenebenen benötigt. Es wurde aber noch kein allgemeiner Algorithmus für die Neuaufteilungen der Segmente entwickelt [ERT02].

4.4 Level-Set-Methode

Aufgrund der Schwäche einer impliziten Darstellung von Grenzflächen durch Volumenanteile bei Rekonstruktion der geometrischen Eigenschaften wurde in [OS88] das Level-Set-Verfahren entwickelt. Es benutzt für die Beschreibung der Grenzflächenbewegung das Anfangswertproblem (4.1) und (4.3). Einen Überblick über die weitere Entwicklung der Methoden geben die Arbeiten [Set99, OF02].

Wie im Fall des dendritischen Kristallwachstums sind oftmals durch das der Grenzflächenbewegung zugrundeliegende Problem weder die Anfangswerte $\Phi_0(x)$ noch die Geschwindigkeit $V(t, x)$ im ganzen Raum Ω festgelegt. Die Vorgabe der Anfangswerte wird als *Initialisierung* bezeichnet. Naheliegend ist die Wahl der vorzeichenbehafteten Abstandsfunktion $\Phi = d_\Gamma$. Die Normalgeschwindigkeit muß geeignet von der Fläche in das Volumen fortgesetzt werden, worauf weiter unten eingegangen wird. Nach einiger Zeit kann die Funktion Φ steile Flanken oder sehr flache Abschnitte ausgebildet haben, was zu Instabilität der numerischen Rechnungen führen kann. Dann wird eine *Reinitialisierung* der Level-Sets auf die Abstandsfunktion notwendig, womit aber die Lage von Γ nicht verändert werden sollte. Das iterative Verfahren für diese Reinitialisierung in [SSO94] beruht darauf, daß die Abstandsfunktion eine stationäre Lösung der Gleichung

$$\Phi_t = \text{sign}(\Phi^*)(1 - \|\nabla\Phi\|) \quad (4.10)$$

ist, wobei hier die Grenzfläche nur implizit als Nullstellenmenge der temporär genutzten Funktion Φ^* einfließt. Die Störung der Grenzfläche läßt sich mit dem *Subcell-Fix* von [RS00] verringern.

Mit dem Level-Set-Verfahren entsteht ein erhöhter Rechenaufwand, da mit der Grenzfläche alle anderen Höhenmengen mitbewegt werden müssen. Der

Mehraufwand läßt sich allerdings eingrenzen, indem nur in einem engen Band um die Grenzfläche gerechnet wird und außerhalb des Bandes konstante Werte für Φ angenommen werden. Abhängig von der Bewegung der Grenzfläche ist dann von Zeit zu Zeit eine weitere Reinitialisierung nötig, bei der diesmal die erneute Festlegung eines Bandes gemeint ist [Cho93, AS95].

Fortsetzung der Geschwindigkeit

Bei der Simulation von Zweiphasenströmungen kann oft davon ausgegangen werden, daß die Grenzflächengeschwindigkeit der dortigen Strömungsgeschwindigkeit entspricht. Es ist daher naheliegend, in einem solchen Fall im gesamten Raum die Level-Sets mit der Fluidgeschwindigkeit zu bewegen. Dieser Ansatz wird beispielsweise in [CHMO96] benutzt und nach jedem Zeitschritt dann eine Reinitialisierung mittels der Gleichung (4.10) vorgenommen. Zusätzlich muß zur Massenerhaltung noch eine weitere Korrektur der Level-Sets erfolgen.

Reinitialisierungen lassen sich vermeiden, wenn das Geschwindigkeitsfeld V sicherstellt, daß ein Level-Set, das anfänglich als Abstandsfunktion zur Grenzfläche gewählt wurde, die Eigenschaft $\|\nabla\Phi\| = 1$ über alle Zeiten beibehält. Durch formale Rechnung bzw. mit der Annahme, daß die Lösung glatt ist und daher die Ableitungen vertauschbar sind, sehen wir, daß

$$\begin{aligned} 0 &\stackrel{!}{=} \frac{\partial \|\nabla\Phi\|^2}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \langle \nabla\Phi, \nabla\Phi \rangle = 2 \left\langle \nabla\Phi, \frac{\partial}{\partial t} \nabla\Phi \right\rangle \\ &= 2 \langle \nabla\Phi, \nabla(\Phi_t) \rangle = 2 \langle \nabla\Phi, \nabla(V \|\nabla\Phi\|) \rangle \\ &= 2 \underbrace{\langle \nabla\Phi, \nabla V \rangle}_{\stackrel{!}{=} 0} \|\nabla\Phi\| + 2 \langle \nabla\Phi, \nabla \underbrace{\|\nabla\Phi\|}_{=0, \text{ für } t=0} \rangle V. \end{aligned}$$

Änderungen der Geschwindigkeit $V(x)$ dürfen also nur senkrecht zum Gradienten von Φ auftreten, was gleichbedeutend damit ist, daß V in Richtung der Oberflächennormalen konstant sein muß

$$\langle \nabla V, \nabla\Phi \rangle = 0. \quad (4.11)$$

Es ist daher sinnvoll, auch wenn es aus der Problemmodellierung heraus eine natürliche Einbettung der Grenzflächengeschwindigkeit in ein Vektorfeld im gesamten Raum gibt, eine Fortsetzung von V gemäß (4.11) zu konstruieren, insbesondere da dies ohne wesentliche Erhöhung des Rechenaufwandes möglich ist. Ein solches Verfahren ist in [AS99] angegeben. Mittels der weiter unten beschriebenen *Fast-Marching-Methode* wird dazu durch Lösen von $\|\nabla\Phi^*\| = 1$ eine temporäre Abstandsfunktion Φ^* berechnet und dabei simultan die Geschwindigkeit in Richtung $\nabla\Phi^*$ konstant fortgesetzt.

Bei der Simulation dendritischen Kristallwachstums sind zwei Fälle zu unterscheiden. Für nichtverschwindenden kinetischen Koeffizienten $\beta_\varepsilon \neq 0$ läßt sich die Gibbs-Thomson-Beziehung (2.37) formal auf das gesamte Volumen fortsetzen. Es ist dann

$$V = \frac{d_\varepsilon}{\beta_\varepsilon} \kappa + \frac{\vartheta - \mathcal{U}}{\beta_\varepsilon} \quad \text{in } [0, t^*] \times \Omega. \quad (4.12)$$

Damit hat die Dynamik von Γ die Gestalt eines inversen Krümmungsflusses mit veränderlichem Quellterm $V = \kappa + q(t, x)$ in $[0, t^*] \times \Omega$. Ein Finite-Elemente-Verfahren in zwei Raumdimensionen ist für diesen Fall in [Fri04] angegeben. In dem in dieser Arbeit interessierenden Fall diffusionsbegrenzten Wachstums, also $\beta_\varepsilon = 0$, muß die Geschwindigkeit aus der Stefan-Bedingung (2.39b) bestimmt werden, für die es keine naheliegende Fortsetzung in den Raum gibt. In [SS92] wird statt dessen ein Integral über die Oberfläche benutzt, das dort die Geschwindigkeit beschreibt, aber auch außerhalb davon ausgewertet werden kann. In [CMOS97] wird die Stefan-Bedingung auf Γ verwendet, um in einem Band nahe von Γ die Geschwindigkeiten vorzugeben und dann durch Transportgleichungen der Art

$$V^{(i)} + \text{sign}(\Phi) \partial_{\xi_i} \Phi \partial_{\xi_i} V^{(i)} = 0, \quad \text{für } i = 1, \dots, n$$

entlang n verschiedener Richtungen ξ_i in das Volumen fortzusetzen. Zum Vermeiden von Gitterorientierungseffekten wird anschließend über die $V^{(i)}$ gemittelt. In dieser Arbeit wird ein Verfahren nach [AS99] benutzt, wobei V durch Auswerten der Stefan-Bedingung auf Γ und Fortsetzen gemäß (4.11) bestimmt wird.

Fast-Marching-Verfahren

Bei einseitiger Bewegung von Flächen, wie beispielsweise zur Berechnung der Abstandsfunktionen, läßt sich durch Umsetzung des stationären Problems (4.7) mittels der *Fast-Marching-Methode* der Aufwand um eine Größenordnung reduzieren.

Dazu gilt es, die numerische Lösung an den Gitterpunkten in genau der Reihenfolge vorzunehmen, die durch die jeweilige Zeit des ersten Erreichens $t = -\Phi(x)$ aus der Lösung des kontinuierlichen Problems gegeben ist. Weil sich an jedem Punkt x die Ankunftszeit der Grenzfläche ausschließlich aus Punkten mit größeren Werten von Φ berechnen läßt, gibt es bei diesem Problem einen einseitigen Transport von Informationen. Dementsprechend ist bei numerischen Verfahren auf die Aufwind-Approximation des Gradienten zu achten. Die Gitterpunkte werden in drei Gruppen aufgeteilt:

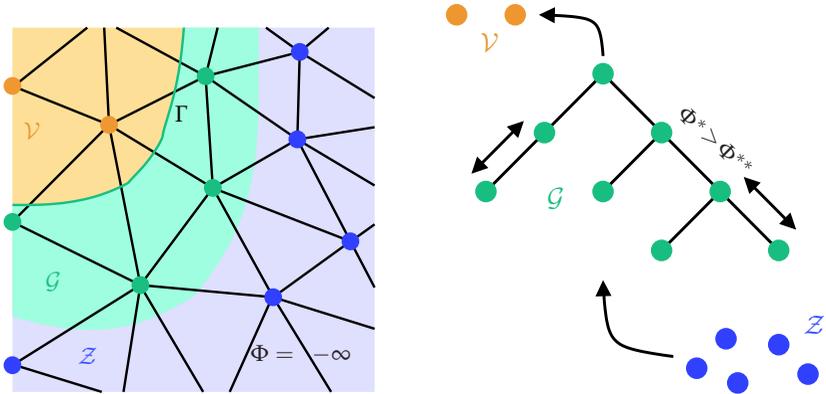


Abbildung 4.5: Band um die Grenzfläche Γ und Sortierung in binärem Baum.

\mathcal{V} : *Vergangenheit*. Die Punkte besitzen schon ihre endgültigen Werte von Φ und werden von den Berechnungen nicht mehr beeinflusst.

\mathcal{Z} : *Zukunft*. Die Punkte haben noch den bei der Initialisierung zugewiesenen Wert $\Phi = -\infty$ und werden nach und nach der Gruppe \mathcal{G} zugeordnet.

\mathcal{G} : *Gegenwart*. In dieser Gruppe findet die Lösung der Gleichung statt. Der Punkt mit dem größten Wert Φ wechselt zur Gruppe \mathcal{V} . Für alle Nachbarn aus \mathcal{G} wird Φ neu berechnet und \mathcal{G} neu sortiert. Nachbarn, die in \mathcal{Z} liegen, werden zuvor \mathcal{G} hinzugefügt.

Es muß ein Startband um die Fläche $\Gamma(0)$ mit Werten für Φ initialisiert werden, die auf andere Weise zu berechnen sind. Die darin enthalten Knoten bilden anfangs die Gruppe \mathcal{G} . Gitterknoten, die anfangs in der Gruppe \mathcal{V} liegen, wird der Wert $\Phi = 0$ zugeordnet. Der Aufwand zur Sortierung der Gitterpunkte in \mathcal{G} ist für das Gesamtverfahren zur Lösung des stationären Problems (4.7) bestimmend. Hier besitzt das *Quicksort*-Verfahren zur Sortierung mit Hilfe eines binären Baumes die optimale asymptotische Ordnung $O(n \log n)$. Somit ist der Aufwand der Fast-Marching-Methode in einer groben Abschätzung von der Ordnung $O(n \log n)$ bei n Gitterpunkten im Volumen.

Auch bei Problemen wie dem dendritischen Kristallwachstum, bei denen sich die Grenzfläche sowohl vorwärts als auch rückwärts bewegen kann, ist die Fast-Marching-Methode von Interesse. Sie ist dann, wie oben geschildert, ein wichtiges technisches Hilfsmittel zur geeigneten Fortsetzung der Geschwindigkeit von der Grenzfläche in das Volumen und zur Berechnung von – möglicherweise gewichteten – Abstandsfunktionen.

4.5 Phasenfeld-Methode für Kristallwachstum

Die Phasenfeld-Methode kann einerseits als ein Ansatz zur physikalischen Modellierung des Kristallwachstums aufgefaßt werden oder aber als eine Approximation des Modells mit scharfer Grenzfläche zu numerischen Zwecken. Neben einer zusätzlichen Feldgröße Φ für den Phasenzustand wird in deren Rahmen eine neue Längenskala w_ϵ eingeführt, die in Beziehung mit der Weite der diffusen Grenzfläche zwischen den Phasen steht und deutlich kleiner als die anderen Längenskalen des Dendriten sein sollte. Eine Phasenfeld-Formulierung des Kristallwachstums muß im Grenzfall für verschwindende Dicke der Übergangszone dem Modell der scharfen Grenzfläche entsprechen, wofür in [KR98, Alm99] Nachweise zu finden sind. Oft wird die Konsistenz der Phasenfeld-Formulierung mit der Thermodynamik gefordert, siehe dazu [PF90, PF93, WS⁺93]. Eine wichtige Eigenschaft der Methode ist die leichte Übertragbarkeit auf Multiphasen-Systeme [NW00, LKP01].

Ausgangspunkt der Phasenfeld-Methode ist der Ansatz eines Energiefunctionals, einer *phänomenologischen freien Energie* $\mathcal{F}(\Phi, \vartheta)$. Analog zu Abschnitt 2.3 wird dann als Variationsproblem formuliert

$$\int_{\Omega} \varphi \omega(\nabla \Phi) \frac{\partial}{\partial t} \Phi \, dx = - \frac{\delta}{\delta \Phi} \mathcal{F}(\Phi, \vartheta)_{[\varphi]}, \quad \forall \varphi \in H^1(\Omega). \quad (4.13)$$

Wegen der impliziten Beschreibung der – hier diffusen – Grenzfläche durch die Funktion Φ kann die Phasenfeld-Methode formell als eine Level-Set-Methode angesehen werden. Allerdings ist die Grenzflächendynamik implizit in (4.13) enthalten und nicht durch die Level-Set-Gleichung (4.1) bestimmt, in die die Normalgeschwindigkeit V explizit eingeht. Dies erspart bei der numerischen Umsetzung das Berechnen der Temperaturgradienten zum Auswerten der Stefan-Bedingung, wobei ein Ordnungsverlust auftreten würde. Andererseits sind neben der Geschwindigkeit auch die bestimmenden Materialparameter nicht explizit im Modell enthalten, sondern können erst über Bedingungen an das asymptotische Verhalten für verschwindende Grenzflächenweite rekonstruiert werden.

Energiefunktional

Aus dem Kontext von Phasenübergangsproblemen bistabiler bzw. zweiphasiger Systeme mit diffuser Grenzfläche stammt der erste Beitrag zur phänomenologischen freien Energie $\mathcal{F}(\Phi, \vartheta)$. Dort wird ein *Zwei-Mulden-Potential* $\mathcal{W}(\Phi)$ benutzt, das bei $\Phi = \pm 1$ lokale Minima besitzt und dadurch stabile Zustände für die jeweiligen Phasen erzeugt [AC79]. Ein glattes Zwei-Mulden-Potential führt nur zu asymptotischer – wenn auch exponentieller – Annäherung an die stabilen Phasenzustände bei ± 1 . Deshalb kann alternativ ein unstetiges *Zwei-Hindernis-Potential* benutzt werden. Dies verkompliziert die analytische Beschreibung des

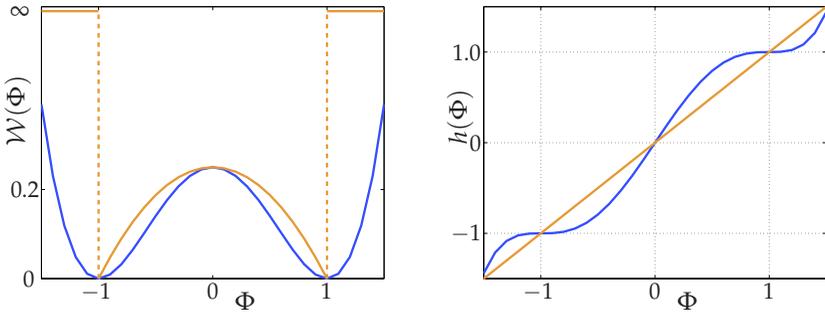


Abbildung 4.6: Links: Zwei-Mulden- und Zwei-Hindernis-Potential. Rechts: Funktion zur Gewichtung der stabilen Zustände wegen einer treibenden Kraft.

Problems, für die dann variationelle Ungleichungen benötigt werden, ist aber numerisch oft sogar einfacher zu realisieren, indem die Beträge der Knotenwerte von Φ gegebenenfalls auf 1 abzuschneiden sind. Geeignete Ansätze für das Potential sind beispielsweise

$$\mathcal{W}(\Phi) = \frac{1}{4} - \frac{\Phi^2}{2} + \frac{\Phi^4}{4} \quad \text{oder} \quad \mathcal{W}(\Phi) = \begin{cases} \frac{1}{4} - \frac{\Phi^2}{4} & \text{für } \Phi \in [-1, 1], \\ \infty & \text{sonst.} \end{cases}$$

Die treibende Kraft durch die Unterkühlung soll in Abhängigkeit von der örtlichen Temperatur einen der Phasenzustände energetisch günstiger machen. Liegt die Temperatur unterhalb der Schmelztemperatur, ist also $\vartheta - \mathcal{U} < 0$, so soll die feste Phase bei $\Phi = 1$ energetisch günstiger, d.h. die Mulde tiefer sein. Zu diesem Zweck wird zu \mathcal{W} ein $(\vartheta - \mathcal{U}) h(\Phi)$ -Term addiert,³ wobei h eine stetige monotone Funktion ist, die analog zu (2.15) die Bedingung

$$h(1) - h(-1) = 2$$

erfüllt. Wünschenswert ist, daß durch diese Modifikation des Potentials \mathcal{W} die Lage der Minima bei ± 1 unverändert bleibt. Deshalb wird in [KR98] nicht $h(\Phi) = \Phi$ gewählt, sondern stattdessen $h(\Phi) = 15/8 (\Phi - 2\Phi^3 + \Phi^5/5)$.

Die Oberflächeneffekte werden durch einen Term $w_\varepsilon^2(\nabla\Phi) \|\nabla\Phi\|^2$ modelliert. Der Anteil $\|\nabla\Phi\|^2$ bestraft das Auftreten von örtlichen Phasenübergängen. Die Funktion $w_\varepsilon : \mathbb{R}^d \ni p \mapsto w_\varepsilon(p) \in \mathbb{R}$ dient dazu, die Stärke des Oberflächeneinflusses von der Normalenrichtung, also der Orientierung von $\nabla\Phi$, abhängig

3. Wird bei der Entdimensionalisierung der Temperatur anders als in Abschnitt 2.4 nicht T_∞ , sondern T_m als Bezugsgröße gewählt, so lautet der Term einfach $\vartheta h(\Phi)$.

zu machen. Beispielsweise verwendet [KR98] für 4-fache Symmetrie den Ansatz

$$w_\varepsilon(\nabla\Phi) := W_0(1 - 3\varepsilon) \left(1 + \frac{4\varepsilon}{1 - 3\varepsilon} \frac{(\partial_x\Phi)^4 + (\partial_y\Phi)^4 + (\partial_z\Phi)^4}{\|\nabla\Phi\|^4} \right).$$

Im Fall verschwindender Anisotropie $\varepsilon = 0$ ist w_ε konstant und damit die Weite der Übergangszone zwischen den Phasen richtungsunabhängig.

Diese drei Bestandteile setzen wir zusammen und erhalten das mit (2.27a) bzw. (2.36) vergleichbare Funktional der phänomenologischen freien Energie

$$\mathcal{F}(\Phi, \vartheta) = \int_\Omega \frac{w_\varepsilon^2(\nabla\Phi)}{2} \|\nabla\Phi\|^2 + \mathcal{W}(\Phi) + \lambda(\vartheta - U) \frac{h(\Phi)}{2} dx. \quad (4.14)$$

Zugehörige Differentialgleichung

Die variationelle Ableitung in (4.13) läßt sich konkret berechnen als

$$\frac{\delta}{\delta\Phi} \mathcal{F}(\Phi, \vartheta)_{[\varphi]} = \frac{\partial}{\partial\mu} \Big|_{\mu=0} \mathcal{F}(\Phi + \mu\varphi, \vartheta).$$

Nun vertauschen wir die Differentiation mit der zur Definition von \mathcal{F} gehörenden Integration. Es ist dann zur Ableitung jedes der drei additiven Terme des Integranden die Kettenregel zu benutzen. Im ersten Term bilden wir zuerst die äußere Ableitung der Funktion $p \mapsto w_\varepsilon(p)^2 \|p\|^2$ an der Stelle $p = \nabla\Phi$, das ist

$$\frac{1}{2} \nabla_p \left(w_\varepsilon(\nabla\Phi)^2 \|\nabla\Phi\|^2 \right) = w_\varepsilon(\nabla\Phi) \nabla_p w_\varepsilon(\nabla\Phi) \|\nabla\Phi\|^2 + w_\varepsilon(\nabla\Phi)^2 \nabla\Phi, \quad (4.15)$$

und müssen diese dann skalar mit der inneren Ableitung $\partial_\mu(\nabla\Phi + \mu\nabla\varphi) = \nabla\varphi$ multiplizieren. Wir erhalten insgesamt für die variationelle Ableitung

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{\delta\Phi} \mathcal{F}(\Phi, \vartheta)_{[\varphi]} &= \int_\Omega \frac{1}{2} \left\langle \nabla\varphi, \nabla_p \left(w_\varepsilon^2(\nabla\Phi) \|\nabla\Phi\|^2 \right) \right\rangle dx \\ &\quad + \int_\Omega \varphi \left(\frac{\partial}{\partial\Phi} \mathcal{W}(\Phi) + \lambda \vartheta \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial\Phi} h(\Phi) \right) dx. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Zur Abkürzung des zweiten Integrals definieren wir

$$F(\Phi, \lambda, \vartheta) := \mathcal{W}(\Phi) + \lambda \vartheta \frac{1}{2} h(\Phi). \quad (4.17)$$

Mit dem Gaußschen Satz wird die Testfunktion im ersten Integral in (4.16) von den Ableitungen befreit. Das Randintegral verschwindet, da $\nabla\Phi = 0$ auf $\partial\Omega$ ist, sofern die Grenzfläche hinreichend von $\partial\Omega$ entfernt ist. Es folgt

$$-\frac{\delta}{\delta\Phi} \mathcal{F}(\Phi, \vartheta) = \frac{1}{2} \int_\Omega \varphi \operatorname{div} \left(\nabla_p \left[w_\varepsilon^2(\nabla\Phi) \|\nabla\Phi\|^2 \right] \right) dx - \int_\Omega \varphi F_\Phi(\Phi, \lambda, \vartheta) dx.$$

Jetzt können wir aus der Variationsformulierung (4.13) leicht die zugehörige partielle Differentialgleichung entnehmen. Insgesamt erhalten wir die in der zweiten Ableitung nichtlineare Gleichung zweiter Ordnung

$$\omega(\nabla\Phi)\frac{\partial}{\partial t}\Phi = \frac{1}{2}\operatorname{div}\left(\nabla_p\left[w_\varepsilon^2(\nabla\Phi)\|\nabla\Phi\|^2\right]\right) - F_\Phi(\Phi, \lambda, \vartheta). \quad (4.18)$$

Zur Vervollständigung des Phasenfeld-Modells des Kristallwachstums wird eine weitere Gleichung für die Temperatur ϑ benötigt. Dazu definieren wir die *innere Energie* e analog zu (2.14) bzw. (2.35a) über die Beziehung

$$e(\Phi, e) = \vartheta - \frac{h(\Phi)}{2} \quad (4.19)$$

und erhalten die gleiche Differentialgleichung (2.33)

$$\frac{\partial}{\partial t}\vartheta = \operatorname{div}(D(\Phi)\nabla\vartheta) - \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial t}h(\Phi).$$

Im Falle verschwindender Anisotropie $\varepsilon = 0$ und eines phasenunabhängigen Diffusionskoeffizienten D verbleibt ein quasilineares System, bei dem die erste Gleichung vom Diffusions-Reaktions-Typ ist

$$\omega\frac{\partial}{\partial t}\Phi = w_\varepsilon^2\operatorname{div}(\nabla\Phi) - F_\Phi(\Phi, \lambda, \vartheta), \quad (4.20a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\vartheta = D\operatorname{div}(\nabla\vartheta) + \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial t}h(\Phi). \quad (4.20b)$$

Numerische Aspekte

Mit der Phasenfeld-Methode ließen sich erstmals beeindruckende numerische Ergebnisse des dreidimensionalen Kristallwachstums erreichen [Kob92]. Allerdings war dabei die Struktur der Seitenarme stark gitterabhängig. Mit feiner werdenden Gittern unterdrückt die Phasenfeld-Methode numerisches Rauschen sehr gut, so daß zur Untersuchung von Seitenarmen wiederum kontrolliert Rauschen als Quellterm zugefügt werden muß [KR99]. Quantitative Ergebnisse wurden mit numerischen Simulationen des Phasenfeld-Modells mit Finite-Differenzen-Verfahren erzielt [KR98, TBKL01]. Bei kleinen Unterkühlungen \mathcal{U} muß das numerische Rechengebiet sehr groß gewählt werden, weil dann die Diffusionslänge groß im Vergleich zum Spitzenradius des Dendriten ist. Wird ein gleichmäßiges Gitter verwendet, daß die Grenzfläche mit einer gewissen Anzahl an Zellen auflösen muß, so wird der erhöhte Aufwand besonders deutlich spürbar, zumal mit der der Phasenfeld-Methode eine zweite Differentialgleichung im gesamten Raum gelöst werden muß. Er läßt sich durch Einsatz von Gitteradaption

abmildern [PGD99], dann erfordert aber die Implementierung auf dem Rechner komplexere Software-Strukturen. Zur Vermeidung von Gitteradaption wurde auch ein alternativer Weg mit einer statistischen Modellierung der Diffusion im Fernfeld des Kristalls besprochen [PK00].

Da das Ausgangsproblem in Form eines Variationsproblems gegeben ist, bietet es sich an, nicht die Differentialgleichungen (4.18) zu diskretisieren, sondern direkt die Variationsformulierung (4.13) für eine Finite-Elemente-Approximation zu benutzen. Mit (4.16) bekommen wir

$$\int_{\Omega} \varphi \omega(\nabla \Phi) \Phi_t \, dx = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \left\langle \nabla \varphi, \nabla_p \left(w_{\varepsilon}^2(\nabla \Phi) \|\nabla \Phi\|^2 \right) \right\rangle \, dx \\ + \int_{\Omega} \varphi F_{\Phi}(\Phi, \lambda, \vartheta) \, dx \quad \text{für alle } \varphi \in H_0^1(\Omega).$$

In einer semi-impliziten Diskretisierung dieser Gleichung werden dann nach Einsetzen von (4.15) alle nichtlinearen Terme explizit berücksichtigt, also auf den vorangegangenen Zeitschritt bezogen. Es ist eine formale Analogie dieser Gleichung zum anisotropen Krümmungsfluß zu erkennen, allerdings ist der Term $w_{\varepsilon}^2(\nabla \Phi) \|\nabla \Phi\|^2$ homogen von Ordnung 2 und nicht von Ordnung 1. Bei stückweise linearen Ansatzfunktionen für Φ ist $\nabla \Phi$ und damit w_{ε} auf jedem Element konstant.

In [Sch03] wird ein Finite-Elemente-Ansatz für das Phasenfeld-Modell unter Verwendung eines Zwei-Hindernis-Potentials vorgestellt mit $P2$ -Elementen für die Temperatur, aber $P1$ -Elementen für das Phasenfeld, da nur bei linearer Interpolation der Knotenwerte die Bedingung $|\Phi| \leq 1$ nach Abschneiden sichergestellt werden kann. Dies erfordert dann praktisch unterschiedliche Gitter für die beiden Lösungskomponenten, denn während für das Temperaturfeld das Gitter an Γ einseitig im Teilgebiet Ω^- zu verfeinern ist, erfordert hingegen das Phasenfeld eine beidseitige Verfeinerung an den Rändern der Übergangszone.

Gerade unter der Sichtweise der Phasenfeld-Methode als Approximation des Modells mit scharfer Grenzfläche zu numerischen Zwecken ist es naheliegend, auf die Einhaltung der Bedingung $|\Phi| \leq 1$ zu verzichten und stattdessen für beide Lösungskomponenten $P2$ -Elemente auf einem gemeinsamen Gitter zu benutzen. Als erster Schritt dazu wurde in [Mos04] die Finite-Elemente-Approximation des Systems (4.20) untersucht.

Zur Einbeziehung von Strömung in die Phasenfeld-Methode siehe [BDS⁺99, TA00, TBKL01]. In einem weiteren Ansatz wird die Phasenfeld-Gleichung direkt diskretisiert und dies gekoppelt mit kinetischen Schemata für das Temperatur- und Strömungsfeld [MK04].

Kapitel 5

Vorgaben auf inneren Flächen

Für numerische Zwecke lassen sich Grenzflächen mit der Level-Set-Methode unabhängig von dem benutzten Gitter durch die Werte einer Funktion darstellen. Dies ist einerseits vorteilhaft, wenn einfache, strukturierte Gitter verwendet werden sollen, die nicht an die Gebiete angepaßt sind, aber den Einsatz von einfachen und effizienten Algorithmen erlauben. Andererseits kann diese Methode auch bei wesentlich komplizierteren unstrukturierten Gittern hilfreich sein, nämlich für instationäre Probleme mit bewegter Grenzfläche oder in quasi stationären Problemen bei der Gestaltoptimierung von Bauteilen, wenn eine komplexe Mehrgitterhierarchie die Repräsentation einer Grenzfläche durch Gitterkanten praktisch verhindert, siehe Abbildung 5.1. Dann müssen allerdings gegebenenfalls Randbedingungen auf Flächen oder entlang von Kurven erfüllt werden, die nicht auf den Gitterkanten liegen, sondern durch das Innere der Elemente laufen.

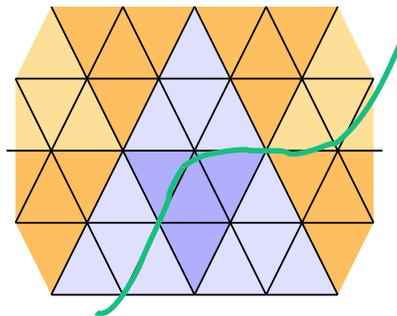


Abbildung 5.1: Eine Kurve wird in einem hierarchischen Gitter im allgemeinen nur auf der feinsten Gitterebene gut durch Gitterkanten wiedergegeben.

Ist das Gitter nicht an die inneren Grenzflächen angepaßt, so geben bei einem üblichen Finite-Elemente-Ansatz mit Lagrange-Elementen die Ansatzfunktionen nicht den bekannten qualitativen Verlauf der Lösung wieder. Die Idee des im folgenden beschriebenen Verfahrens ist, den Raum der Ansatzfunktionen zu erweitern und – nach dem Wechsel auf eine besser angepaßte Basis – die durch die zusätzlich eingefügten Ansatzfunktionen hinzugekommenen Freiheitsgrade direkt wieder an die Grenzflächen-Bedingungen zu binden. Das Ziel ist eine Diskretisierung, die die Schnittstellen zu einem Gleichungssystem-Löser unverändert läßt, als ob ein Problem ohne zusätzliche innere Vorgaben vorläge.

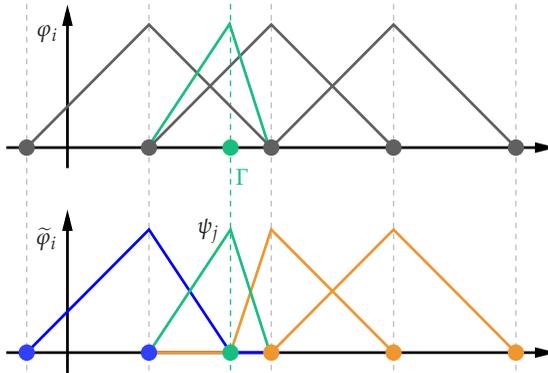


Abbildung 5.2: Hinzufügen einer Ansatzfunktion (grün) zum Standard-Ansatz (grau) und Basiswechsel zum Trennen der Teilgebiete.

Für (quasi-)stationäre Probleme mit unstetigen Koeffizienten, die Knicke in den Gradienten der Lösungen hervorrufen, wurden vergleichbare Ansätze in [MC87] vorgestellt. Dabei wurden nur Ansätze erster Ordnung auf Quadraten näher untersucht. Alternativ zu dem hier vorgestellten Verfahren ließen sich innere Grenzflächenbedingungen durch distributionelle Quellterme in den Differentialgleichungen berücksichtigen. Bei der Integration ist dann auf geeignete Approximation von Sprüngen durch die Ansatzfunktionen niedriger Ordnung zu achten [Tor02].

In Verbindung mit einer Level-Set-Methode ist eine Gitterglättung für das Finite-Elemente-Verfahren zumindest in der Nähe der Grenzfläche nicht möglich, weil dadurch die Grenzfläche verschoben würde. Im Kontrast dazu ist die r -Methode für Finite-Elemente [LCHR03] zu sehen, die stets eine optimale örtliche Verteilung der Knotenpunkte sucht, aber keine Einschränkung durch Phasenzugehörigkeit von Elementen berücksichtigt.

5.1 Stationärer Fall

Die Bedingungen auf einer inneren Fläche Γ sollen im nachhinein dem üblichen Finite-Elemente-Verfahren für ein stationäres lineares Randwertproblem hinzugefügt werden. Es ist ausreichend, das Vorgehen für ein Modellproblem mit der Laplace-Gleichung und homogenen Dirichlet-Randwerten zu erläutern. Ohne Vorgaben auf einer Grenzfläche Γ wird zunächst eine Lösung ϑ von

$$-\Delta\vartheta = q \quad \text{in } \Omega \subseteq \mathbb{R}^d, \quad d \in \mathbb{N}, \quad (5.1a)$$

$$\vartheta = 0 \quad \text{auf } \partial\Omega \quad (5.1b)$$

gesucht. Dieses Problem ist zuerst in die *schwache Form* zu überführen. Dabei wird eine Lösung $\vartheta \in H_0^1(\Omega)$ gesucht, die

$$\langle \nabla\varphi, \nabla\vartheta \rangle_\Omega = \langle \varphi, q \rangle_\Omega \quad \text{für alle } \varphi \in H_0^1(\Omega) \quad (5.2)$$

erfüllt, wobei $\langle \cdot, \cdot \rangle_\Omega$ hier stets das $L^2(\Omega)$ -Skalarprodukt bezeichnet.

Bei einem Standard-Finite-Elemente-Verfahren [Bra97, BS96, Cia91, GRT93, KA00] wird eine Zerlegung \mathcal{T} des Gebietes Ω in Polyeder zusammen mit einer Menge von Ansatzfunktionen $\{\varphi_i\}$ gewählt.¹ Hier werden nur Elemente vom Lagrange-Typ betrachtet, wobei auf Ansätze höherer Ordnung in Abschnitt 5.2 noch einmal genauer eingegangen wird. Für die numerische Lösung von (5.1) wird üblicherweise ein Ansatz

$$\vartheta_h = \sum_i \xi_i \varphi_i \quad (5.3)$$

als Linearkombination der Ansatzfunktionen gemacht. Aus der Einschränkung der schwachen Formulierung auf Erfüllen der Bedingung (5.2) in dem durch die Ansatzfunktionen aufgespannten endlich-dimensionalen Teilraum des $H_0^1(\Omega)$ folgt dann ein lineares Gleichungssystem

$$A\xi = r \quad (5.4)$$

zur Bestimmung der Koeffizienten ξ_i , die hier in dem Vektor ξ zusammengefaßt sind. Die Einträge $A[i, k]$ und $r[i]$ in der *Steifigkeitsmatrix* A und dem Vektor r sind

$$A[i, k] = \langle \nabla\varphi_i, \nabla\varphi_k \rangle_\Omega, \quad \text{bzw.} \quad r[i] = \langle \varphi_i, q \rangle_\Omega. \quad (5.5)$$

An den Interpolationspunkten x_k der Lagrange-Elemente – das sind im $P1$ -Fall die Gitterknoten – erfüllen die Ansatzfunktionen die Bedingung $\varphi_i(x_k) = \delta_{ik}$ für

1. Es ist üblich, auch nicht-simpliziale Zerlegungen, wie sie hier zugelassen sein sollen, als Triangulierungen zu bezeichnen.

alle i und k , wobei δ_{ik} das Kronecker-Symbol bezeichnet. Dadurch stimmen in dem Lösungsansatz (5.3) die Koeffizienten ξ_i mit den Funktionswerten $\vartheta_h(x_i)$ überein.

Die Berücksichtigung inhomogener Dirichlet-Daten auf dem Gebietsrand $\partial\Omega$ läßt sich durch Subtraktion einer geeigneten $H^1(\Omega)$ -Funktion von der Lösung ϑ auf den homogenen Fall zurückführen. Praktisch wird die Menge $\{\varphi_i\}$ der Ansatzfunktionen vergrößert, so daß die hinzugekommenen Freiheitsgrade auf dem Rand $\partial\Omega$ zur Erfüllung der Randwerte benutzt werden können.

Nun wird das Gebiet Ω durch eine Fläche Γ in die Teile Ω^+ und Ω^- geteilt. Durch das Hinzufügen einer Dirichlet-Bedingung zum Problem (5.1) und Einschränkung der Differentialgleichung auf $\Omega^- \cup \Omega^+ = \Omega \setminus \Gamma$ ändert sich das Verhalten der Lösung ϑ , die jetzt

$$-\Delta\vartheta = q \quad \text{in } \Omega \setminus \Gamma \subseteq \mathbb{R}^d, \quad d \in \mathbb{N}, \quad (5.6a)$$

$$\vartheta = 0 \quad \text{auf } \partial\Omega, \quad (5.6b)$$

$$\vartheta(x) = g(x) \quad \text{auf } \Gamma \quad (5.6c)$$

erfüllt. Sie wird im allgemeinen beim Übergang über die innere Grenzfläche Γ einen Knick aufweisen. Dort, wo die geeignet approximierte Grenzfläche Γ_h mit Gitterkanten übereinstimmt, kann so wie im Standard-Finite-Elemente-Verfahren vorgegangen werden. Dies braucht hier nicht weiter berücksichtigt zu werden. Verläuft aber Γ_h im Elementinneren, so müssen den Ansatzfunktionen $\{\varphi_i\}$ zusätzliche Basisfunktionen $\{\psi_j\}$ hinzugefügt werden, um in der numerischen Lösung ϑ_h den durch die Randbedingung (5.6c) hervorgerufenen Knick nachvollziehen zu können. Diese ψ_j werden ähnlich zu den φ_i ebenfalls stetig, stückweise polynomial und mit möglichst minimalem Träger gewählt. Bei polygonaler Approximation von Γ , z.B. aus stückweise linearer Rekonstruktion einer Level-Set-Funktion, können die Funktionen ψ_j auf jedem Element stückweise (multi)-linear sein. Der Träger wird jeweils auf die Elemente beschränkt, die an den zugehörigen Schnittpunkt von Γ_h mit einer Gitterkante angrenzen. Weiterhin sollen die Funktionen in jedem solchen Schnittpunkt x_j stets $\psi_l(x_j) = \delta_{lj}$ erfüllen. Für die numerische Lösung ϑ_h kann nun ein Ansatz der Art

$$\vartheta_h = \sum_i \xi_i \varphi_i + \sum_j \xi_j \psi_j$$

gemacht werden. Statt einer penibel genauen Buchführung über die Indexmenge gilt im Rahmen dieser Überlegungen folgende

Konvention: *Im Zusammenhang mit den Ansatzfunktionen, die zu den Gitterknoten oder allgemeiner zu den Interpolationspunkten von Lagrange-Elementen zum gegebenen Gitter gehören, werden die Indizes i und k benutzt. Zu den zusätzlichen An-*

satzfunktionen und Schnittpunkten von Grenzfläche und Gitterkanten gehören stets die Indizes j und l .

Durch die folgende Modifikation der Ansatzfunktionen

$$\tilde{\varphi}_k := \varphi_k - \sum_j \varphi_k(x_j) \psi_j \quad (5.7)$$

gilt an allen Schnittpunkten x_j von Grenzfläche und Gitterkanten für alle k die Beziehung $\tilde{\varphi}_k(x_j) = 0 = \delta_{kj}$. Mit dem zugehörigen Ansatz

$$\vartheta_h = \sum_k \xi_k \tilde{\varphi}_k + \sum_j \xi_j \psi_j \quad (5.8)$$

gilt somit stets $\vartheta_h(x_j) = \xi_j$, und die Koeffizienten ξ_j vor den zugefügten Ansatzfunktionen ψ_j sind direkt durch die Randwerte an diesen Punkten gegeben als

$$\xi_j \stackrel{!}{=} g(x_j) =: g_j.$$

Die schwache Formulierung des Problems (5.6) ist analog zu (5.2), nur ist der Raum der Testfunktionen auf $H_0^1(\Omega \setminus \Gamma)$ einzuschränken. Bei Wahl der $\tilde{\varphi}_i$ als Testfunktionen erhalten wir für jedes i jeweils

$$\begin{aligned} \langle \nabla \tilde{\varphi}_i, \nabla \vartheta_h \rangle_\Omega &= \langle \tilde{\varphi}_i, q \rangle_\Omega \\ &= \langle \varphi_i, q \rangle_\Omega - \sum_j \varphi_i(x_j) \langle \psi_j, q \rangle_\Omega. \end{aligned} \quad (5.9)$$

Auf der rechten Seite ist nun im Vergleich zu (5.2) ein Korrekturterm hinzugetreten. Auf der linken Seite der Gleichung führt das Einsetzen des Lösungsansatzes (5.8) zu deutlich umständlicheren Rechnungen, siehe Anhang A.6. Zweckmäßige weitere symbolische Abkürzungen in Analogie zu (5.5) sind:

$$B[l, j] := \langle \nabla \psi_l, \nabla \psi_j \rangle_\Omega, \quad C[k, j] := \langle \nabla \varphi_k, \nabla \psi_j \rangle_\Omega, \quad \rho[j] := \langle \psi_j, q \rangle_\Omega, \quad (5.10a)$$

$$\Phi[k, j] := \varphi_k(x_j), \quad \gamma[j] := g(x_j). \quad (5.10b)$$

Als Resultat dieses Vorgehens erhalten wir mit (A.34) und den Definitionen

$$\tilde{A} := A - \Phi C^T - C \Phi^T + \Phi B \Phi^T, \quad \tilde{C} := C - \Phi B \quad \text{und} \quad \tilde{r} := r - \Phi \rho \quad (5.11)$$

das gegenüber (5.4) modifizierte lineare Gleichungssystem

$$\tilde{A} \xi = \tilde{r} - \tilde{C} \gamma. \quad (5.12)$$

Wenn wir nun das Gleichungssystem (5.12) analysieren, so erkennen wir, daß darin die gleichen, mit den Interpolationspunkten des Gitters verbundenen

Freiheitsgrade bzw. eine Teilmenge davon vorkommen und insbesondere das Besetzungsmuster der Matrix \tilde{A} in dem von A enthalten ist. Denn aus (5.9) sehen wir

$$\tilde{A}[i, k] = \langle \nabla \tilde{\varphi}_i, \nabla \tilde{\varphi}_k \rangle,$$

und aus (5.7) folgt, daß für jedes i jeweils der Träger $\text{supp}(\tilde{\varphi}_i)$ der Testfunktion $\tilde{\varphi}_i$ in $\text{supp}(\varphi_i)$ enthalten ist. Damit ist die Struktur des Gleichungssystems für den Löser gegenüber der von (5.4) unverändert. Bei geometrischen Mehrgitter-Verfahren in vorhandenen Implementierungen, z.B. in dem in Abschnitt 6.1 vorgestellten ug , werden Gittertransfer-Operationen benötigt, die nur von dem – in diesem Fall nicht an die Grenzfläche angepaßten – Gitter abhängig sind. Die Verlagerung aller Information über die Grenzfläche Γ in die rechte Seite des Gleichungssystems macht das vorgestellte Verfahren auch für solche Mehrgitter-Löser geeignet.

Die Anpassung an die Bedingung auf der inneren Fläche kann dem Standard-Finite-Elemente-Verfahren für das Problem ohne Grenzflächen-Bedingung als Nachbereitungsschritt angefügt werden, ohne daß zusätzlich Speicher für Werte zu benötigen wird oder die Struktur des Gleichungssystems für den Löser zu ändern ist.

Numerische Tests für Ansatz erster Ordnung

Das vorgestellte Verfahren muß durch numerische Testrechnungen geprüft werden. Details der Implementierung der benötigten Programmteile unter Einbeziehung des Software-Pakets ug sind in Abschnitt 6.2 angegeben. Es wurde in den folgenden Rechnungen stets ein Mehrgitter-Löser mit unvollständiger Zerlegung als Glätter eingesetzt.

Als erstes wird nun das Lösungsverfahren an einem Beispiel mit kreisförmiger Grenzfläche $\Gamma := \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid \|(x, y)\| = 2\}$ in einem rechteckigen Gebiet $\Omega := [-5, 5]^2 \subseteq \mathbb{R}^2$ untersucht. Bei Vorgabe der exakten Lösung

$$\vartheta(x, y) = \begin{cases} -\ln(\|(x, y)\|) & \text{für } \|(x, y)\| > 2, \\ -\ln(2) & \text{für } \|(x, y)\| \geq 2 \end{cases} \quad (5.13)$$

auf $\partial\Omega$ ist das zu lösende Randwertproblem

$$-\Delta\vartheta = 0 \quad \text{in } \Omega \setminus \Gamma, \quad (5.14a)$$

$$\vartheta|_{\partial\Omega} = -\ln(\|(x, y)\|) \quad \text{für } (x, y) \in \partial\Omega. \quad (5.14b)$$

$$\vartheta|_{\Gamma} = -\ln(2) \quad \text{auf } \Gamma. \quad (5.14c)$$

Die Rechnung, für die ein unstrukturiertes Dreiecks-Gitter benutzt wurde, zeigt nach Abbildung 5.3 bei sukzessiv verfeinerten Gittern die gleiche Fehlerasymptotik, die ohne Grenzflächen-Bedingung für einen linearen $P1$ -Ansatz zu

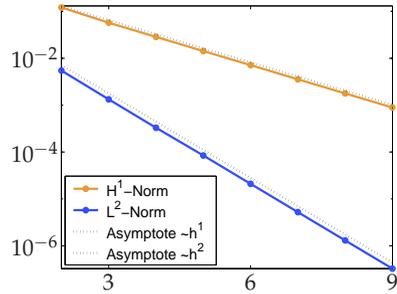
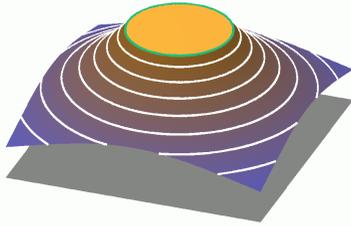


Abbildung 5.3: Lösung des Problems (5.14) mit kreisförmiger Grenzfläche und Fehler der numerischen Lösung über der Anzahl von Gitter-Verfeinerungen.

erwarten ist [Cia91]. Tatsächlich entkoppelt das Verfahren im linearen Fall die Freiheitsgrade der beiden Teilgebiete, indem die zugehörigen Matrix-Einträge des linearen Gleichungssystems (5.12) gelöscht werden. Dadurch entspricht es der separaten Anwendung des Standard-Verfahrens auf den beiden Teilgebieten, wobei allerdings unter Umständen neue Elementtypen einzubeziehen sind. So treten in Abbildung 5.4 zu den Dreieckselementen jetzt noch Viereckselemente hinzu.

In der Analysis von Finite-Elemente-Verfahren wird oft zum Nachweis optimaler Fehlerordnung eine Quasiuniformität des Gitters in Form einer Bedin-

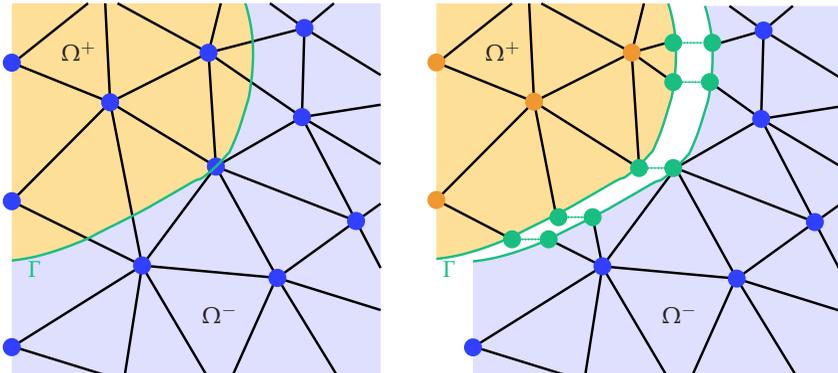


Abbildung 5.4: Virtuelles Aufteilen des Gebietes zur Berücksichtigung von Bedingungen im Elementinneren.

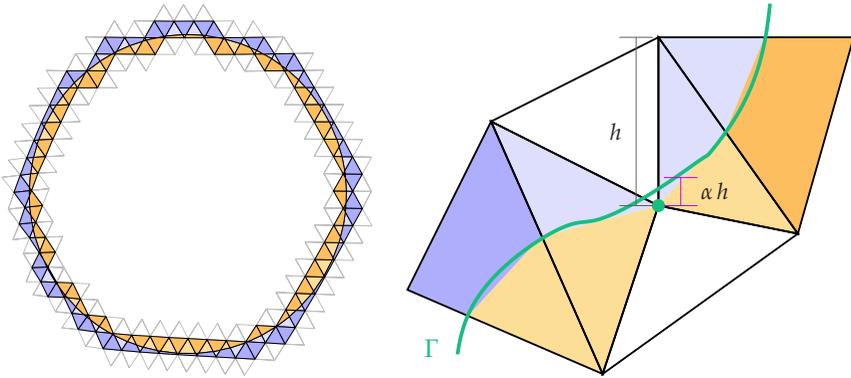


Abbildung 5.5: Links: Aufteilung für Problem (5.14) bei unstrukturiertem Gitter. Rechts: Aufteilung in Teilelemente mit Schwellwert α .

gung an maximale oder minimale Winkel der Elemente, bzw. bei Vierecken an das Längenverhältnis der Seiten, vorausgesetzt. Beim Schneiden der Elemente mit der Grenzfläche können diese aber prinzipiell beliebig groß oder klein werden. Zusätzlich ist zu berücksichtigen, daß die Position der Grenzfläche nur mit endlicher Genauigkeit vorliegt bzw. rekonstruiert werden kann. Daher müssen Schnittpunkte von Gitterkanten und der Grenzfläche auf Gitterknoten verlegt werden, wenn ein Längenanteil der Kante, der innerhalb eines der Teilgebiete Ω^\pm liegt, einen festgelegten Schwellwert α der *Sub-Gitter-Auflösung* unterschreitet. Während durch Einführen eines solchen Schwellwertes die Quasiuniformität des Gitters formal sichergestellt ist, können die Konstanten der Fehlerabschätzung mit geringer werdendem α ansteigen. Andererseits geht mit einem zu großen Schwellwert α die Güte der Grenzflächenapproximation verloren.

Um den Einfluß der Sub-Gitter-Auflösung α auf das Fehlerverhalten zu prüfen, wird das Problem (5.14) auf einem die Grenzfläche tangential berührenden Gitter, das aus Verfeinerung eines strukturierten Gitters hervorgegangen ist, numerisch gelöst. Dadurch ist das Auftreten spitzer oder stumpfer Schnittwinkel von Grenzfläche und Gitterkanten bzw. stark anisotrop gestreckter Vierecke sichergestellt. Aufgrund der rotationssymmetrischen Lösung (5.13) und der Symmetrie des Gitters reicht es, auf einem Ausschnitt mit einem Achtelkreis zu rechnen und symmetrische Randbedingungen, also homogene Neumann-Bedingungen, zu stellen.

Die Rechnungen zeigen in Abbildung 5.6 einen Ordnungsverlust des Verfahrens bei zu grober Gebietsapproximation. Dagegen sind selbst bei sehr klei-

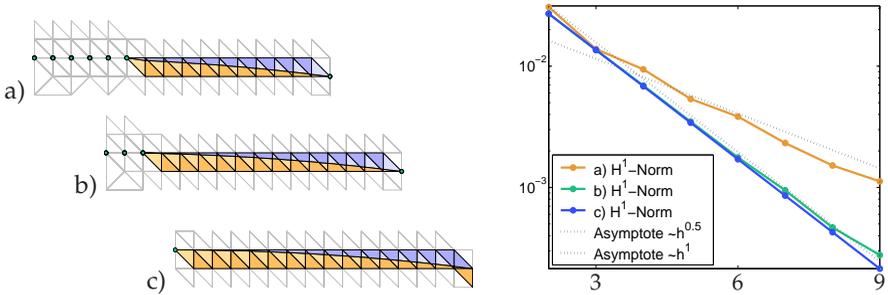


Abbildung 5.6: Aufteilung in Teilelemente und H^1 -Fehler der Lösung für verschiedene Parameter: a) $\alpha = 1/10$, b) $\alpha = 1/40$, c) $\alpha = 1/2560$.

nen Schwellwerten keine erhöhten Fehler festzustellen. Aufgrund der beobachteten Reduktionsraten des iterativen Gleichungssystem-Lösers ist auch kein Einfluß des Parameters α auf die Konditionszahl der Matrix des zu lösenden Systems erkennbar.

Um eine solche Abhängigkeit der Konditionszahl des linearen Gleichungssystems genauer zu untersuchen, wird in einem weiteren Test eine glatte Lösung vorgegeben, hier

$$\vartheta(x, y) = 1 - \sin\left(y/\sqrt{D}\right),$$

diese für alle Dirichlet-Daten benutzt und die zugehörige rechte Seite der Differentialgleichung ausgerechnet. Das Randwertproblem ohne Grenzflächen-Bedingung ist

$$-D\Delta\vartheta(x, y) = -\sin\left(\frac{y}{\sqrt{D}}\right) \quad \text{in } \Omega = [-5, 5]^2 \subseteq \mathbb{R}^2, \tag{5.15a}$$

$$\vartheta(x, y) = 1 - \sin\left(\frac{y}{\sqrt{D}}\right) \quad \text{für } (x, y) \in \partial\Omega. \tag{5.15b}$$

Während durch die zusätzliche Vorgabe von

$$\vartheta(x, y) = 1 - \sin\left(\frac{y}{\sqrt{D}}\right) \quad \text{auf } \Gamma = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid \|(x, y)\| = 2\} \tag{5.16}$$

bei gleichzeitiger Einschränkung der Differentialgleichung (5.15a) auf $\Omega \setminus \Gamma$ die Lösung gegenüber dem Problem (5.15) ohne (5.16) nicht verändert wird, ändert sich aber die Diskretisierung und damit das Gleichungssystem, das die in beiden Fällen gleichen Freiheitsgrade miteinander verknüpft. Die Reduktionsraten

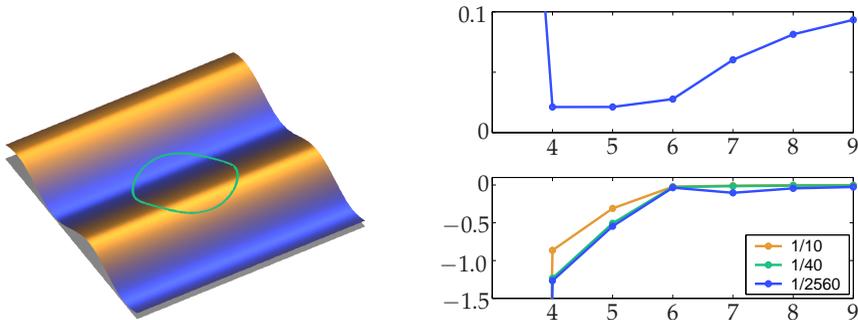


Abbildung 5.7: Links: Lösungsfunktion von (5.15), bzw. von (5.15) und (5.16) und Grenzfläche. Rechts: Reduktionsraten über Gitterlevel ohne Vorgabe auf dem Kreis Γ und prozentuale Abweichung davon bei Vorgabe auf Γ .

des iterativen Löser dienen wieder als Indikator für die Konditionszahl der Matrix des Gleichungssystems. Wie aus Abbildung 5.7 zu sehen ist, wird offenbar die Erweiterung der Anwendbarkeit des Mehrgitter-Löser nicht durch eine Verschlechterung der Kondition des zu lösenden Systems erkauft.

5.2 Höhere Ordnung

Das Verfahren des vorherigen Abschnitts 5.1 läßt sich in gleicher Weise anwenden, wenn die Menge der Ansatzfunktionen $\{\varphi_i\}$ als die zu einem $P2$ -Lagrange-Ansatz zum gegebenen Gitter gehörende Menge von Funktionen gewählt wird. Die zugehörigen Ansatzfunktionen ψ und $\{\tilde{\varphi}_i\}$ sind für den eindimensionalen Fall in Abbildung 5.8 links oben dargestellt.

Im Unterschied zum stückweise linearen Ansatz ist so aber kein Trennen der Teilgebiete und Entkoppeln der Freiheitsgrade der unterschiedlichen Phasen möglich, da die Ansatzfunktionen einen Träger haben, der über die Phasengrenze hinüberreicht. Allerdings bilden die Ansatzfunktionen immer noch wie gewünscht eine Partition der Eins. Die Phasen lassen sich nun trennen, indem die zu den Kantenmittelpunkten gehörenden Freiheitsgrade einer der Phasen zugeordnet und dann von jeder der Ansatzfunktionen die in die jeweils andere Phase herüberreichenden Anteile abgeschnitten und den übrigen Ansatzfunktionen zugeschlagen werden, siehe Abbildung 5.8 links unten.

Dieser Ansatz ist aber unsymmetrisch. Das Grundproblem ist, daß bei der Aufteilung des Gebietes die Anzahl der inneren Knoten unverändert bleibt, aber mehr innere Kanten entstehen. Alternativ können für ein symmetrisches Vorge-

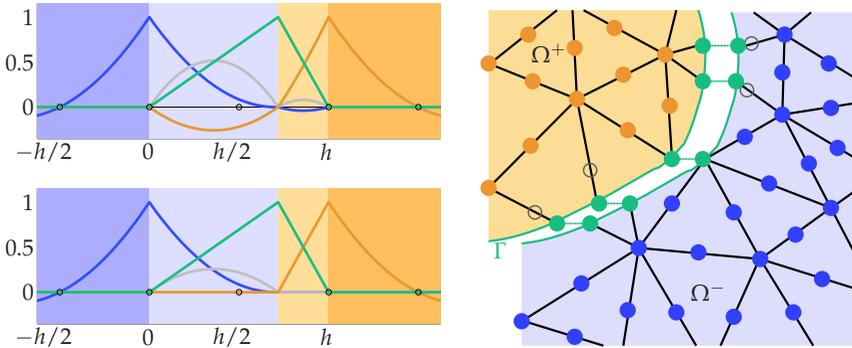


Abbildung 5.8: Links: Mögliche Ansatzfunktionen für den 1D-Fall. Rechts: Virtuelles Aufteilen des Gebietes bei P_2 -Ansatz, vergleiche Abb. 5.4.

hen auf den von der Grenzfläche geschnittenen Elementen die zu den geschnittenen Kanten gehörenden Freiheitsgrade weggelassen werden, wogegen ein Zufügen weiterer Freiheitsgrade auf den Kanten in dem gegebenen Kontext nicht möglich ist, da damit die Struktur des resultierenden Gleichungssystems für den Löser verändert würde. Wie in Abbildung 5.2 werden dazu auf den Teilen der geschnittenen Elemente zuerst stückweise (multi-)lineare Ansatzfunktionen bestimmt. Um im mehrdimensionalen Fall die Konformität des Ansatzes bei Übergang zu den nicht geschnittenen Elementen im Inneren der Teilgebiete sicherzustellen, müssen dann noch die entsprechenden (multi-)quadratischen Ansatzfunktionen für die jeweiligen Elementteile in den Ansatz eingearbeitet werden, so daß wir wieder eine Partition der Eins und die Eigenschaft $\tilde{\varphi}_i(x_k) = \delta_{ik}$ erhalten.

Numerische Tests

Zuerst wird wieder das Randwertproblem (5.14) mit der kreisförmigen Grenzfläche in einem rechteckigen Gebiet gelöst. Dabei werden das gleiche unstrukturierte Gitter und die gleiche elementweise lineare Rekonstruktion der Level-Set-Funktion wie im vorherigen Abschnitt benutzt. Wie Abbildung 5.9 zu entnehmen ist, verbessert sich die H^1 -Fehlerordnung durch Einsatz von Elementen höherer Ordnung von $O(h)$ auf $O(h^{3/2})$ und ermöglicht, den Fehler um eine Größenordnung zu verringern. Dies ist die zu erwartende optimale Ordnung des Standard-Verfahrens bei polygonaler Randapproximation [Cia91].

Um eine Überlagerung der Fehlerasymptotik durch Effekte der Grenzflächen-Approximation auszuschließen, betrachten wir den Fall einer ebenen Grenzfläche $\Gamma := \{(x, y) \in \Omega \mid y = 0\}$. Das Randwertproblem

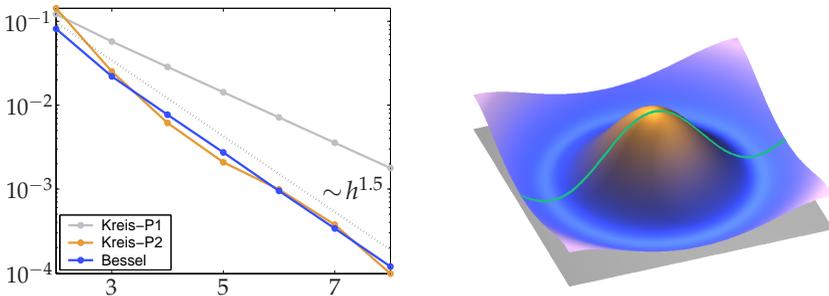


Abbildung 5.9: Links: H^1 -Fehlerasymptotik für Ansatz höherer Ordnung. Rechts: rotationssymmetrische Lösung mit Vorgabe auf ebener Grenzfläche.

$$-\Delta \vartheta(x, y) = J_0(\|(x, y)\|) \quad \text{in } \Omega = [-5, 5]^2 \setminus \Gamma, \quad (5.17a)$$

$$\vartheta(x, y) = J_0(\|(x, y)\|) \quad \text{für } (x, y) \in \partial\Omega, \quad (5.17b)$$

$$\vartheta(x, 0) = J_0(|x|) \quad \text{auf } \Gamma := \{(x, y) \in \Omega \mid y = 0\} \quad (5.17c)$$

besitzt die Bessel-Funktion $J_0(\|(x, y)\|)$ als Lösung. Der H^1 -Fehler bei der numerischen Lösung des Problems ist wiederum in Abbildung 5.9 angegeben. Es tritt ein Ordnungsverlust auf, der sich nicht mit der polygonalen Approximation der Grenzfläche begründen läßt.

Analyse der Fehlerordnung

Es ist der Fehler $\vartheta - \vartheta_h$ in der H^1 - bzw. $W^{1,2}$ -Norm $\|\cdot\|_{1,\Omega}$ auf dem Gebiet Ω abzuschätzen. Beim Standard-Verfahren wird zuerst mit dem Lemma von Cea die Fehlerabschätzung auf die Analyse eines Approximationsproblems zurückgeführt. Dazu sei $V_h \subseteq H^1(\Omega) = W^{1,2}(\Omega)$ der Raum der Ansatzfunktionen und I_h der Projektionsoperator auf V_h , der also einer Funktion die zum Gitter gehörende Interpolierende zuweist. Dann gilt für die Finite-Elemente-Lösung eines Problems wie (5.1)

$$\|\vartheta - \vartheta_h\|_{1,\Omega} \leq \inf_{v \in V_h} \|\vartheta - v_h\|_{1,\Omega} \leq \|\vartheta - I_h \vartheta\|_{1,\Omega}. \quad (5.18)$$

Die elementweise Abschätzung des Interpolationsfehlers nach [Cia91, Kap. 15], hier mit ϑ statt u , T statt Ω und $p, q = 2$, verläuft in drei Schritten. Durch die Rücktransformation Ψ^{-1} wird T auf das Referenzelement \hat{T} abgebildet. Dort erfolgt für $m \in \mathbb{N}_0$ eine Abschätzung der $|\cdot|_{m,T}$ -Halbnormen des Interpolationsfehlers $\hat{\vartheta} - I_h \hat{\vartheta}$ mit einem Bramble-Hilbert-Lemma, wobei $\hat{\vartheta} := \vartheta \circ \Psi^{-1}$ ist.

Zuletzt wird die Transformation von \widehat{T} auf T ausgeführt. Dies gibt – mit möglicherweise von Zeile zu Zeile jeweils unterschiedlichen Konstanten C – die Ungleichungen

$$|\vartheta - I_h \vartheta|_{m,T} \leq C \|\Psi^{-1}\|^m |\det \Psi^{-1}|^{\frac{1}{2}} |\widehat{\vartheta} - I_h \widehat{\vartheta}|_{m,\widehat{T}} \quad (5.19a)$$

$$\leq C \|\Psi^{-1}\|^m |\det \Psi^{-1}|^{\frac{1}{2}} |\widehat{\vartheta}|_{k+1,\widehat{T}} \quad (5.19b)$$

$$\leq C \|\Psi^{-1}\|^m \|\Psi\|^{k+1} |\det \Psi^{-1}|^{\frac{1}{2}} |\det \Psi|^{\frac{1}{2}} |\vartheta|_{k+1,T}. \quad (5.19c)$$

Dabei ist k der maximale Grad, bis zu dem alle Polynome im lokalen Ansatzraum auf dem Referenzelement enthalten sind. Während die Beträge der Determinanten sich aufheben, ist zum weiteren Abschätzen des Produkts der Normen von Hin- und Rücktransformation eine Annahme der Quasiuniformität des Gitters nötig. Wenn es ein $\tilde{\alpha} > 0$ gibt, so daß für die längste Elementkante h_T und den Innenkreisdurchmesser ρ_T jedes Elements $h_T \leq \tilde{\alpha} \rho_T$ gilt, folgt wegen $\|\Psi^{-1}\| \leq h_{\widehat{T}}/\rho_T$ und $\|\Psi\| \leq h_T/\rho_{\widehat{T}}$, siehe [KA00]

$$|\vartheta - I_h \vartheta|_{1,T} \leq C h_T^{k+1-m} |\vartheta|_{k+1,T}. \quad (5.20)$$

Unter der Voraussetzung $\vartheta \in H^{k+1}(\Omega)$ ergibt dies zusammengesetzt über alle Elemente mit (5.18) die Fehlerabschätzung

$$\|\vartheta - \vartheta_h\|_{1,\Omega} \leq \|\vartheta - I_h \vartheta\|_{1,\Omega} \leq C h^k \|\vartheta\|_{k+1,\Omega}. \quad (5.21)$$

Für Probleme, bei denen wegen der Grenzflächen-Bedingung die Ansatzfunktionen innerhalb der Elemente nur noch stückweise glatt sind, lassen sich die Bramble-Hilbert-Abschätzungen (5.19b) nicht mehr machen. Aber nach dem Trennen der Freiheitsgrade der einzelnen Phasen haben wir auf den Elementteilen T_Γ wieder die üblichen Ansatzfunktionen, die eine solche Abschätzung erlauben. Durch den Schwellwert α ist formal die Quasiuniformität der T_Γ gesichert. Bei stückweise linearem $P1$ -Ansatz gibt das Verfahren aus Abschnitt 5.1 auf allen Elementen und den T_Γ die gleiche Approximationsordnung. Mit der Voraussetzung $\vartheta \in H^2(\Omega^+ \cup \Omega^-)$ erhalten wir wiederum die gleiche globale Abschätzung (5.21) mit $k = 1$ und gegebenenfalls modifizierter Konstante C .

Bei einem $P2$ -Ansatz im Inneren der Phasen ist eine Unterscheidung der nicht geschnittenen Elemente mit einer Approximationsordnung von $O(h^2)$ gegenüber den Teilen T_Γ der von Γ geschnittenen Elemente nötig, wo wir nur eine auf $O(h)$ verringerte Approximationsordnung haben. Dies führt auf

$$\|\vartheta - \vartheta_h\|_{1,\Omega^+ \cup \Omega^-}^2 \leq C \left(h^4 \|\vartheta\|_{3,\Omega^+ \cup \Omega^-}^2 + h^2 \sum_{T_\Gamma} |\vartheta|_{2,T_\Gamma}^2 \right).$$

Mit der Annahme $\vartheta \in H^3(\Omega^+ \cup \Omega^-) \cap C^2(\Omega^+ \cup \Omega^-)$, die nur im eindimensionalen Fall schon für $\vartheta \in H^3(\Omega^+ \cup \Omega^-)$ automatisch erfüllt ist, läßt sich $|\vartheta|_{2,T_\Gamma}^2$ durch den maximalen Betrag der Ableitungen zweiter Ordnung $|\vartheta_{\max}^{(2)}|$ abschätzen. Die Grundfläche jedes T_Γ hat jeweils die Form $h_{T_\Gamma} l_{T_\Gamma}$, und deren Summe läßt sich insgesamt durch die Gitterweite h und die Länge der l_Γ der Grenzfläche abschätzen. Die so erhaltene h -Potenz führt auf

$$\|\vartheta - \vartheta_h\|_{1,\Omega^+ \cup \Omega^-}^2 \leq C \left(h^4 \|\vartheta\|_{3,\Omega^+ \cup \Omega^-}^2 + h^3 |\vartheta_{\max}^{(2)}|^2 \right) \quad (5.22)$$

und gibt für den H^1 -Fehler die in den numerischen Rechnungen beobachtete Ordnung $3/2$. Tatsächlich ist das Maximum der zweiten Ableitungen an der Grenzfläche die für die Fehlerordnung entscheidende Größe.² Dies läßt sich durch die numerische Lösung quasi-eindimensionaler Probleme analog zu (5.15) oder (5.17), mit einer ebenen Grenzfläche $\Gamma := \{(x, y) \in \Omega \mid y = 0\}$ und der exakten Lösung

$$\vartheta(x, y) = 1 - \text{sign}(y) \sin\left(y/\sqrt{D}\right), \text{ bzw.} \quad (5.23a)$$

$$\vartheta(x, y) = e^{-|y|/\sqrt{D}} \quad (5.23b)$$

nachweisen. Während wir für den H^1 -Fehler der numerischen Lösung des Problems mit der Sinus-Funktion (5.23a), wo $\vartheta_{yy}(x, 0) = 0$ und $|\vartheta_{\max}^{(2)}| \sim h$ gilt, die volle Ordnung $O(h^2)$ feststellen, erhalten wir mit (5.23b) nur die Ordnung $O(h^{3/2})$, siehe Abbildung 5.10.

Als Folgerung ist festzuhalten, daß bei krummliniger Grenzfläche Γ isoparametrische quadratische Ansätze für die Funktionen $\{\psi_j\}$ auf den Elementteilen T_Γ der von Γ geschnittenen Elemente ohne Hinzunahme weiterer Freiheitsgrade im Inneren der Phasen die Verfahrensordnung nicht verbessern können.

Eine interessante Alternative zu dem hier vorgestellten Verfahren mit $P2$ -Lagrange-Elementen ist ein reduzierter kubischer Hermite-Ansatz mit dem Zienkiewicz-Dreieck. Hierbei sind wieder – wie beim $P1$ -Ansatz – alle Freiheitsgrade den Gitterknoten zugeordnet. Um die erreichbare Fehlerordnung dabei nicht durch die Gebietsapproximation zu beschränken, wird allerdings eine stückweise krummlinige Approximation der Grenzfläche nötig, beispielsweise aus einer stückweise quadratischen und deshalb nicht mehr elementweisen Rekonstruktion der Grenzfläche aus einem Level-Set.

2. Da sich – außer für lineare Lösungsfunktionen – nur im (quasi-)eindimensionalen Fall eine weitere Verbesserung der Fehlerordnung hervorrufen läßt, war es naheliegend, zunächst eine Dimensionsabhängigkeit der erreichbaren Ordnung zu vermuten, was aber durch das Beispiel mit der Lösung (5.23b) widerlegt wird.

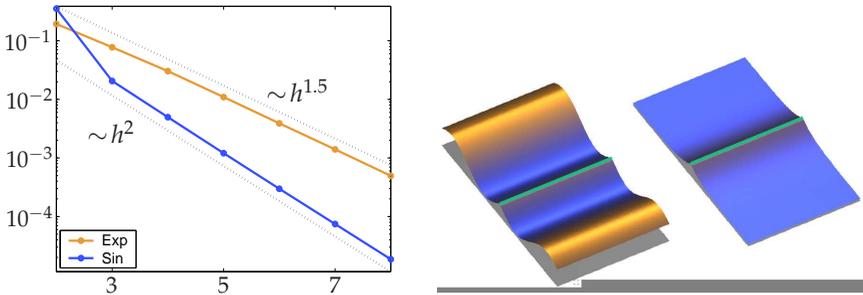


Abbildung 5.10: H^1 -Fehlerasymptotik für die Lösungen der quasi-eindimensionalen Probleme und die Lösungsfunktionen (5.23a), bzw. (5.23b).

5.3 Wärmeleitungsgleichung

Für den instationären Fall wird ein Modellproblem aus der Wärmeleitungsgleichung mit Quellterm sowie Anfangs- und Randbedingung betrachtet. Gesucht wird eine Lösung ϑ von

$$\vartheta_t - D \Delta \vartheta = q \quad \text{in } [0, t^*] \times \Omega \subseteq \mathbb{R}^{d+1}, \quad d \in \mathbb{N}, \quad (5.24a)$$

$$\vartheta(t, x) = 0 \quad \text{auf } [0, t^*] \times \partial\Omega, \quad (5.24b)$$

$$\vartheta(0, x) = \vartheta_0(x) \quad \text{für } t = 0, x \in \Omega. \quad (5.24c)$$

Die Zeit- und Ortsdiskretisierung der Differentialgleichung erfolgt üblicherweise in zwei getrennten Schritten. Mit einer Menge von Zeitpunkten $t_n \in [0, t^*]$, die der Einfachheit halber als äquidistant mit der Schrittweite τ angenommen werden, wird hier zuerst die Zeitdiskretisierung durchgeführt. Die Größen zu jedem festen Zeitpunkt t_n werden mit $\vartheta^{(n)}$ bzw. $q^{(n)}$ bezeichnet. Mit der Anwendung des expliziten bzw. des impliziten Euler-Verfahren erhalten wir aus (5.24a) jeweils eine Reihe von semidiskreten Problemen mit Differentialgleichungen

$$\vartheta^{(n+1)} - \vartheta^{(n)} - \tau D \Delta \vartheta^{(n)} = \tau q^{(n)}, \quad \text{in } \Omega, \text{ bzw.} \quad (5.25a)$$

$$\vartheta^{(n+1)} - \vartheta^{(n)} - \tau D \Delta \vartheta^{(n+1)} = \tau q^{(n+1)}. \quad \text{in } \Omega. \quad (5.25b)$$

In der schwachen Form der zu den stationären Problemen aus Abschnitt 5.1 analogen semidiskreten Probleme muß jeweils nach Multiplikation von (5.25) mit beliebigen Testfunktionen $\varphi_i \in H_0^1(\Omega)$ und Integration gelten

$$\left\langle \varphi_i, \vartheta^{(n+1)} - \vartheta^{(n)} \right\rangle_{\Omega} + \tau D \left\langle \nabla \varphi_i, \nabla \vartheta^{(n)} \right\rangle_{\Omega} = \tau \left\langle \varphi_i, q^{(n)} \right\rangle_{\Omega}, \quad \text{bzw.} \quad (5.26a)$$

$$\left\langle \varphi_i, \vartheta^{(n+1)} - \vartheta^{(n)} \right\rangle_{\Omega} + \tau D \left\langle \nabla \varphi_i, \nabla \vartheta^{(n+1)} \right\rangle_{\Omega} = \tau \left\langle \varphi_i, q^{(n+1)} \right\rangle_{\Omega}. \quad (5.26b)$$

Mit dem Lösungsansatz für die numerische Lösung $\vartheta_h^{(n)}$ zum n -ten Zeitschritt als Linearkombination der Ansatzfunktionen erhalten wir die mit (5.4) vergleichbaren linearen Gleichungssysteme

$$a \zeta^{(n+1)} = \tau r^{(n)} + (a - \tau D A) \zeta^{(n)}, \quad (5.27a)$$

$$(a + \tau D A) \zeta^{(n+1)} = \tau r^{(n+1)} + a \zeta^{(n)}. \quad (5.27b)$$

Zusätzlich zur Steifigkeitsmatrix A fließt nun die *Massenmatrix* a in die Gleichungen ein, und der Vektor $r^{(n)}$ kann vom Zeitschritt n abhängen. Analog zu (5.5) ist dazu

$$a[i, k] := \langle \varphi_i, \varphi_k \rangle_{\Omega}, \quad A[i, k] := \langle \nabla \varphi_i, \nabla \varphi_k \rangle_{\Omega}, \quad r^{(n)}[i] := \left\langle \varphi_i, q^{(n)} \right\rangle_{\Omega} \quad (5.28)$$

zu definieren.³ Die beiden Verfahren (5.25) können in einer Konvexkombination verknüpft werden. Es seien $\omega_0, \omega_1 \geq 0$ mit $\omega_0 + \omega_1 = 1$, dann können wir aus (5.27)

$$(a + \tau D \omega_1 A) \zeta^{(n+1)} = (a - \tau D \omega_0 A) \zeta^{(n)} + \tau \left(\omega_0 r^{(n)} + \omega_1 r^{(n+1)} \right) \quad (5.29)$$

herleiten,⁴ wobei wir für $\omega_0 = \omega_1 = 1/2$ das Crank-Nicolson-Verfahren erhalten, das mit $O(h^2 + \tau^2)$ eine bessere L^2 -Fehlerordnung aufweist als die anderen Kombinationen, die nur von der Ordnung $O(h^2 + \tau)$ sind [Tho97, KA00]. Abbildung 5.11 zeigt das typische Fehlerverhalten bei Verfeinerung der Gitter- bzw. Schrittweiten, wobei hier für die Darstellung die L^2 -Fehler über ein festes Zeitintervall $[0, t^*]$ gemittelt wurden, da die Schwankungen im zeitlichen Verlauf gegenüber der Fehlerreduktion aufgrund der Verfeinerungen gering sind. Ein weiteres Auswahlkriterium für den Parameter ω_1 ist durch Konditionszahl der zu invertierenden Matrix von (5.29) gegeben. Neben dem Anwachsen der Konditionszahl mit feiner werdenden örtlichen Gittern [Mos04] läßt sich ein Anwachsen mit größer werdender Zeitschrittweite τ und ein Wachsen mit stärkerer Gewichtung des impliziten Verfahrensanteils durch größere ω_1 beobachten. Das Crank-Nicolson-Verfahren liegt allerdings an der Grenze des Bereichs $\omega_1 \in [\frac{1}{2}, 1]$ der absoluten Stabilität, in dem es keine aus der Ortsdiskretisierung resultierende Beschränkung der zulässigen Zeitschrittweite gibt.

3. In diesem Abschnitt werden die Matrizen, deren Einträge jeweils von den gleichen Ansatzfunktionen abhängen wie die in Abschnitt 5.1, ohne aber die Anwendung des Gradienten in den Skalarprodukten zu enthalten, mit den dazu jeweils korrespondierenden Kleinbuchstaben bezeichnet.

4. Als weitere Verallgemeinerung kann auch für jede Zeile aus (5.27) eine unterschiedliche Gewichtung der Verfahren vorgenommen werden. Dafür seien ω_0 und ω_1 Diagonalmatrizen mit nichtnegativen Einträgen und $\omega_0 + \omega_1 = I$, wobei I die entsprechende Einheitsmatrix ist.

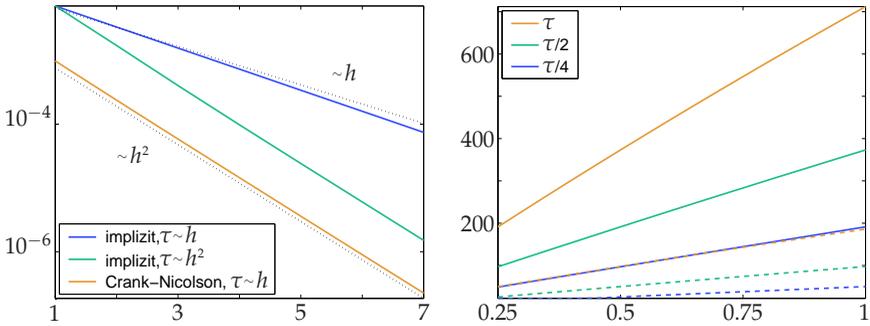


Abbildung 5.11: Links: L^2 -Fehler über der Anzahl Gitterverfeinerungen für das Problem (5.24) mit Lösung (5.37a); Rechts: Konditionszahl der Systemmatrix von (5.29) über dem Parameter ω_1 , gestrichelte Linien für verdoppelte Gitterweite.

Den bisherigen Ausführungen dieses Abschnitts liegt die Annahme zugrunde, daß sich die Ansatzfunktionen, d.h. üblicherweise das Gitter, zwischen den Zeitschritten nicht ändert. Werden aber Adaptionsschritte vorgenommen, so ist entweder die numerische Lösung des vorangegangenen Schritts zuerst auf das neue Gitter zu projizieren bzw. interpolieren, oder beim Bilden der Skalarprodukte in (5.26) bzw. (5.28) sind die verschiedenen Ansatzfunktionen der jeweiligen Zeitpunkte zu berücksichtigen. In dem resultierenden Gleichungssystem

$$(a_1 + \tau D \omega_1 A_1) \xi^{(n+1)} = (a_0 - \tau D \omega_0 A_0) \xi^{(n)} + \tau (\omega_0 r^{(n+0)} + \omega_1 r^{(n+1)})$$

sind daher verschiedene Massen- oder Steifigkeitsmatrizen enthalten, wobei a_μ und A_μ für $\mu \in \{0, 1\}$ definiert werden durch⁵

$$a_\mu[i, k] := \langle \varphi_i^{(n+1)}, \varphi_k^{(n+\mu)} \rangle_\Omega, \quad A_\mu[i, k] := \langle \nabla \varphi_i^{(n+1)}, \nabla \varphi_k^{(n+\mu)} \rangle_\Omega. \quad (5.30)$$

Jetzt wird das Anfangs- Randwertproblem (5.24) so geändert, daß das Gebiet Ω sich aus zwei möglicherweise zeitveränderlichen Teilen $\Omega^\pm(t)$ zusammensetzt und auf der beweglichen Grenzfläche $\Gamma(t)$ eine Dirichlet-Bedingung

$$\vartheta(t, x) = g(t, x) \quad \text{auf } \Gamma(t) := \partial\Omega^\pm(t) \setminus \partial\Omega, \quad t \in [0, t^*] \quad (5.31)$$

5. Weil in der schwachen Formulierung mit (5.26) die Testfunktion stets dem späteren Zeitpunkt t_{n+1} zugeordnet ist, ist der auf der linken Seite der Skalarprodukte auftauchende obere Index für den Zeitschritt stets $n + 1$.

gestellt wird. Die Differentialgleichung (5.24a) ist entsprechend auf den Bereich $\bigcup_{0 < t < t^*} \{t\} \times (\Omega \setminus \Gamma(t))$ einzuschränken. Nach der Zeiddiskretisierung sind die in den Abschnitten 5.1 und 5.2 vorgestellten Verfahren auf die stationären semi-diskreten Probleme anwendbar. Es sind jeweils Funktionen $\psi_j^{(n)}$ zur Erfüllung der Grenzflächenbedingung zum Zeitpunkt t_n einzuführen, dann ist von den mit dem Gitter verbundenen Ansatzfunktionen $\varphi_i^{(n)}$ auf die $\tilde{\varphi}_i^{(n)}$ zu wechseln und ein Ansatz

$$\vartheta_h^{(n)} = \sum_k \tilde{\zeta}_k^{(n)} \tilde{\varphi}_k^{(n)} + \sum_j g_j^{(n)} \psi_j^{(n)}$$

für die numerische Lösung zu machen, wobei die $g_j^{(n)}$ durch die Randwerte $g(t_n, x_j^{(n)})$ gegeben sind. Das führt für das explizite bzw. das implizite Verfahren nach Elimination der Freiheitsgrade auf der Grenzfläche analog zu (5.12) auf das Gleichungssystem

$$\begin{aligned} \tilde{a}_1 \tilde{\zeta}^{(n+1)} &= \left(\tilde{a}_0 - \tau D \tilde{A}_0 \right) \tilde{\zeta}^{(n+0)} + \tau \tilde{r}^{(n+0)} \\ &+ \left(\tilde{c}_0 - \tau D \tilde{C}_0 \right) \gamma^{(n+0)} - \tilde{c}_1 \gamma^{(n+1)} \quad \text{bzw.} \end{aligned} \quad (5.32a)$$

$$\begin{aligned} \left(\tilde{a}_1 + \tau D \tilde{A}_1 \right) \tilde{\zeta}^{(n+1)} &= \tilde{a}_0 \tilde{\zeta}^{(n+0)} + \tau \tilde{r}^{(n+1)} \\ &+ \tilde{c}_0 \gamma^{(n+0)} - \left(\tilde{c}_1 + \tau D \tilde{C}_1 \right) \gamma^{(n+1)}. \end{aligned} \quad (5.32b)$$

Dabei sind die vorkommenden Matrizen analog zu (5.9)

$$\tilde{a}_\mu[i, k] = \left\langle \tilde{\varphi}_i^{(n+1)}, \tilde{\varphi}_k^{(n+\mu)} \right\rangle, \quad \tilde{A}_\mu[i, k] = \left\langle \nabla \tilde{\varphi}_i^{(n+1)}, \nabla \tilde{\varphi}_k^{(n+\mu)} \right\rangle, \quad (5.33)$$

und analog zu (5.11) und in Einklang mit Anhang A.6 ist zu definieren

$$\tilde{a}_\mu := a_\mu - \Phi_1 c_1^T - c_\mu \Phi_\mu^T + \Phi_1 b_\mu \Phi_\mu^T, \quad \tilde{c}_\mu := c_\mu - \Phi_1 b_\mu \quad (5.34a)$$

$$\begin{aligned} \tilde{A}_\mu &:= A_\mu - \Phi_1 C_1^T - C_\mu \Phi_\mu^T + \Phi_1 B_\mu \Phi_\mu^T, & \tilde{C}_\mu &:= C_\mu - \Phi_1 B_\mu \\ \tilde{r}^{(n+\mu)} &:= r^{(n+\mu)} - \Phi_1 \rho^{(n+\mu)}. \end{aligned} \quad (5.34b)$$

Die komponentenweise Definition dieser Größen ist analog zu (5.10)

$$b_\mu[l, j] := \left\langle \psi_l^{(n+1)}, \psi_j^{(n+\mu)} \right\rangle_\Omega, \quad B_\mu[l, j] := \left\langle \nabla \psi_l^{(n+1)}, \nabla \psi_j^{(n+\mu)} \right\rangle_\Omega, \quad (5.35a)$$

$$c_\mu[k, j] := \left\langle \varphi_k^{(n+1)}, \psi_j^{(n+\mu)} \right\rangle_\Omega, \quad C_\mu[k, j] := \left\langle \nabla \varphi_k^{(n+1)}, \nabla \psi_j^{(n+\mu)} \right\rangle_\Omega, \quad (5.35b)$$

$$\rho^{(n+\mu)}[j] := \left\langle \psi_k^{(n+1)}, q_j^{(n+\mu)} \right\rangle_\Omega, \quad \gamma_\mu[j] := g \left(x_j^{(n+\mu)} \right), \quad (5.35c)$$

$$\Phi_\mu[k, j] := \varphi_k^{(n+\mu)} \left(x_j^{(n+\mu)} \right). \quad (5.35d)$$

Auch für das Problem mit Vorgabe auf der Grenzfläche können wieder das explizite und implizite Vorgehen kombiniert werden:

$$\begin{aligned} \left(\tilde{a}_1 + \tau D \omega_1 \tilde{A}_1\right) \xi^{(n+1)} &= \left(\tilde{a}_0 - \tau D \omega_0 \tilde{A}_0\right) \xi^{(n)} + \tau \left(\omega_0 \tilde{r}^{(n)} + \omega_1 \tilde{r}^{(n+1)}\right) \\ &+ \left(\tilde{c}_0 - \tau D \omega_0 \tilde{C}_0\right) \gamma^{(n)} - \left(\tilde{c}_1 + \tau D \omega_1 \tilde{C}_1\right) \gamma^{(n+1)}. \end{aligned} \quad (5.36)$$

Gegenüber Abschnitt 5.1 geht ein wesentlicher Vorteil des Verfahrens verloren, da es nicht mehr möglich ist, die Grenzflächenbedingungen in einem Nachbearbeitungsschritt *allein* aus dem momentanen Verlauf der Grenzfläche zu berücksichtigen. Es müssen Informationen, die nicht im Gitter enthalten sind, zwischengespeichert werden. Würde man darauf verzichten und $\vartheta_h^{(n)}$ aus den zum Gitter gehörenden Ansatzfunktionen φ_i rekonstruieren, was mit der vorher berechneten Lösung zum Zeitpunkt t_n auf allen nicht von der Grenzfläche geschnittenen Elementen im Inneren der Phasen übereinstimmt, so würden in (5.35) die Matrizen b_0, B_0, c_0 und C_0 zu 0 verschwinden und in (5.34) wären $\tilde{c}_0 = 0$ und $\tilde{C}_0 = 0$, sowie $\tilde{a}_0 = a_0 - \Phi_1 c_1^T$ und $\tilde{A}_0 = A_0 - \Phi_1 C_1^T$. Das daraus resultierende vereinfachte Verfahren erreicht aber nicht die volle Ordnung, siehe Abbildung 5.15 und hat eine stärkere Neigung zu unerwünschten Oszillationen in der Lösung. Eine vergleichbare Vereinfachung wird in [ZH01] als instabil beschrieben.

Numerische Tests

Um geometriebedingte Fehlereinflüsse bei der numerischen Lösung auszuschließen, werden zuerst quasi-eindimensionale Probleme betrachtet, einmal ohne und einmal mit einer ebenen, sich mit der Geschwindigkeit V gleichförmig bewegenden Grenzfläche $\Gamma(t) := \{(x, y) \in \Omega \mid y = Vt\}$. Aus der gewünschten exakten Lösung

$$\vartheta(t, x, y) = 1 - \sin\left(\frac{y - Vt}{\sqrt{D}} - \frac{3\pi}{4}\right), \quad \text{bzw.} \quad (5.37a)$$

$$\vartheta(t, x, y) = 1 - \sin\left(\frac{y - Vt}{\sqrt{D}} - \frac{3\pi}{4} + \frac{\pi}{2}\chi_{\Omega^-}(x)\right) \quad (5.37b)$$

sind der Quellterm in (5.24a) und die Randwertvorgabe in (5.31) zu berechnen.

Für das Problem ohne Grenzfläche und mit der Lösung (5.37a) werden die oben genannten analytischen Vorhersagen über das L^2 -Fehlerverhalten in der numerischen Rechnung erreicht, siehe Abbildung 5.11. Bei dem Problem mit der bewegten Grenzfläche und der zugehörigen Lösung (5.37b) weist das implizite Verfahren das gleiche Konvergenzverhalten auf, wie im Fall ohne Grenzfläche, siehe Abbildung 5.12. Für das Crank-Nicolson-Verfahren muß dagegen eine Verschlechterung der L^2 -Fehlerordnung von quadratisch auf linear in h festgestellt werden, in der H^1 -Norm ist sogar keine Konvergenz mehr festzustellen.

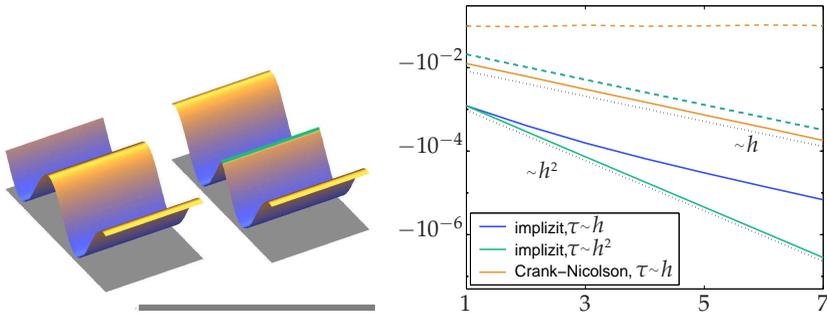


Abbildung 5.12: Links: Lösungen (5.37a) mit und (5.37b) ohne Grenzfläche zu einem festen Zeitpunkt. Rechts: $L^2(\Omega)$ -Fehler über Gitterverfeinerungen für das Problem mit Lösung (5.37b) mit ebener Grenzfläche und gestrichelte Linien für den $H^1(\Omega)$ -Fehler.

Um dieses Verhalten genauer zu analysieren, betrachten wir zwei Probleme, bei denen der Quellterm und die vorgegebenen Werte auf der Grenzfläche verschwinden. Dafür werden die Lösungen

$$\vartheta(t, x, y) = \begin{cases} 0 & \text{in } \Omega^+(t), \\ e^{-y+t} - 1 & \text{in } \Omega^-(t), \end{cases} \quad (5.38a)$$

bzw.
$$\vartheta(t, x, y) = \begin{cases} e^{y+t} - 1 & \text{in } \Omega^+(t), \\ 0 & \text{in } \Omega^-(t) \end{cases} \quad (5.38b)$$

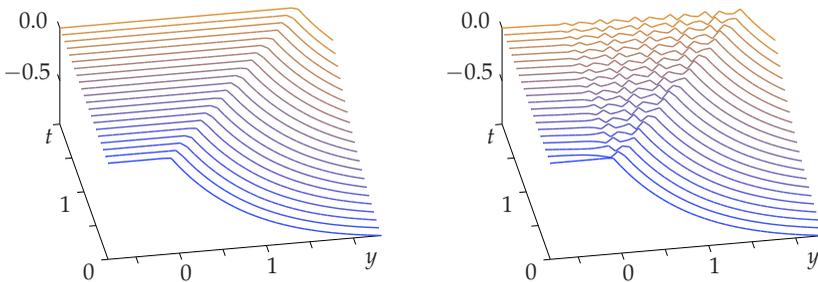


Abbildung 5.13: Links: Der Lösungsverlauf von (5.38a) wird mit dem impliziten Verfahren richtig wiedergegeben. Rechts: Das Crank-Nicolson-Verfahren zeigt bei Vorgabe auf einer bewegten Grenze oszillierendes Verhalten.

vorgegeben, wobei $\Omega^+(t) = \{(x, y) \in \Omega \mid Vt - y > 0\}$ sei. Dies erfordert dann die Wahl der Diffusionskonstante $D = 1$ und $V = +1$ bzw. $V = -1$. Der erste Fall ist die Lösung des Stefan-Problems mit ebener Grenzfläche und der Unterkühlung $\mathcal{U} = 1$. Bei der numerischen Lösung des ersten Problems sind Oszillationen in der sich ausdehnenden Phase Ω^+ festzustellen. Noch deutlicher lassen sich im zweiten Problem die Oszillationen in Ω^- der Ausdehnung dieser Phase zuschreiben. Die Systemmatrix entkoppelt wie im stationären Fall die Freiheitsgrade der beiden Teilgebiete, und durch das Verschwinden der Grenzflächenwerte und der Lösung auf Ω^+ gibt es keine nach Ω^- hinüberreichenden Einflüsse durch die Lösung zum vorangegangenen Zeitpunkt.

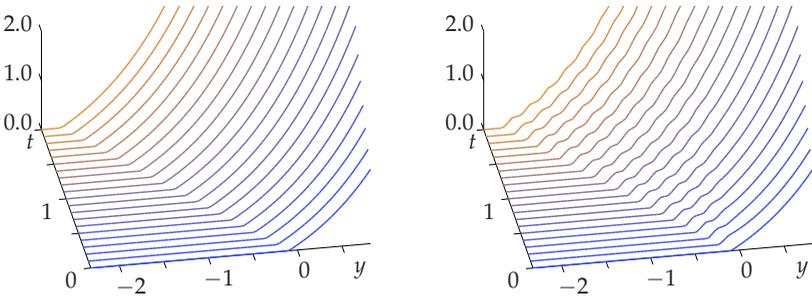


Abbildung 5.14: Numerische Lösung für den zweiten Fall mit (5.38b): Links: implizites Verfahren; Rechts: Crank-Nicolson-Verfahren.

Die Neigung des Crank-Nicolson-Verfahrens, oszillierende numerische Lösungen zu liefern, ist im Zusammenhang mit Sprüngen in den Anfangswerten bekannt [Øst03]. Mit wachsendem Parameter ω_1 verringern sich zwar die Oszillationen nahe der Grenzfläche, diese Verfahren weisen aber alle keine bessere Fehlerordnung auf als das rein implizite Verfahren mit $\omega_1 = 1$.

Als ein echt mehrdimensionales Testbeispiel dient die instationäre Berechnung des Ivantsov-Nadelkristalls aus Abschnitt 3.2 mit den gleichen Werten für R, V_{tip}, D und \mathcal{U} wie in Abschnitt 3.5. Es wird die gleichmäßig bewegte parabel-förmige Grenzfläche

$$\Gamma(t) = \left\{ (x, \gamma(x)) \mid \gamma(x) = \frac{R}{2} - \frac{x^2}{2R} + V_{tip} t \right\}$$

vorgegeben. Innerhalb eines beschränkten Gebiets Ω wird eine Lösung θ von

$$\theta_t - D\Delta\theta = 0, \quad \text{in } \bigcup_{0 < t < t^*} \{t\} \times (\Omega \setminus \Gamma(t)) \tag{5.39a}$$

mit den konstanten Dirichlet-Werten

$$\vartheta|_{\Gamma} = \mathcal{U} \quad \text{auf } \Gamma(t) \quad (5.39b)$$

und Vorgabe der exakten Lösungswerte auf $\partial\Omega$ gesucht. Für die Zeitdiskretisierung wird das implizite Euler-Verfahren eingesetzt. Wie Abbildung 5.15 zu entnehmen ist, erreicht das Verfahren auch hier asymptotisch zweite Ordnung für den L^2 -Fehler, wenn die Zeitschrittweite τ proportional zum Quadrat der Gitterweite h verkleinert wird. Ein Ansatz von Elementen höherer Ordnung bringt keine Verbesserung der Fehlerordnung, sofern die Zeitschrittweite nicht mit der Gitterweite noch stärker reduziert wird. Bei der adaptiven Gitterverfeinerung traten dabei allerdings gelegentlich abseits der Grenzfläche auf den geänderten Elementen dominierende Fehler auf, die die Konvergenz des Verfahrens verhinderten. Die Ursache dieser Fehler ist entweder in der ug-Bibliothek oder im Zusammenwirken der hier implementierten Verfahren mit dieser zu vermuten, blieb aber trotz intensiver Suche unklar.

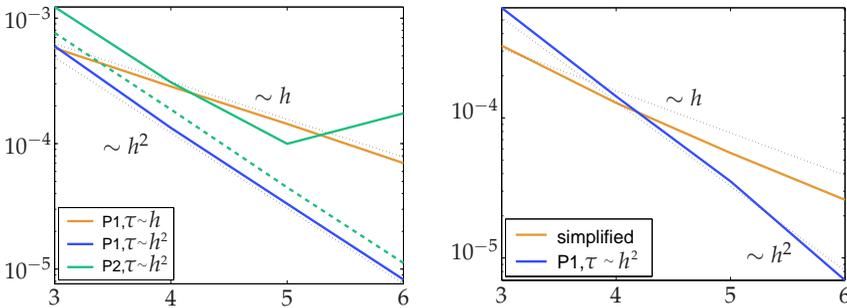


Abbildung 5.15: Links: $L^2(\Omega)$ -Fehler der numerischen Ivantsov-Lösung über Anzahl der Gitterverfeinerungen. Die gestrichelte Linie steht für uniforme Gitterverfeinerung. Rechts: Vergleich mit dem Verhalten des $L^2(\Omega)$ -Fehlers für das vereinfachte Verfahren.

Kapitel 6

Implementierung und numerische Tests

Für die numerische Lösung von Problemen partieller Differentialgleichungen muß die darin enthaltene unendliche Anzahl von Freiheitsgraden im Zuge einer Diskretisierung auf eine endliche Menge reduziert werden, welche dann in der Regel an ein Gitter gebunden ist. Die dafür eingesetzte Software muß diese Gitter verwalten und Algorithmen bereitstellen, die die Verknüpfungen der Freiheitsgrade entsprechend der Differentialgleichung nachbilden und diese Verknüpfungen anschließend auflösen. In den zurückliegenden Jahren wurden wichtige Techniken zur Steigerung der Effizienz dieser Algorithmen entwickelt: *adaptive Methoden, Parallelisierung* und *Mehrgitter-Verfahren*. Weil mit diesen Techniken die Komplexität der Implementierung deutlich zunimmt, ist die Wiederverwertbarkeit von Implementierungen von großer Bedeutung.

6.1 Das Software-Paket ug

Für diese Arbeit wurde das Softwarepaket ug-3.8 [BBJ⁺97] als Basis der Implementierung der numerischen Verfahren ausgewählt, da es sich aus einer großen Menge numerischer Software durch den Anspruch abhebt, alle oben genannten Techniken zur Effizienzsteigerung umzusetzen. ug wurde als ein akademisches Projekt mit der Zielsetzung entwickelt, einen universellen Baukasten flexibel wiederverwertbarer Methoden für Probleme partieller Differentialgleichungen in zwei und drei Raumdimensionen bereitzustellen. Dies umfaßt zuerst eine ug-eigene, betriebssystemunabhängige Speicherverwaltung, die für die Parallelisierung gegebenenfalls verteilt ausgelegt ist und eine dynamische Speicherbelegung ermöglicht. Darauf baut die Verwaltung von unstrukturierten adaptiven Mehrgittern aus allgemeinen, d.h. nicht nur simplizialen Elementen auf, die adaptive Verfeinerungen und Vergrößerungen zuläßt. Die dafür definierten

Datenstrukturen werden unten genauer beschrieben. Die numerischen Algorithmen sind nach einem objektorientierten Konzept angelegt, das aber in der prozeduralen Programmiersprache C realisiert ist. Auch dies wird unten genauer beschrieben. Weitere Teile von ug umfassen Schnittstellen und Methoden für die Gebiets- und Problembeschreibung, für Grafikausgabe und Post-Processing sowie für den Import und Export von Daten.

Spezieller auf bestimmte Probleme zugeschnittene Algorithmen sind in einer darüber angesiedelten Schicht in *Problemklassen-Bibliotheken* zusammengefaßt. So gibt es z.B. die Bibliothek ns für die Navier-Stokes-Gleichungen und die Finite-Elemente-Bibliothek fe, von der Teile in dieser Arbeit benutzt werden.

In Anwendungsprogrammen werden konkrete Gebiets- und Problembeschreibungen mit den genannten allgemeinen Bausteinen von ug und gegebenenfalls den Problemklassen-Bibliotheken verbunden. Zur Steuerung des Programmablaufs dient dabei die ug-Shell. Hier kann ein Nutzer in einer ug-eigenen Befehlssprache interaktiv Kommandos absetzen oder diese in Skripten zusammengefaßt ablaufen lassen. Ein zentraler Bestandteil der ug-Shell ist das Umgebungsverzeichnis, der *Environment-Baum*, in dem Variablen und Verweise für das Zusammenwirken der ug-Bausteine zusammengefaßt sind [Blu02].

Der Quelltext von ug steht mit Ausnahme der zentralen Header-Datei unter <http://cox.iwr.uni-heidelberg.de/~ug/> zum Abrufen bereit. Er kann für den wissenschaftlichen und privaten Einsatz kostenfrei lizenziert und an die jeweiligen Anforderungen angepaßt werden. Allerdings ist ug keine freie Software im Sinne einer z.B. mit der GPL¹ oder den DFSG² verträglichen Lizenz. Damit verbundene Nachteile sind bei der Nachvollziehbarkeit des Entwicklungsprozesses und der Dokumentation der Programmteile zu sehen sowie bei der fehlenden Möglichkeit, nicht-fachspezifische Komponenten aus freier Software zu integrieren.

Datenstrukturen

Die grundlegenden *geometrischen* und *algebraischen Datenstrukturen* sind in ug als strukturierte Datentypen [KR88] angelegt. Das Ziel der Verarbeitung unstrukturierter Gitter auf gegebenenfalls verteilten Systemen macht es naheliegend, diese in verketteten Listen anzulegen und damit auch die Flexibilität dynamischer Speicherbelegung nutzen zu können.

Bei der Diskretisierung eines linearen elliptischen Randwertproblems als Beispielaufgabe partieller Differentialgleichungen erhalten wir als Resultat

$$Ax = b, \quad \text{d.h.} \quad \sum_k a_{ik} x_k = b_i \quad \text{für jedes } i, \quad (6.1)$$

1. GNU General Public License der Free Software Foundation, siehe <http://www.fsf.org/licenses/gpl.html>.

2. Debian Free Software Guidelines, http://www.debian.org/social_contract#guidelines.

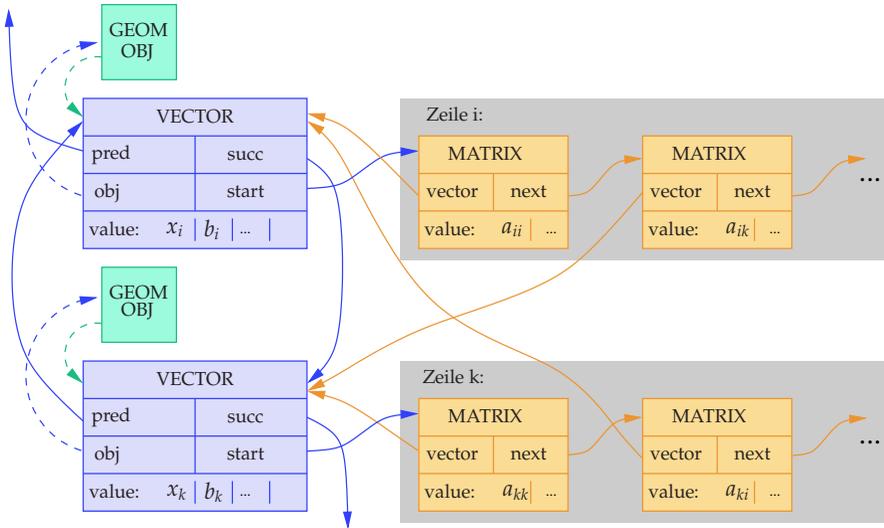


Abbildung 6.1: Nachbildung des linearen Gleichungssystems (6.1) mit den algebraischen Datenstrukturen in ug.

mit den zwei Vektoren x und b sowie einer Matrix A . In den Vektoren sind Einträge – normalerweise als Komponenten bezeichnet – zusammengefaßt, die zu der jeweils gleichen Größe des kontinuierlichen Problems gehören, z.B. der Lösung oder dem Quellterm. Alle Einträge in einer Zeile des Gleichungssystems (6.1) haben in der Regel einen örtlichen Bezug zu dem gleichen geometrischen Objekt, wie z.B. einem Knoten oder Element. Wenn bei der Parallelverarbeitung die geometrischen Objekte auf verschiedene Rechner mit getrenntem Speicher verteilt sind, ist es dagegen sinnvoll, die Sortierung oder Gruppierung der Einträge an deren Kopplung an die geometrischen Objekte auszurichten. In ug werden daher jedem geometrischen Objekt alle zugehörigen Vektoreinträge in einer Variablen vom Typ VECTOR und die Matrixeinträge in einer gewissen Anzahl an Variablen vom Typ MATRIX zugeordnet. Die Einträge in diesen Datenstrukturen werden dann als *Komponenten* bezeichnet. Gemäß Abbildung 6.1 gehört zum Vektor x aus (6.1) die 0-te Komponente in der VECTOR-Datenstruktur und zu b die erste Komponente. Die ug-Shell hält nicht die kompletten Daten der Vektoren und Matrizen bereit, stattdessen gibt es die *Descriptor* VECDATA_DESC und MATDATA_DESC, die den Variablen des Gleichungssystems und ihrer Bezeichnung in der ug-Shell die Komponenten in den Datenstrukturen zuordnen.

Mehrgitter werden in ug als Zusammenfassung von Gittern unterschied-

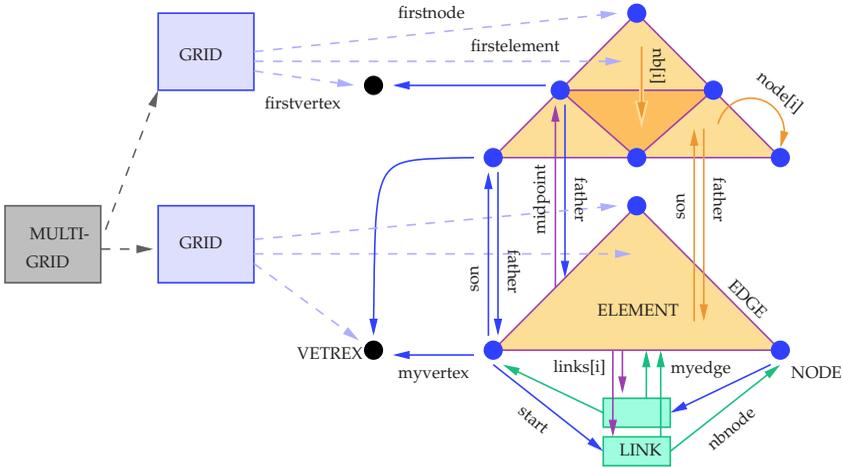


Abbildung 6.2: Geometrische Datenstrukturen von ug und Beziehungen untereinander. Datentypen sind in Großbuchstaben angegeben, die enthaltenen Verweise in Kleinbuchstaben.

licher Verfeinerungsstufe gebildet, wobei die 0-te Stufe das Ausgangsgitter ist und die i -te Stufe alle durch i -malige Verfeinerung von Elementen des Ausgangsgitters entstandenen Elemente enthält. Eine solche Mehrgitter-Hierarchie kann daher in eine Baumstruktur abgebildet und diese zum Suchen darin ausgenutzt werden. Die wichtigsten geometrischen Objekte als Bestandteile eines Gitters sind:

- Gitterknoten `NODE` (in Abb. 6.2 blau). Sie enthalten Verweise auf Vater- bzw. Sohn-Objekte auf dem entsprechend größeren bzw. feineren Gitter sowie Verweise auf Verbindungen zu Nachbarknoten. Die nicht vom Gitterlevel abhängigen Informationen, wie z.B. die Raumkoordinaten, sind in `VERTEX`-Objekten (schwarz) gespeichert.
- Gitterkanten `EDGE` (lila). Sie stellen eine symmetrische Verbindung von Knoten zu Knoten durch zwei Verbindungen `LINK` (grün) dar.
- Elemente `ELEMENT` (orange). Sie enthalten Verweise auf Vater- und Sohn-Objekte sowie auf Nachbar-elemente und Eckpunkte, nicht aber auf Seiten oder Seitenmittelpunkte.

Es ist zu beachten, daß bei zwei Raumdimensionen der Elementrand aus Kanten besteht, bei drei dagegen aus Seiten, für die es in ug keine eigene Datenstruktur gibt.

Zur Laufzeit der Anwendung erfolgt in der ug-Shell die *format-Vereinbarung*. Das ist eine Festlegung, wie viele Vektoren mit wie vielen Freiheitsgra-

den in welchen geometrischen Objekten, und wie viele Matrizen mit welchen Beziehungen der Freiheitsgrade untereinander vorgesehen werden. Die `NODE`- und `ELEMENT`-Objekte besitzen einen weiteren Zeiger `data`. Dieser wird von `ug` z.B. in der Datenstruktur `NODE` genutzt, um bei Bedarf Verweise von den Knoten auf die umliegenden Elemente zu erzeugen. Dazu ist eine eigene Datenstruktur `ELEMENTLIST` vorgesehen, die an jedem Knoten in einer einfach verketteten Liste angelegt wird. Es ist aber beim Umgang mit diesem `data`-Zeiger stets genau darauf zu achten, daß in der `format`-Vereinbarung ein ausreichender zusätzlicher Speicherbedarf in den geometrischen Objekten vorgesehen ist.

Weiterhin benötigt die Definition von Mehrgittern in `ug` neben der `format`-Vereinbarung noch eine Beschreibung der Gebietsränder, denen jeweils Verweise auf Funktionen für die Randbedingungen zuzuordnen sind, sowie ein Array von Zeigern des in `ug` definierten Typs `CoefProcPtr` auf Koeffizienten-Funktionen der Differentialgleichungen.

Numerische Prozeduren

In `ug` sind die Algorithmen, dort kurz als *NumProcs* für „Numerische Prozeduren“ bezeichnet, nach einem objektorientierten Konzept angelegt. Eine Klasse entspricht in der Realisierung in C einem strukturierten Datentyp, der Daten und Funktionen, die auf diese Daten zugreifen können, vereint. Dabei sind alle Daten *öffentlich*, können also von Funktionen außerhalb der Klasse geändert werden. Als grundlegende Basisklasse gibt es in `ug` die Klasse `NP_BASE`.³

```

struct np_base{
    /* data */
    ENVVAR      v;           /* is an environment variable */
    MULTIGRID   *mg;        /* associated multigrid */
    INT         status;     /* has a status , NO type and size ... */
    /* functions */
    INT (*Init)( struct np_base *, INT, char **); /* initializing */
    INT (*Display)(struct np_base *);             /* Display routine*/
    INT (*Execute)(struct np_base *, INT, char **); /* Execute routine */
};
typedef struct np_base NP_BASE;

```

Wir sehen hieran wesentliche Eigenschaften aller *NumProcs*. Durch den ersten Eintrag lassen sie sich in das Umgebungsverzeichnis der `ug`-Shell einordnen, der zweite bezieht die Algorithmen stets auf eine Mehrgitter-Hierarchie, und der dritte gibt Auskunft, ob die benötigten Funktionszeiger gesetzt sind. Weiterhin stellt jeder *NumProc* zumindest drei Funktionen bereit: `Init` zum Setzen von

3. Angaben in Form von Quelltext sind angemessen, da eine tabellarische Darstellung kaum davon abweichen würde. Obwohl zu der Definition von Funktionen die Festlegung der Parameterliste gehört, wird diese im weiteren aus Platzgründen weggelassen.

Parametern der Algorithmen, `Display`, um die Werte der Parameter anzuzeigen, und `Execute` für die eigentliche Ausführung. Diese Funktionen lassen sich dann von der `ug-Shell` mit den Kommandos `npinit`, `npdisplay` und `npexecute` aufrufen. Es ist typisch und zweckmäßig, daß alle Funktionen einer Klasse in ihrer Parameterliste zuerst einen Verweis auf ein Objekt eben dieser Klasse enthalten, um auf die klasseneigenen Daten zugreifen zu können. Ein *Objekt* einer bestimmten Klasse wird durch Belegung des benötigten Speichers und Festlegung der Funktionen gebildet. Zu diesem Zweck muß eine Funktion, der *Konstruktor*, im Umgebungsverzeichnis der `ug-Shell` verankert werden, die sich dann zur Laufzeit der Anwendung mit dem Shell-Befehl `npcreate` ausführen läßt. Ein entsprechender Destruktor fehlt.

Alle numerischen Algorithmen in `ug` sind als `NumProcs` durch *Vererbung* von der Klasse `NP_BASE` abgeleitete Klassen. Das heißt hier, bei der Realisierung des Konzeptes in `C`, daß der zugehörige Datentyp stets zuerst ein Feld vom Typ `NP_BASE` enthält. Die Vererbung von Klassen kann in mehreren Stufen geschehen, jedoch ist stets nur eine Vererbung von *einer* Klasse möglich. Beispielsweise definiert `ug` für die Diskretisierung die Klasse `NP_ASSEMBLE`:

```
struct np_assemble{
    NP_BASE          base;          /* inherits base class */
    /* data */
    VECDATA_DESC    *x;            /* solution */
    VECDATA_DESC    *b;            /* right hand side */
    MATDATA_DESC    *A;            /* matrix */
    /* functions */
    INT (*PreProcess)( <Parameter> );
    INT (*Assemble)( <Parameter> );
    INT (*PostProcess)( <Parameter> );
};
typedef struct np_assemble NP_ASSEMBLE;
```

Diese Klasse enthält also zusätzliche Daten, die das Ergebnis der Diskretisierung in einem Gleichungssystem wie (6.1) beschreiben sollen, sowie Funktionen zur Anpassung der `Execute`-Funktion an die spezielle Form des Problems partieller Differentialgleichungen. Sie ist in dem Sinne problemunabhängig definiert, daß Randbedingungen und Koeffizientenfunktionen nicht explizit einfließen. Es ist stattdessen üblich, diese in der `PreProcess`-Funktion aus der Mehrgitter-Beschreibung auszulesen und entsprechende, für die `Assemble`-Funktion sichtbare, Zeiger zu setzen. Da das Randwertproblem erst zur Laufzeit der Anwendung festgelegt wird, gibt es keine Kontrolle, ob dieses mit der implementierten Diskretisierung verträglich ist. Ebenso wenig ist sichergestellt, daß die in einem `NumProc` realisierten Funktionen auch mit der zur Laufzeit zu treffenden `format`-Vereinbarung verträglich sind. Damit die `Init`-, `Display`- oder `Execute`-

Funktion aus NP_BASE die zusätzlichen Daten der durch die Vererbung abgeleiteten Klasse benutzen können, muß der als erstes Argument beim Funktionsaufruf erhaltene Zeiger vom Typ *NP_BASE in einen vom Typ *NP_ASSEMBLE umgewandelt werden, wobei im allgemeinen nicht sichergestellt ist, daß dies auch für die erhaltenen Zeiger zulässig ist. Hier sind also stets bei der Programmierung implizit getroffene Konventionen einzuhalten, was die Wiederverwertbarkeit von Programmteilen erschwert.

6.2 Diskretisierung mit inneren Vorgaben

Die in Kapitel 5 vorgestellten Diskretisierungsverfahren benötigen zunächst eine elementweise lineare Rekonstruktion der Grenzfläche Γ aus dem Level-Set Φ . Werden bei Unterschreiten des dort eingeführten Schwellwertes α Schnittpunkte der Gitterkanten und der Grenzfläche mit Gitterknoten identifiziert, so ist die Konsistenz der Rekonstruktion über alle Elemente sicherzustellen. Die nach Rotation und Spiegelung verbleibenden möglichen Aufteilungen eines zweidimensionalen Referenzelements sind in Abbildung 6.3 angegeben. Dabei werden quadratische Referenzelemente auf dreieckige zurückgeführt, weshalb im weiteren nur noch Dreiecke betrachtet werden.

Im instationären Fall ist diese Aufteilung der Elemente zu jedem in der Diskretisierung genutzten Zeitpunkt anzuwenden. Daher ist es zweckmäßig, sie je-

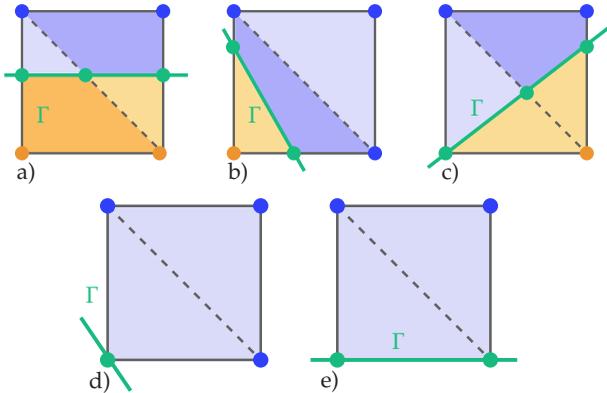


Abbildung 6.3: Aufteilung des Referenzelements bei linearer Rekonstruktion der Grenzfläche Γ und Knotenpunkte für einen stückweise (bi-)linearen Ansatz. In a) werden drei neue Freiheitsgrade eingeführt, in b) und c) zwei. In c) und d) werden jeweils ein Freiheitsgrad an die Vorgabe auf Γ gebunden, in e) zwei.

weils zusammen mit den lokalen geometrischen Eigenschaften der Grenzfläche zwischenspeichern, um eine mehrmalige Rekonstruktion dieser Informationen zu vermeiden. Es werden dafür zwei neue Datentypen definiert: ein strukturierter Datentyp `SUBELEMENT`, der die globalen Ortskoordinaten der Eckpunkte jedes Teilelements und deren lokale Koordinaten im Referenzelement enthält, sowie `IF_DATA` durch

```

struct if_data{
    ELEMENT          *myelem;      /* associated element */
    struct if_data   *succ;        /* linked list        */
    struct if_data   *data_o;      /* of previous timestep */
    /* description of parts */
    INT              n_subelem;    /* number of parts          */
    SUBELEMENT       *subelem[MAX_SUBELEM];
    INT              n_if_nodes;   /* number of grid nodes on interf */
    INT              corner[ MAX_CORNERS_OF_ELEM ];
    INT              n_if_dofs;    /* number of grid edges on interf */
    INT              edge[ MAX_SIDES_OF_ELEM ];
    /* values */
    DOUBLE_VECTOR    normal[ MAX_CORNERS_OF_ELEM ];
    DOUBLE           curv[ MAX_CORNERS_OF_ELEM ];
    DOUBLE           speed[ MAX_CORNERS_OF_ELEM ];
    DOUBLE           val[ MAX_CORNERS_OF_ELEM ];
};
typedef struct if_data IF_DATA;

```

Die Normalenrichtung und die Krümmung der Grenzfläche in den `n_if_nodes` darauf liegenden Gitterknoten und den `n_if_dofs` Schnittpunkten mit Gitterkanten können direkt während der Rekonstruktion der Grenzfläche bestimmt werden, die Verfahren dazu werden in den folgenden Abschnitten 6.3.3 und 6.4 beschrieben. In der Anwendung auf das dendritische Kristallwachstum lassen sich daraus auch die jeweils zugehörigen Randwerte in dem Array `val` festlegen, die Geschwindigkeit wird aber in der Regel erst in späteren Rechenschritten bestimmt.

Der optional nutzbare Zeiger `data` der `ug`-Datenstruktur `ELEMENT` erhält auf von der Grenzfläche geschnittenen Elementen einen Verweis auf eine Variable vom neu definierten Typ `IF_DATA`.⁴ Der dortige Zeiger `data_o` kann dann einen weiteren Verweis auf die Aufteilung des Elements zum vorangegangenen Zeitpunkt enthalten.

Bei der Implementierung der Verfahren aus Kapitel 5 ist auf jedem Element nach einer solchen Rekonstruktion der Grenzfläche zu entscheiden, ob entweder die übliche oder eine an die Grenzfläche angepaßte lokale Diskretisierung vor-

4. Entsprechend ist in der `format`-Vereinbarung Speicherplatz vorzusehen.

zunehmen ist. Es wird daher eine neue NumProc-Klasse IF_ASSEMBLE für stationäre und instationäre Probleme mit einer inneren Grenzfläche durch Vererbung von der Klasse NP_ASSEMBLE abgeleitet:

```

struct if_assemble{
  NP_ASSEMBLE      assemble;      /* inherits assemble class */
  /* data */
  DOUBLE          alpha;          /* subgrid-resolution (0 - 0.5) */
  VECDATA_DESC    *ls;           /* level-set vector */
  IF_DATA         *start;         /* reconstruction of interf */
  DOUBLE          timestep;       /* timestep (> 0 ==> instat .) */
  VECDATA_DESC    *ls_o;         /* OLD level-set vector */
  IF_DATA         *start_o;       /* list of ELEMes on OLD interf */
  /* functions */
  INT (*AssembleLocal)( <Parameter> ); /* standard local assemble */
  INT (*AssembleInterf)( <Parameter> ); /* local assemble of interf */
};
typedef struct if_assemble IF_ASSEMBLE;
    
```

Zur lokalen Assemblierung wird stets das Element bzw. das Teilelement auf das Einheits-Dreieck oder -Viereck transformiert, wo dann die jeweiligen Skalarprodukte mit den Ansatzfunktionen φ_i , bzw. $\tilde{\varphi}_i$ und ψ_j gebildet werden. Anschließend sind die lokalen Beiträge in das globale Gleichungssystem einzufügen. Die Beziehungen zwischen der lokalen Indizierung der Ansatzfunktionen auf einem Element und der lokalen Indizierung auf den Teilelementen S und S' ist für den Ansatz höherer Ordnung in Abbildung 6.4 angegeben. Dabei ist zu beachten,

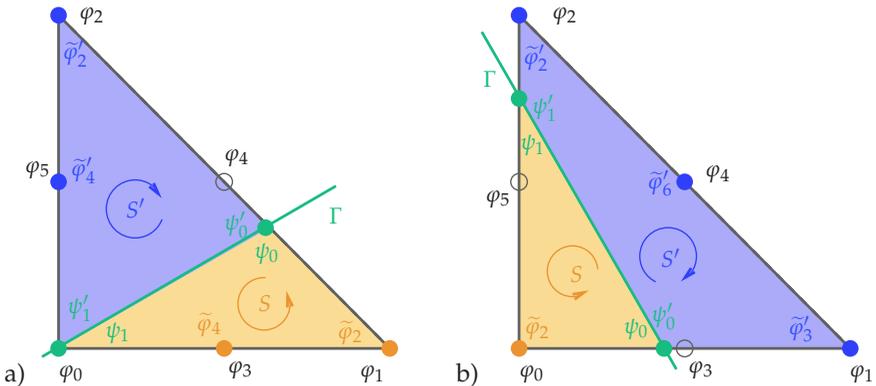


Abbildung 6.4: Modifizierte Ansatzfunktionen auf dem Referenzelement bei höherer Ordnung.

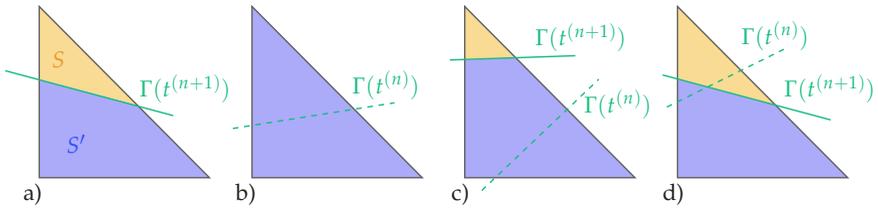


Abbildung 6.5: Aufteilungen des Referenzelements durch Schnitte mit der Grenzfläche Γ zu den Zeitpunkten $t^{(n)}$ und $t^{(n+1)}$ im instationären Fall.

daß die Freiheitsgrade auf den von der Grenzfläche geschnittenen Kanten entfallen. Die Indizierung für den Ansatz erster Ordnung ist in der des Ansatzes höherer Ordnung enthalten.

Im instationären Fall werden in jedem Zeitschritt die Lösungen $\vartheta^{(n)}$ und $\vartheta^{(n+1)}$, mit unterschiedlichen zugehörigen Aufteilungen der Elemente bezüglich der Grenzfläche Γ zu den Zeitpunkten $t^{(n)}$ und $t^{(n+1)}$, benötigt. Die wesentlichen zu unterscheidenden Fälle sind in Abbildung 6.5 angegeben.

Während sich die Fälle a) und b) weitgehend gegenüber dem stationären Fall unverändert berücksichtigen lassen, sind die beiden anderen Fälle komplizierter. Bei einer Aufteilung eines Elements in die Elementteile S und S' gemäß der Grenzfläche $\Gamma(t^{(n+1)})$ sind die Ansatzfunktionen $\tilde{\varphi}^{(n)i}$ auf diesen nur noch stückweise polynomial. Für eine Quadratur über die Elementteile müssen sie daher durch Polynome niedrigen Grades approximiert werden. Oder alternativ sind die Elementteile weiter aufzuteilen, diesmal bezüglich der Grenzfläche $\Gamma(t^{(n)})$. Nun sind die resultierenden Teile S_0 und S_1 von S , bzw. S'_0 und S'_1 von

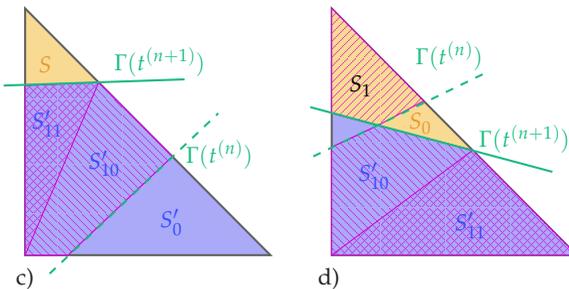


Abbildung 6.6: Weitere Aufteilung der Teilgebiete aus Abb. 6.5 zur Integration der Ansatzfunktionen.

S' unter Umständen keine Dreiecke oder Vierecke mehr, womit die bisherigen Quadraturformeln nicht mehr anwendbar wären. Also ist gegebenenfalls eine weitere Aufteilung z.B. von S'_1 in S'_{10} und S'_{11} erforderlich, siehe Abbildung 6.6. Für die Umsetzung dieses Vorgehens enthält die Datenstruktur SUBELEM die entsprechenden Verweise

```
struct subelem *subelem;
struct subelem *complement;
struct subelem *father;
```

6.3 Numerische Tests der Level-Set-Verfahren

Weil mit der Level-Set-Beschreibung von Grenzflächenproblemen die Gebietsgeometrie in den Werten und nicht im Definitionsbereich der Lösung enthalten ist, sind für deren numerische Lösung kartesische Gitter besonders gut geeignet, da sie hohe Genauigkeiten mit vergleichsweise einfachen Verfahren erzielen lassen. Ist aber die Grenzflächenbewegung nur ein – unter Umständen untergeordneter – Teil eines größeren Problems, und dies ist beim dendritischen Kristallwachstum der Fall, so ist es gegebenenfalls effizienter, ein gemeinsames unstrukturiertes Gitter einzusetzen.

Im Zusammenhang mit den Diskretisierungsverfahren für die Level-Set-Gleichung und das Fast-Marching Verfahren wird in der Regel nicht auf die Erfüllung von Randbedingungen eingegangen. Zumeist wird eine vollständige Beschreibung von geschlossenen Grenzflächen angestrebt, die den Gebietsrand nicht berühren. Dabei läßt sich stets das Gebiet so groß wählen, daß Randeinflüsse vernachlässigbar sind. Auch sind die Verfahren mit einem Ausfluß-Verhalten auf dem Rand verträglich. In dieser Arbeit sollen aber Symmetrien zur Reduzierung des Rechenaufwandes ausgenutzt werden, weshalb hier besonders symmetrische Randbedingungen zu untersuchen sind.

6.3.1 Level-Set-Gleichung

Die Level-Set-Gleichung (4.1) ist von Hamilton-Jacobi-Typ, sofern die Geschwindigkeit V unabhängig von der Krümmung κ ist. Zu deren Diskretisierung betrachten wir daher zunächst einen sowohl allgemeineren als auch spezielleren Fall mit einem Anfangswertproblem

$$\Phi_t + H(\nabla\Phi) = 0 \quad \text{in } [0, t^*] \times \Omega, t^* > 0, \quad (6.2a)$$

$$\Phi(0, x) = \Phi_0(x) \quad \text{in } \Omega \subseteq \mathbb{R}^d, d = 2, 3, \quad (6.2b)$$

bei dem die Hamilton-Funktion H nur vom Gradienten $\nabla\Phi$ abhängt. Der örtliche Bereich Ω wird durch eine Zerlegung \mathcal{T} in $|\mathcal{T}|$ Elemente T aufgeteilt, wobei das zugehörige Gitter unstrukturiert sein kann. Für die gesuchte Funktion

Φ wird ein stetiger, stückweise linearer P1-Ansatz gemacht, wodurch auf jedem Element T der Gradient $\nabla\Phi_T$ konstant ist. Ein explizites Verfahren zur Zeitdiskretisierung hat in jedem Knotenpunkt mit Index j die allgemeine Form

$$\Phi_j^{(n+1)} = \Phi_j^{(n)} - \tau \mathcal{H}_j(\nabla\Phi_1^{(n)}, \dots, \nabla\Phi_{|T|}^{(n)}), \quad (6.3)$$

dabei bezeichnet der untere Index stets den örtlichen Bezug zu Elementen oder Knoten, der obere Index gibt den Zeitschritt an. Mit asymptotisch verschwindenden Schrittweiten ist nach [CL84] die Konvergenz gegen die Viskositätslösung von (6.2) für *konsistente monotone* Verfahren dieser Art bewiesen. Die Konsistenz des Verfahrens erfordert

$$\mathcal{H}_j(\nabla\Phi, \dots, \nabla\Phi) = H(\nabla\Phi) \quad \text{für alle Knoten } j,$$

falls Φ örtlich und zeitlich lineares Verhalten hat und $\nabla\Phi$ folglich überall konstant ist. Ein Ansatz für die *numerische Hamilton-Funktion* \mathcal{H} in (6.3) der Form

$$\mathcal{H}_j(\nabla\Phi_1^{(n)}, \dots, \nabla\Phi_{|T|}^{(n)}) := \frac{\sum_{T \in \mathcal{T}} \alpha_{jT}^{(n)} \int_T H(\nabla\Phi_T^{(n)}) dx}{\sum_{T \in \mathcal{T}} \alpha_{jT}^{(n)} \text{Vol}_d(T)} \quad (6.4)$$

stellt die Konsistenz sicher und trennt die Beiträge aller Elemente $T \in \mathcal{T}$. Die auftretenden Koeffizienten $\alpha_{jT}^{(n)}$ müssen nichtnegativ und sollen lokal sein, also an jedem Knoten nur durch Werte aus Elementen in der jeweils engeren Nachbarschaft des Knotens bestimmt sein. Ein Verfahren wie (6.3) heißt *monoton*, wenn bei der Anwendung auf $\Phi^{(n)}$ und auf $\Psi^{(n)}$ komponentenweise gilt

$$\Phi^{(n)} \leq \Psi^{(n)} \implies \Phi^{(n+1)} \leq \Psi^{(n+1)}.$$

Diese Monotonieforderung führt zu einer Beschränkung der zulässigen Zeitschrittweite τ in Abhängigkeit von der Gitterweite, ähnlich einer Courant-Friedrichs-Lewy-Bedingung, kurz CFL-Bedingung. Unter der gleichen Einschränkung an die Zeitschrittweite läßt sich mit einem zweistufigen Runge-Kutta-Verfahren

$$\Phi_j^{(n+1/2)} = \Phi_j^{(n)} - \tau \mathcal{H}_j(\nabla\Phi_1^{(n)}, \dots, \nabla\Phi_{|T|}^{(n)}), \quad (6.5a)$$

$$\Phi_j^{(n+1)} = \frac{1}{2} \left(\Phi_j^{(n)} + \Phi_j^{(n+1/2)} \right) - \frac{\tau}{2} \mathcal{H}_j(\nabla\Phi_1^{(n+1/2)}, \dots, \nabla\Phi_{|T|}^{(n+1/2)}) \quad (6.5b)$$

die Ordnung der Zeitdiskretisierung verbessern.

Diskretisierung nach Barth und Sethian

Wegen der in Abschnitt 4.2 geschilderten Beziehung des Problems (6.2a) zu Erhaltungsgleichungen, mit einseitig gerichtetem Informationstransport entlang von charakteristischen Kurven, werden in [BS98] Methoden aus dem Bereich der Erhaltungsgleichungen zur Diskretisierung von (6.2a) benutzt. Wichtig ist die Berücksichtigung des Kausalitätsprinzips und die Aufwind-Approximation des Gradienten. Die Monotoniebedingung wird dagegen dahingehend abgeschwächt, daß bei der Formulierung des Verfahrens als

$$\Phi_j^{(n+1)} = \Phi_j^{(n)} - \tau \sum_{k \neq j} \beta_{jk}^{(n)} \left(\Phi_j^{(n)} - \Phi_k^{(n)} \right) \quad (6.6)$$

nur die Positivität der Koeffizienten $\beta_{jk}^{(n)}$ gefordert wird. Es gibt dann zwar keinen strikten Konvergenzbeweis für das Verfahren, aber es ist zumindest noch ein globales diskretes Maximumprinzip und ein lokales Maximumprinzip sichergestellt. Es werden speziell Hamilton-Funktionen betrachtet, die bezüglich $\nabla\Phi$ homogen von der Ordnung p sind, d.h. für die

$$H(\lambda \nabla\Phi) = \lambda^p H(\nabla\Phi)$$

gilt. Aus dem Eulerschen Satz über homogene Funktionen folgt dann $pH(\nabla\Phi) = \langle \nabla H, \nabla\Phi \rangle$. Mit dem stetigen, stückweise linearen P1-Ansatz für Φ ist auf jedem Element T der Gradient $\nabla\Phi_T$ konstant, und es gilt⁵

$$\int_T H(\nabla\Phi_T) dx = \frac{\text{Vol}_d(T)}{p} \langle \nabla H, \nabla\Phi \rangle =: \mathcal{H}_T.$$

Bei Einschränkung auf *simpliciale* Zerlegungen, also ausschließlich aus Dreiecken bzw. Tetraedern, gibt es für den Gradienten $\nabla\Phi_T$ die spezielle Darstellung

$$\nabla\Phi_T = \frac{1}{d \text{Vol}_d(T)} \sum_{i=0}^d n_i \Phi_i,$$

wobei die n_i die mit dem $(d-1)$ -dimensionalen Volumen der Seite gewichteten Normalen der dem Knoten i gegenüberliegenden Elementseiten sind. Es folgt

$$\mathcal{H}_T = \sum_{i=0}^d \frac{\langle \nabla H, n_i \rangle}{d p} \Phi_i =: \sum_{i=0}^d K_i \Phi_i,$$

5. Die oberen Indizes können im weiteren weggelassen werden, da stets alle Größen auf denselben Zeitpunkt bezogen sind.

mit $\sum_{i=0}^d K_i = 0$. Aus dieser *kanonischen Form* mit den K_i erhalten wir durch aus der Literatur über Erhaltungsgleichungen bekannte Umformungen, bei denen die positiven K_i als K_i^+ von den negativen K_k^- getrennt werden,

$$\mathcal{H}_T = \sum_{i=0}^d K_i^+ \left(\sum_{k=0}^d K_k^+ \right)^{-1} \sum_{k=0}^d K_k^- (\Phi_k - \Phi_i) =: \sum_{i=0}^d \delta_{Ti}.$$

Daraus lassen sich die Koeffizienten β_{jk} in (6.6) bestimmen, deren Positivität für spitzwinklige Zerlegungen sichergestellt ist. Im folgenden sind lokale und globale Indizierung der auftretenden Größen zu unterscheiden. Die Ecken i jedes Elements T sind bei Bedarf mit einer Funktion $j = N_T(i)$ auf einen globalen Knotenindex j abzubilden. Die Koeffizienten in (6.4) werden entsprechend als

$$\alpha_{N_T(i)T} = \frac{\delta_{Ti}}{\int_T H(\nabla\Phi_T) dx} \quad (6.7)$$

gewählt. Für allgemeinere simpliziale Zerlegungen ohne Winkelbedingung ist eine Modifikation der Koeffizienten nötig

$$\tilde{\alpha}_{jT} = \frac{\max(0, \alpha_{jT})}{\sum_{k=0}^d \max(0, \alpha_{kT})}.$$

Die in der Level-Set-Gleichung (4.1) auftretende Hamilton-Funktion ist⁶ $H(t, x, \nabla\Phi) = -V(t, x) \|\nabla\Phi\|$ und damit bei festgehaltenen anderen Variablen bezüglich $\nabla\Phi$ homogen von Ordnung $p = 1$. Daher ist das Diskretisierungsverfahren auf eine Hamilton-Jacobi-Gleichung

$$\Phi_t + H(\nabla\Phi, t, x) = q(t, x) \quad \text{in } [0, t^*] \times \Omega,$$

mit Quelltem q und möglicherweise orts- und zeitabhängiger Hamilton-Funktion H , zu übertragen. Die Ortsabhängigkeit wird in [BS98] durch Mittelung auf den Elementen berücksichtigt. Aus (6.4) wird dadurch

$$\mathcal{H}_j(\nabla\Phi_1, \dots, \nabla\Phi_{|T|}) = \frac{\sum_{T \in \mathcal{T}} \tilde{\alpha}_{jT} \int_T (H(\nabla\Phi_T) - q) dx}{\sum_{T \in \mathcal{T}} \tilde{\alpha}_{jT} \text{Vol}_d(T)}. \quad (6.8)$$

Der konkrete Algorithmus für diesen Fall ist in Anhang A.7 angegeben.

6. Es ist wieder zu beachten, daß das Vorzeichen der Geschwindigkeit V gegenüber dem in der Literatur üblichen und insbesondere gegenüber dem in [BS98] umgekehrt ist.

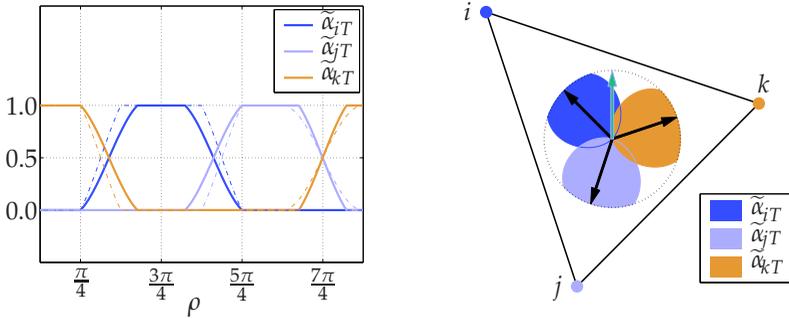


Abbildung 6.7: Verhalten der Koeffizienten α_{jT} in Abhängigkeit von der Richtung der Normalen. Links zeigen die gestrichelten Linien die Veränderung im Fall eines rechten Winkels im Knoten i .

Numerische Tests

Die Diskretisierung wird für den Fall der Grenzflächenbewegung mit konstanter Geschwindigkeit $V = 1$ getestet. Der Aufwind-Charakter dieses Verfahrens wird dabei aus Abbildung 6.7 deutlich, wo der Verlauf der Koeffizienten $\tilde{\alpha}_{jT}$ in Abhängigkeit von der Richtung des negativen Gradienten $-\nabla\Phi$ aufgetragen ist. Im rechten Teil der Abbildung ist diese Richtung einmal grün für den Winkel $\rho = \pi/2$ dargestellt. Die Koeffizienten K_i berechnen sich jeweils aus dem Skalarprodukt des negativen Gradienten mit der gewichteten, nach innen gerichteten Seiten-Normalen. Auch deren Richtungen sind im rechten Teil von Abb. 6.7 angegeben. Nur wenn diese Skalarprodukte positiv sind, gibt es aus diesem Element einen Beitrag zur numerischen Hamilton-Funktion an dem entsprechenden Knoten.

Für die Testrechnungen wurde das Anfangswertproblem

$$\Phi_t - \|\nabla\Phi\| = 0 \quad \text{in } [0, t^*] \times \Omega, t^* > 0, \tag{6.9a}$$

$$\Phi(0, x) = \Phi_0(x) \quad \text{in } \Omega \subseteq \mathbb{R}^2 \tag{6.9b}$$

auf einem quadratischen Gebiet mit einem unstrukturierten Gitter numerisch gelöst. Einige Aspekte der Implementierung im Rahmen des Software-Pakets `ug` sind in Abschnitt 6.4 angegeben. Die Anfangswerte wurden zunächst durch eine Initialisierung des Level-Sets mit der Abstandsfunktion $\Phi_0 := d_{\Gamma(0)}$ zur Ausgangsfläche $\Gamma(0)$ bestimmt.

Es sind drei typische Situationen zu untersuchen, die in Abbildung 6.8 dargestellt sind: eine glatte konvexe Ausgangsfläche führt zu einem stets glatten Verlauf der Fläche. Dagegen entstehen bei einer glatten nichtkonvexen Aus-

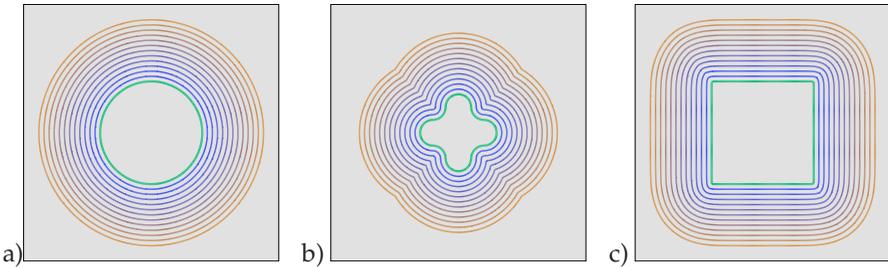


Abbildung 6.8: Numerische Lösung des Anfangswertproblems (6.9): Es sind die grün markierten Ausgangskurven und deren zeitliche Entwicklung dargestellt.

gangskurve nach endlicher Zeit Ecken. Die anfänglichen Ecken im dritten Fall, in Abb. 6.8 c), werden sofort geglättet.

Zur quantitativen Analyse des Verfahrens muß an jedem Punkt auf der berechneten Fläche $\Gamma_h(t)$ der Abstand zu der bewegten Fläche $\Gamma(t)$ gemessen werden, wogegen z.B. ein L^2 -Fehler der berechneten Level-Set-Funktion $\Phi_h(t)$ abseits der Fläche nicht von Bedeutung ist. Als Fehler \mathcal{E} wird deshalb definiert⁷

$$\mathcal{E}(t) := \left(\int_{(x,y) \in \Gamma_h(t)} \left(d_{\Gamma(t)}(x,y) \right)^2 dS(x,y) \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Im Fall a) der über alle Zeiten glatten Lösung läßt sich ein mit der Gitterweite h quadratisch abnehmender Fehler beobachten, hingegen hat das Verfahren für den Fall c) mit den vorstehenden Ecken der Ausgangskurve nur eine Fehlerordnung von $1/2$. Dies entspricht der erreichbaren Ordnung von $1/2$ im allgemeinen Konvergenzbeweis für konsistente monotone Verfahren in [CL84]. Das qualitative Verhalten des Fehlers $\mathcal{E}(t)$ über die Zeit t ist in diesen beiden Fällen nicht von der Gitterweite abhängig. Anders ist es im Fall b). So ist rechts in Abbildung 6.9 zum Zeitpunkt $t = 0,5$, in dem die Lösung Ecken ausbildet, zunächst ein mit feinerer Gitterweite deutlicher werdender Anstieg des Fehlers zu beobachten. Danach verschwinden aber Teile der Grenzfläche und damit verbundene Fehler der numerischen Lösung in diesen Ecken, und es folgt eine mit der Anzahl der Gitter länger werdende Zeitspanne, in der der Fehler insgesamt kaum noch zunimmt. Dies führt zu einer besser als quadratischen Fehlerordnung.

7. Wegen der konstanten Bewegung der Grenzfläche entspricht die Integration dieses Fehlers $\mathcal{E}(t)$ über die Zeit t dem L^2 -Fehler bezüglich der berechneten Zeit des ersten Erreichens jedes Punktes durch die Fläche.

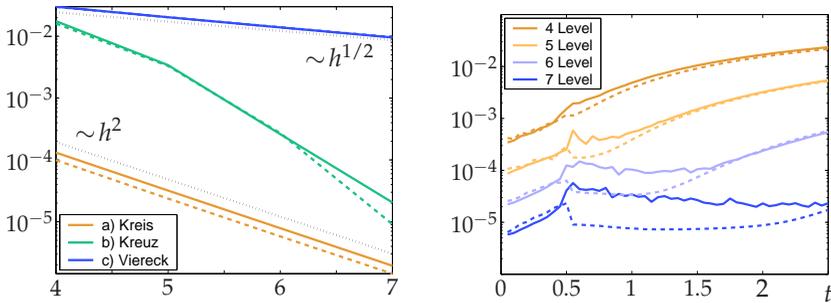


Abbildung 6.9: Links: Asymptotik des Fehlers $\mathcal{E}(t^*)$ bei Gitterverfeinerung. Rechts: Zeitlicher Verlauf des Fehlers $\mathcal{E}(t)$ im Fall b). Die gestrichelten Linien beziehen sich auf die unten geschilderte Nutzung der Symmetriebedingung.

Bei der Initialisierung $\Phi_0 = d_{\Gamma(0)}$ mit der Abstandsfunktion und Bewegung der Grenzfläche mit konstanter Geschwindigkeit ist die Grenzflächenposition für alle Zeiten $t > 0$ schon in den Anfangswerten enthalten, was natürlich durch die Diskretisierung erhalten bleiben sollte. Die Viskositätslösung von (6.9) ist aber im inneren Gebiet Ω^+ nicht überall gleich der Abstandsfunktion zu $\Gamma(t)$, auch wenn dies in Anwendungen wünschenswert wäre. Die Aufwind-Eigenschaft des Verfahrens sichert hier eine Konvergenz der numerischen Lösungen gegen die Viskositätslösung, und so bildet sich in der Mitte jeweils ein Level-Set mit positivem Volumen und darauf verschwindendem Gradienten aus, siehe auch Anhang A.7. Neben der Initialisierung mit der Abstandsfunktion wurde für die Fälle a) und c) aus Abbildung 6.8 die Auswirkung einer alternativen Initialisierung getestet, siehe Abbildung 6.10. Im Fall der glatten Kurve verringert sich die Ordnung von 2 auf 1, wogegen es im Fall der vorstehenden Ecke zu einer Verbesserung von 1/2 auf 3/4 kommt. Das hier beobachtete Fehlerverhalten ist insgesamt mit [BS98] verträglich, wo für glatte Ausgangskurven die Fehlerordnung mit „etwas schlechter als 1“ angegeben ist.

Symmetrische Randbedingungen

Alle in Abbildung 6.8 dargestellten bewegten Kurven erfüllen über den gesamten Zeitabschnitt räumlich die vierfache Symmetrie, die auch beim dendritischen Kristallwachstum vorhanden ist. Die Koordinatenachsen und die Hauptdiagonalen als Symmetrieachsen können als künstliche Ränder eines reduzierten Rechengebietes dienen. Wir benötigen damit hier nur ein dreieckiges Gebiet mit einem Achtel der Fläche des ursprünglichen Gebietes. Wie aus dem Fall b) in Abb. 6.8 zu sehen ist, braucht die Lösung bei Übergang über die Symmetrie-

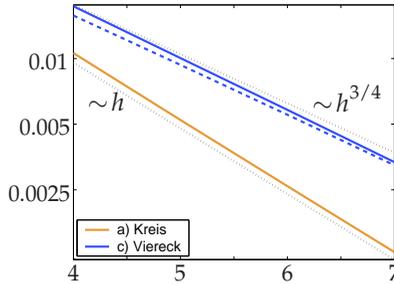


Abbildung 6.10: Fehlerasymptotik bei Gitterverfeinerung. Die gestrichelte Linie bezieht sich auf die Nutzung der Symmetriebedingung.

achsen nicht glatt zu sein. Die Symmetriebedingung lässt sich daher nicht wie bei vielen anderen Problemstellungen durch die Forderung $\partial_n \Phi = 0$ auf den Rändern sicherstellen.

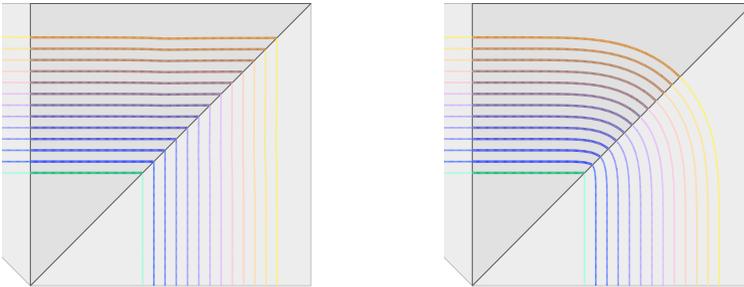


Abbildung 6.11: Einschränkung des Rechengebiets entlang der Symmetrieachsen und angedeutete symmetrische Fortsetzung der Lösung. Links: Der unveränderte Algorithmus führt zu falschen Ergebnissen, vergleiche Abb. 6.8 c). Rechts: Richtige Lösung durch Einbeziehung der Symmetriebedingung.

Wir betrachten den Verfahrens-Algorithmus in Anhang A.7. Die elementweisen Beiträge zur numerischen Hamilton-Funktion werden durch die $K_i := -\frac{\text{Vol}_d(T)V_T}{\|\nabla\Phi_T\|} \langle \nabla\Phi_T, \nabla\varphi_i \rangle$ bestimmt. Wird ein Randelement gespiegelt, so müssen auch die Ansatzfunktionen φ_i und der Gradient $\nabla\Phi_T$ entsprechend gespiegelt werden, womit die Skalarprodukte und damit die K_i und die $\tilde{\alpha}_{jT}$ in den beiden gespiegelten Elementen gleich sind, siehe Abbildung 6.12. Damit wären in (6.4) *alle* Beiträge zur numerischen Hamilton-Funktion in den Randpunkten doppelt

zu berücksichtigen, was diese aber nicht ändert, da sich die doppelte Berücksichtigung in Nenner und Zähler wieder herauskürzen läßt.

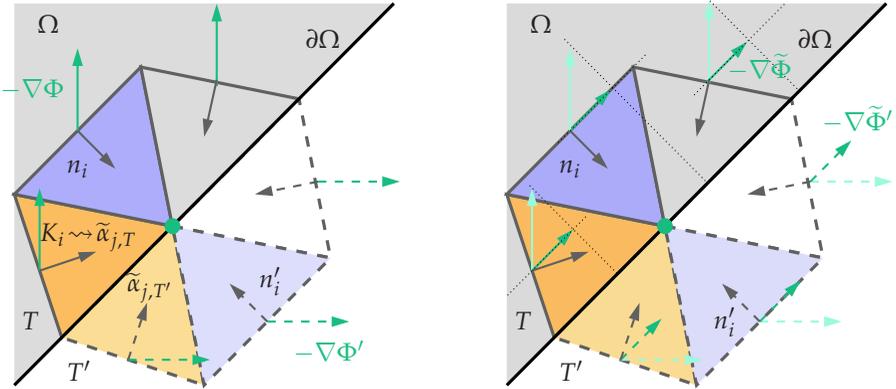


Abbildung 6.12: Links: Spiegelung am Gebietsrand als Symmetrieachse führt auf paarweise gleiche Koeffizienten K_i und $\tilde{\alpha}_{j,T}$. Rechts: Bei nach innen weisender Normale $-\nabla\Phi$ ist diese für symmetrische Randbedingungen auf die Randtangente zu projizieren.

Das Verfahren schränkt durch die Aufwind-Approximation den Einflußbereich jedes Gitterpunktes in Richtung fallender Lösungswerte ein. Das sorgt dafür, daß ein Ausfluß-Verhalten der Lösung, d.h. ein durch den Rand nicht gestörtes weiteres Ausdehnen der Grenzfläche, korrekt wiedergegeben wird. Je nach Verlauf der Lösung kann eine symmetrische Randbedingung einer solchen Ausflußbedingung entsprechen, nämlich falls die Grenzflächen-Normale bzw. der negative Gradient $-\nabla\Phi$ aus dem Gebiet nach außen weist. Das ist aber entlang der kritischen diagonalen Randseite in Abbildung 6.11 nicht der Fall, weshalb das Randverhalten dort undefiniert ist.

Um für einen Gitterpunkt auf einem Rand mit Symmetriebedingung die elementweisen Beiträge zur numerischen Hamilton-Funktion zu bestimmen, wird eine mit der Symmetriebedingung verträgliche Rekonstruktion des Gradienten benötigt. Dazu ist der auf diesem Element konstant angenommene Gradient $\nabla\Phi_T$ mit dem Gradienten auf dem an der Randseite gespiegelten Element zu mitteln, was einer Projektion des Gradienten auf die Randseite entspricht.

Mit dieser Modifikation erhalten wir für die Lösungen auf dem eingeschränkten Gebiet das gleiche Fehlerverhalten wie bei der Rechnung auf dem gesamten Gebiet ohne Nutzung der Symmetrie, siehe Abbildungen 6.9 und 6.10.

6.3.2 Fast-Marching Level-Sets

Eine Diskretisierung der Eikonalgleichung und Lösung des stationären Grenzflächenproblems (4.7) mit der Fast-Marching-Methode ist für unstrukturierte Gitter mit einer simplizialen Zerlegung in [KS98] angegeben.

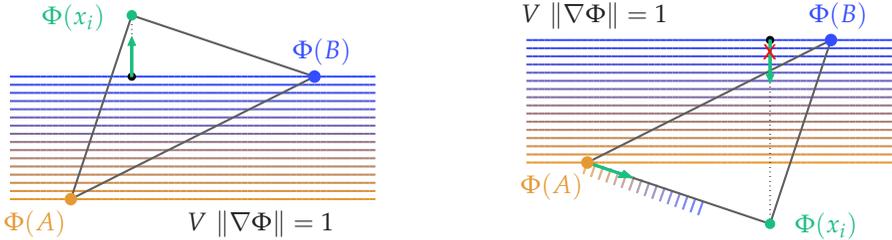


Abbildung 6.13: Bei der Diskretisierung muß die Level-Set-Normale $-\nabla\Phi$ stets von einem Punkt *innerhalb* des Elements auf den zu aktualisierenden Punkt weisen.

An den Gitterknoten x_i ist dabei jeweils zu prüfen, ob sich aus den umliegenden Elementen ein größerer Wert der Level-Set-Funktion $\Phi(x_i)$ berechnen läßt, der für eine geringere Entfernung zur Ausgangsfläche $\Gamma(0)$ steht, und dieser größere Wert ist dann gegebenenfalls weiterzuverwenden. Dazu wird elementweise versucht, eine mit der Eikonalgleichung konsistente lineare Rekonstruktion des Level-Sets aus den übrigen Knotenwerten des Elements zu bilden. Ist dies nicht möglich oder würde der so erhaltene Wert für $\Phi(x_i)$ nicht kleiner sein als das Minimum der übrigen Knotenwerte, so wird versucht, die Bedingung an den Gradienten entlang der Elementkanten zu erfüllen. Dann wird das Maximum aus den so bestimmten Werten von $\Phi(x_i)$ ausgewählt, siehe Abbildung 6.13. Dieses Vorgehen sichert die Aufwind-Approximation des Gradienten. Bei stumpfwinkligen Elementen kann es nötig sein, Nachbarelemente in die Berechnungen einzubeziehen.

Numerische Tests

Die Fast-Marching-Methode wurde anhand von Testbeispielen geprüft, die denen in Abschnitt 6.3.1 entsprechen. Bei überall konstanter Geschwindigkeit $V = 1$ lassen sich im Außenraum die Flächen mit gleichem Abstand zu einer Ausgangskurve $\Gamma(0)$ aus den Lösungen des instationären Problems 6.9 zu festen Zeitpunkten bestimmen. Im inneren Teilgebiet müßte entsprechend bezüglich der Zeit rückwärts gelöst werden. Das hier zu lösende stationäre Randwertproblem zur Berechnung der vorzeichenbehafteten Abstandsfunktion bezüglich ei-

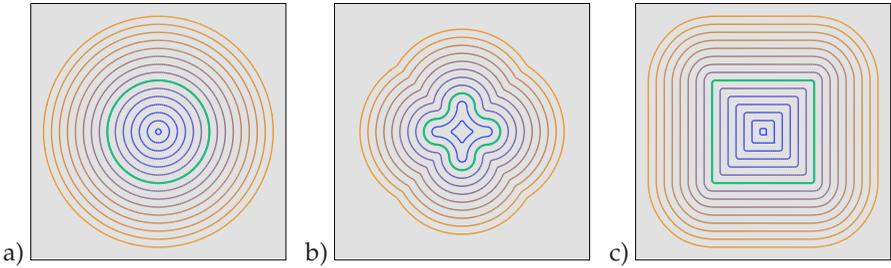


Abbildung 6.14: Höhenlinien der berechneten Abstandsfunktionen zu den grünen Ausgangskurven, vergleiche mit Abb. 6.8.

ner gegebenen Ausgangskurve ist

$$\|\nabla\Phi\| = 1 \quad \text{in } \Omega, \tag{6.10a}$$

$$\Phi(x) = 0 \quad \text{auf } \Gamma(0). \tag{6.10b}$$

Die berechneten Lösungen sind in Abbildung 6.14 dargestellt. Auch im Fall b) der glatten nichtkonvexen Ausgangskurve kommt es jetzt zum Entstehen von Ecken im inneren Teilgebiet. In den numerischen Rechnungen wird stets ein asymptotisch mit der Gitterweite h linear fallender L^2 -Fehler beobachtet, siehe Abbildung 6.15. Der wichtige Unterschied gegenüber Abschnitt 6.3.1 ist, daß für die Fast-Marching-Methode keine CFL-Bedingung zu erfüllen ist.

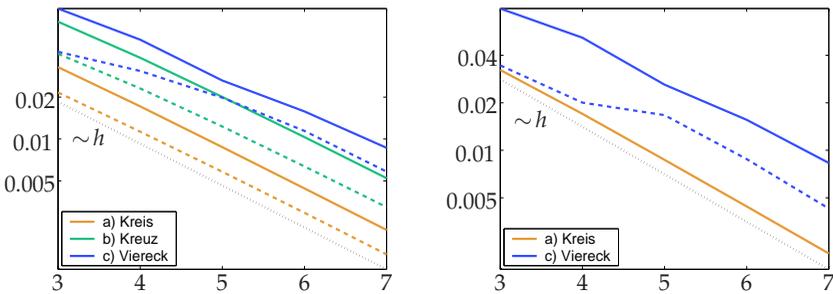


Abbildung 6.15: L^2 -Fehlerasymptotik bei Gitterverfeinerung. Im rechten Bild wurde die Grenzkurve $\Gamma(0)$ nicht durch eine Abstandsfunktion beschrieben. Die gestrichelten Linien beziehen sich auf die Nutzung der Symmetriebedingung.

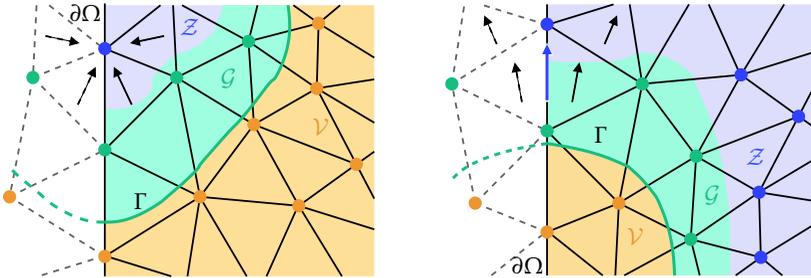


Abbildung 6.16: Darstellung der Lösungsabhängigkeiten bei symmetrischer Randbedingung im konkaven und konvexen Fall.

Symmetrische Randbedingungen

Das in [KS98] angegebene Verfahren gewährleistet die Verträglichkeit mit symmetrischen Randbedingungen. Im Fall von am Gebietsrand $\partial\Omega$ lokal konkaven Grenzflächen oder Höhenmengen wäre bei Spiegelung der umliegenden Elemente zur Berechnung der Lösung in einem Randknoten das Maximum über jeweils paarweise gleiche, elementweise bestimmte Lösungswerte zu bilden. Dagegen wird im lokal konvexen Fall durch die Aufwind-Approximation des Gradienten kein Element ausgewählt, aus dem die Lösung des jeweiligen Randknotens bestimmt wird. Stattdessen muß die Lösung entlang der Randkante aus der Differentialgleichung (6.10a) bestimmt werden, siehe Abbildung 6.16.

Fortsetzung von Oberflächengrößen ins Volumen

Der Bedarf, auf Flächen definite Größen in das Volumen fortzusetzen, ist durch das in Abschnitt 4.4 angegebene Verfahren begründet, mit dem im instationären Fall ein Entarten des Level-Sets verhindert werden soll. Dazu wird in jedem Zeitschritt simultan mit der Berechnung einer temporären Abstandsfunktion Φ^* die Grenzflächengeschwindigkeit gemäß der Bedingung $\langle \nabla V, \nabla \Phi^* \rangle = 0$ aus (4.11) fortgesetzt. Als Testfall wird hier ein Geschwindigkeitsfeld V untersucht, das einen konvektiven Transport der Grenzfläche Γ in Richtung eines Einheitsvektors $\rho \in \mathbb{R}^2$ bewirkt. Dabei ist nun die Normalgeschwindigkeit V der Level-Sets anders als bisher in diesem Abschnitt und in Abschnitt 6.3.1 nicht örtlich konstant. Stattdessen hat sie die Form

$$V = w_1 \langle n, \rho \rangle,$$

womit sich die Level-Set-Gleichung $\Phi_t - V \|\nabla \Phi\| = 0$ in eine lineare Konvektionsgleichung $\Phi_t + \langle \nabla \Phi, w \rangle = 0$ umformen läßt, bei der dann wiederum das Geschwindigkeitsfeld $w = w_1 \rho$ örtlich konstant ist.

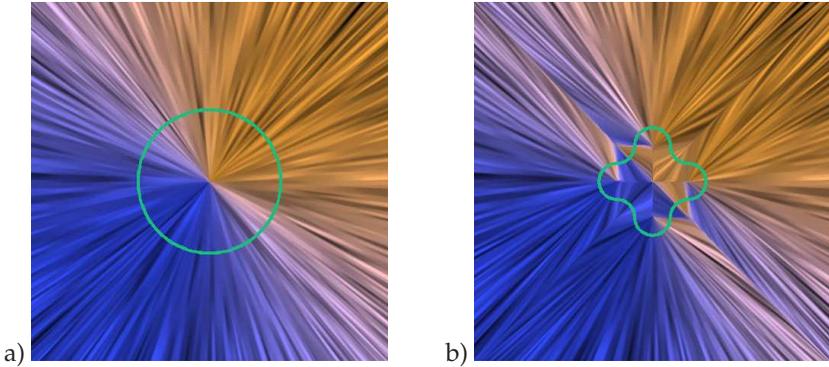


Abbildung 6.17: Farbliche Darstellung des Normalgeschwindigkeitsfeldes V zum Transport der grün angegebenen Kurven Γ in $(1, 1)$ -Richtung und qualitative Darstellung der Normalenrichtungen.

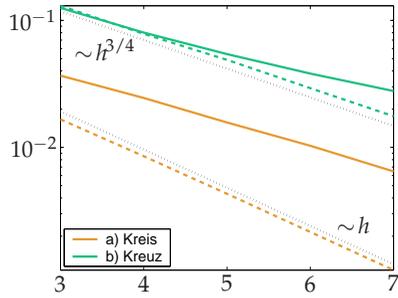


Abbildung 6.18: $L^2(\Omega)$ -Fehler von V über der Anzahl der Gitterverfeinerungen. Die gestrichelten Linien stehen für die Einschränkung auf den Außenraum Ω^- .

Bei den numerischen Tests dieses Abschnitts wurde auch eine entsprechende Fortsetzung mit $\rho = (1, 1)$ durchgeführt, siehe Abbildung 6.18. Der $L^2(\Omega)$ -Fehler der fortgesetzten Geschwindigkeit V nimmt gemäß Abbildung 6.18 bei Verfeinerung des Gitters nur sehr langsam ab. Es ist aber zu beachten, daß dort, wo die Level-Set-Funktion Knicke aufweist, die Normalen aus verschiedenen Richtungen aufeinandertreffen und daher die Fortsetzung nur in einem Abstand der Größenordnung h von diesen Knicken sinnvoll ist. Schränken wir die Fehlerbetrachtung auf das äußere Gebiet Ω^- ein, so verbessert sich die Konvergenzordnung Fall a), in dem die Level-Set-Funktion dann glatt ist, auf 1. Das ent-

spricht der Fehlerordnung, mit der die Abstandsfunktion berechnet wird. Die verbleibenden Knicke der Level-Sets in Ω^- erlauben im Fall b) nur eine Verbesserung der Fehlerordnung auf $3/4$, siehe Abbildung 6.18.

Bei einem Beispiel mit einer vorstehenden Ecke der Grenzfläche, so wie in Abbildung 6.14 c), ist keine Konvergenz von V festzustellen. Diese ist auch nicht zu erwarten, da eine Ecke bei jeder Gitterauflösung h mit einer gleichbleibenden Anzahl von Knoten und Elementen dargestellt wird und die dabei gemachten Fehler auf ein von h unabhängiges Gebiet wirken.

6.3.3 Geometrieberechnung

Aus den Knotenwerten der Level-Set-Funktion läßt sich die Normale n leicht elementweise rekonstruieren, was aber auf den Gitterkanten nicht eindeutig ist und wobei keine höhere Approximationsordnung erreicht wird. Die Krümmung κ läßt sich dagegen auf unstrukturierten simplizialen Gittern nicht in vergleichbar einfacher Weise rekonstruieren.

Um numerisch die geometrischen Größen n und κ in einem beliebigen Punkt $(x^*, y^*) \in \Omega \subseteq \mathbb{R}^2$ zu bestimmen, wird das Level-Set Φ lokal durch

$$\begin{aligned} \Phi(x^* + x, y^* + y) &\approx \Phi^*(x, y) \\ &:= \zeta_0 + \zeta_1 x + \zeta_2 y + \zeta_3 x^2 + \zeta_4 xy + \zeta_5 y^2 (+ \dots) \end{aligned} \quad (6.11)$$

approximiert. Durch diesen verschobenen Ansatz ist $\Phi(x^*, y^*) \approx \Phi^*(0, 0)$. Die Koeffizienten ζ_i werden mit dem Verfahren gewichteter kleinster Fehlerquadrate festgelegt. Dazu benötigen wir eine gewisse Menge von Approximationspunkten $\{(x_n, y_n)\}$ und die zugehörigen Knotenwerte $\{\Phi_n = \Phi(x^* + x_n, y^* + y_n)\}$. Die Minimierungsaufgabe

$$\sum_n w(x_n, y_n) \left(\Phi_n - \Phi^*(x_n, y_n) \right)^2 \rightarrow \min_{\zeta_i}$$

mit geeigneten Gewichten $w(x_n, y_n)$ führt dann auf ein lineares Gleichungssystem $A\zeta = b$ für die Koeffizienten ζ_i mit den Einträgen

$$\begin{aligned} A[i, k] &= \sum_n w(x_n, y_n) \varphi_i(x_n, y_n) \varphi_k(x_n, y_n), \\ b[i] &= \sum_n w(x_n, y_n) \varphi_i(x_n, y_n) \Phi_n, \end{aligned}$$

wobei mit φ_i die entsprechend zum Koeffizienten ζ_i gehörende Ansatzfunktion aus (6.11) gemeint ist. Die Gewichte $w(x_n, y_n)$ sollen den Einfluß weiter entfernter Punkte auf die Rekonstruktion abschwächen. Eine geeignete Wahl für das Gewicht ist

$$w(x_n, y_n) = \frac{1}{1 + \|(x_n, y_n)\|}.$$

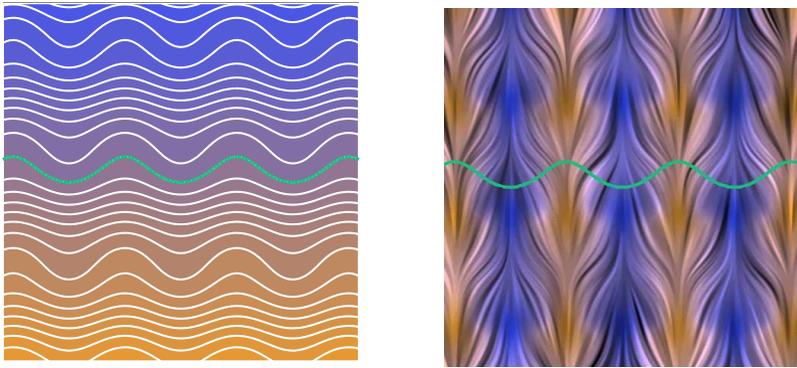


Abbildung 6.19: Links: Glatte Level-Set-Funktion nach (6.12) mit Höhenlinien und Grenzfläche in grün. Rechts: Qualitative Darstellung von Krümmung und Normalenrichtungen.

Für die Normale und die Krümmung im Punkt (x^*, y^*) erhalten wir mit (6.11) aus dem Ansatz (6.11) für Φ^* als Näherung⁸

$$n(x^*, y^*) \approx \frac{(\zeta_1, \zeta_2)}{\sqrt{\zeta_1^2 + \zeta_2^2}}, \quad \kappa(x^*, y^*) \approx 2 \frac{\zeta_3 \zeta_2 \zeta_2 - \zeta_4 \zeta_1 \zeta_2 + \zeta_5 \zeta_1 \zeta_1}{\sqrt{\zeta_1^2 + \zeta_2^2}^3}.$$

Numerische Tests

Die geschilderte Rekonstruktion der geometrischen Größen nimmt keine Rücksicht auf eventuelle Knicke der Level-Set-Funktion. Dort wäre eine spezielle, Oszillationen vermeidende, einseitige Rekonstruktion nötig. Entsprechend sollte auch bei symmetrischen Randbedingungen, bei denen die Level-Set-Funktion nicht glatt über den Rand fortsetzbar sein muß, eine einseitige Rekonstruktion vorgenommen werden, die dann dem normalen Vorgehen im Gebiet entspricht.

In einem ersten Test wird die glatte Level-Set-Funktion

$$\Phi(x, y) := -y - \sin^2(x) - \sin^2(y) \tag{6.12}$$

benutzt, siehe Abbildung 6.19. Die numerische Rechnung zeigt gemäß Abbildung 6.21 eine quadratische Konvergenz für die Normalen und lineare Konvergenz für die Krümmung. Es wurden dabei jeweils bis zu 14 Knotenpunkte aus

8. Da die Normale und Krümmung durch die Ableitungen von Φ^* im Nullpunkt bestimmt werden, ändern weitere polynomiale Anteile im Ansatz (6.11) offensichtlich diese Berechnungsvorschrift nicht. Ein solcher erweiterter Ansatz wird aber im allgemeinen auf andere Koeffizienten ζ_i führen.

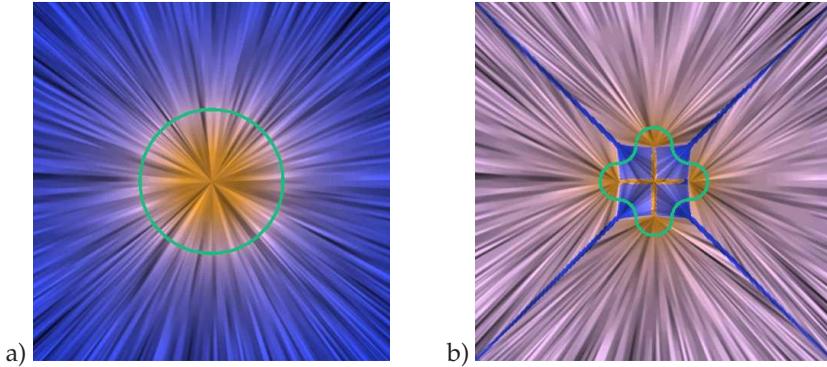


Abbildung 6.20: Qualitative Darstellung von Krümmung und Normalenrichtungen der jeweiligen Abstandsfunktion zur grünen Kurve, vergleiche Abb. 6.14.

einer Umgebung um (x^*, y^*) mit Radius von 4 mal der lokalen Gitterweite h benutzt. Zusätzlich wurden die Abstandsfunktionen der vorherigen Abschnitte 6.3.1 und 6.3.2 für weitere Tests benutzt, siehe Abbildung 6.20. Dabei weist insbesondere die Krümmung an den Knicken der Level-Set-Funktionen so starke Singularitäten auf, daß nur noch eine lokale Untersuchung der L^2 -Fehler sinnvoll ist.

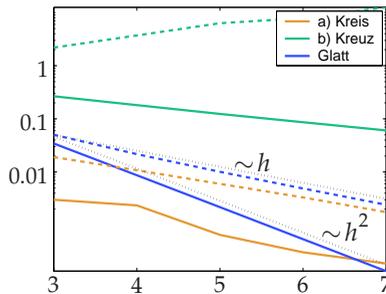


Abbildung 6.21: Fehlerasymptotik bei Gitterverfeinerung: Für die Normalen ist die $L^2(\Omega)$ -Norm des Betrags der Differenz zur exakten Normalen dargestellt, der $L^2(\Omega)$ -Fehler der Krümmung ist mit gestrichelten Linien angegeben.

6.4 Implementierung der Level-Set-Verfahren

Für den Fall der Level-Set-Gleichung ist in Anhang A.7 der konkrete Algorithmus $[\Phi^*, w^*] = \text{LS_Assemble}(\Phi, V, q)$ zur Bestimmung der numerischen Hamilton-Funktion gemäß (6.8) angegeben. Damit wird das zweistufige Verfahren (6.5) formuliert als

$$\begin{aligned}
 [\Phi^*, w^*] &= \text{LS_Assemble} \left(\Phi^{(n)}, V^{(n)}, q^{(n)} \right), \\
 \Psi_j &= \Phi_j^{(n)} - \tau \frac{\Phi_j^*}{w_j^*} && \text{für alle Knoten } j, \\
 [\Phi^*, w^*] &= \text{LS_Assemble} \left(\Psi, V^{(n)}, q^{(n)} \right), \\
 \Phi_j^{(n+1)} &= \frac{1}{2} \left(\Phi_j^{(n)} + \Psi_j \right) - \frac{\tau \Phi_j^*}{2 w_j^*} && \text{für alle Knoten } j.
 \end{aligned}$$

Zur Umsetzung als NumProc-Klasse in ug wird eine Datenstruktur definiert:

```

typedef struct NP_LS {
    NP_BASE          base;          /* inherits base class */
    /* data */
    VECDATA_DESC    *ls;           /* level-set vector */
    VECDATA_DESC    *v;           /* speed */
    VECDATA_DESC    *q;           /* source term */
    VECDATA_DESC    *tmp[3];      /* temporary vectors */
    DOUBLE          timestep;     /* timestep width */
    /* functions */
    INT      (*PreProcess) (<Parameter> ); /* PreProcess */
    INT      (*LS_Assemble) (<Parameter> ); /* Discretization */
    INT      (*Integration) (<Parameter> ); /* Time integration */
    INT      (*PostProcess) (<Parameter> ); /* PostProcess */
};

```

In der PreProcess-Funktion muß die CFL-Bedingung geprüft werden. Die maximale zulässige Zeitschrittweite ist

$$\tau_{\text{CFL}} = \frac{\min_{T \in \mathcal{T}} h_T}{\max_{T \in \mathcal{T}} V_T},$$

wobei h_T die minimale Kantenlänge des Elements T und V_T die auf diesem gemittelte Geschwindigkeit ist.

Adaptivität und Mehrgitterkonsistenz

Abbildung 6.22 zeigt exemplarisch eine adaptive Mehrgitter-Verfeinerung. Dabei wird an einigen Elementen eine reguläre bzw. „rote“ Verfeinerung vorge-

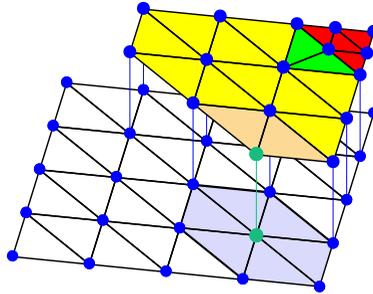


Abbildung 6.22: Einem Knoten auf dem Rand des Gitters auf höherem Level fehlen bei adaptiver Mehrgitter-Verfeinerung angrenzende Elemente oder Nachbarknoten.

nommen, die die minimalen und maximalen Winkel des Gitters unverändert läßt. Um hängende Knoten im Gitter zu verhindern, müssen weitere Elemente *irregulär* bzw. „grün“ verfeinert werden. Ein Streifen von zwei Elementen Breite wird dann noch auf den höheren Gitter-Level kopiert. Dies sind „gelbe“ Elemente. Das *Oberflächengitter* besteht aus allen in einer Draufsicht von oben sichtbaren Elementen und Knoten.

In jedem Gitterknoten muß bei der Diskretisierung des Level-Set-Verfahrens die numerische Hamilton-Funktion aus den Beiträgen aller umliegenden Elemente des Oberflächengitters zusammengesetzt werden. Den Knoten auf dem Rand eines verfeinerten Gitters fehlen allerdings gegebenenfalls einige der umliegenden Elemente des niedrigeren Gitter-Levels, wie in Abbildung 6.22 zu sehen ist. Die *ug*-Datenstruktur `ELEMENT` besitzt zwar eine Kennzeichnung von Randlelementen, mit Verweisen auf die Gebietsbeschreibung, es sind damit aber keine Ränder der Verfeinerung im Inneren des Gebiets gemeint. Um das Level-Set-Verfahren konsistent auf allen Gittern auszuführen, sind jeweils die Liste aller umliegenden Elemente zu prüfen und gegebenenfalls die Beiträge zur numerischen Hamilton-Funktion auf den höheren Level zu kopieren. Da es in *ug* keinen direkten Verweis von Knoten auf umliegende Elemente gibt, siehe Abbildung 6.2, kann, wie in Abschnitt 6.1 erwähnt, die *ug*-Datenstruktur `ELEMENTLIST` benutzt werden. Dann ist bei der *format*-Vereinbarung der benötigte Speicherplatz in den Knoten vorzusehen.

Für die Gitteradaption wurde in den numerischen Tests ein einfaches Verfeinerungskriterium verwendet: Ist der mit der Level-Set-Funktion verbundene Abstand eines Elements zur Grenzfläche kleiner als ein bestimmtes Vielfaches der minimalen Kantenlänge des Elements, so wird dieses verfeinert. Dabei ist zu beachten, daß die Grenzfläche stets auf dem feinsten Gitter-Level liegt und

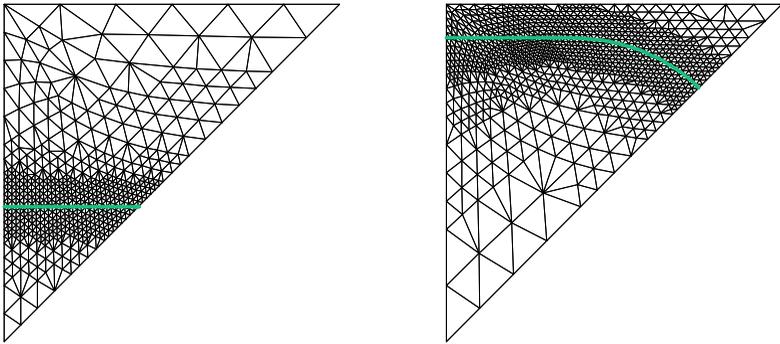


Abbildung 6.23: Gitteradaption und Grenzfläche zum Anfangs- und Endzeitpunkt der Rechnung von Abb. 6.11 bei Verwendung eines unstrukturierten Basisgitters.

die Verfeinerungen und Vergrößerungen nur in einer gewissen Entfernung davon vorgenommen werden. Nach einem Adaptionsschritt ist es zweckmäßig, die Grenzflächeninformation durch eine Reinitialisierung mit der Abstandsfunktion in das Volumen zu transportieren. In Abbildung 6.23 ist die Anpassung des Gitters über den Verlauf einer Rechnung dargestellt.

Fast-Marching-Verfahren

Die Grundlage für das Fast-Marching-Verfahren bilden schnelle Sortierverfahren in einem binären Baum [Knu97]. Bei der Implementation mit `ug` ist dazu eine neue Datenstruktur `BINTREE` einzuführen, für die zwei Funktionen zu realisieren sind: Nach dem Entfernen des Knotens an der Wurzel des binären Baumes muß jeweils von unten der Knoten mit dem geringeren Abstand zur Grenzfläche eine Stufe nachrücken, und nach der Aktualisierung des berechneten Lösungswertes eines Knotens im Baum oder nach Hinzufügen eines neuen Knotens in den Baum muß die Sortierung nach oben hin überprüft und gegebenenfalls durch Vertauschen wiederhergestellt werden.

Zur Aktualisierung des Lösungswertes in einem Knoten muß die Eikonalgleichung in allen umliegenden Elementen gelöst werden. Dazu ist es zweckmäßig, die `ug`-Datenstruktur `ELEMENTLIST` zu benutzen, die von `ug` an den `data`-Zeiger der `MODE`-Datenstruktur angebunden wird. Nach der Aktualisierung des Lösungswertes wird dann ein Verweis von dem Knoten auf das zugehörige Objekt im binären Baum benötigt. Daneben ist auch bei der Fast-Marching-Methode auf adaptiven Mehrgittern die Konsistenz über alle Gitter sicherzustellen. Dafür

ist es nützlich, für jeden Knoten N eine Liste anzulegen mit allen Knoten auf diesem oder größeren Gitterleveln, die den Knoten N oder seinen Sohn-Knoten als Nachbarn haben. Analog zu der ug-Datenstruktur ELEMENTLIST wird dazu die neue Datenstruktur NBLIST definiert. Mit der weiteren neuen Datenstruktur LSDATA werden alle Verweise von den Knoten zusammengefaßt. Dabei wird ELEMENTLIST so erweitert, daß eine Nutzung in den Level-Set-Verfahren möglich ist.

```

struct nblast{
    NODE          *nb;
    struct nblast *next;
};
typedef struct nblast NBLIST;

```

<pre> struct nblast{ NODE *nb; struct nblast *next; }; typedef struct nblast NBLIST; </pre>	<pre> typedef struct LSDATA{ ELEMENTLIST list; NBLIST *nbl; BINTREE *bt; }; </pre>
--	--

Der wesentliche Anwendungszweck des Fast-Marching-Verfahrens in dieser Arbeit besteht in der Berechnung temporärer Abstandsfunktionen und der Fortsetzung der Grenzflächen-Geschwindigkeit. Daher wird bei der Definition der Datenstruktur einer neuen NumProc-Klasse NP_FM für das Fast-Marching-Verfahren davon ausgegangen, daß die Grenzfläche durch Knotenwerte einer Level-Set-Funktion beschrieben wird. Alternativ könnte eine Parametrisierung der Grenzfläche den Koeffizientenfunktionen des Randwertproblems zugeordnet und das Startband mit einer für diesen Zweck angepaßten InitBand-Funktion erzeugt werden.

```

typedef struct NP_FM {
    NP_BASE          base;          /* inherits base class */
    /* data */
    VECDATA_DESC    *x;            /* solution vector */
    VECDATA_DESC    *ls;          /* level-set vector */
    VECDATA_DESC    *v;            /* extension vector (speed) */
    BINTREE          *bintree;     /* binary tree */
    INT              sign;         /* inner/outer domain (1/-1) */
    /* functions */
    INT              (*PreProcess) (<Parameter> ); /*pre processing */
    INT              (*InitBand) (<Parameter> ); /* initialises Band */
    INT              (*Extension) (<Parameter> ); /*from interf to volume*/
    INT              (*PostProcess) (<Parameter> ); /*post processing */
};

```

Geometrieberechnung

Im Rahmen der Bestimmung der Normalenrichtung und der Krümmung sind für die lokale Rekonstruktion des Level-Sets Gitterknoten des Oberflächengitters als Approximationspunkte aus einer Umgebung um den jeweiligen Aus-

wertungspunkt zu suchen. Auf einem unstrukturierten Gitter ist das gleichbedeutend damit, lokal Abstandsfunktionen zu einem solchen Auswertungspunkt der Rekonstruktion zu berechnen. Der NumProc NP_FM für das Fast-Marching-Verfahren kann zu diesem Zweck angepaßt werden. Es wird in diesem Zusammenhang prinzipiell nur in einem Außenbereich gerechnet, und der Abstand läßt sich in jedem Knoten explizit und endgültig bestimmen. Bei Erreichen einer gewissen Anzahl von Knotenpunkten oder eines gewissen Abstandes vom Auswertungspunkt kann die Berechnung abgebrochen werden. Für die wiederholte Anwendung in verschiedenen Punkten wird aus diesen Gründen ein separater Schritt zur Initialisierung aller Knoten mit dem Wert $-\infty$ vorgesehen und werden die während der Berechnung nur in wenigen Knoten in der Nähe des Auswertungspunktes vorgenommenen Änderungen jeweils im nachhinein wieder zurückgenommen.

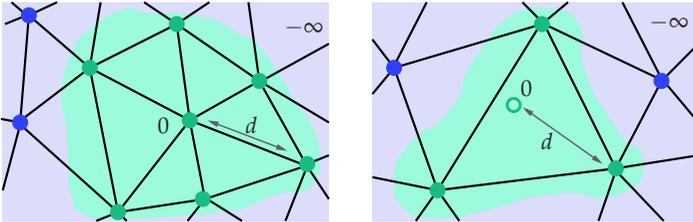


Abbildung 6.24: Besetzung des Startbandes mit dem jeweiligen Abstand d zum Auswertungspunkt bei der Geometrieberechnung.

Kapitel 7

Instationäre Simulation dendritischen Wachstums

Ziel dieser Arbeit ist, bei der Simulation des dendritischen Kristallwachstums die Phasengrenze als scharfe Grenzfläche beizubehalten, weshalb keine Approximation des mathematischen Modells im Sinne einer Phasenfeld-Methode vorgenommen wird und somit die Grenzflächengeschwindigkeit V explizit im mathematischen Modell auftaucht. Da ein rein diffusionsbegrenztes Wachstum angenommen wird, d.h. der kinetische Koeffizient ist $\beta = 0$, kann die Grenzflächenbewegung nicht wie z.B. in [Sch93] oder [Fri04] in Form eines Krümmungsflusses durch die Gibbs-Thomson-Beziehung (2.37) beschrieben werden, und die Geschwindigkeit V läßt sich nicht aus dem numerischen Algorithmus eliminieren, sondern muß explizit aus dem Sprung der einseitigen Temperaturgradienten an der Phasengrenze gemäß der Stefan-Bedingung (2.39b) bestimmt werden.

Gegen die Verwendung von Front-Tracking- und Segment-Projektions-Verfahren spricht der Wunsch, die Methoden einfach auf den dreidimensionalen Fall übertragen zu können. Als Konsequenz dieser Rahmenbedingungen ist das mathematische Modell (2.39) mit einer Level-Set-Formulierung der Grenzflächenbewegung zu konkretisieren und zu ergänzen. Das Level-Set muß dabei

$$\Phi_t = V \|\nabla\Phi\| \quad \text{in } [0, t^*] \times \Omega, \quad (7.1a)$$

$$0 = \langle \nabla V, \nabla\Phi \rangle \quad \text{in } \Omega, \text{ für jedes } t \in [0, t^*] \quad (7.1b)$$

mit geeigneten Anfangsbedingungen erfüllen. Die Festlegung (7.1b) dient dazu, eine Unbestimmtheit der Geschwindigkeit V im Volumen zu beseitigen.

Die Temperatur ϑ kann allerdings nicht in gleicher Weise in dem festen, zeitlich unveränderlichen Gebiet Ω berechnet werden. Die Stefan-Bedingung kann zwar zu einem solchen Zweck stets wie in (2.34) durch einen singulären Quellterm in der Differentialgleichung berücksichtigt werden, bei verschwindendem kinetischen Koeffizienten gibt es aber keine Möglichkeit, zusätzlich die Gibbs-Thomson-Beziehung einzubeziehen. Von daher wird die Grenzfläche $\Gamma(t)$ nicht

aus dem Modell eliminiert, ist aber nur noch eine aus der Lösungskomponente Φ abgeleitete Größe. Es wird insgesamt ein Lösungspaar (ϑ, Φ) von (7.1) und

$$\vartheta_t = D\Delta\vartheta \quad \text{in } \Omega \setminus \Gamma(t), \quad t \in [0, t^*] \quad (7.2a)$$

$$\vartheta|_{\Gamma} = \mathcal{U} - d_\varepsilon \kappa \quad \text{auf } \Gamma(t) = \{x \in \Omega \mid \Phi(t, x) = 0\}, \quad t \in [0, t^*], \quad (7.2b)$$

$$V|_{\Gamma} = D[\partial_n \vartheta]_{\Gamma} \quad \text{auf } \Gamma(t) = \{x \in \Omega \mid \Phi(t, x) = 0\}, \quad t \in [0, t^*], \quad (7.2c)$$

mit geeigneten Anfangsbedingungen und Vorgaben für das Verhalten von ϑ im Fernfeld des Kristalls gesucht.

Bei der örtlichen Diskretisierung des Systems (7.1) und (7.2) werden Finite Elemente auf einem gegebenenfalls unstrukturierten Gitter eingesetzt. Im Hinblick auf eine effiziente Berechnung wird eine adaptive Mehrgitterhierarchie benutzt, wodurch wiederum nahegelegt wird, für das Temperaturfeld das in Kapitel 5 vorgestellte Verfahren zur Diskretisierung von (7.2a) zusammen mit (7.2b) einzusetzen. Nach einer Diskretisierung bezüglich der Zeit erhalten wir als Algorithmus für einen Zeitschritt:

Gegeben seien zum Zeitpunkt t_n : $\Phi^{(n)}$, $\vartheta^{(n)}$ und $V^{(n)}$

- **Zeitschritt $\Phi^{(n)} \rightarrow \Phi^{(n+1)}$:** Level-Set-Gleichung mit $V^{(n)}$. Liefert neue Phasengrenze $\Gamma(t_{n+1})$, siehe Abschnitt 6.3.1.
- **Dirichlet-Randwerte $\vartheta|_{\Gamma(t_{n+1})}$:** Aus $\Phi^{(n+1)}$ Normale und Krümmung berechnen, siehe Abschnitt 6.3.3.
- **Zeitschritt $\vartheta^{(n)} \rightarrow \vartheta^{(n+1)}$:** FEM-Diskretisierung der Wärmeleitung mit Dirichlet-Bedingung im Elementinneren, siehe Abschnitt 5.3.
- **Bestimmen von $V|_{\Gamma(t_{n+1})}$:** Rekonstruktion des Sprungs in der Normalableitung von $\vartheta^{(n+1)}$, siehe Abschnitt 7.1.
- **Fortsetzen zu $V^{(n+1)}$ auf Ω :** siehe Abschnitt 6.3.2.

7.1 Bestimmung und Fortsetzung der Geschwindigkeit

Das in Abschnitt 6.3.2 dargestellte Verfahren zur Fortsetzung von Oberflächengrößen in das Volumen arbeitet ausschließlich auf Gitterknoten. Da mit dem eingesetzten Verfahren für die Diskretisierung der Wärmeleitung die Grenzfläche nicht entlang der Gitterkanten verläuft, ist hier ein dreistufiges Vorgehen nötig: Zuerst wird die Differenz der einseitigen Normalableitungen des Temperaturfeldes in Schnittpunkten von Gitter und Grenzfläche bestimmt, dann erfolgt eine

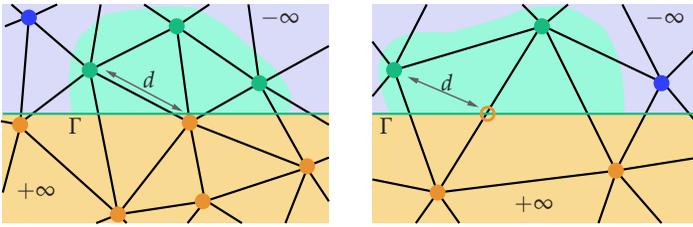


Abbildung 7.1: Einseitiges Startband zur Bestimmung der einseitigen Temperaturgradienten, vergleiche dagegen Abb. 6.24. Links: Startband für einen Gitterknoten, der als auf der Grenzfläche liegend angenommen wird. Rechts: Startband um markierten Schnittpunkt von Gitter und Grenzfläche.

Interpolation auf die Gitterknoten in einem engen Band um die Grenzfläche und zuletzt die Fortsetzung auf alle Gitterknoten im Volumen.

Bei der Rekonstruktion der Temperaturgradienten in Schnittpunkten von Gitter und Grenzfläche sollen neben den Knotenwerten aus der jeweiligen Umgebung die vorgegebenen Randwerte aus der Gibbs-Thomson-Beziehung einfließen. Dabei ist zu beachten, daß die stärksten Änderungen des Temperaturfeldes unmittelbar an der Grenzfläche auftreten. Aus diesem Grund ließe sich der Gradient ausschließlich aus dem jeweils geschnittenen Element berechnen. Dies wäre aber nur von geringer Fehlerordnung und würde numerisch instabil, wenn Teilelemente sehr klein sind. Stattdessen wird hier eine Approximation der Temperatur mit Hilfe gewichteter kleinster Fehlerquadrate vorgenommen. Zuerst wird die Normalenrichtung n wie in Abschnitt 6.3.3 aus beiden Teilgebieten rekonstruiert. Dann sind für die Rekonstruktion der Temperatur einseitig

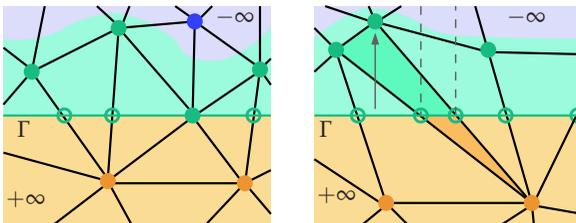


Abbildung 7.2: Links: Ausschnitt eines Startbandes zur Fortsetzung der Geschwindigkeit V . Rechts: Sonderfall, bei dem Informationen über V nicht aus einem im Gitterknoten enthaltenden Element kommen.

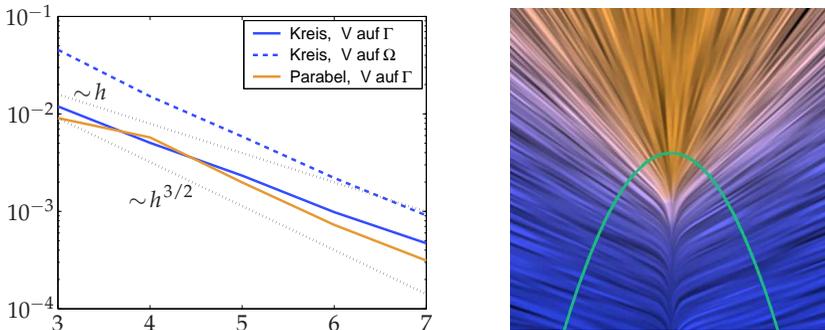


Abbildung 7.3: Links: $L^\infty(\Gamma)$ -Fehler der Geschwindigkeit V und gestrichelt der $L^2(\Omega)$ -Fehler bei Gitterverfeinerungen. Rechts: Fortgesetzte Geschwindigkeit für den Ivantsov-Nadelkristall.

in dem jeweiligen Teilgebiet Nachbarknoten als Stützstellen der Approximation zu suchen, wobei deren Abstand zum Auswertungspunkt auf der Grenzfläche noch mit der Abweichung gegenüber der Normalenrichtung gewichtet wird.

Die Fortsetzung der Geschwindigkeit V erfolgt simultan zur Berechnung einer temporären Abstandsfunktion bezüglich der Grenzfläche gemäß (4.11) aus Abschnitt 4.4 bzw. wie in Abschnitt 6.3.2 geschildert. Die Geschwindigkeit V wird auf der Grenzfläche elementweise linear aus den Werten in den Schnittpunkten mit den Gitterkanten interpoliert. In jedem Gitterknoten des Startbandes ist für die Geschwindigkeit V der Wert des normal auf die Grenzfläche projizierten Punktes zu benutzen, siehe Abbildung 7.2. Ein hochfrequentes Fehlerrauschen der Grenzflächengeschwindigkeit wird noch durch einige Glättungsschritte reduziert.

Zum Test des geschilderten Verfahrens wurden zwei Beispielfälle untersucht: das stationäre Problem aus Abschnitt 5.1 mit der kreisförmigen Grenzfläche und der Lösung (5.13) sowie das instationäre Problem aus Abschnitt 5.3 mit einer vorgegebenen gleichförmig bewegten Parabel als Grenzfläche und einer der Ivantsov-Lösung aus Abschnitt 3.1 entsprechenden exakten Lösung. Das Verhalten der numerischen Fehler bei Gitterverfeinerung ist in Abbildung 7.3 angegeben. Wir sehen ein mit der Gitterweite leicht besser als lineares Abklingen der Fehler.

7.2 Numerische Ergebnisse

Die Parameter wurden wie in Abschnitt 3.5 gewählt: die dimensionslose Unterkühlung sei $U = 0.405565$, was bei einem isothermen Ivantsov-Kristall einer zugehörigen Péclet-Zahl von $p \approx 0.1$ entspricht. Mit der Wahl von $\varepsilon = 0.075$ bestimmt gemäß (3.9) die Selektionstheorie $\sigma \approx 0.0256$. Nach der Festlegung der weiteren Parameter als $D = 0.75$ und $d_\varepsilon = 0.0025$ erhalten wir für die Kristallspitze aus (3.4) den Radius $R \approx 0.976859$ und die Geschwindigkeit $V_{tip} \approx 0.153553$.

Auf dem künstlichen Rand des Rechengebiets im Fernfeld des Kristalls wurde die konstante Temperatur $\vartheta = 0$ vorgegeben. Damit der Einfluß dieser Randbedingung auf die wachsende Kristallspitze gering bleibt, sollte der Rand zumindest 2.5 Diffusionslängen von der Spitze entfernt sein; bei feiner Auflösung der Kristallspitze werden Abstände in der Größenordnung von 5 Diffusionslängen benötigt, vergleiche [Ihl96] und Abbildung 3.12 aus Abschnitt 3.5. Die Diffusionslänge beträgt hier $L = 2D/V_{tip} \approx 9.77$. Das Rechengebiet wurde so groß gewählt, daß ein Wachstum der Hauptarme um das hundertfache des Spitzenradius R möglich ist. Die zeitliche Entwicklung des simulierten dendritischen Kristalls ist in Abbildung 7.4 dargestellt. Abbildung 7.5 zeigt Momentaufnahmen des berechneten Temperaturfeldes.

Da keine exakten Startwerte bekannt sind, die mit einem selbstähnlichen Lösungsverlauf verträglich wären, wurde eine Funktion 4. Ordnung mit Krümmungsradius R an der Spitze als Grenzfläche vorgegeben, die sich an den Symmetrieachsen glatt fortsetzen läßt. Das Temperaturfeld zum Startzeitpunkt wurde durch Rechnung einer Anzahl von Zeitschritten der Wärmeleitung bei dabei

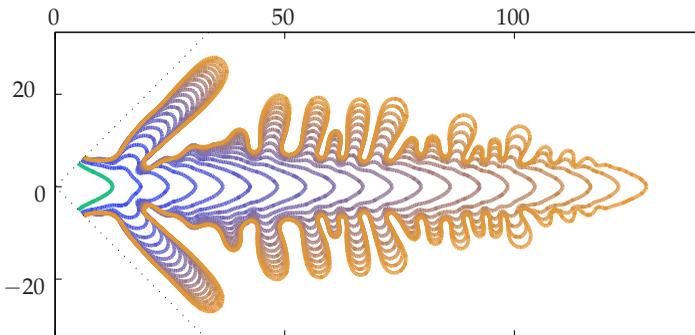


Abbildung 7.4: Wachstum eines Hauptarms: Überlagerung der Grenzfläche zu äquidistanten Zeitpunkten. Gezeigt ist der relevante Ausschnitt des Rechengebiets. Die Ausgangsfläche ist grün dargestellt, die Symmetrieachsen gepunktet.

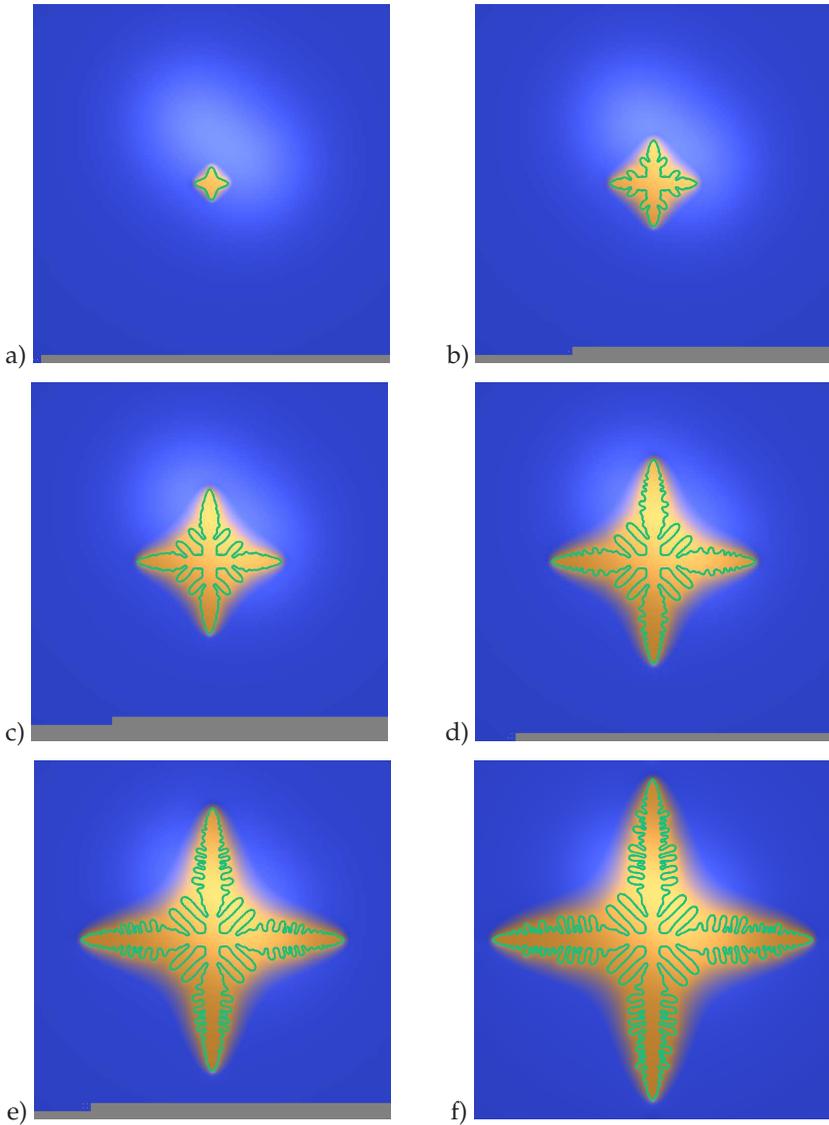


Abbildung 7.5: Temperaturfeld und Grenzfläche eines wachsenden dendritischen Kristalls zu verschiedenen äquidistanten Zeitpunkten.

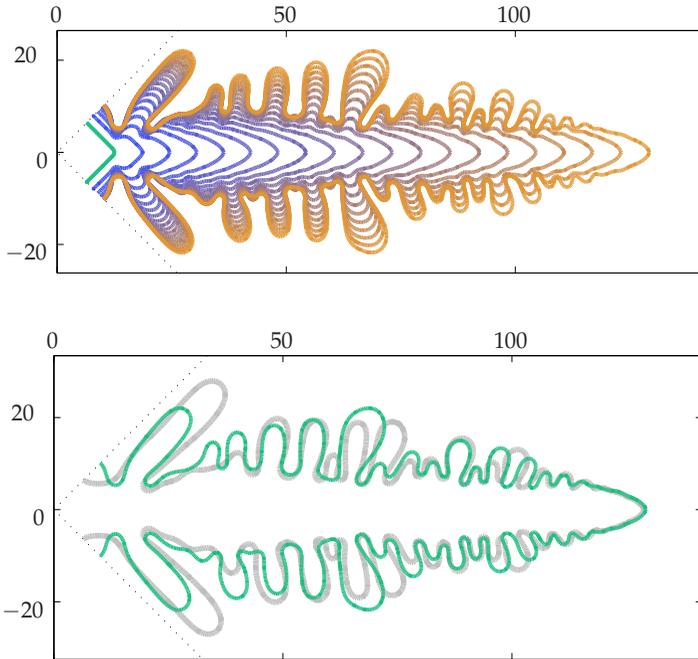


Abbildung 7.6: Oben: Wachstum eines Hauptarms bei alternativen Startwerten. Unten: Vergleich der resultierenden Dendritenform (grün) mit der aus Abb. 7.4 (grau).

vorgegebener Grenzflächenbewegung bestimmt. Die Symmetriebedingung wurde nicht entlang der Achsen der Hauptarme angewendet, wo die stärkste Bewegung der Grenzfläche stattfindet, denn dies führte zu einem Aufspalten der Kristallspitze unmittelbar nach Simulationsbeginn. Stattdessen wurde ein vollständiger Hauptarm berechnet. Als ein typisches Verhalten war bei den Rechnungen stets zuerst ein Verlassen der vorgegebenen Kristallform mit einem Aufspalten der Spitze und Ausbilden von Seitenarmen zu beobachten, und erst danach bildete sich ein neuer stabiler Wachstumszustand heraus. Dies schwächt die Bedeutung der Anfangswerte für die Resultate der Simulation ab. Die Ergebnisse einer Rechnung mit einer alternativen Ausgangsgrenzfläche sind in Abbildung 7.6 angegeben. Die Länge des Dendriten und die wesentliche Seitenarmstruktur stimmen in beiden Rechnungen überein, allerdings sind die eher unerwünschten, in diagonaler Richtung wachsenden Seitenarme am Schaft, die vom anfänglichen Aufspalten der Spitze stammen, im zweiten Fall deutlich geringer ausgeprägt.

Einfluß örtlicher und zeitlicher Gitterweiten

Bei der direkten numerischen Simulation von Dendriten mit scharfer Grenzfläche ist die Seitenarmstruktur in der Regel von den Gitterweiten abhängig. Demgegenüber unterdrückt die Phasenfeld-Methode mit feineren Gittern das Entstehen von Seitenarmen, sofern nicht ein kontrolliertes Rauschen zugeführt wird [KR99].

Es werden als nächstes die Ergebnisse von Rechnungen mit verschiedenen Orts- und Zeitschrittweiten verglichen. Nach Abbildung 7.7 ist mit feiner werdender örtlicher Gitterweite h eine Zunahme der Wachstumsgeschwindigkeit V_{tip} zu beobachten. Demgegenüber führt nach Abbildung 7.8 eine gröbere Zeitschrittweite τ zu einer Zunahme der Geschwindigkeit V_{tip} . Aus den beiden Abbildungen läßt sich entnehmen, daß mit kleiner werdender CFL-Zahl für die Diskretisierung der Level-Set-Gleichung der Grenzflächenbewegung, also bei im Verhältnis größerer Gitterweite h oder kleiner Zeitschrittweite τ , die Dendritenform glatter wird, die Seitenarme weniger stark ausgeprägt sind.

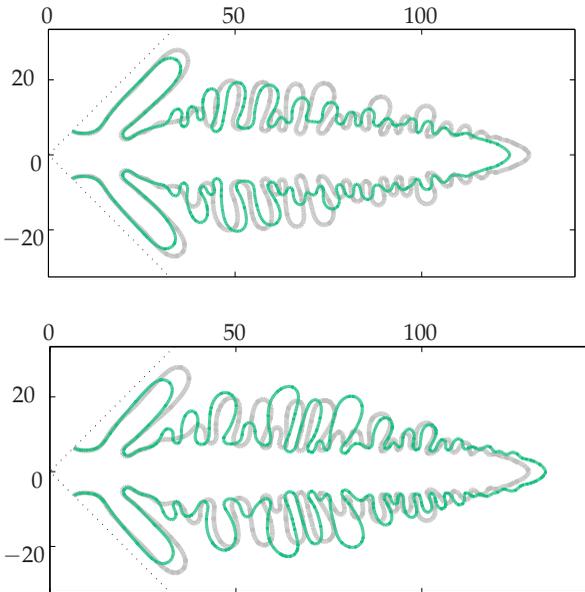


Abbildung 7.7: Einfluß der Gitterweite auf die resultierende Dendritenform (grün): Oben Vergleich mit der Form aus Abb. 7.4 (grau) bei größerer örtlicher Gitterweite h , und unten bei feinerer Gitterweite h .

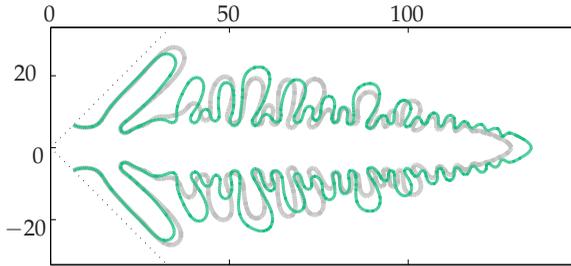


Abbildung 7.8: Vergleich der resultierenden Dendritenform (grün) mit der aus Abb. 7.4 (grau) bei Rechnung mit halbierter Zeitschrittweite τ .

Für Abbildung 7.9 wurde in der numerischen Simulation ein weiterer verfeinerter Gitterlevel hinzugenommen und entsprechend die Zeitschrittweite $\tau \sim h^2$ reduziert. Der Vergleich mit der zu Abbildung 7.4 gehörenden Rechnung ist hier schwieriger, da sich hier die Kristallspitze mit der Zeit aufweitet und verlangsamt. Bei einer geringeren Gitterweite ist in diesem Fall die CFL-Zahl ebenfalls geringer.

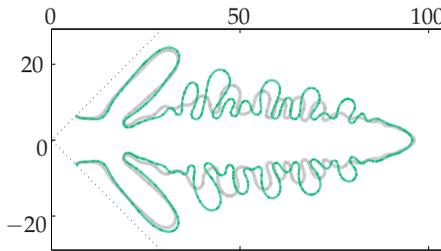


Abbildung 7.9: Vergleich der resultierenden Dendritenform (grün) mit der aus Abb. 7.4 (grau) bei Hinzunahme einer weiteren Verfeinerungsstufe des Gitters und entsprechend $\tau \sim h^2$ verkürzter Zeitschrittweite.

Qualitative und quantitative Auswertung

Der Abstand der Kristallspitze zum ersten Seitenarm, dessen Länge mindestens dem Radius R der Spitze entspricht, wird mit D_1 bezeichnet. Weiter sei D_c der Abstand bis zum ersten Auftreten einer Vergrößerung, d.h. bis zum ersten Seitenarm, dessen Länge geringer ist als die des vorherigen. Nach Auswertung experi-

menteller Daten wurde in [CKL⁺99] die Unabhängigkeit dieser Größen D_1 und D_c von der Unterkühlung festgestellt, sofern sie auf den Radius R bezogen werden. Bei verschwindendem Gravitationseinfluß ist demnach $D_1 = (11.8 \pm 1.7)R$ und $D_c = (30.2 \pm 6.9)R$. Wie in Abbildung 7.10 zu sehen ist, geben die Simulationsergebnisse diese qualitativen Eigenschaften dendritischer Kristalle wieder.¹ Im Zuge der Vergrößerung der Seitenarme kann es zu einem Zurückschmelzen von Seitenarmen kommen. Auch ein solches Verhalten wird durch die Rechnungen wiedergegeben, wie in Abbildung 7.6 zu erkennen ist.

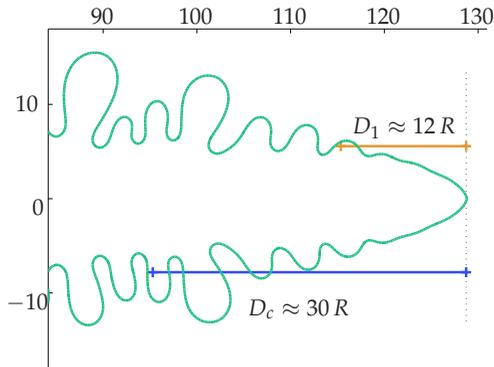


Abbildung 7.10: Abstand D_1 von der Kristallspitze zum ersten Seitenarm und Abstand D_c zum ersten Auftreten von Vergrößerung.

Für eine quantitative Auswertung der Simulationsergebnisse wurde die Kristallspitze durch eine Parabel approximiert. Dabei gibt es 4 freie Parameter: die Koordinaten x_0 und y_0 des Scheitelpunktes, den Krümmungsradius R_h der Parabel am Scheitelpunkt sowie ihren Öffnungswinkel φ gegenüber einer Bezugsrichtung. Die Minimierung der gewichteten Fehlerquadrate führt auf ein nichtlineares System, das mit dem Newton-Verfahren gelöst wurde. Gemäß Abbildung 7.11 läßt sich ein gleichförmiges Wachstum des Dendriten feststellen, aber die Geschwindigkeit V_h der Kristallspitze liegt zu niedrig, ebenso die aus den rekonstruierten Größen R_h und V_h berechnete Péclet-Zahl p_h .

Bei Variation der Unterkühlung, genauer der damit verbundenen Péclet-Zahl p , ist gemäß Abbildung 7.12 nicht der nach der Theorie zu erwartende quadratische Verlauf der Geschwindigkeit V_h festzustellen. Bei Variation der Aniso-

1. Im Zusammenhang mit diffusionslimitierter Aggregation (DLA) läßt sich beobachten, daß die Position der Seitenarme weitgehend unabhängig vom Fehlerrauschen ist, die Amplituden dabei allerdings mit verschwindendem Rauschen abnehmen [Kas96].

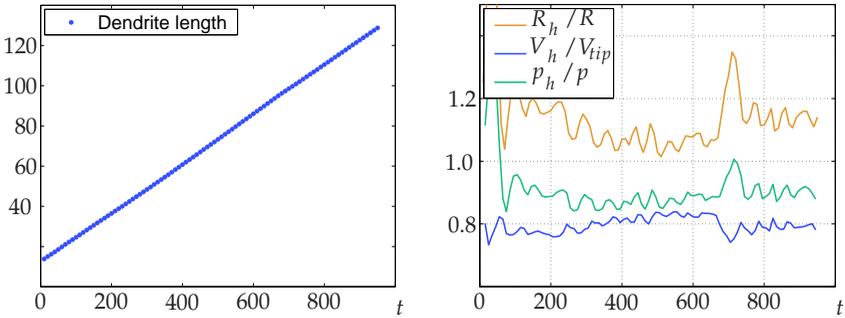


Abbildung 7.11: Links: Die Länge des Dendritenarms wächst gleichförmig. Rechts: Rekonstruierte Werte R_h , V_h und p_h , jeweils bezogen auf die Soll-Werte nach der Selektionstheorie MSC.

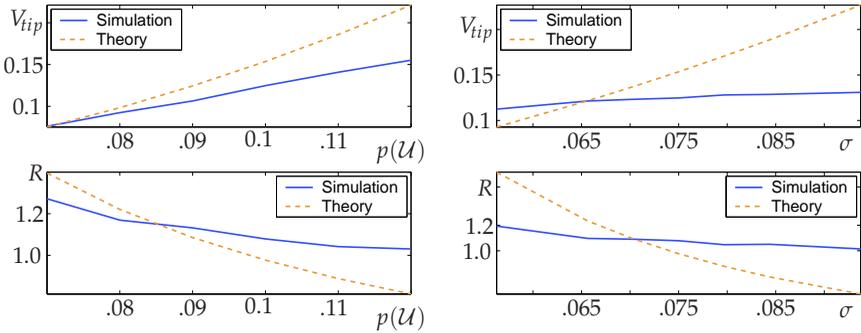


Abbildung 7.12: Änderung von Geschwindigkeit V_h und Radius R_h der Kristallspitze. Links: bei Variation der Péclet-Zahl p , rechts: bei Variation der Anisotropie ε .

otropie ε verändert sich die Geschwindigkeit nur in einem im Vergleich zur Selektionstheorie MSC deutlich zu geringen Umfang. Das läßt vermuten, daß die numerischen Störungen und dadurch erzeugte Anisotropie zu groß sind.

7.3 Bewertung und Ausblick

Die Einzelkomponenten des Verfahrens zur instationären Simulation dendritischen Wachstums wurden in den Kapiteln 5 und 6 vorgestellt und deren Konvergenz bei kleiner werdenden Diskretisierungsschritten jeweils bestätigt. Im

Zusammenwirken der Komponenten zeigen die Simulationsergebnisse dendritische Strukturen, die in der Nähe der theoretischen Vorhersagen liegen und auch qualitative Eigenschaften der Kristalle gut wiedergeben. Trotzdem sind die Ergebnisse aber quantitativ noch nicht zufriedenstellend, insbesondere der stationäre Wachstumszustand von Radius R und Geschwindigkeit V_{tip} der Kristallspitzen folgt nicht hinreichend Änderungen der Parameter p und ε , sondern wird zu stark durch numerische Einflüsse bestimmt.

Die erzielten Ergebnisse der Simulation dendritischen Wachstums zeigen deutliche Auswirkungen von numerischem Rauschen und auch damit verbundene Abhängigkeiten von den Diskretisierungsgittern. Während Berechnungen mit dem Phasenfeld-Ansatz dieses Rauschen gut unterdrücken können, läßt es sich in der direkten Simulation des Modells mit scharfer Grenzfläche schwer kontrollieren, könnte z.B. durch Mittelung verschiedener Rechnungen auf mehreren gegeneinander gedrehter Gitter wie in [Ihl96] reduziert werden.

Als eine Möglichkeit numerisches Rauschen zu unterdrücken, kommen Diskretisierungsmethoden höherer Ordnung in Frage. Ein örtliches Diskretisierungsverfahren höherer Ordnung wie in Abschnitt 5.2 führte aber im instationären Test nicht zu verringerten numerischen Fehlern, wobei zudem Fehler im Zusammenhang der Implementierung mit u_g einer adaptiven Gitterverfeinerung im Wege stehen. Zum Ausnutzen der optimalen Konvergenzordnung müßte bei örtlicher Verfeinerung die Zeitschrittweite quadratisch oder stärker mit der Ortsschrittweite verkleinert werden, was zu zunehmend ungünstigeren CFL-Zahlen der Grenzflächenbewegung führen würde.

Bei örtlicher Diskretisierung mit höherer Ordnung steigt also der Bedarf nach Zeitschrittverfahren höherer Ordnung, beispielsweise mit zwei- oder mehrstufigen Runge-Kutta-artigen Verfahren. Dem steht aber der hohe Aufwand zur korrekten Berücksichtigung von nicht im örtlichen Gitter aufgelösten Grenzflächen zu den verschiedenen Zeitpunkten entgegen.

Anhang

A.1 Parabelkoordinaten

Wir benutzen *parabolische Zylinderkoordinaten*, um die parabelförmige Spitze eines Nadelkristalls durch eine Koordinatenfläche darzustellen. Diese Koordinaten sind in der Literatur oftmals definiert durch die Koordinatentransformation $\mathcal{J} : \mathbb{R} \times \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}^3$, mit

$$(x, y, z)^T = \mathcal{J}(\xi, \eta, z) := \left(R^2 \xi \eta, \frac{R^2}{2} (\eta^2 - \xi^2), z \right)^T.$$

Im Kontext des Kristallwachstums ist es üblich, aufgrund der Symmetrie bezüglich der y -Achse nur einen Halbraum zu betrachten. Alle vorkommenden Funktionen müssen dann aber gerade in x und damit auch in ξ sein oder aber sich gerade in ξ fortsetzen lassen und dabei hinreichend glatt sein. Deshalb wird hier als Transformation definiert $\mathcal{J} : \mathbb{R}_+^2 \times \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}^2$, mit

$$(x, y, z)^T = \mathcal{J}(\xi, \eta, z) := \left(R \sqrt{\xi \eta}, \frac{R}{2} (\eta - \xi), z \right)^T. \quad (\text{A.2})$$

Die zugehörige inverse Transformation ist

$$(\xi, \eta, z)^T = \mathcal{J}^{-1}(x, y, z) = \left(\frac{\sqrt{x^2 + y^2} - y}{R}, \frac{\sqrt{x^2 + y^2} + y}{R}, z \right)^T. \quad (\text{A.3})$$

Da wir nur ebene Probleme betrachten wollen, reicht es hier, nur die ersten beiden Komponenten zu berücksichtigen. Wir benötigen die Differentialmatrix der Koordinatentransformation

$$D\mathcal{J}(\xi, \eta) = \frac{R}{2\sqrt{\xi\eta}} \begin{pmatrix} \eta & \xi \\ -\sqrt{\xi\eta} & \sqrt{\xi\eta} \end{pmatrix} \quad (\text{A.4})$$

und der inversen Transformation

$$D\mathcal{J}^{-1}(\mathcal{J}(\xi, \eta)) = (D\mathcal{J}(\xi, \eta))^{-1} = \frac{2}{R(\xi + \eta)} \begin{pmatrix} \sqrt{\xi\eta} & -\xi \\ \sqrt{\xi\eta} & \eta \end{pmatrix}. \quad (\text{A.5})$$

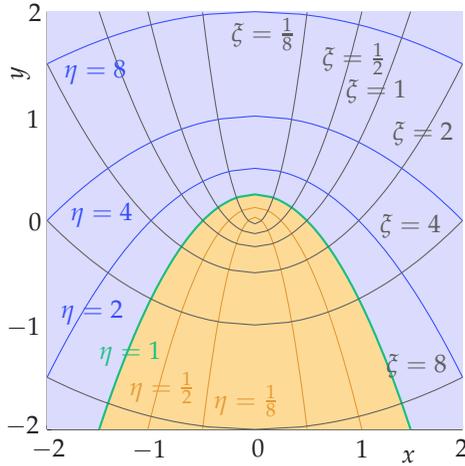


Abbildung A.13: Parabelkoordinaten bezogen auf den Spitzenradius $R = 1/2$.

Die Einheitsvektoren der Parabelkoordinaten sind die normierten Gradienten $\nabla_{(x,y)}\xi$ bzw. $\nabla_{(x,y)}\eta$. Aus den Spalten der Differentialmatrix in (A.5) können wir ablesen

$$e_{\xi} = \frac{(\sqrt{\eta}, -\sqrt{\xi})^T}{\sqrt{\xi + \eta}}, \quad e_{\eta} = \frac{(\sqrt{\xi}, \sqrt{\eta})^T}{\sqrt{\xi + \eta}}. \quad (\text{A.6})$$

Die Skalarprodukte der krummlinigen mit den kartesischen Einheitsvektoren sind

$$\langle e_{\xi}, e_x \rangle = \sqrt{\frac{\eta}{\xi + \eta}}, \quad \langle e_{\xi}, e_y \rangle = -\sqrt{\frac{\xi}{\xi + \eta}}, \quad (\text{A.7a})$$

$$\langle e_{\eta}, e_x \rangle = \sqrt{\frac{\xi}{\xi + \eta}}, \quad \langle e_{\eta}, e_y \rangle = \sqrt{\frac{\eta}{\xi + \eta}}. \quad (\text{A.7b})$$

Um Ableitungen bezüglich der transformierten Variablen auszudrücken, ist allgemein die Kettenregel zu benutzen. Es ist aber einfacher, wie in [Bro96, Kap. 13.2] mit *metrischen Koeffizienten* für krummlinige orthogonale Koordinatensysteme zu arbeiten. Die metrische Koeffizienten sind durch die Norm der Zeilen von (A.4) gegeben:

$$h_{\xi} = \frac{R}{2\sqrt{\xi\eta}} \left\| (\eta, -\sqrt{\xi\eta})^T \right\| = \frac{R}{2} \sqrt{\frac{\xi + \eta}{\xi}}, \quad (\text{A.8a})$$

$$h_\eta = \frac{R}{2\sqrt{\xi\eta}} \left\| \left(\xi, \sqrt{\xi\eta} \right)^T \right\| = \frac{R}{2} \sqrt{\frac{\xi + \eta}{\eta}}. \quad (\text{A.8b})$$

Der Gradient einer Funktion ϑ in Parabelkoordinaten ausgedrückt ist

$$\nabla\vartheta = \frac{1}{h_\xi} \frac{\partial\vartheta}{\partial\xi} e_\xi + \frac{1}{h_\eta} \frac{\partial\vartheta}{\partial\eta} e_\eta \quad (\text{A.9a})$$

$$= \frac{2}{R} \frac{1}{\sqrt{\xi + \eta}} \left(\sqrt{\xi} \frac{\partial\vartheta}{\partial\xi} e_\xi + \sqrt{\eta} \frac{\partial\vartheta}{\partial\eta} e_\eta \right). \quad (\text{A.9b})$$

Die Richtungsableitungen bezüglich der Einheitsvektoren berechnen sich als Skalarprodukt des Gradienten mit den Einheitsvektoren. Mit (A.7) und (A.9) folgt

$$\partial_{e_x} \vartheta = \frac{2}{R} \frac{\sqrt{\xi\eta}}{\xi + \eta} \left(\frac{\partial\vartheta}{\partial\xi} + \frac{\partial\vartheta}{\partial\eta} \right), \quad (\text{A.10a})$$

$$\partial_{e_y} \vartheta = \frac{2}{R} \frac{1}{\xi + \eta} \left(-\xi \frac{\partial\vartheta}{\partial\xi} + \eta \frac{\partial\vartheta}{\partial\eta} \right), \quad (\text{A.10b})$$

$$\partial_{e_\xi} \vartheta = \frac{2}{R} \sqrt{\frac{\xi}{\xi + \eta}} \frac{\partial\vartheta}{\partial\xi}, \quad (\text{A.10c})$$

$$\partial_{e_\eta} \vartheta = \frac{2}{R} \sqrt{\frac{\eta}{\xi + \eta}} \frac{\partial\vartheta}{\partial\eta}. \quad (\text{A.10d})$$

Die Divergenz eines Vektorfeldes $\Theta := \Theta^\xi e_\xi + \Theta^\eta e_\eta$ ist in Parabelkoordinaten

$$\operatorname{div} \Theta = \frac{1}{h_\xi h_\eta} \left(\frac{\partial}{\partial\xi} (h_\eta \Theta^\xi) + \frac{\partial}{\partial\eta} (h_\xi \Theta^\eta) \right) \quad (\text{A.11a})$$

$$= \frac{4}{R^2(\xi + \eta)} \left(\sqrt{\xi} \frac{\partial}{\partial\xi} \left(\sqrt{\xi + \eta} \Theta^\xi \right) + \sqrt{\eta} \frac{\partial}{\partial\eta} \left(\sqrt{\xi + \eta} \Theta^\eta \right) \right). \quad (\text{A.11b})$$

Für den Laplace-Operator folgt aus (A.9) und (A.11)

$$\begin{aligned} \Delta\vartheta &= \operatorname{div}(\nabla\vartheta) = \frac{1}{h_\xi h_\eta} \left(\frac{\partial}{\partial\xi} \left(\frac{h_\eta}{h_\xi} \frac{\partial\vartheta}{\partial\xi} \right) + \frac{\partial}{\partial\eta} \left(\frac{h_\xi}{h_\eta} \frac{\partial\vartheta}{\partial\eta} \right) \right) \\ &= \frac{4\sqrt{\xi\eta}}{R^2(\xi + \eta)} \left(\frac{\partial}{\partial\xi} \left(\sqrt{\frac{\xi}{\eta}} \frac{\partial\vartheta}{\partial\xi} \right) + \frac{\partial}{\partial\eta} \left(\sqrt{\frac{\eta}{\xi}} \frac{\partial\vartheta}{\partial\eta} \right) \right) \\ &= \frac{2}{R^2(\xi + \eta)} \left(\frac{\partial^2\vartheta}{\partial\xi^2} + 2\xi \frac{\partial^2\vartheta}{\partial\xi^2} + \frac{\partial\vartheta}{\partial\eta} + 2\eta \frac{\partial^2\vartheta}{\partial\eta^2} \right). \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

A.2 Transformierte Modellgleichungen, Ivantsov-Lösung

Wir gehen hier von einem parabelförmigen Nadelkristall aus, dessen Spitze sich mit der Geschwindigkeit V_{tip} in positive y -Richtung bewegt. Werden die reskalierten Gleichungen (3.3) benutzt, so ist zu beachten, daß in den Transformationen auf Parabelkoordinaten $R = 1$ zu setzen ist. Das gleiche Ergebnis liefert (3.1) unter Verwendung von (A.12) und (A.10). Die Differentialgleichung ist somit

$$0 = \frac{2D}{R^2(\xi + \eta)} \left(\frac{\partial \theta}{\partial \xi} + 2\xi \frac{\partial^2 \theta}{\partial^2 \xi} + \frac{\partial \theta}{\partial \eta} + 2\eta \frac{\partial^2 \theta}{\partial^2 \eta} \right) + \frac{2V_{tip}}{R(\xi + \eta)} \left(-\xi \frac{\partial \theta}{\partial \xi} + \eta \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \right)$$

bzw. mit Hilfe der Péclet-Zahl $p = V_{tip}R/2D$ aus (3.2) kürzer ausgedrückt

$$0 = \left(\frac{\partial \theta}{\partial \xi} + 2\xi \frac{\partial^2 \theta}{\partial^2 \xi} + \frac{\partial \theta}{\partial \eta} + 2\eta \frac{\partial^2 \theta}{\partial^2 \eta} \right) + 2p \left(-\xi \frac{\partial \theta}{\partial \xi} + \eta \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \right). \quad (\text{A.13})$$

Randbedingungen

Die Phasengrenze ist durch die Koordinatenfläche für $\eta = 1$ gegeben. In der Stefan-Bedingung (3.3b) ist die Normalgeschwindigkeit wegen (A.7)

$$V = \langle V_{tip} e_y, e_\eta \rangle = V_{tip} \sqrt{\frac{1}{\xi + 1}}, \quad (\text{A.14})$$

und auf der linken Seite steht wegen (A.10)

$$\left[D \partial_n \theta(\xi, 1) \right]_\Gamma = \left[D \partial_{e_\eta} \theta(\xi, 1) \right]_\Gamma = \frac{2}{R \sqrt{\xi + 1}} \left[D \partial_\eta \theta(\xi, 1) \right]_\Gamma.$$

In der Gibbs-Thomson-Beziehung wird die spezielle Geometrie der angenommenen parabelförmigen Grenzfläche eingesetzt. Mit der Parametrisierung $\gamma(x) := x^2/(2R)$ der Phasengrenze lassen sich die Normale und Krümmung leicht berechnen

$$n = \frac{(-\gamma', 1)^T}{\sqrt{1 + (\gamma')^2}} = \frac{(\sqrt{\xi}, 1)^T}{\sqrt{1 + \xi}}, \quad (\text{A.15a})$$

$$\kappa = \frac{-\gamma''}{(1 + (\gamma')^2)^{3/2}} = \frac{1}{R(1 + \xi)^{3/2}}. \quad (\text{A.15b})$$

Für beliebige feste Werte von η läßt sich analog im Level-Set-Kontext berechnen

$$n = e_\eta = \frac{(\sqrt{\xi}, \sqrt{\eta})^T}{\sqrt{\xi + \eta}}, \quad (\text{A.16a})$$

$$\kappa = \text{div}_{(x,y)} n = \frac{\sqrt{\eta}}{R(\xi + \eta)^{3/2}}. \quad (\text{A.16b})$$

Der Winkel α zwischen der Normalen $n = e_\eta$ und der ausgezeichneten Richtung von e_y ist nach (A.7) an jedem beliebigen Punkt der Phasengrenze

$$\alpha = \arccos(\langle n, e_y \rangle) = \arccos\left(\sqrt{\frac{\eta}{\xi + \eta}}\right).$$

Dies setzen wir in die Anisotropie-Funktion $A_\varepsilon = 1 - \varepsilon \cos(4\alpha)$ aus (2.38) ein. Mit $\cos(4\alpha) = 2 \cos^2(2\alpha) - 1 = 8 \cos^4(\alpha) - 8 \cos^2(\alpha) + 1$ folgt

$$\begin{aligned} A_\varepsilon &= 1 - \varepsilon \left(1 - 8 \frac{\eta}{\xi + \eta} + 8 \frac{\eta^2}{(\xi + \eta)^2}\right) = 1 - \varepsilon + 8\varepsilon \frac{\xi\eta}{(\xi + \eta)^2} \\ &= 1 - \varepsilon \frac{\xi^2 - 6\xi\eta + \eta^2}{(\xi + \eta)^2}. \end{aligned}$$

Insgesamt lauten die Randbedingungen somit für $\eta = 1$

$$\left[\frac{\partial \vartheta}{\partial \eta}(\xi, 1)\right]_\Gamma = p, \quad (\text{A.17a})$$

$$\vartheta(\xi, 1) = \mathcal{U} - p\sigma \left(\frac{1}{(1 + \xi)^{3/2}} - \varepsilon \frac{\xi^2 - 6\xi + 1}{(1 + \xi)^{7/2}}\right). \quad (\text{A.17b})$$

Separation mit Produktansatz

Durch Einsetzen des *Produktansatzes* $\vartheta(\xi, \eta) = X(\xi)Y(\eta)$ in die Differentialgleichung (A.13) erhalten wir

$$0 = X'Y + 2\xi X''Y + XY' + 2\eta XY'' - 2p\xi X'Y + 2p\eta XY'.$$

Nach Division durch $X(\xi)Y(\eta)$ lassen sich die Veränderlichen separieren:

$$0 = \underbrace{2\xi \frac{X''}{X} + (1 - 2p)\xi \frac{X'}{X}}_{=: -m^2} + \underbrace{2\eta \frac{Y''}{Y} + (1 + 2p)\eta \frac{Y'}{Y}}_{=: m^2}.$$

Somit erhalten wir die zwei gewöhnlichen Differentialgleichungen

$$-pnX := -m^2X = 2\xi X'' + (1 - 2p\xi) X', \quad (\text{A.18a})$$

$$+pnY := +m^2Y = 2\eta Y'' + (1 + 2p\eta) Y' \quad (\text{A.18b})$$

mit einem zunächst noch unbestimmten Separationsparameter $m \in \mathbb{R}$, bzw. $n \geq 0$. Die Randbedingungen (A.17) sind in der Produktform

$$X(\xi) [Y'(1)]_\Gamma = p, \quad (\text{A.19a})$$

$$X(\xi)Y(1) = \mathcal{U} - p\sigma \left(\frac{1}{(1 + \xi)^{3/2}} - \varepsilon \frac{\xi^2 - 6\xi + 1}{(1 + \xi)^{7/2}}\right). \quad (\text{A.19b})$$

Bei Vernachlässigung der veränderlichen Terme in der Randbedingung (A.19b) kann die Funktion $X(\zeta)$ lediglich konstant gewählt werden. Dies erlaubt dann in (A.18) nur noch den verschwindenden Separationsparameter $n = 0$. Wir bekommen die *Ivantsov-Lösung*

$$\vartheta_0(\eta) = Y(\eta) = e^p \sqrt{p\pi} \begin{cases} \operatorname{erfc}(\sqrt{p}) & \text{für } \eta \leq 1, \\ \operatorname{erfc}(\sqrt{p\eta}) & \text{für } \eta \geq 1. \end{cases} \quad (\text{A.20})$$

Für $\eta \leq 1$ ist ϑ_0 konstant, so daß hier alle Ableitungen von ϑ verschwinden. Aus $\partial_\eta \operatorname{erfc}(\eta) = -\frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-\eta^2}$ folgt

$$\begin{aligned} \partial_\eta \vartheta_0(\eta) &= -e^p \sqrt{p\pi} \frac{p}{\sqrt{\pi p \eta}} e^{-p\eta} = -\frac{pe^p}{\sqrt{\eta}} e^{-p\eta} & \text{für } \eta > 1, \\ \partial_\eta^2 \vartheta_0(\eta) &= \frac{pe^p}{\sqrt{\eta}} e^{-p\eta} \left(\frac{1}{2\eta} + p \right) & \text{für } \eta > 1. \end{aligned}$$

Daraus ist sofort zu sehen, daß ϑ_0 die Differentialgleichung (3.6a), bzw. (A.18b) mit $m = 0$, erfüllt. Zur Überprüfung der Stefan-Bedingung bilden wir noch

$$[\partial_\eta \vartheta_0(1)]_\Gamma = 0 - \partial_\eta \vartheta_0(1) = p.$$

A.3 Oseensche Umströmung der Parabel

Wegen des stationären Wachstums des Nadelkristalls benutzen wir auch für die Umströmung den Ansatz $\tilde{u}(t, x, y) := u(x, y - V_{tip}t) + V_{tip}e_y$, d.h. in einem mit der Kristallspitze mitbewegten Koordinatensystem beobachten wir das stationäre Geschwindigkeitsfeld u . Aus (3.20) folgt das stationäre Problem für u :

$$V_{tip} \partial_y u - (\nabla u) \cdot (u + V_{tip} e_y) + \nu \Delta u = \frac{1}{\rho} \nabla P \quad \text{in } \Omega^-, \quad (\text{A.21a})$$

$$\operatorname{div} u = 0 \quad \text{in } \Omega^-, \quad (\text{A.21b})$$

$$u|_{\Gamma} = -V_{tip} e_y, \quad \lim_{y \rightarrow \infty} u = -(u_\infty + V_{tip}) e_y. \quad (\text{A.21c})$$

Bei der Oseen-Näherung wird mit Hilfe des Strömungsverhaltens im Fernfeld, also hier für $y \rightarrow \infty$, eine Linearisierung des Konvektionsterms in der Impulsgleichung (3.20a) vorgenommen. Mit (A.21c) nehmen wir an

$$(\nabla u) u \approx (\nabla u) \cdot (-u_\infty - V_{tip} e_y) e_y = -(u_\infty + V_{tip}) \partial_y u.$$

Damit folgt aus (A.21)

$$\nu \Delta u + (u_\infty + V_{tip}) \partial_y u = \frac{1}{\rho} \nabla P \quad \text{in } \Omega^-, \quad (\text{A.22a})$$

$$\operatorname{div} u = 0 \quad \text{in } \Omega^-. \quad (\text{A.22b})$$

Für die räumliche Skalierung bezüglich der Länge R ist eine Transformation der Art $u(x, y) = 1/R \tilde{u}(R x, R y)$ anzuwenden. Mit der Definition der Reynolds-Zahl $Re := \frac{R(u_\infty + V_{tip})}{\nu}$ erhalten wir aus (A.22) und (A.21c)

$$\Delta u + Re \partial_y u = \frac{1}{\nu \rho} \nabla P \quad \text{in } \Omega^-, \quad (\text{A.23a})$$

$$\operatorname{div} u = 0 \quad \text{in } \Omega^-, \quad (\text{A.23b})$$

$$u|_{\Gamma^-} = -\frac{V_{tip}}{R} e_y, \quad \lim_{y \rightarrow \infty} u = -\frac{u_\infty + V_{tip}}{R} e_y. \quad (\text{A.23c})$$

Die beiden aus (A.23a) folgenden Gleichungen für die kartesischen Komponenten u_1 und u_2 von u haben in Parabelkoordinaten bei konstantem Druck P und nach Multiplikation mit $1/2(\xi + \eta)$ die Form

$$2\bar{\xi} \frac{\partial^2}{\partial \bar{\xi}^2} u_{1/2} + 2\eta \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} u_{1/2} + (1 - 2Re \bar{\xi}) \frac{\partial}{\partial \bar{\xi}} u_{1/2} + (1 + 2Re \eta) \frac{\partial}{\partial \eta} u_{1/2} = 0. \quad (\text{A.24})$$

Der die Divergenzfreiheit von u sichernde Ansatz (3.21) ist in kartesischen Koordinaten

$$u(\xi, \eta) = \frac{u_\infty}{R(\xi + \eta)} \left(-\frac{\eta X_u(\bar{\xi}) Y_u'(\eta)}{\sqrt{\bar{\xi} \eta} X_u(\bar{\xi}) Y_u'(\eta)} + \frac{\bar{\xi} X_u'(\bar{\xi}) Y_u(\eta)}{\sqrt{\bar{\xi} \eta} X_u'(\bar{\xi}) Y_u(\eta)} \right). \quad (\text{A.25})$$

Durch die Forderung der Divergenzfreiheit sind die Funktionen X_u und Y_u nur bis auf eine additive Konstante festgelegt. Die Wahl von $X_u(\bar{\xi}) = \sqrt{\bar{\xi}}$ im Ansatz (A.25) führt in der zweiten kartesischen Komponente von Gleichung (A.24) entlang der Geraden $\bar{\xi} = 0$ auf die gewöhnliche Differentialgleichung

$$4\eta Y_u''(\eta) + (2 + 2Re \eta) Y_u'(\eta) - Re Y_u(\eta) = 0 \quad \text{für } \eta > 1.$$

Deren allgemeine Lösung mit zwei freien Parametern k_1 und k_2 ist

$$Y_u(\eta) = k_1 \sqrt{\eta} + k_2 \left(\sqrt{\eta} \operatorname{erfc} \left(\sqrt{\frac{Re}{2} \eta} \right) - \sqrt{\frac{2}{\pi Re}} e^{-\frac{Re}{2} \eta} \right), \quad (\text{A.26})$$

womit wir sogar eine Lösung der vollständigen Oseenschen Gleichungen bei konstantem Druck erhalten haben! Die zweite Randbedingung aus (A.23c) lautet nach Einsetzen des Separationssansatzes (3.21)

$$\lim_{\eta \rightarrow \infty} u(0, \eta) = -\frac{u_\infty}{2R} \lim_{\eta \rightarrow \infty} \frac{Y_u(\eta)}{\sqrt{0 + \eta}} e_\eta \quad \stackrel{!}{=} -\frac{u_\infty + V_{tip}}{R} e_\eta.$$

Durch Einsetzen der allgemeinen Lösung (A.26) folgt daraus

$$\lim_{\eta \rightarrow \infty} u(0, \eta) = -\frac{u_\infty}{2R} k_1 \stackrel{!}{=} -\frac{u_\infty + V_{tip}}{R} e_\eta,$$

und damit erhalten wir $k_1 = 2(1 + V_{tip}/u_\infty)$. Dies nutzen wir um die Lösung (A.26) in der Form

$$Y_u(\eta) := 2(1 + V_{tip}/u_\infty)\sqrt{\eta} - 2g(\eta)$$

zu schreiben und die verbleibende Randbedingung zu untersuchen. Sie lautet

$$u(\xi, 1) = \frac{u_\infty}{R\sqrt{\xi+1}} \left(\sqrt{\xi} Y_u'(1) e_\xi - \frac{1}{2} Y_u(1) e_\eta \right) \stackrel{!}{=} \frac{V_{tip}}{R\sqrt{\xi+1}} \left(-\sqrt{\xi} e_\xi + e_\eta \right)$$

und erfordert damit $Y_u(1) = 2Y_u'(1) = V_{tip}/u_\infty$, also $g(1) = 2g'(1) = 1$. Mit dem einen verbleibenden Parameter k_2 in (A.26) ist dies aber nicht zu erfüllen. Als Ausweg kann zu Y_u eine additive Konstante zur Beseitigung des zur Erfüllung von $g(1) = 1$ störenden Exponentialterms hinzugefügt werden, die dann allerdings einen Rest in den Osenschen Gleichungen bewirkt, der als Druckgradient interpretiert werden muß. Der zugehörige Druck ist bis auf eine additive Konstante proportional zu $P = 1 - \sqrt{\eta}/(\xi + \eta)$ und klingt nicht mit wachsender Entfernung zum Kristall ab. Damit erhalten wir die [BP89] angegebene Lösung

$$Y_u(\eta) := 2(1 + V_{tip}/u_\infty)\sqrt{\eta} - 2g(\eta), \quad \text{mit} \quad (\text{A.27a})$$

$$g(\eta) := \frac{1}{\operatorname{erfc}\left(\sqrt{\frac{Re}{2}}\right)} \left[\sqrt{\eta} \operatorname{erfc}\left(\sqrt{\frac{Re}{2}}\eta\right) + \sqrt{\frac{2}{\pi Re}} \left(e^{-\frac{Re}{2}} - e^{-\frac{Re}{2}\eta} \right) \right]. \quad (\text{A.27b})$$

A.4 Selbstkonsistente Form und Störungsansatz

Als Fundamentallösung für den Operator $\Delta + 2p\partial_y$ muß die in (3.13) angegebene Funktion $G(X, Y) = \frac{1}{2\pi} e^{-pY} K_0(p \|(X, Y)\|)$ die Bedingung

$$\Delta G(X, Y) + 2p\partial_y G(X, Y) = \delta(x, y)$$

erfüllen. Unter Benutzung von $K_0'(z) = -K_1(z)$ berechnen wir dafür

$$\nabla G(x, y) = -\frac{p e^{-py}}{2\pi} \left[K_1(p \|(x, y)\|) \frac{1}{\|(x, y)\|} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ K_0(p \|(x, y)\|) \end{pmatrix} \right]. \quad (\text{A.28})$$

Zur Bestimmung von $\Delta G(x, y) = \operatorname{div} \nabla G(x, y)$ sind zuerst die Ableitungen der ersten modifizierten Bessel-Funktion $K'_1(z) = -K_0(z) - \frac{1}{z}K_1(z)$ mitsamt der inneren Ableitungen zu berechnen, als zweites wird der exponentielle Faktor abgeleitet, dann werden die Ableitungen des normierten Vektors (x, y) hinzugefügt und zuletzt die Ableitung des verbleibenden K_0 -Terms berücksichtigt

$$\begin{aligned} \Delta G(x, y) = & \frac{p^2}{2\pi} e^{-py} \left[\left(K_0(p \|(x, y)\|) + \frac{1}{p \|(x, y)\|} K_1(p \|(x, y)\|) \right) \frac{x^2 + y^2}{\|(x, y)\|^2} \right. \\ & + \left(K_1(p \|(x, y)\|) \frac{y}{\|(x, y)\|} + K_0(p \|(x, y)\|) \right) \\ & \left. - K_1(p \|(x, y)\|) \frac{(2-1) \|(x, y)\|^2}{p \|(x, y)\|^3} + K_1(p \|(x, y)\|) \frac{y}{\|(x, y)\|} \right]. \end{aligned}$$

Zusammenfassend erhalten wir

$$\Delta G(x, y) = \frac{2p^2}{2\pi} e^{-py} \left[K_1(p \|(x, y)\|) \frac{y}{\|(x, y)\|} + K_0(p \|(x, y)\|) \right],$$

womit durch Kombination mit (A.28) das Verschwinden der Anwendung des Operators $\Delta + 2p\partial_y$ auf G überall außerhalb des Nullpunkts gezeigt ist. Es verbleibt noch zu zeigen

$$1 \stackrel{!}{=} \int_{\mathbb{R}} (\Delta + 2p\partial_y) G(x, y) d(x, y). \quad (\text{A.29})$$

Hierfür muß lediglich über Kugeln $B(0, \mu/p)$ um den Nullpunkt mit Radius $\mu/p > 0$ integriert und der Grenzfall für verschwindendes μ untersucht werden. Auf diesen Kugeln kann der Gaußsche Satz angewendet werden, und wir erhalten mit dem späteren Übergang zu Polarkoordinaten

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}} (\Delta + 2p\partial_y) G(x, y) d(x, y) \\ &= \lim_{\mu \rightarrow 0} \int_{\partial B(0, \mu/p)} \left\langle \nabla G(x, y), \frac{-(x, y)}{\|(x, y)\|} \right\rangle + 2p G(x, y) \frac{-y}{\|(x, y)\|} dS(x, y) \\ &= \frac{p}{2\pi} \lim_{\mu \rightarrow 0} \int_{\partial B(0, \mu/p)} e^{-py} K_1(p \|(x, y)\|) - e^{-py} K_0(p \|(x, y)\|) \frac{y}{\|(x, y)\|} dS(x, y) \\ &= \frac{p}{2\pi} \lim_{\mu \rightarrow 0} \int_0^{2\pi} \left(e^{-\mu \sin \varphi} K_1(\mu) - e^{-\mu \sin \varphi} K_0(\mu) \sin \varphi \right) \frac{\mu}{p} d\varphi \\ &= \lim_{\mu \rightarrow 0} \frac{\mu K_1(\mu)}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-\mu \sin \varphi} d\varphi - \lim_{\mu \rightarrow 0} \frac{\mu K_0(\mu)}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-\mu \sin \varphi} \sin \varphi d\varphi. \end{aligned}$$

Der Integrand im ersten Integral geht für $\mu \rightarrow 0$ gegen 1 und somit das Integral insgesamt gegen 2π . Das zweite Integral ist beschränkt. Mit den Asymptotiken für die Bessel-Funktionen bei kleinen Argumenten

$$\lim_{\mu \rightarrow 0} \mu K_0(\mu) = 0 \quad \text{und} \quad \lim_{\mu \rightarrow 0} \mu K_1(\mu) = 1, \quad (\text{A.30})$$

siehe dazu [AS72], ist damit insgesamt die Eigenschaft (A.29) gezeigt.

Die aus dem Störungsansatz resultierende Differenz in (3.17) wird durch eine Linearisierung von G um die Beiträge des ungestörten Zustands angenähert. Aus der Taylor-Entwicklung erhalten wir

$$\begin{aligned} G(x, y+h) - G(x, y) &= \partial_y G(x, y) h + O(h^2) \\ &= \frac{1}{2\pi} e^{-py} \left(-pK_0(p \|(x, y)\|) + pK_1(p \|(x, y)\|) \frac{y}{\|(x, y)\|} \right) h + O(h^2). \end{aligned}$$

In die Gleichung (3.17) ist dabei $y = \gamma_0(x) - \gamma_0(\xi)$ sowie $h = \gamma_\varepsilon(x) - \gamma_\varepsilon(\xi)$ einzusetzen, und es folgt

$$\begin{aligned} A_\varepsilon \sigma \kappa &= \frac{1}{\pi} \int_{\xi \in \mathbb{R}} \left(\gamma_\varepsilon(x) - \gamma_\varepsilon(\xi) \right) e^{-p(\gamma_0(x) - \gamma_0(\xi))} \\ &\quad \left(-pK_0\left(p \|(x - \xi, \gamma_0(x) - \gamma_0(\xi))\| \right) \right. \\ &\quad \left. + pK_1\left(p \|(x - \xi, \gamma_0(x) - \gamma_0(\xi))\| \right) \frac{\gamma_0(x) - \gamma_0(\xi)}{\|(x - \xi, \gamma_0(x) - \gamma_0(\xi))\|} \right) d\xi. \end{aligned}$$

Es wird nun der Grenzfall $p \rightarrow 0$ betrachtet, damit der Exponentialterm zu 1 wird und gemäß (A.30) der K_0 -Term zu 0 verschwindet sowie die Näherung $K_1(y) \approx \frac{1}{y}$ angewendet werden kann. Diese Vereinfachungen führen auf

$$A_\varepsilon \sigma \kappa = \frac{1}{\pi} \int_{\xi \in \mathbb{R}} \left(\gamma_\varepsilon(x) - \gamma_\varepsilon(\xi) \right) \frac{\gamma_0(x) - \gamma_0(\xi)}{\|(x - \xi, \gamma_0(x) - \gamma_0(\xi))\|^2} d\xi.$$

Wird jetzt $\gamma_0(x) = -\frac{x^2}{2}$ eingesetzt und die Oberflächenkrümmung κ an der entsprechenden Stelle ausgerechnet, so folgt

$$A_\varepsilon \sigma \frac{\left(\gamma_\varepsilon(x) - \frac{x^2}{2} \right)''}{\left(1 + \left(\gamma_\varepsilon(x) - \frac{x^2}{2} \right)^2 \right)^{\frac{3}{2}}} = \frac{1}{\pi} \int_{\xi \in \mathbb{R}} \frac{(\gamma_\varepsilon(x) - \gamma_\varepsilon(\xi)) \frac{1}{2}(x^2 - \xi^2)}{(x - \xi)^2 + \frac{1}{4}(x^2 - \xi^2)^2} d\xi.$$

Durch Kürzen erhalten wir daraus

$$A_\varepsilon \sigma \frac{\gamma_\varepsilon''(x) - 1}{(1 + (\gamma_\varepsilon' - x)^2)^{\frac{3}{2}}} = \frac{1}{2\pi} \int_{\xi \in \mathbb{R}} \frac{(\gamma_\varepsilon(x) - \gamma_\varepsilon(\xi))(x + \xi)}{(x - \xi) \left(1 + \frac{1}{4}(x + \xi)^2\right)} d\xi. \quad (\text{A.31})$$

A.5 Integralbeziehungen mit Oberflächentermen

Die Nullstellenmenge einer stetigen Level-Set-Funktion $\Phi(t, x)$ beschreibe eine bewegliche Grenzfläche $\Gamma(t)$. Sie zerlege ein Kontrollvolumen $K \subseteq \mathbb{R}^d$ in die beiden Teile $K^\pm(t)$, wobei $\text{sign}(\Phi(t, x)) = \pm 1$ in $K^\pm(t)$ gelte. Zur Herleitung der Stefan-Bedingung in Kapitel 2 berechnen wir

$$\frac{d}{dt} \int_K \text{sign}(\Phi) dx = \frac{d}{dt} \int_{K^+(t)} 1 dx + \frac{d}{dt} \int_{K^-(t)} (-1) dx.$$

Für die Integration über zeitveränderliche Gebiete ist der Reynoldssche Transportsatz anwendbar. Er lautet

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} F(t, x) dx = \int_{\Omega(t)} \partial_t F(t, x) + \text{div} \left(F(t, x) u(t, x) \right) dx,$$

wobei $F(t, x)$ eine beliebige stetig differenzierbare Funktion und $u(t, x)$ das durch die Zeitableitung der Lagrangeschen Koordinaten von $\Omega(t)$ hervorgegangene Vektorfeld ist, siehe [War99]. Wir wählen ein konstantes $F(x) = 1$ und zuerst $\Omega(t) = K^+(t)$. Damit erhalten wir

$$\frac{d}{dt} \int_{K^+(t)} 1 dx = \int_{K^+(t)} 0 + \text{div} \left(1 \cdot u(t, x) \right) dx = \int_{\partial K^+(t)} \langle u(t, x), n \rangle dS(x).$$

Da $\partial K^+(t) \setminus \Gamma(t)$ jeweils mit Abschnitten des unbewegten Randes ∂K übereinstimmt, verschwindet dort die Normalkomponente von $u(t, x)$. Auf $\Gamma(t)$ erhalten wir dagegen die Normalgeschwindigkeit V von Γ , also

$$\langle u(t, x), n \rangle = \begin{cases} 0 & \text{auf } \partial K^+(t) \setminus \Gamma(t), \\ V & \text{auf } K \cap \Gamma(t). \end{cases}$$

Für das zweite Teilgebiet $K^-(t)$ können wir in gleicher Weise vorgehen, nur daß $u(t, x)$ hierbei auf der Grenzfläche das entgegengesetzte Vorzeichen hat. Dies fassen wir zusammen zu

$$\frac{d}{dt} \int_K \text{sign}(\Phi) dx = 2 \int_{K \cap \Gamma(t)} V dS(x).$$

Durch Vertauschen von Differentiation und Integration mit Hilfe der Theorie der Distributionen folgern wir

$$\int_K \partial_t \operatorname{sign}(\Phi) dx = 2 \int_{K \cap \Gamma(t)} V dS(x), \quad (\text{A.32})$$

wobei das linke Integral als Integration bezüglich des geeigneten singulären Maßes zu interpretieren ist.

Von Interesse ist auch die Umwandlung eines Oberflächenintegrals in ein Volumenintegral mit Diracscher δ -Distribution:

$$\int_{\Omega} F(x) \|\nabla \Phi(x)\| \delta(\Phi(x)) dx = \int_{\Gamma} F(x) dS(x). \quad (\text{A.33})$$

Der Nachweis in [CHMO96] beruht darauf, daß sich jede Höhenmenge von Φ als eine Koordinatenfläche in einem transformierten Koordinatensystem auffassen läßt. Es ist nur die Betrachtung eines Volumens Ω_{μ} mit maximaler Ausdehnung $\mu > 0$ von der Fläche Γ notwendig. Es sei $\mathcal{J} : (\Phi, \Phi^{\perp}) \mapsto x$ eine solche Koordinatentransformation und $\mathcal{D}_{\mathcal{J}}$ ihr Definitionsbereich. Die übrigen Koordinaten Φ^{\perp} lassen sich dann so wählen, daß sie auf Ω_{μ} senkrecht zur Koordinate Φ sind, d.h.

$$\langle \nabla \Phi(x), \nabla \Phi_i^{\perp}(x) \rangle = 0 \quad \text{für } i \in \{1, \dots, d-1\}.$$

Für die Differentialmatrix der Rücktransformation $\mathcal{J}^{-1} : x \mapsto (\Phi, \Phi^{\perp})$ gilt

$$\begin{aligned} |\det \nabla \mathcal{J}^{-1}| &= \left| \det \begin{pmatrix} \nabla \Phi \\ \nabla \Phi^{\perp} \end{pmatrix} \right| = \sqrt{\det \begin{pmatrix} \nabla \Phi \\ \nabla \Phi^{\perp} \end{pmatrix} \det \begin{pmatrix} \nabla \Phi \\ \nabla \Phi^{\perp} \end{pmatrix}^T} \\ &= \sqrt{\det \left(\begin{pmatrix} \nabla \Phi \\ \nabla \Phi^{\perp} \end{pmatrix} (\nabla \Phi, \nabla \Phi^{\perp}) \right)} \\ &= \sqrt{\det \begin{pmatrix} \|\nabla \Phi\|^2 & 0 \\ 0 & \nabla \Phi^{\perp} \nabla \Phi^{\perp T} \end{pmatrix}} = \|\nabla \Phi\| \sqrt{\det \left(\nabla \Phi^{\perp} (\nabla \Phi^{\perp})^T \right)}. \end{aligned}$$

Es ist weiterhin möglich die zur Grenzfläche senkrechten Koordinaten Φ^{\perp} so zu wählen, daß $\sqrt{\det \left(\nabla \Phi^{\perp} (\nabla \Phi^{\perp})^T \right)} = 1$ gilt. Dann ist

$$\left| \det \nabla \mathcal{J}(\Phi, \Phi^{\perp}) \right| = \frac{1}{\left| \det \nabla \mathcal{J}^{-1}(\mathcal{J}(\Phi, \Phi^{\perp})) \right|} = \frac{1}{\|\nabla \Phi(x)\|}.$$

Mit der Transformationsformel der Integralrechnung folgern wir

$$\begin{aligned}
 & \int_{\Omega_\mu} F(x) \|\nabla\Phi(x)\| \delta(\Phi(x)) dx \\
 &= \int_{\mathcal{D}_J} F(\mathcal{J}(\Phi, \Phi^\perp)) \|\nabla\Phi\| \left| \det \nabla \mathcal{J}(\Phi, \Phi^\perp) \right| \delta(\Phi) d(\Phi, \Phi^\perp) \\
 &= \int_{\mathcal{D}_J} F(\mathcal{J}(\Phi, \Phi^\perp)) \delta(\Phi) d(\Phi, \Phi^\perp) \\
 &= \int_{\Phi=0} F(\mathcal{J}(0, \Phi^\perp)) d\Phi^\perp = \int_\Gamma F(x) dS(x),
 \end{aligned}$$

womit (A.33) nachgewiesen ist. Zusammen mit der Level-Set-Gleichung (4.1) $\Phi_t = V \|\nabla\Phi\|$ erhalten wir eine alternative unabhängige Begründung von (A.32):

$$\begin{aligned}
 \int_K \partial_t \text{sign}(\Phi) dx &= \int_K \partial_t \Phi \delta(\Phi) dx \\
 &= \int_K V \|\nabla\Phi\| \delta(\Phi) dx = \int_{K \cap \Gamma(t)} V dS(x).
 \end{aligned}$$

A.6 Modifizierte Massen und Steifigkeitsmatrizen

Der Ansatz (5.8) für die Finite-Elemente-Lösung lautet nach Einsetzen der Randwerte g_j als Koeffizienten vor den hinzugefügten Ansatzfunktionen ψ_j

$$\vartheta_h = \sum_k \zeta_k \tilde{\varphi}_k + \sum_j g_j \psi_j.$$

Bei der schwachen Formulierung des Problems (5.1) sind Skalarprodukte der Form $\langle \nabla \tilde{\varphi}_i, \nabla \vartheta_h \rangle_\Omega$ zu berechnen. Um später für den instationären Fall in Abschnitt 5.3 den Bezug der Größen zu unterschiedlichen Zeitpunkten erkennbar zu machen, sind die von ϑ_h stammenden, gegebenenfalls zeitabhängigen Terme farblich gekennzeichnet. Aus der Definition $\tilde{\varphi}_i = \varphi_i - \sum_l \varphi_i(x_l) \psi_l$ erhalten wir

$$\begin{aligned}
 \langle \nabla \tilde{\varphi}_i, \nabla \vartheta_h \rangle_\Omega &= \sum_k \langle \nabla \tilde{\varphi}_i, \zeta_k \nabla \tilde{\varphi}_k \rangle_\Omega + \sum_j \langle \nabla \tilde{\varphi}_i, g_j \nabla \psi_j \rangle_\Omega \\
 &= \sum_k \zeta_k \left\langle \nabla \left(\varphi_i - \sum_l \varphi_i(x_l) \psi_l \right), \nabla \left(\varphi_k - \sum_j \varphi_k(x_j) \psi_j \right) \right\rangle_\Omega \\
 &\quad + \sum_j g_j \left\langle \nabla \left(\varphi_i - \sum_l \varphi_i(x_l) \psi_l \right), \nabla \psi_j \right\rangle_\Omega.
 \end{aligned}$$

Nach dem Ausmultiplizieren des Skalarprodukts in der zweiten Zeile wird, wo es möglich ist, der Summationsindex von l nach j umbenannt und dann die Summation zusammengefaßt

$$\begin{aligned} \langle \nabla \tilde{\varphi}_i, \nabla \vartheta_h \rangle_\Omega &= \sum_k \zeta_k \langle \nabla \varphi_i, \nabla \varphi_k \rangle_\Omega \\ &\quad - \sum_k \zeta_k \left[\sum_j \left(\varphi_i(x_j) \langle \nabla \varphi_k, \nabla \psi_j \rangle_\Omega + \langle \nabla \varphi_i, \nabla \psi_j \rangle_\Omega \varphi_k(x_j) \right) \right. \\ &\quad \quad \left. - \sum_j \sum_l \varphi_i(x_l) \langle \nabla \psi_l, \nabla \psi_j \rangle_\Omega \varphi_k(x_j) \right] \\ &\quad + \sum_j g_j \left(\langle \nabla \varphi_i, \nabla \psi_j \rangle_\Omega - \sum_l \varphi_i(x_l) \langle \nabla \psi_l, \nabla \psi_j \rangle_\Omega \right). \end{aligned}$$

Mit Hilfe der in (5.5) und (5.10) definierten Matrizen wird dies abgekürzt zu

$$\begin{aligned} \langle \nabla \tilde{\varphi}_i, \nabla \vartheta_h \rangle_\Omega &= \sum_k \zeta_k A[i, k] \\ &\quad - \sum_k \zeta_k \left[\sum_j \left(\Phi[i, j] C[k, j] + C[i, j] \Phi[k, j] - \sum_l \Phi[i, l] B[l, j] \Phi[k, j] \right) \right] \\ &\quad + \sum_j g_j \left(C[i, j] - \sum_l \Phi[i, l] B[l, j] \right) \end{aligned}$$

und dann, soweit möglich, durch die Produkt-Matrizen ausgedrückt als

$$\begin{aligned} \langle \nabla \tilde{\varphi}_i, \nabla \vartheta_h \rangle_\Omega &= \sum_k \zeta_k \left(A[i, k] - (\Phi C^T)[i, k] - (C \Phi^T)[i, k] + (\Phi B \Phi^T)[i, k] \right) \\ &\quad + \sum_j g_j \left(C[i, j] - (\Phi B)[i, j] \right). \end{aligned} \quad (\text{A.34})$$

A.7 Level-Set-Algorithmus

Zur Bestimmung der numerischen Hamilton-Funktion ist entsprechend (6.8) durch

$$\mathcal{H}_j(\nabla \Phi_1, \dots, \nabla \Phi_{|T|}) = \frac{\sum_{T \in \mathcal{T}} \tilde{\alpha}_{jT} \int_T (H(\nabla \Phi_T) - q) dx}{\sum_{T \in \mathcal{T}} \tilde{\alpha}_{jT} \text{Vol}_d(T)} =: \frac{\Phi_j^*}{w_j^*}. \quad (\text{A.35})$$

in jedem Gitterknoten j ein Quotient von Werten Φ_j^* und w_j^* zu bestimmen. Der konkrete Algorithmus ist in diesem Fall in Anlehnung an [BS98]

$[\Phi^*, w^*] = \text{Assemble}(\Phi, V, q)$:

Initialisieren der Knotenwerte Φ_j^* und w_j^* mit 0.

Für jedes Element $T \in \mathcal{T}$ die lokalen Beiträge zu \mathcal{H}_j ermitteln:

$$\triangleright V_T := \frac{1}{\text{Vol}_d(T)} \int_T V(x) dx, \quad q_T := \frac{1}{\text{Vol}_d(T)} \int_T q(x) dx$$

$$\triangleright \nabla \Phi_T := \sum_{i=0}^d \Phi_i \nabla \varphi_i \quad \text{aus P1-Ansatzfunktionen } \{\varphi_0, \dots, \varphi_d\}$$

\triangleright Für jeden Eckpunkt von T , d.h. für $i \in \{0, \dots, d\}$:

$$\cdot K_i := - \frac{\text{Vol}_d(T) V_T \langle \nabla \Phi_T, \nabla \varphi_i \rangle}{\|\nabla \Phi_T\|}$$

$$\triangleright \mathcal{H}_T := \sum_{i=0}^d K_i \Phi_i$$

\triangleright Für jedes $i \in \{0, \dots, d\}$ und globalen Knotenindex $j := N_T(i)$:

$$\cdot \delta_{Ti} := K_i^+ \left(\sum_{k=0}^d K_k^+ \right)^{-1} \sum_{k=0}^d K_k^- (\Phi_k - \Phi_i)$$

$$\cdot \tilde{\alpha}_{jT} := \frac{\max(0, \delta_{Ti} / \mathcal{H}_T)}{\sum_{k=0}^d \max(0, \delta_{Tk} / \mathcal{H}_T)}$$

$$\cdot \Phi_j^* := \Phi_j^* + \tilde{\alpha}_{jT} (\delta_{Ti} - q_T \text{Vol}_d(T))$$

$$\cdot w_j^* := w_j^* + \tilde{\alpha}_{jT} \text{Vol}_d(T)$$

Die Bestimmung der $\tilde{\alpha}_{jT}$ setzt elementweise $\mathcal{H}_T \neq 0$ und damit $\nabla \Phi_T \neq 0$ voraus. Allerdings kann die exakte Lösung der Level-Set-Gleichung im allgemeinen Gebiete mit darin verschwindendem Gradienten ausbilden. Insbesondere ist auch bei konstanter Normalgeschwindigkeit der Grenzfläche und Initialisierung des Level-Sets mit der Abstandsfunktion die Viskositätslösung nicht notwendigerweise für alle Zeit eine Abstandsfunktion. Wir betrachten dazu das **eindimensionale Beispiel**:

$$\begin{aligned} \Phi_t - |\Phi_x| &= 0 & \text{für } x \in \mathbb{R}, t > 0, \\ \Phi(0, x) &= 1 - |x| & \text{für } t = 0. \end{aligned}$$

Die Lösung des Anfangswertproblems ist nicht

$$\Phi(t, x) = 1 + t - |x|,$$

was einer Abstandsfunktion zu zwei sich auseinander bewegenden Grenzpunkten entsprechen würde. Denn mit der Wahl der glatten Testfunktion

$$\varphi(t, x) = 1 + t^2 + 1/4$$

gilt $\Phi - \varphi \leq 0$ und $\Phi(\frac{1}{2}, 0) - \varphi(\frac{1}{2}, 0) = 0$ ist ein lokales Maximum. Es ist aber

$$\varphi_t(\frac{1}{2}, 0) - \left| \varphi_x(\frac{1}{2}, 0) \right| = 2 \frac{1}{2} - 0 = 1 > 0,$$

was der Definition einer Viskositätslösung nach Abschnitt 4.2 widerspricht. Stattdessen ist die korrekte Viskositätslösung

$$\Phi(t, x) = \min(1, 1 + t - |x|),$$

wobei zum Nachweis nur die Knickstellen bei $x = \pm t$ zu betrachten sind. Mit der Testfunktion

$$\varphi(t, x) = 1 + c(t^2 + 1/4 - x), \quad \text{für ein } c \in (0, 1),$$

gilt $\Phi - \varphi \leq 0$ und $\Phi(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) - \varphi(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) = 0$ ist ein lokales Maximum mit

$$\varphi_t(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) - \left| \varphi_x(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) \right| = 2c \frac{1}{2} - c = 0 \leq 0.$$

Diese Überlegungen können übertragen werden auf beliebige glatte Testfunktionen, die in $(1/2, 1/2)$ tangential an φ verlaufen und für die $\Phi - \varphi$ daher dort ein lokales Maximum hat, und schließlich durch Verschieben für alle Punkte $x = \pm t$ wiederholt werden.

Nun untersuchen wir das Verhalten des oben angegebenen Algorithmus in der Mitte eines sich mit konstanter Normalgeschwindigkeit ausdehnenden Kreises. Wir betrachten zunächst ein spezielles Gitter, bei dem der Gitterpunkt j der Mittelpunkt des Kreises sei und alle angrenzenden Knoten den gleichen, geringeren Wert von Φ besitzen. Damit weist der negative Gradient $-\nabla \Phi_T$ in jedem an den Knoten j angrenzenden Element T jeweils normal zur gegenüberliegenden Seite nach außen und es verschwinden jeweils die zugehörigen Koeffizienten K_i^+ , δ_{iT} und $\tilde{\alpha}_{jT}$ mit $j = N_T(i)$, vergleiche auch Abbildung 6.7. Es ist nun zwar $\Phi_j^* = 0$, aber auch $w_j^* = 0$. Damit der Algorithmus auf die Viskositätslösung führt, ist in diesem Fall die numerische Hamilton-Funktion $\mathcal{H}_j = 0$ zu

setzen. Bei leichten Veränderungen des Gitters lassen sich diese Überlegungen übertragen.

Gebiete mit verschwindendem Gradienten $\nabla\Phi_T = 0$ werden in der Regel abseits der Grenzfläche auftreten, wo eine korrekte Lösung des Anfangswertproblems der Level-Set-Gleichung nicht entscheidend für die Grenzflächenbewegung ist. Sie lassen sich durch eine von Zeit zu Zeit durchzuführende Reinitialisierung des Level-Sets auf die Abstandsfunktion beseitigen. Tritt der Fall $\nabla\Phi_T = 0$ trotzdem auf, ist sicherzustellen, daß $\tilde{\alpha}_{jT} = 0$ gesetzt wird.

Literaturverzeichnis

- [AC79] ALLEN, S. M. ; CAHN, J. W.: A microscopic theorie for antiphase boundary motion and its application to antiphase domain coarsening. In: *Acta Metallurgica* 27 (1979), S. 1085–1095. – ISSN 0001–6160
- [Alm99] ALMGREN, R. F.: Second-order phase field asymptotics for unequal conductivities. In: *SIAM J. Appl. Math.* 59 (1999), Nr. 6, S. 2086–2107. – ISSN 0036–1399
- [AS72] ABRAMOWITZ, M. (Hrsg.) ; STEGUN, I. A. (Hrsg.): *Handbook of mathematical functions*. 10. Washington, DC : United States / Department of Commerce, 1972. – ISBN 0–471–80007–4
- [AS95] ADALSTEINSSON, D. ; SETHIAN, J. A.: A fast level set method for propagating interfaces. In: *J. Comput. Phys.* 118 (1995), Nr. 2, S. 269–277. – ISSN 0021–9991
- [AS99] ADALSTEINSSON, D. ; SETHIAN, J. A.: The Fast Construction of Extension Velocities in Level Set Methods. In: *J. Comput. Phys.* 148 (1999), Nr. 1, S. 2–22. – ISSN 0021–9991
- [BB96] BISANG, U. ; BILGRAM, J. H.: Shape of the tip and formation of sidebranches of Xenon dendrites. In: *Phys. Rev. E* 54 (1996), Nr. 5, S. 5309–5326. – ISSN 1063–651X
- [BBJ+97] BASTIAN, P. ; BIRKEN, K. ; JOHANNSEN, K. ; LANG, S. ; NEUSS, N. ; RENTZ-REICHERT, H. ; WIENERS, C.: UG - A Flexible Software Toolbox for Solving Partial Differential Equations. In: *Comput. Vis. Sci.* 1 (1997), Nr. 1, S. 27–40. – ISSN 1432–9360
- [BDS+99] BECKERMANN, C. ; DIEPERS, H.-J. ; STEINBACH, I. ; KARMA, A. ; TONG, X.: Modeling melt convection in phase-field simulations of solidification. In: *J. Comput. Phys.* 154 (1999), Nr. 2, S. 468–496. – ISSN 1063–651X
- [Blu02] BLUMSCHEIN, J.: *Wärme- und Stoffübertragung in der flüssigkeitsbedüsten Wirbelschicht*. Magdeburg, Otto-von-Guericke Universität, Diplomarbeit, 2002

- [BM91] BRENER, E. ; MEL'NIKOV, V. I.: Pattern selection in two-dimensional dendritic growth. In: *Adv. in Phys.* 40 (1991), Nr. 1, S. 53–97. – ISSN 0001–8732
- [BMR01] BECKETT, G. ; MACKENZIE, J. A. ; ROBERTSON, M. L.: A Moving Mesh Finite Element Method for the Solution of Two-Dimensional Stefan Problems. In: *J. Comput. Phys.* 168 (2001), Nr. 2, S. 500–518. – ISSN 0021–9991
- [BNP98] BELLETTINI, G. ; NOVAGA, M. ; PAOLINI, M.: An example of three-dimensional fattening for linked space curves evolving by curvature. In: *Comm. Partial Differential Equations* 23 (1998), Nr. 9-10, S. 1475–1492. – ISSN 0360–5302
- [BP89] BOUISOUS, Ph. ; PELCÉ, P.: Effect of a forced flow on dendritic growth. In: *Physical Review A* 40 (1989), Nr. 11, S. 6673–6680. – ISSN 1050–2947
- [Bra97] BRAESS, D.: *Finite Elemente: Theorie, schnelle Löser und Anwendungen in der Elastizitätstheorie*. 2. Auflage. Berlin : Springer-Verlag, 1997. – ISBN 3–540–61905–4
- [Bro96] BRONSTEIN, I. N. ; ZEIDLER, E. (Hrsg.): *Taschenbuch der Mathematik*. 8. Auflage. Stuttgart : Teubner, 1996. – ISBN 3–8154–2001–6
- [BS96] BRENNER, S. ; SCOTT, L. R.: *The Mathematical Theory of Finite Element Methods*. 2nd edition. New York : Springer-Verlag, 1996. – ISBN 0–387–94193–2
- [BS98] BARTH, T. J. ; SETHIAN, J. A.: Numerical schemes for the Hamilton-Jacobi and level set equations on triangulated domains. In: *J. Comput. Phys.* 145 (1998), Nr. 1, S. 1–40. – ISSN 0021–9991
- [BS00] BÄNSCH, E. ; SCHMIDT, A.: Simulation of dendritic crystal growth with thermal convection. In: *Interfaces and Free Boundaries* 2 (2000), Nr. 1, S. 95–115. – ISSN 1463–9963
- [BT95] BRENER, E. ; TEMKIN, D.: Noise-induced sidebranching in the three-dimensional nonaxisymmetric dendritic growth. In: *Phys. Rev. E* 51 (1995), Nr. 1, S. 351–359
- [CHMO96] CHANG, Y. C. ; HOU, T. Y. ; MERRIMAN, B. ; OSHER, S.: A level set formulation of Eulerian interface capturing methods for incompressible fluid flows. In: *J. Comput. Phys.* 124 (1996), Nr. 2, S. 449–464. – ISSN 0021–9991
- [Cho93] CHOPP, D. L.: Computing minimal surfaces via level set curvature flow. In: *J. Comput. Phys.* 106 (1993), Nr. 1, S. 77–91. – ISSN 0021–9991
- [Cia91] CIARLET, P. G.: Basic Error Estimates for Elliptic Problems. In: CIARLET, P. G. (Hrsg.) ; LIONS, J. L. (Hrsg.): *Handbook of Numerical Analysis* Bd. Vol II. Amsterdam : Elsevier, 1991, S. 21–351

- [CKL⁺99] CORRIGAN, D. P. ; KOSS, M. B. ; LACOMBE, J. C. ; JAGER, K. D. ; TENNENHOUSE, L. A. ; GLICKSMAN, M. E.: Experimental measurements of sidebranching in thermal dendrites under terrestrial-gravity and microgravity conditions. In: *Phys. Rev. E* 60 (1999), Nr. 6, S. 7217–7223. – ISSN 1063–651X
- [CL83] CRANDALL, Michael G. ; LIONS, Pierre-Louis: Viscosity solutions of Hamilton–Jacobi equations. In: *Trans. Amer. Math. Soc.* 277 (1983), Nr. 1, S. 1–42. – ISSN 0002–9947
- [CL84] CRANDALL, M. G. ; LIONS, P.-L.: Two approximations of solutions of Hamilton–Jacobi equations. In: *Math. Comp.* 43 (1984), Nr. 167, S. 1–19. – ISSN 0025–5718
- [CMOS97] CHEN, S. ; MERRIMAN, B. ; OSHER, S. ; SMEREKA, P.: A simple level set method for solving Stefan problems. In: *J. Comput. Phys.* 135 (1997), Nr. 1, S. 8–29. – ISSN 0021–9991
- [EFF02] ENRIGHT, D. ; FEDKIW, R. ; FERZIGER, J.: A Hybrid Particle Level Set Method for Improved Interface Capturing. In: *J. Comput. Phys.* 183 (2002), Nr. 1, S. 83–116. – ISSN 0021–9991
- [EMOT53] ERDÉLYI ; MAGNUS ; OBERHETTINGER ; TRICOMI: *Higher transcendental functions*. New York : McGraw-Hill, 1953. – ISBN 0–07–019545–5
- [EPS03] ESCHER, J. ; PRÜSS, J. ; SIMONETT, G.: Analytic solutions for a Stefan problem with Gibbs–Thomson correction. In: *J. Reine Angew. Math.* 563 (2003), S. 1–52. – ISSN 0075–4102
- [ERT02] ENGQUIST, B. ; RUNBORG, O. ; TORNBORG, A. K.: High Frequency Wave Propagation by the Segment Projection Method. In: *J. Comput. Phys.* 178 (2002), Nr. 2, S. 373–390. – ISSN 0021–9991
- [ESS92] EVANS, L. C. ; SONER, H. M. ; SOUGANIDIS, P. E.: Phase transitions and generalized motion by mean curvature. In: *Comm. Pure Appl. Math.* 45 (1992), Nr. 9, S. 1097–1123. – ISSN 0010–3640
- [Eva98] EVANS, L. C.: *Partial differential equations*. Providence, RI : American Mathematical Society, 1998. – ISBN 0–8218–0772–2
- [Fri04] FRIED, M.: A level set based finite element algorithm for the simulation of dendritic growth. In: *Comput. Vis. Sci.* 7 (2004), Nr. 2, S. 97–110. – ISSN 1432–9360
- [Gar01] GARVAN, F.: *The Maple book*. Boca Raton : Chapman & Hall / CRC, 2001. – ISBN 1–584–88232–8
- [GKW94] GLICKSMAN, M. E. ; KOSS, M. B. ; WINSKA, E. A.: Dendritic Growth in Microgravity. In: *Phys. Rev. Lett.* 73 (1994), Nr. 4, S. 573–576. – ISSN 0031–9007
- [GM93] GLICKSMAN, M.E. ; MARSH, S.P.: The Dendrite. In: HURLE, D.J.T.

- (Hrsg.): *Handbook of Crystal Growth* Bd. Vol 1b. Amsterdam : Elsevier, 1993, S. 1075–1122
- [GMN99] GRIEBEL, M. ; MERZ, W. ; NEUNHOEFFER, T.: Mathematical modeling and numerical simulation of freezing processes of a supercooled melt under consideration of density changes. In: *Comput. Vis. Sci.* 1 (1999), Nr. 4, S. 201–219. – ISSN 1432–9360
- [Gra87] GRAYSON, M. A.: The heat equation shrinks embedded plane curves to round points. In: *J. Differ. Geom.* 26 (1987), S. 285–314. – ISSN 0022–040X
- [GRT93] GOERING, H. ; ROOS, H.-G. ; TOBISKA, L.: *Finite-Elemente-Methode: eine Einführung*. 3. Auflage. Frankfurt/Main : Harri Deutsch, 1993. – ISBN 3–8171–1107–X
- [GS67] GLICKSMAN, M. E. ; SCHAEFER, R. J.: Investigation of solid / liquid interface temperatures via isenthalpic solidification. In: *J. Cryst. Growth* 1 (1967), Nr. 5, S. 297–310. – ISSN 0022–0248
- [GT98] GILBARG, D. ; TRUDINGER, N. S.: *Elliptic partial differential equations of second order*. 2nd edition. Berlin : Springer-Verlag, 1998. – ISBN 3–540–41160–7
- [Gur93] GURTIN, M. E.: *Thermomechanics of evolving phase boundaries in the plane*. New York : The Clarendon Press Oxford University Press, 1993. – ISBN 0–19–853694–1
- [HC61] HORVAY, G. ; CAHN, J. W.: Dendritic and Spheroidal Growth. In: *Acta Metall.* 9 (1961), S. 695–705. – ISSN 0001–6160
- [HN81] HIRT, C. W. ; NICHOLS, B. D.: Volume of Fluid (VOF) Method for the Dynamics of Free Boundaries. In: *J. Comput. Phys.* 39 (1981), Nr. 1, S. 201–225. – ISSN 0021–9991
- [Hör83] HÖRMANDER, L.: *The analysis of linear partial differential operators*. Bd. I. Berlin : Springer-Verlag, 1983
- [Ihl96] IHLE, T.: *Wachstumsmuster unter diffusivem Transport*. Forschungszentrum Jülich GmbH, 1996 (Berichte des Forschungszentrums Jülich 3230). – 179 S. – ISBN 0944–2952
- [Iva47] IVANTSOV, G. P.: Temperature Field Around Spherical, Cylindrical and Needle-shaped Crystals Which Grow in Supercooled Melt. In: *Dokl. Akad. Nauk SSSR* 58 (1947), S. 567–569. – ISSN 0002–3264
- [JT96] JURIC, D. ; TRYGGVASON, G.: A front-tracking method for dendritic solidification. In: *J. Comput. Phys.* 123 (1996), Nr. 1, S. 127–148. – ISSN 0021–9991
- [KA00] KNABNER, P. ; ANGERMANN, L.: *Numerik partieller Differentialgleichungen*. Berlin : Springer-Verlag, 2000. – Eine anwendungsorientierte Einführung. – ISBN 3–540–66231–6

- [Kas96] KASSNER, K.: *Pattern formation in diffusion-limited crystal growth*. Singapore : World Scientific, 1996. – ISBN 981-021532-0
- [Kas00] KASSNER, K.: *Persönliche Mitteilung*. 2000
- [Knu97] KNUTH, D. E.: *The art of computer programming*. Bd. 1. Fundamentale algorithms. 3. Auflage. Reading, Mass. : Addison-Wesley, 1997. – ISBN 0-201-89683-4
- [Kob92] KOBAYASHI, R.: Simulations of Three Dimensional Dendrites. In: KAI, S. (Hrsg.): *Pattern formation in complex dissipative systems*. Singapore : World Scientific, 1992, S. 121–128. – ISBN 981-020879-0
- [KR88] KERNIGHAN, B. W. ; RITCHIE, D. M.: *The C programming language*. 2. Auflage. Englewood Cliffs, N.J. : Prentice Hall, 1988. – ISBN 0-13-110370-9
- [KR98] KARMA, Alain ; RAPPEL, Wouter-Jan: Quantitative phase-field modelling of dendritic growth in two and three dimensions. In: *Phys. Rev. E* 57 (1998), Nr. 4, S. 4323–4349. – ISSN 1063-651X
- [KR99] KARMA, Alain ; RAPPEL, Wouter-Jan: Phase-field model of dendritic sidebranching with thermal noise. In: *Phys. Rev. E* 60 (1999), Nr. 4, S. 3614–3625. – ISSN 1063-651X
- [KS98] KIMMEL, R. ; SETHIAN, J. A.: Computing geodesic paths on manifolds. In: *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 95 (1998), Nr. 15, S. 8431–8435. – ISSN 1091-6490
- [L⁺99] LACOMBE, J. C. u. a.: Implications of the interface shape on steady-state dendritic crystal growth. In: *J. Cryst. Growth* 206 (1999), S. 331–344
- [L⁺02] LACOMBE, J. C. u. a.: Evidence for tip velocity oscillations in dendritic solidification. In: *Phys. Rev. E* 65 (2002), Nr. 031604, S. 1–6. – ISSN 1063-651X
- [Lan80] LANGER, J. S.: Instabilities and pattern formation in crystal growth. In: *Rev. Mod. Phys.* 52 (1980), Nr. 1, S. 695–705. – ISSN 1539-0756
- [Lan87] LANGER, J. S.: Dendritic sidebranching in the three-dimensional symmetric model in the presence of noise. In: *Phys. Rev. A* 36 (1987), Nr. 7, S. 3350–3358. – ISSN 1539-0756
- [LCHR03] LANG, J. ; CAO, W. ; HUANG, W. ; RUSSELL, R. D.: A two-dimensional moving finite element method with local refinement based on a posteriori error estimates. In: *Appl. Numer. Math.* 46 (2003), Nr. 1, S. 75–94. – ISSN 0168-9274
- [Leb73] LEBEDEW, N. N.: *Spezielle Funktionen und ihre Anwendung*. Mannheim : Bibliograph. Inst. , 1973. – ISBN 3-411-01423-7
- [LKG99] LACOMBE, J. C. ; KOSS, M. B. ; GLICKSMAN, M. E.: Nonconstant tip velocity in microgravity dendritic growth. In: *Phys. Rev. Lett.* 83 (1999), Nr. 15, S. 2997–3000. – ISSN 0031-9007

- [LKP01] LO, T. S. ; KARMA, A. ; PLAPP, M.: Phase-field modeling of microstructural pattern formation during directional solidification of peritectic alloys without morphological instability. In: *Phys. Rev. E* 63 (2001), Nr. 031504, S. 1–15. – ISSN 1063–651X
- [LL94] LEVEQUE, R. J. ; LI, Z.: The immersed interface method for elliptic equations with discontinuous coefficients and singular sources. In: *SIAM J. Numer. Anal.* 31 (1994), Nr. 4, S. 1019–1044. – ISSN 0036–1429
- [LM78] LANGER, J. S. ; MÜLLER-KRUMBHAAR, H.: Theory of dendritic growth. In: *Acta Metall.* 26 (1978), Nr. 11, S. 1681–1697. – ISSN 0001–6160
- [Luc90] LUCKHAUS, S.: Solutions for the two-phase Stefan problem with the Gibbs-Thomson law for the melting temperature. In: *European J. Appl. Math.* 1 (1990), Nr. 2, S. 101–111. – ISSN 0956–7925
- [MC87] MACKINNON, R.J. ; CAREY, G.F.: Treatment of material discontinuities in finite element computations. In: *Int. J. Numer. Methods Eng.* 24 (1987), S. 393–417. – ISSN 0271–2091
- [Mei92] MEIRMANOV, A. M.: *The Stefan problem*. Berlin : Walter de Gruyter, 1992. – ISBN 0–201–89683–4
- [MK04] MEDVEDEV, D. ; KASSNER, K.: *Lattice-Boltzmann scheme for dendritic growth in presence of convection*. Preprint Otto-von-Guericke Universität Magdeburg, 2004
- [MM81] MILLER, K. ; MILLER, R. N.: Moving finite elements. I. In: *SIAM J. Numer. Anal.* 18 (1981), S. 1019–1032. – ISSN 0036–1429
- [Mos04] MOSHAGEN, T.: *Phasefeldmodell für Kristallwachstum*. Magdeburg, Otto-von-Guericke Universität, Diplomarbeit, 2004
- [MS63] MULLINS, W. W. ; SEKERKA, R. F.: Morphological Stability of a Particle Growing by Diffusion or Heat Flow. In: *J. Appl. Phys.* 34 (1963), Nr. 2, S. 323–329. – ISSN 0021–8979
- [MT01] MATTHIES, G. ; TOBISKA, L.: Simulation of free surfaces of magnetic liquids. In: HANDLOVICOVA, A. (Hrsg.) u. a.: *Algoritmy 2000. Proceedings of contributed papers and posters*. Bratislava : Slovenská Technická Univ. , 2001, S. 1–10. – ISBN 80–227–1391–0
- [Nau84] NAUMANN, J.: *Einführung in die Theorie parabolischer Variationsungleichungen*. Leipzig : Teubner, 1984
- [NG74] NASH, G. E. ; GLICKSMAN, M. E.: Capillarity-limited steady-state dendritic growth –I. Theoretical development. In: *Acta Metall.* 22 (1974), Nr. 10, S. 1283–1290. – ISSN 0001–6160
- [NW00] NESTLER, B. ; WHEELER, A.A.: A multi-phase-field model of eutectic and peritectic alloys: Numerical simulation of growth structures. In: *Phys. D* 138 (2000), Nr. 1-2, S. 114–133. – ISSN 0167–2789

- [OF02] Osher, S. ; FEDKIW, R.: *Level set methods and dynamic implicit surfaces*. New York : Springer-Verlag, 2002. – ISBN 0–387–95482–1
- [OS88] Osher, S. ; SETHIAN, J. A.: Fronts propagating with curvature-dependent speed: Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations. In: *J. Comput. Phys.* 79 (1988), Nr. 1, S. 12–49. – ISSN 0021–9991
- [Øst03] ØSTERBY, O.: Five ways of reducing the Crank-Nicolson oscillations. In: *BIT* 43 (2003), Nr. 4, S. 811–822. – ISSN 0006–3835
- [Pel88] PELCÉ, Pierre (Hrsg.): *Dynamics of curved fronts*. New York : Academic Press, 1988. – xv, 514 S. – ISBN 0–12–550355–5
- [Pes77] PESKIN, C. S.: Numerical analysis of blood flow in the heart. In: *J. Comput. Phys.* 25 (1977), S. 220–252. – ISSN 0021–9991
- [PF90] PENROSE, O. ; FIFE, P.C.: Thermodynamically consistent models of phase-field type for the kinetic of phase transitions. In: *Phys. D* 43 (1990), Nr. 1, S. 44–62. – ISSN 0167–2789
- [PF93] PENROSE, O. ; FIFE, P.C.: On the relation between the standard phase-field model and a “thermodynamically consistent” phase-field model. In: *Phys. D* 69 (1993), Nr. 1-2, S. 107–113. – ISSN 0167–2789
- [PGD99] PROVATAS, Nikolas ; GOLDENFELD, Nigel ; DANTZIG, Jonathan: Adaptive Mesh Refinement Computations of Solidification Microstructures Using Dynamic Data Structures. In: *J. Comput. Phys.* 148 (1999), Nr. 1, S. 265–290. – ISSN 0021–9991
- [PK00] PLAPP, M. ; KARMA, A.: Multiscale Finite-Difference-Diffusion-Monte-Carlo Method for Simulating Dendritic Solidification. In: *J. Comput. Phys.* 165 (2000), Nr. 2, S. 592–619. – ISSN 1063–651X
- [QTV00] QUARTERONI, A. ; TUVERI, M. ; VENEZIANI, A.: Computational vascular fluid dynamics: Problems, models and methods. In: *Comput. Vis. Sci.* 2 (2000), Nr. 4, S. 163–197. – ISSN 1432–9360
- [Rad91] RADKEVICH, E. V.: The Gibbs-Thompson correction and conditions for the existence of a classical solution of the modified Stefan problem. In: *Sov. Math., Dokl.* 43 (1991), Nr. 1, S. 274–278. – ISSN 0197–6788
- [RS00] RUSSO, G. ; SMEREKA, P.: A Remark on Computing Distance Functions. In: *J. Comput. Phys.* 163 (2000), Nr. 1, S. 51–67. – ISSN 0021–9991
- [Rud91] RUDIN, W.: *Functional analysis*. 2nd edition. New York : McGraw-Hill, 1991. – ISBN 0–07–054236–8
- [RY95] RICHARDS, J. ; YOUNG, H.: *Theory of distributions : a non-technical introduction*. Cambridge : Cambridge Univ. Press, 1995. – ISBN 0–521–55890–5

- [Sch93] SCHMIDT, A.: *Die Berechnung dreidimensionaler Dendriten mit Finiten Elementen*. Freiburg im Br., Albert-Ludwigs-Universität, Dissertation, 1993
- [Sch02] SCHWEIZER, B.: A stable time discretization of the Stefan problem with surface tension. In: *SIAM J. Numer. Anal.* 40 (2002), Nr. 3, S. 1184–1205. – ISSN 0036–1429
- [Sch03] SCHMIDT, A.: A Multi-mesh Finite Element Method for Phase-field Simulations. In: EMMERICH (Hrsg.) u. a.: *Interfacial and Transport Dynamics*. Berlin : Springer-Verlag, 2003, S. 208–217. – ISBN 3–540–40367–1
- [Set99] SETHIAN, J. A.: *Level set methods and fast marching methods*. 2nd edition. Cambridge : Cambridge University Press, 1999. – *Evolving interfaces in computational geometry, fluid mechanics, computer vision, and materials science*. – ISBN 0–521–64557–3
- [SGM88] SAITO, Y.; GOLDBECK-WOOD, G.; MÜLLER-KRUMBHAAR, H.: Numerical simulation of dendritic growth. In: *Phys. Rev. A* 38 (1988), Nr. 4, S. 2148–2157. – ISSN 1050–2947
- [SP00] SUSSMAN, M.; PUCKETT, E. G.: A coupled level set and volume-of-fluid method for computing 3D and axisymmetric incompressible two-phase flows. In: *J. Comput. Phys.* 162 (2000), Nr. 2, S. 301–337. – ISSN 0021–9991
- [SS92] SETHIAN, J. A.; STRAIN, J.: Crystal growth and dendritic solidification. In: *J. Comput. Phys.* 98 (1992), Nr. 2, S. 231–253. – ISSN 0021–9991
- [SSO94] SUSSMAN, M.; SMERKA, P.; OSHER, S.: A Level Set Approach for Computing Solutions to Incompressible Two-Phase Flow. In: *J. Comput. Phys.* 114 (1994), Nr. 1, S. 146–159. – ISSN 0021–9991
- [TA00] TÖNHARDT, R.; AMBERG, G.: Dendritic growth of randomly oriented nuclei in a shear flow. In: *J. Cryst. Growth* 213 (2000), Nr. 1-2, S. 161–187. – ISSN 0022–0248
- [TBKL01] TONG, X.; BECKERMANN, C.; KARMA, A.; LI, Q.: Phase-field simulations of dendritic crystal growth in a forced flow. In: *Phys. Rev. E* 63 (2001), Nr. 061601, S. 468–496. – ISSN 1063–651X
- [TE03] TORNBORG, A. K.; ENGQUIST, B.: The Segment Projection Method for Interface Tracking. In: *Commun. Pure Appl. Math.* 56 (2003), Nr. 1, S. 47–79. – ISSN 0010–3640
- [Tho97] THOMÉE, V.: *Galerkin Finite Element Methods for Parabolic Problems*. Berlin : Springer-Verlag, 1997. – ISBN 3–540–63236–0
- [Tor02] TORNBORG, A. K.: Multi-dimensional quadrature of singular and discontinuous functions. In: *BIT* 42 (2002), Nr. 3, S. 644–669. – ISSN 0006–3835

- [Tri70] TRIVEDI, R.: Growth of dendritic needles from a supercooled melt. In: *Acta Metall.* 18 (1970), S. 287–296. – ISSN 0001–6160
- [UMK03] UDAYKUMAR, H. S. ; MARELLA, S. ; KRISHNAN, S: Sharp-interface simulation of dendritic growth with convection: benchmarks. In: *Int. J. Heat Mass Transfer* 46 (2003), Nr. 14, S. 2615–2627. – ISSN 0017–9310
- [UMS99] UDAYKUMAR, H. S. ; MITTAL, R. ; SHYY, W.: Computation of Solid-Liquid Phase Fronts in the Sharp Interface Limit on Fixed Grids. In: *J. Comput. Phys.* 153 (1999), Nr. 2, S. 535–574. – ISSN 0021–9991
- [Ver96] VERFÜRTH, R.: *A review of a posteriori error estimation and adaptive mesh-refinement techniques*. Chichester : Wiley-Teubner, 1996. – ISBN 3–519–02605–8
- [Vis96] VISINTIN, A.: *Models of phase transitions*. Boston, MA : Birkhäuser Boston Inc. , 1996. – ISBN 0–8176–3768–0
- [War99] WARNECKE, G.: *Analytische Methoden in der Theorie der Erhaltungsgleichungen*. Stuttgart-Leipzig : Teubner, 1999. – ISBN 3–519–00235–3
- [Wei] WEISSTEIN, E.W.: <http://mathworld.wolfram.com/>. – Online-Ressource. – From MathWorld—A Wolfram Web Resource.
- [WS+93] WANG, S.-L. ; SEKERKA, R.F. u. a.: Thermodynamically-consistent phase-field models for solidification. In: *Phys. D* 69 (1993), Nr. 1-2, S. 189–200. – ISSN 0167–2789
- [WW96] WHITTAKER, E. T. ; WATSON, G. N.: *A course of modern analysis*. 4. Ausgabe. Cambridge University Press, 1996. – ISBN 0–521–58807–3
- [XY99] XU, Jian-Jun ; YU, Dong-Sheng: Examinations of dendritic growth theories with some latest numerical simulations and experimental data. In: *J. Cryst. Growth* 198/199 (1999), S. 43–48
- [ZH01] ZHAO, P. ; HEINRICH, J. C.: Front-Tracking Finite Elemente Method for Dendritic Solidification. 173 (2001), Nr. 2, S. 765–796. – ISSN 0021–9991