SFB 609

Teilprojekt A4

Kontrolle leitfähiger Fluide mit Methoden der mathematischen Optimierung

Kontrolle freier Ränder bei der Erstarrung von Kristallschmelzen

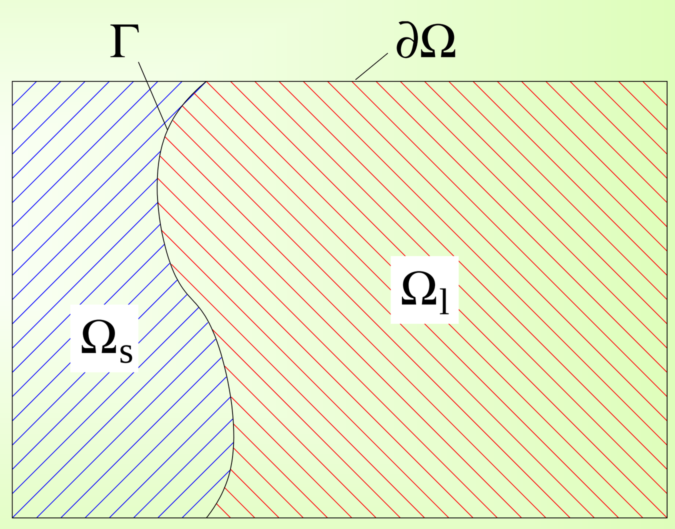
Michael Hinze, Stefan Ziegenbalg

Institut für Numerische Mathematik

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DRESDEN

Problemstellung

Gegeben ist ein geschlossener Zylinder Ω mit einer Schmelze, bestehend aus einer festen Phase Ω_s und einer flüssigen Phase Ω_l. Ziel ist es, den freien Rand Γ (Interface zwischen fester und der flüssiger Phase) mit Hilfe der Randtemperatur auf $\partial\Omega$ zu steuern.



Modell

- Wärmeleitungsgleichung innerhalb der Phasen Ω_s und Ω_l:

$$\partial_t u = D_s \Delta u \text{ in } \Omega_s \quad \text{und} \quad \partial_t u = D_l \Delta u \text{ in } \Omega_l \tag{1}$$

(u ist die normierte Temperatur; D_l, D_s sind Materialkonstanten).

- Erhaltungsgleichung für an Γ freiwerdende Schmelzwärme:

$$V_\Gamma = k_s \partial_\mu u\big|_{\Omega_s} - k_l \partial_\mu u\big|_{\Omega_l} \quad \text{auf } \Gamma, \quad \text{(Stefan-Bedingung)} \tag{2}$$

(V_Γ ist die Geschwindigkeit des freien Randes in Richtung der Normalen μ; k_l,k_s sind Materialkonstanten).

- Gibbs-Thomson-Gesetz beschreibt das thermodynamische Gleichgewicht am freien Rand:

$$0 = u + \varepsilon_C(\mu) C_\Gamma + \varepsilon_V(\mu) V_\Gamma \qquad \text{auf } \Gamma \tag{3}$$

(C_Γ ist die mittlere Krümmung; ε_C,ε_C sind materialabhängig).

- Startbedingungen zum Zeitpunkt $t = 0$:

$$u = u_0 \quad \text{in } \Omega \qquad \Gamma = \Gamma_0\,. \tag{4}$$

- Randbedingung: $\frac{1}{\alpha}\partial_\eta u + u = u_{b0} + \beta u_{bc}$ auf $\partial\Omega$ (5)

(Die Randtemperatur wird in einen festen Anteil u_{b0} (z.B. einen Erfahrungswert) und einen steuerbaren Anteil u_{bc} zerlegt. Mit der Funktion β kann der Einfluss der Steuergröße u_{bc} gewichtet werden, $\alpha \to \infty$ entspricht Dirichlet Kontrolle).

Methode

Freier Rand wird als Graph dargestellt: $\Gamma(t) = \{(x,\ f(t,x))^T\}$. Es soll das Funktional

$$J(f, u_{bc}) = g(u_{bc}) := \frac{1}{2}\int_0^T \int_X (f - \overline{f})^2 + \frac{\lambda}{2}\int_0^T \int_{\partial\Omega} \beta u_{bc}^2$$

unter den Nebenbedingungen (1) bis (5) minimiert werden, wobei $\overline{f}$ die gewünschte Evolution des freien Randes bezeichnet. Mit der Lagrange-Technik wird ein adjungiertes System hergeleitet, mit dessen Lösung der Gradient $g'(u_{bc})$ charakterisiert und nach geeigneter Diskretisierung numerisch günstig berechnet werden kann. Der Algorithmus zur Steuerung des freien Randes lautet:

$u_{bc} = 0$, berechnen von $u^{(0)}$, $f^{(0)}$ (Vorwärtssimulation)
Für alle $1 \le k \le k_{\max}$
Lösung des adjungierten GLS, benötigt $u^{(k-1)}$, $f^{(k-1)}$
Berechnen des Gradienten $g'(u_{bc}^{(k-1)}) := v^{(k)}$
Strahlminimierung: $g(u_{bc}^{(k-1)} + s_k v^{(k)}) = \min_{s_k}!$
$u_{bc}^{(k)} = u_{bc}^{(k-1)} + s_k v^{(k)}$, berechnen von $u^{(k)}$, $f^{(k)}$

Ziele

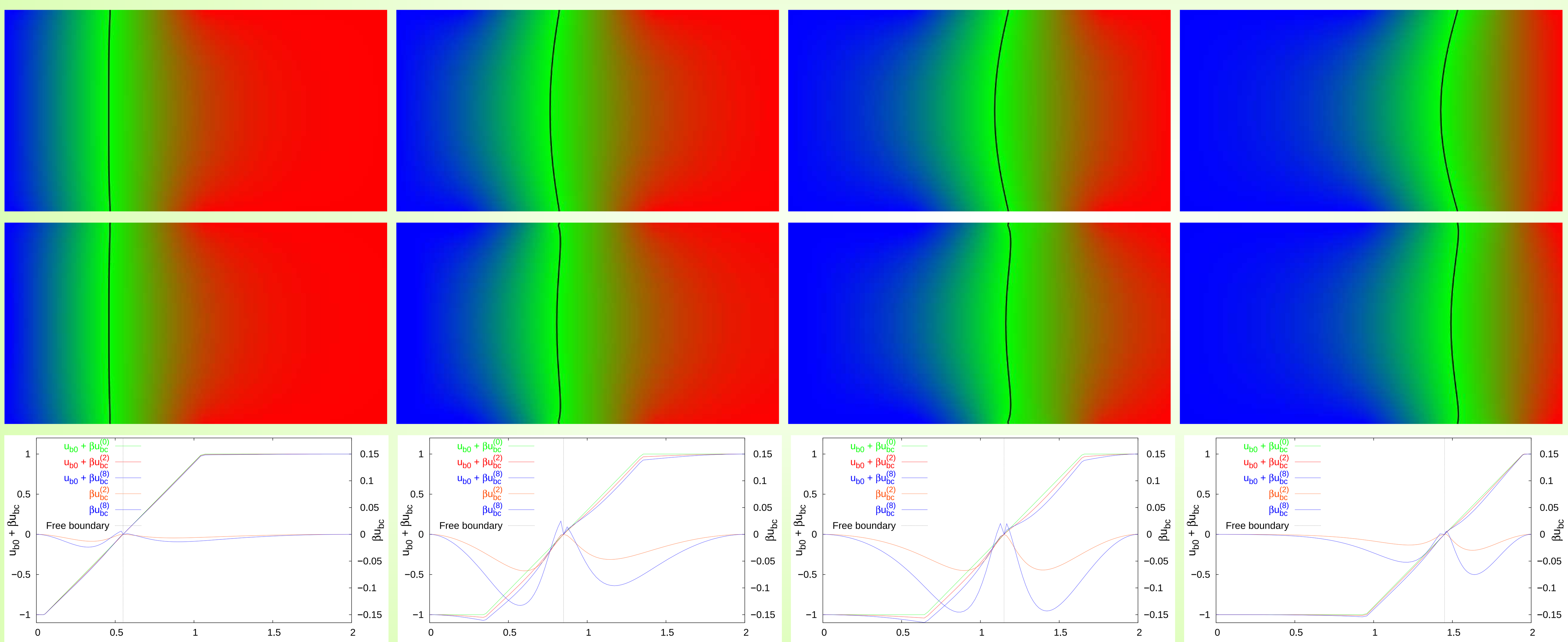
Langfristig: Steuerung der Kristallisation komplexer Systeme (Strömung, Magnetfeldeinfluss, Strahlung, etc.)

Mittelfristig: Steuerung des freien Randes mit komplexen Kristallisationsmodellen (z.B. unter Berücksichtigung von Strömung)

Gegenwärtig: Optimalsteuerung des freien Randes bei Erstarrungsprozessen für eine Modellkonfiguration

Ergebnisse

Es soll ein gerader freier Rand angesteuert werden, d.h. $\overline{f}(t,x) = \overline{f}(t)$. Die Temperaturverteilung und der freie Rand werden für jeweils vier verschiedene Zeitwerte dargestellt. Die Farben der Bilder geben die Temperatur an (blau: kalt, rot:warm). Der freie Rand wird durch eine schwarze Linie gekennzeichnet.



$u^{(0)}$, $f^{(0)}$: Temperatur in Ω und freier Rand ohne Kontrolle ($u_{bc} = 0$).

$u^{(8)}$, $f^{(8)}$: Temperatur in Ω und freier Rand mit Kontrolle nach 8 Iterationen.

Randtemperatur auf der Mantelfläche des Zylinders Ω für $k = 0, 2, 8$ und Steuertemperatur u_{bc} für $k = 2, 8$.