

ŠKODA, koncernový podnik, PLZEŇ
ÚSTŘEDNÍ VÝZKUMNÝ ÚSTAV
Výzkum strojírenský

"Duševní majetek k.p. ŠKODA - nelze využít bez jeho souhlasu"

Doc. RNDr. Jindřich Nečas, DrSc. MDT: 519.3:539.383
Ing. RNDr. Ivan Hlaváček, DrSc.
Ing. RNDr. Tomáš Roubíček, CSc.
RNDr. J. Voldřich, CSc.

Matematické modely mechaniky
kontinua
část I

Zakázkové číslo: 715-092-3019/7

Odpovědný pracovník: RNDr. P. Martinec Číslo zprávy: Sz 4592/V
Vedoucí střediska : Ing. V. Hauer, CSc. Druh zprávy: průběžná
Vedoucí odboru : Ing. M. Balda, DrSc. Číslo kopie: 7.
Ředitel ústavu : Ing. Z. Kletečka, CSc.

Stran: 48

Tabulek: -

Obrázků: 1

V Plzni, prosinec 1987

MDT: 519.3:539.383

Sz 4592 V

Nečas J., RNDr., Doc., DrSc.
Hlaváček I., RNDr., Ing., DrSc.
Roubíček T., Ing., RNDr., CSc.
Voldřich J., RNDr., CSc.

Matematické modely mechaniky kontinua - část I

Plzeň, ŠKODA-ÚVZÚ-VS, 1987

48 stran, - tabulek, 1 obrázek

Ve zprávě je zformulováno slabé řešení nelineární rovnice vedení tepla popisující teplotní pole, které vzniká při tuhnutí odlitků ve formě. Uvažuje se též prostředí formy případně chladítek, úloha je charakterizována přítomností fázových změn a neapojitě se měnícími vlastnostmi prostředí. Je dokázána existence slabého řešení a konvergence numerických aproximací implementovatelných na počítači. Je uveden popis programové realizace a výsledky modelového příkladu.

prosinec 1987

<u>Obsah</u>	list
1. Formulace rovnice vedení tepla při fázových přeměnách ve skokově nehomogenních prostředích . . .	4
2. Diskretizace	8
3. Aproximace teploty slabě v prostoru $L^2(0,T;H^1(\Omega))$	17
4. Aproximace teploty v "lepších" prostorech, speciální případy	28
5. Implementace diskretizovaného modelu	36
6. Řešení systému rovnic	39
7. Realizace popsaného modelu	41
8. Testovací příklad	45
Literatura	47

Klíčová slova:

TUHNUTÍ ODLITKŮ, FORMA, CHLADÍTKO, TEPLTNÍ POLE, SLABÉ
ŘEŠENÍ

1. Formulace rovnice vedení tepla při fázových přeměnách ve skokově nehomogenních prostředích

Tato zpráva si kladě za cíl formulovat rovnice, dokázat kvalitativní výsledky existence jejich řešení a konvergence přibližných řešení, a nakonec popsat konkrétní počítačový algoritmus pro případ teplotního pole vznikajícího při tuhnutí odlitku. Situace je schematicky znázorněna na obr. 1. Úloha je charakteristická dvěma jevy: i) v některých oblastech může probíhat fázová přeměna doprovázená uvolňováním či absorpcí tepla (zde půjde o tuhnutí oceli, při kterém se uvolňuje skupenské teplo tání), ii) prostředí je nehomogenní, přičemž jeho vlastnosti se mění nespojitě (např. na styku oceli s formou, která je ze slévárenského písku, se tepelné vlastnosti prostředí mění skokem). Kombinace obou těchto jevů přináší určité specifické těžkosti. Zdůrazněme, že bude zanedbáno zejména proudění v kapalně fázi oceli (tavenině), geometrické změny vznikající při tuhnutí oceli a nehomogenita v rámci jednotlivých oblastí (speciálně tedy bude zanedbán vliv změn složení oceli, ke kterým dochází při tuhnutí, na teplotu tuhnutí). Je potom přirozené takto zjednodušenou fázovou přeměnu popsat jako tzv. Stefanovu úlohu.

Historie Stefanovy úlohy samá do minulého století, kdy bylo studováno pro vojenské účely tání ledovců. Zejména v posledních několika desetiletích byla Stefanova úloha mnohokrát aplikována v nejrůznějších technických situacích a též podrobena intenzivnímu teoretickému studiu; viz seznam literatury, který ovšem z tohoto hlediska naprosto není úplný. Stefanova úloha v nehomogenním prostředí byla zkoumána v [9], avšak pouze v situaci, kde se vlastnosti prostředí mění spojitě (a dokonce hladce).

Formulujeme úlohu: Nechť se vyšetřovaná oblast $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ skládá z m podoblastí Ω_i , $i=1, \dots, m$. Každá Ω_i nechť má Lipschitzovskou hranici, skládající se z části Γ_i , kterou sousedí Ω_i s ostatními oblastmi Ω_j (samozřejmě, Γ_{ij} může být i prázdná). V jednotlivých oblastech budeme předpokládat, že prostředí je homogenní a izotropní. Teplotu jako funkci prostoru a času označíme $\theta = \theta(x, t)$, $x \in \Omega$, $t \in (0, T)$, $T > 0$. V každé oblasti Ω_i

platí nelineární rovnice vedení tepla

$$(1.1) \quad c_i(\theta) \partial\theta / \partial t = \nabla(k_i(\theta) \nabla\theta) \quad \text{na } \Omega_i = \Omega_i \times (0, T).$$

Koeficient $c_i = c_i(\theta)$ je součin měrné tepelné kapacity a hustoty materiálu v oblasti Ω_i (fyzikální rozměr je J/m^3K) a $k_i = k_i(\theta)$ je tepelná vodivost (fyzikální rozměr W/mK). Stefanova úloha vznikne formálně tehdy, obsahuje-li koeficient c_i Diracovu distribuci δ , tj.:

$$c_i(\theta) = c_i^0 + L \cdot \delta(\theta - \theta_S),$$

kde L je měrné latentní teplo (rozměr J/m^3) a θ_S je teplota, při které dochází k tomuto přechodu. Takto se formálně popisuje dvoufázová Stefanova úloha v oblasti Ω_i (při n -fázové úloze zřejmě c_i obsahuje $n-1$ Diracových distribucí).

Při fázových přeměnách je fyzikálně přirozenější popsat stav materiálu nikoli pomocí teploty, což není jednoznačné, ale pomocí tzv. hustoty vnitřní energie (entalpie), označme ji $w = w(x, t)$. Fyzikální rozměr entalpie je J/m^3 . V entalpické formulaci se (1.1) přepíše jako:

$$(1.2) \quad \partial w / \partial t = A \beta_i(w), \quad \theta = \alpha_i(w) \quad \text{na } \Omega_i,$$

kde pro funkce $\alpha_i, \beta_i : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ platí následující vztahy (ve smyslu distribucí):

$$(1.3) \quad d(\alpha_i^{-1})/d\theta = c_i(\theta), \quad d(\beta_i \cdot \alpha_i^{-1})/d\theta = k_i(\theta).$$

Tyto vztahy se snadno dostanou dosazením $w = \alpha_i^{-1}(\theta)$ do (1.2), provedením naznačených derivací, a srovnáním s (1.1). Ze vztahů (1.3) se dají pro zadané teplotní závislosti tepelných parametrů c_i a k_i sestavit funkce α_i a β_i , což je obzvláště jednoduché v případě, že c_i a k_i jsou po částech konstantní, neboť pak jsou α_i a β_i po částech lineární (tento případ byl také implementován na počítači). Veličina $\beta_i(w)$ se nazývá teplota po Kirchoffově

transformaci (rozměr J/ms), a nemá zřejmý fyzikální smysl.

Zbývá zadat počáteční a okrajové podmínky. Počáteční podmínky je fyzikálně rozumné zadávat entalpií, nikoli teplotou:

$$(1.4) \quad w(x,0) = w_0(x), \quad x \in \Omega.$$

Na hranici Γ_i budeme uvažovat nelineární Newtonovy okrajové podmínky: $k_i(\theta) \partial \theta / \partial \nu + g_i(x,t,\theta) = 0$, kde ν je vnější normála. V entalpické formulaci se tato podmínka ovšem запиše takto:

$$(1.5) \quad \partial \beta_i(w) / \partial \nu + g_i(\dots, \alpha_i(w)) = 0 \quad \text{na } \Sigma_i = \Gamma_i \times (0,T).$$

Na hranici Γ_{ij} je přirozené požadovat rovnost tepelných toků, což vyjadřuje skutečnost, že rozhraní má nulovou tepelnou kapacitu. Vznikne tak "přechodová" podmínka Neumannova typu:

$$(1.6) \quad \partial \beta_i(w) / \partial \nu = - \partial \beta_j(w) / \partial \nu \quad \text{na } \Sigma_{ij} = \Gamma_{ij} \times (0,T).$$

Na orientaci normály ν k Γ_{ij} zde zřejmě nezáleží. Druhou podmínkou na této hranici bude rovnost teplot, což vyjadřuje to, že rozhraní neklade průchodu tepelného toku žádný odpor. Dostáváme tak "přechodovou" podmínku Dirichletova typu:

$$(1.7) \quad \alpha_i(w) = \alpha_j(w) \quad \text{na } \Sigma_{ij}.$$

Pro stručnost budeme obvyklý skalární součin, resp. normu v prostoru $L^2(X)$ značit $(\dots)_X$, resp. $\|\cdot\|_X$. Např. $(u,v)_Q$ bude značit $\int_Q u \cdot v \, dxdt$. Odvodíme slabou formulaci úlohy (1.2)-(1.4)-(1.5)-(1.6)-(1.7). Pro každou funkci $z \in C^0(\bar{Q}) \cap H^1(Q)$, tj. z je spojitě diferencovatelná v $Q = \Omega \times (0,T)$ a spojitě prodloužitelná na uzávěr \bar{Q} , dostaneme z (1.2) identitu

$$\sum_{i=1}^m (\partial w / \partial t - \Delta \beta_i(w), z)_{Q_i} = 0.$$

Použitím integrace per partes v čase, jednou Greenovy věty v prostoru, počáteční podmínky (1.4), okrajových podmínek (1.5) a přechodových podmínek (1.6) dostaneme identitu:

$$(1.8) \quad \sum_{i=1}^m ((w, \partial z / \partial t)_{Q_i} - (\nabla \beta_i(w), \nabla z)_{Q_i} - (g_i(\alpha_i(w)), z)_{\Sigma_i} + (w_0, z(\cdot, 0))_{\Omega_i} - (w(\cdot, T), z(\cdot, T))_{\Omega_i}) = 0.$$

Členy typu $(\partial \beta_i(w) / \partial \nu, z)_{\Sigma_{ij}}$ se v (1.8) nevyskytují, neboť se navzájem vyruší v důsledku podmínky (1.6) a spojitosti testovací funkce z na Σ_{ij} . Zavedeme konvenci: $\beta(w)$ bude funkce definovaná s.v. na Q předpisem $\beta(w)(x, t) = \beta_i(w)(x, t)$ je-li $x \in \Omega_i$. Analogicky definujeme $\alpha(w)$ s.v. na Q , $g(\alpha(w))$ s.v. na $\Sigma = \bigcup_{i=1}^m \Sigma_i$, atd. Integrální identitu můžeme potom přepsat do tvaru:

$$(w, \partial z / \partial t)_Q - \sum_{i=1}^m (\nabla \beta(w), \nabla z)_{Q_i} - (g(\alpha(w)), z)_{\Sigma} + (w_0, z(\cdot, 0))_{\Omega} = (w(\cdot, T), z(\cdot, T))_{\Omega}.$$

Podmínka (1.7) bude respektována explicitně podmínkou (1.9) níže. Dostáváme se tak k definici slabého řešení:

Definice 1.1. Funkci $w \in L^2(Q)$ nazveme slabým řešením Stefanovy úlohy s Neumann-Dirichletovými přechodovými podmínkami, tj. úlohy (1.2)-(1.4)-(1.5)-(1.6)-(1.7), jestliže

$$(1.9) \quad \alpha(w) \in L^2(0, T; H^1(\Omega))$$

a následující integrální identita platí pro všechna $z \in H^1(Q)$ takové, že $z(\cdot, T) = 0$ (ve smyslu stop):

$$(1.10) \quad (w, \partial z / \partial t)_Q - \sum_{i=1}^m (\nabla \beta(w), \nabla z)_{Q_i} - (g(\alpha(w)), z)_{\Sigma} + (w_0, z(\cdot, 0))_{\Omega} = 0,$$

kde funkce na Σ a Ω jsou uvažovány ve smyslu stop; speciálně v důsledku (1.9) je stopa $\alpha(w)$ na Σ v prostoru $L^2(0, T; H^{1/2}(\Gamma)) \subset L^2(\Sigma)$.

Zásadní problém, na který naráží použití standardních technik pro Stefanovy úlohy v homogenních prostředích na úlohy s Neumann-Dirichletovými přechodovými podmínkami, je ten, že Kirchhoffova teplota $\beta(w)$ může mít skoky na Σ_{ij} , a tedy nemá stejnou kvalitu jako teplota $\alpha(w)$, a není (nebo její časová diference) dobrou testovací funkcí.

2. Diskretizace

Existence slabého řešení podle Def. 1.1 bude dokázána konstruktivním způsobem pomocí konvergence numerických aproximací, sestavených metodou konečných elementů v prostoru (s lineárním prvkem) a implicitní Eulerovou formulí v čase. Budeme používat lineárních interpolací a přibližných integračních formulí, takže výsledné schéma bude přímo implementovatelné na počítači. Pro homogenní prostředí (tj. $m=1$) bylo takové schéma použito v [3] (ve dvou dimenzích s Dirichletovými okrajovými podmínkami), [4] (s homogenními Dirichletovými podmínkami), a [15] (bez Stefanovy úlohy). Většinou se používají schémata bez přibližného výpočtu integrálů (např. [10], [12]), která prakticky nejsou implementovatelná.

Pro jednoduchost budeme uvažovat, že všechny oblasti Ω_i jsou polygonální. Pro prostorový diskretizační parametr $h > 0$ budeme uvažovat triangulaci \mathcal{T}_h oblasti Ω tvořenou N -dimenzionálními simplexy diametru menšího než h takovou, že všechny Γ_i a Γ_{ij} jsou pokryty $(N-1)$ -dimenzionálními stěnami některých simplexů z \mathcal{T}_h . Zavedeme označení:

$$V_h = \{v \in L^2(\Omega);$$

$$\forall K \in \mathcal{T}_h : v|_{\text{int } K} \text{ je lineární, } \forall i=1, \dots, m : v|_{\Omega_i} \in H^1(\Omega_i)\}$$

$$V_h^0 = V_h \cap H^1(\Omega),$$

$$\mathcal{M} = \{v \in L^2(\Omega); \forall i : v|_{\Omega_i} \text{ lze spojitě prodloužit na uzavěr } \Omega_i\},$$

int K značí vnitřek elementu K . Definujeme interpolační operátor $\Gamma_h : \mathcal{M} \rightarrow V_h$ předpisem

$$\lim_{\tilde{x} \rightarrow x, \tilde{x} \in \text{int } K} r_h v(\tilde{x}) = \lim_{\tilde{x} \rightarrow x, \tilde{x} \in \text{int } K} v(\tilde{x})$$

je-li x vrcholem $K \in \mathcal{T}_h$.

Je zřejmé, že funkce $z \in V_h$ nemusí být spojitá na Γ_{ij} , a pro jejich určení potřebujeme znát v každém uzlovém bodě ležícím na Γ_{ij} tolik hodnot, kolik oblastí Ω_i se v tomto bodě stýká.

Navíc budeme používat přibližně integrační formule tvaru:

$$(2.1) \quad I_K^N(v) = \text{meas}_N K \sum_{l=1}^{N+1} a_l \cdot \lim_{\tilde{x} \rightarrow x, \tilde{x} \in \text{int } K} v(\tilde{x}),$$

kde x jsou vrcholy simplexu K , $\text{int } K$ je vnitřek K , a čísla a_l jsou nějaké kladné váhy. Typicky bývá $a_l = 1/(N+1)$. U rotačně symetrických úloh bývá $a_l = 2\pi r_K/(N+1)$, kde r_K je vzdálenost těžiště simplexu K od osy symetrie. Formule (2.1) indukují přibližně skalární součiny:

$$(u, v)_{\Omega_i}^h = \sum_{K \in \mathcal{T}_h, K \subset \bar{\Omega}_i} I_K^N(u \cdot v),$$

$$(u, v)_{\Omega}^h = \sum_{i=1}^m (u, v)_{\Omega_i}^h,$$

$$(u, v)_{\Gamma_i}^h = \sum_{K \subset \bar{\Gamma}_i} I_K^{N-1}(u \cdot v), \text{ atd.}$$

kde K' je $(N-1)$ -dimensionální stěna některého simplexu z \mathcal{T}_h . Všimněme si, že tyto přibližné součiny jsou definovány i v případě, že $u \cdot v$ má skok mezi jednotlivými elementy, protože v (2.1) není použito hodnot v bodech x , ale limit z vnitřků jednotlivých elementů. Všimněme si dále, že výraz $\sum_{i=1}^m (\nabla u, \nabla v)_{\Omega_i}^h$ můžeme pro $u, v \in V_h$ zapsat zjednodušeně jako $(\nabla u, \nabla v)_{\Omega}^h$.

Použití interpolačního operátoru r_h je velmi vhodné z výpočetního hlediska, jinak by vyčíslení např. výrazů tvaru $(\nabla \beta(u), \nabla \beta(v))_{\Omega}$ bylo neúnosně složité i při velmi jednoduchých tvarech funkcí β_i . Při použití interpolace je ovšem nutné použít přibližných integračních formulí: např. jsou-li β_i neklesající, pak výraz $(r_h(\beta(w_1) - \beta(w_2)), w_1 - w_2)_{\Omega}^h = (\beta(w_1) - \beta(w_2), w_1 - w_2)_{\Omega}^h$ je pro $w_1, w_2 \in V_h$ nezáporný, zatímco výraz $(r_h(\beta(w_1) - \beta(w_2)), w_1 - w_2)_{\Omega}$ může mít obecně obojí znaménko.

Použití integrační formule (2.1) navíc diagonalizuje matici hmotnosti a matici koeficientů okrajových podmínek, což je výhodné z výpočetního hlediska, a dále umožní standardní technikou dokázat L^∞ -apriorní odhady řešení (srov. důkaz Věty 3.1 v [10]).

Pro jednoduchost budeme užívat ekvidistantní dělení časového intervalu $(0, T)$. Časový krok budeme označovat $k > 0$, a budeme předpokládat, že T/k je celé číslo.

Definice 2.1. Pro $h, k > 0$ nazveme přibližným řešením Stefanovy úlohy (1.2)-(1.4)-(1.5)-(1.6)-(1.7) funkci $w_{hk} \in L^2(0, T; V_h)$ takovou, že $r_h \alpha(w_{hk}) \in L^2(0, T; V_h^0)$, $w_{hk}(t) = w_{hk}^n$ pro všechna t : $(n-1)k < t \leq nk$, $n=1, \dots, T/k$, a funkce $w_{hk}^n \in V_h$ vyhovují následující rekurzivní formulí:

$$(2.2) \quad k \cdot (\nabla_{r_h} \beta(w_{hk}^n), \nabla v)_\Omega^n + (w_{hk}^n, v)_\Omega^h + k \cdot (g(\alpha(w_{hk}^n)), v)_\Gamma^h = \\ = (w_{hk}^{n-1}, v)_\Omega^h \quad \forall v \in V_h^0,$$

$$w_{hk}^0 = r_h w_0.$$

Uvedeme některé předpoklady na data úlohy:

$$(2.3) \quad \forall i=1, \dots, m: \alpha_i, \beta_i: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \text{ jsou absolutně spojité,} \\ \text{neklesající, } \beta_i \circ \alpha_i^{-1} \text{ je spojitá, a existují kladné} \\ \text{konstanty } C_1, C_2, C_3 \text{ takové, že } d \alpha_i^{-1} / d\theta \geq C_1 \\ \text{a } C_2 \geq d(\beta_i \circ \alpha_i^{-1}) / d\theta \geq C_3 \text{ platí pro s.v. } \theta \in \mathbb{R},$$

$$(2.4) \quad \forall i=1, \dots, m: g_i: \Sigma_i \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \text{ je spojitě prodloužitelná na} \\ \text{uzávěr } \Sigma_i \times \mathbb{R}, \text{ a } \forall (x, t) \in \Sigma_i: g_i(x, t, \cdot): \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \text{ je} \\ \text{neklesající,}$$

$$(2.5) \quad w_0 \in \mathcal{M}.$$

Pro důkaz existence přibližného řešení bohužel nemůžeme použít obvykle užívanou techniku (viz např. [15]) minimalizace konvexního funkcionalu, který je funkcí Kirchhoffovy teploty $r_h \beta(w_{hk}^n)$,

protože tato se v našem případě pohybuje po nelineární varietě dané podmínkou $r_h \alpha(w_{hk}^n) \in V_h^0$ a funkce realizující minimum vyhovuje jiné rovnici než (2.2) (testovací funkce, tj. tečné směry zmíněné variety, nepatří obecně do V_h^0). Chceme-li použít monotonie příslušného operátoru vzhledem k teplotě $r_h \alpha(w_{hk}^n)$, musíme se bohužel omezit na situaci:

$$(2.6) \quad \beta_i(w) = \lambda_i \cdot \alpha_i(w) \quad , \quad \forall i = 1, \dots, m \in \mathbb{R} .$$

Podmínka (2.6) znamená, že koeficienty teplotní vodivosti v jednotlivých oblastech Ω_i jsou teplotně nezávislé (a rovné právě λ_i). Tato velmi omezující podmínka se bohužel bude potřebovat velmi často (kromě vět 2.2, 3.1 a 3.2). Pro homogenní prostředí ($m=1$) by se tato podmínka nepotřebovala.

Věta 2.1. Za předpokladů (2.3), (2.4), (2.5) a (2.6) pro všechna $h, k > 0$ existuje právě jedno přibližné řešení w_{hk} Stefanovy úlohy podle Def. 2.1.

Důkaz: Vzhledem k předpokládané spojitosti dat α_i, β_i, g_i a w_0 jsou všechny interpolační operátory a přibližné integrály v (2.2) dobře definovány. Zbývá dokázat, že pro všechna $w_{hk}^{n-1} \in V_h$ existuje právě jedno $w_{hk}^n \in V_h$, které vyhovuje identitě (2.2) a $r_h \alpha(w_{hk}^n) \in V_h^0$. Definujme mnohoznačné zobrazení $A : V_h^0 \rightarrow (V_h^0)^*$ předpisem:

$$A(\theta)(v) = k \cdot (\nabla_{r_h} \beta \circ \alpha^{-1}(\theta), \nabla v)_\Omega^h + (\alpha^{-1}(\theta), v)_\Omega^h + k \cdot (g(\theta), v)_\Gamma^h .$$

Přitom $\alpha^{-1}(\theta)$ značí množinu $\{w; \alpha(w) = \theta\}$. Platí:

$$\begin{aligned} & (A(\theta_1) - A(\theta_2))(\theta_1 - \theta_2) = \\ & = (\alpha^{-1}(\theta_1) - \alpha^{-1}(\theta_2), \theta_1 - \theta_2)_\Omega^h + \sum_{i=1}^m \lambda_i (\nabla(\theta_1 - \theta_2), \nabla(\theta_1 - \theta_2))_\Omega^h \\ & + (g(\theta_1) - g(\theta_2), \theta_1 - \theta_2)_\Gamma^h \geq c_1 (\theta_1 - \theta_2, \theta_1 - \theta_2)_\Omega^h . \end{aligned}$$

Využili jsme přitom stejnoměrné monotonie α_i^{-1} s konstantou C_1 (viz (2.3)), monotonie $g(x, t, \cdot)$ a předpokladu (2.6). Tedy operátor A je stejnoměrně monotonní. Je to také maximálně monotonní operátor a je koercivní, tedy pro všechna $w_{hk}^{n-1} \in V_h$ existuje právě jedno řešení rovnice $A(\Theta)(v) = (w_{hk}^{n-1}, v)_{\Omega}^h, \forall v \in V_h^0$. Označme toto řešení Θ_{hk}^n . Zřejmě existuje $w_{hk}^n \in V_h$ takové, že $r_h \alpha(w_{hk}^n) = \Theta_{hk}^n$, a toto w_{hk}^n řeší (2.2). Zbývá dokázat, že toto řešení je jednoznačné. Nechť $w_1, w_2 \in V_h$ jsou dvě řešení (2.2). Protože přibližná teplota Θ_{hk}^n je jednoznačná, musí platit $r_h \alpha(w_1) = r_h \alpha(w_2) = \Theta_{hk}^n$, a tedy odečtením (2.2) pro w_1 a w_2 dostaneme identitu $(w_1 - w_2, v)_{\Omega}^h = 0$ pro všechna $v \in V_h^0$. Z toho ihned plyne, že $w_1(x) = w_2(x)$, je-li x uzlový bod triangulace \mathcal{T}_h neležící na Γ_{ij} . Vezměme nyní uzlový bod x ležící na Γ_{ij} . Pro jednoduchost budeme předpokládat, že se v tomto bodě stýkají jen dvě oblasti (tedy Ω_i a Ω_j); zobecnění na styk více oblastí je snadné. Označíme w_1^i hodnotu funkce w_1 v bodě x vzhledem k oblasti Ω_i (tj. hodnotu stopy restrikce w_1 na Ω_i), a analogicky w_2^j, w_2^i a w_2^j . Dosadíme-li za $v \in V_h^0$ funkci rovnou jedné v bodě x a anulující se v ostatních uzlových bodech, dostaneme rovnici:

$$(2.7) \quad a_i(w_1^i - w_2^i) + a_j(w_1^j - w_2^j) = 0,$$

kde $a_i, a_j > 0$ jsou prvky matice hmotnosti v bodě x vzhledem k oblasti Ω_i a Ω_j (připomeňme, že matice hmotnosti je diagonální v důsledku užití přibližně integrační formule (2.1)). Z podmínek $r_h \alpha(w_1), r_h \alpha(w_2) \in V_h^0$ dostaneme podmínky:

$$(2.8) \quad \alpha_i(w_1^i) = \alpha_j(w_1^j), \\ \alpha_i(w_2^i) = \alpha_j(w_2^j).$$

Nechť např. $w_1^i > w_2^i$. Z monotonie funkcí α_i a β_j a z (2.8) plyne, že také $w_1^j > w_2^j$, což ovšem odporuje rovnici (2.7). Tedy $w_1^i = w_2^i$ a $w_1^j = w_2^j$, a tudíž i $w_1 = w_2$. Jednoznačnost přibližné entalpie w_{hk}^n vypočtené podle (2.2) je tímto dokázána. ■

Důkaz existence přibližného řešení bez omezujícího předpokladu (2.6) je možno provést použitím věty o pevném bodě. Bohužel otázka jednoznačnosti přibližného řešení v tomto případě zůstává otevřená.

Věta 2.2. Nechť platí (2.3), (2.4), (2.5), (3.5), (3.6), (3.7) a (3.8) (viz dále). Pak pro všechna $h, k > 0$ existuje alespoň jedno přibližné řešení w_{hk} podle Def. 2.1.

Důkaz. Vzhledem k předpokladům (2.3)-(2.5) jsou všechny přibližné integrály v (2.2) dobře definovány. Stačí tedy dokázat, že pro všechna w_{hk}^{n-1} existuje w_{hk}^n splňující (2.2) a takové, že $r_h \alpha(w_{hk}^n) \in V_h^0$.

Dokážeme nejprve, že pro všechna $\varepsilon > 0$ existuje $w_\varepsilon \in V_h$ takové, že následující identita platí pro všechna $v \in V_h$:

$$(2.9) \quad k(\nabla r_h \beta(w_\varepsilon), \nabla v)_\Omega^h + (w_\varepsilon, v)_\Omega^h + k(g(\alpha(w_\varepsilon)), v)_{\Gamma}^h + \\ + \frac{1}{\varepsilon} \sum_{i>j} (\delta_{ij} \alpha(w_\varepsilon), \delta_{ij} v)_{\Gamma_{ij}}^h = (w_{hk}^{n-1})_\Omega^h,$$

kde δ_{ij} značí skok příslušné funkce na hranici Γ_{ij} , tj. rozdíl stop vzhledem k Ω_i a vzhledem k Ω_j . Použijeme metodu pevného bodu tím způsobem, že "roztrhneme" jednotlivé oblasti Ω_i od sebe. Označme V_{hij} prostor funkcí z $H^1(\Gamma_{ij})$, jež jsou po částech lineární na stěnách simplexů z \mathcal{T}_h tvořících hranici Γ_{ij} . Dále označme V_{hi} prostor funkcí z V_h zúžených na Ω_i .

Nejprve dokážeme, že pro všechna $i=1, \dots, m$ a pro všechna $\theta_{ij} \in V_{hij}$, $i \neq j$, existuje řešení $w_\varepsilon^i \in V_{hi}$ úlohy:

$$(2.10) \quad k(\nabla r_h \beta(w_\varepsilon^i), \nabla v)_{\Omega_i}^h + (w_\varepsilon^i, v)_{\Omega_i}^h + k(g(\alpha(w_\varepsilon^i)), v)_{\Gamma_i}^h + \\ + \frac{1}{\varepsilon} \sum_{i \neq j} (\alpha_i(w_\varepsilon^i), v)_{\Gamma_{ij}}^h = (w_{hk}^{n-1}, v)_{\Omega_i}^h + \frac{1}{\varepsilon} \sum_{i \neq j} (\theta_{ij}, v)_{\Gamma_{ij}}^h$$

$$\forall v \in V_{hi}.$$

Zavedením substituce $y_{\varepsilon}^i = r_h \beta(w_{\varepsilon}^i)$ převedeme (2.10) do tvaru:

$$(2.11) \quad k(\nabla y_{\varepsilon}^i, \nabla v)_{\Omega_i}^h + (\beta^{-1}(y_{\varepsilon}^i, v)_{\Omega_i}^h + k(\bar{g}(y_{\varepsilon}^i), v)_{\Gamma_i}^h + \\ + \frac{1}{\varepsilon} \sum_{i \neq j} (\alpha_i \circ \beta_i^{-1}(y^i), v)_{\Gamma_{ij}}^h \\ \ni (w^{n-1}, v)_{\Omega_i}^h + \frac{1}{\varepsilon} \sum_{i \neq j} (\Theta_{ij}, v)_{\Gamma_{ij}}^h \quad \forall v \in V_{hi},$$

kde $\bar{g} = g \circ \alpha \circ \beta^{-1}$ je monotonní v důsledku předpokladů (2.3) a (2.4). S využitím toho, že hmotnostní matice i matice hraničních forem vzniklé užitím přibližné integrační formule (2.1) jsou diagonální a že funkce \bar{g} i $\alpha_i \circ \beta_i^{-1}$ jsou neklesající funkce Kirchhoffovy teploty, se standardním způsobem (pro diferencovatelný případ viz např. [15]), dokáže, že řešení inkluze (2.11) je zároveň minimem stejnoměrně konvexního (ne nutně diferencovatelného) funkcionálu na V_{hi} . Protože β_i^{-1} je maximální monotonní (mnohoznačná) funkce $R \rightarrow R$, existuje (dokonce právě jedno) $w_{\varepsilon}^i \in V_{hi}$ řešící (2.10).

Stejnomořná konvexnost potenciálu inkluze (2.11) přitom plyne ze stejnoměrné monotonie funkcí β_i :

$$(\beta^{-1}(y) - \beta^{-1}(\tilde{y}), y - \tilde{y})_{\Omega_i}^h \geq C_1 C_2 (y - \tilde{y}, y - \tilde{y})_{\Omega_i}^h,$$

kde C_1 a C_2 jsou konstanty z (2.3). Ze stejnoměrné konvexnosti plyne rovněž spojitost (dokonce Lipschitzovská) zobrazení $\Theta_{ij} \mapsto y_{\varepsilon}^i$. Protože funkce $\alpha_i \circ \beta_i^{-1}$ jsou podle předpokladu (2.3) Lipschitzovské, dostáváme též spojitost (dokonce Lipschitzovskou) zobrazení

$$\Theta_{ij} \mapsto r_h \alpha_i \circ \beta_i^{-1}(y_{\varepsilon}^i) = r_h \alpha_i(w_{\varepsilon}^i).$$

Z principu maxima, který je v diskretních rovnicích zaručen podmínkou (3.6), z podmínky (3.7) a z

$$M_1 \leq \Theta_{ij} \leq M_2, \quad i \neq j,$$

Dostaneme obvyklým způsobem (viz např. důkaz Věty 3.1 dále) apriorní odhad pro teplotu:

$$M_1 \leq \alpha(w_\varepsilon^i) \leq M_2 .$$

Nyní zkonstruujeme zobrazení Φ z $\prod_{i \neq j} (V_{hij} \times V_{hji})$ do sebe. Vezmeme $\theta = (\theta_{ij}, \theta_{ji})_{i \neq j}$, $\theta_{ij}, \theta_{ji} \in V_{hij}$. Vyřešíme rovnice (2.10) pro $i=1, \dots, m$ a položíme $[\Phi(\theta)]_{ij} = r_h \alpha(w_\varepsilon^i) | \Gamma_{ij}$.

Zobrazení Φ je spojité a zobrazuje konvexní množinu $M = \{M_1 \leq \theta \leq M_2\}$ do sebe. Podle Brouwerovy věty o pevném bodu (připomeňme, že V_{hij} jsou konečně dimensionální prostory) existuje $\theta_\varepsilon \in M$ takové, že $\theta_\varepsilon = \Phi(\theta_\varepsilon)$. Z θ_ε zkonstruujeme $w_\varepsilon \in V_h$ tak, aby restrikce w_ε na Ω_i byla řešením (2.10) a $\theta_{ij} = [\theta_\varepsilon]_{ij}$. Je zřejmé, že toto w_ε splňuje rovněž (2.9).

Nyní provedeme limitní přechod $\varepsilon > 0$. Pro všechna $\varepsilon > 0$ platí odhad:

$$(3.12) \quad M_1 \leq \alpha(w_\varepsilon) \leq M_2 .$$

Vzhledem k předpokladu (3.8) je také posloupnost $\{w_\varepsilon\}_{\varepsilon > 0}$ omezená, a tedy lze z ní vybrat konvergentní podposloupnost; její limitu označme $w_{hk}^n \in V_h$. Dosazením $v \in V_h^0$ do (2.9) se vyruší hraniční členy s Γ_{ij} neboť pro $v \in V_h^0$ je zřejmé $\delta_{ij} v = 0$. Vidíme tedy, že všechna w_ε splňují (2.2), a proto také w_{hk}^n musí splňovat (2.2). Zbývá dokázat, že $r_h \alpha(w_{hk}^n) \in V_h^0$.

Dosazením $v = r_h \alpha(w_\varepsilon)$ do (2.9) dostaneme rovnici:

$$k(\nabla r_h \beta(w_\varepsilon), \nabla r_h \alpha(w_\varepsilon))_{\Omega}^h + \frac{1}{\varepsilon} \sum_{i > j} (\delta_{ij} \alpha(w_\varepsilon), \delta_{ij} \alpha(w_\varepsilon))_{\Gamma_{ij}}^h = (w_\varepsilon, \alpha(w_\varepsilon))_{\Omega}^h + k(g(\alpha(w_\varepsilon)), \alpha(w_\varepsilon))_{\Gamma}^h .$$

První člen je v důsledku předpokladu (3.5) kladný. Členy na pravé straně jsou omezené nezávisle na $\varepsilon > 0$ v důsledku apriorního

odhadu (3.12) a předpokladu (3.8). Tedy $\|\delta_{ij} \alpha(w_\varepsilon)\|_{\Gamma_{ij}}^h = O(\sqrt{\varepsilon})$.

Pro limitní funkci w_{hk}^n tedy musí platit $\delta_{ij} \alpha(w_{hk}^n) = 0$,
a tedy $r_n \alpha(w_{hk}^n) \in V_{hk}^0$. Existence řešení w_{hk} podle Def. 2.1
je tímto dokázána.

Poznámka 2.1. Parametr ε v důkazu věty 2.2 má fyzikální význam.
Jeho fyzikální rozměr je $m^2 K/W$ a představuje tepelný odpor
rozhraní Γ_{ij} . Dirichletovy přechodové podmínky (1.7) se tak
vlastně aprosimují podmínkami Newtonova typu:

$$(2.13) \quad \alpha_i(w) - \alpha_j(w) = \varepsilon \cdot \nabla \beta_i(w) / \partial \nu \quad \text{na } \Sigma_{ij},$$

kde ν je normála k Γ_{ij} orientovaná z oblasti Ω_j do oblasti Ω_i .
Samozřejmě stále platí podmínka (1.6), což stírá zdánlivou ne-
symetrii v podmínce (2.13). Tímto způsobem by bylo vhodné zjednodu-
šit naši úlohu v případě, že izolační deska (oblast Ω_3 na Obr.1)
by byla velmi tenká. Zanedbáním její tloušťky by vznikla část hra-
nice Γ_{12} , na které by se předepsaly přechodové podmínky (1.6)
a (2.13) (koeficient ε by měl potom význam tloušťky desky dělené
koeficientem její tepelné vodivosti).

Poznámka 2.2. Zesílením podmínky (2.4) požadavkem, že některá
 $g_i(x, t, \cdot)$ je stejnoměrně monotonní stejně pro všechna $t \in (0, T)$ a
 $x \in \tilde{\Gamma}_{ij}$, kde $\tilde{\Gamma}_{ij}$ je nějaká část Γ_{ij} , přitom $\text{meas}_{N-1} \Gamma_{ij} > 0$,
a požadavkem, aby Ω byla souvislá oblast, bychom mohli studovat
úlohy s parabolickou degenerací. Totiž úlohy, kde C_1 v (2.3) je
nulové (tyto úlohy nejsou tzv. silně parabolické). Dokonce bychom
mohli uvažovat funkce α_i a β_i jako mnohoznačné a požadovat pouze,
aby byly maximálně monotonní, a aby $\beta_i \circ \alpha_i^{-1}$ byla (jednoznačná)
absolutně spojitá funkce splňující podmínku $C_2 \geq d(\beta_i \circ \alpha_i^{-1})/d\Theta \geq$
 $\geq C_3$ pro s.v. $\Theta \in \mathbb{R}$. Pak bychom připustili degeneraci parabolic-
ké rovnice v parabolicko-eliptickou rovnici. Takové úlohy se vy-
skytují v modelování některých elektrochemických procesů nebo

proudění v porózních prostředích při částečné saturaci, a ve tvaru variační nerovnice byly studovány zejména v pracích poáské matematicky Ireny Pawlow.

V důkazech vět 3.1 a 3.2 dále se konstanta C_1 vůbec nepoužívá, a tedy tyto věty platí i v případě degenerace parabolického typu rovnice. Také věty 2.1 a 2.2 zůstanou v platnosti, pouze při důkazech stejnoměrné monotonie příslušných operátorů (viz důkazy těchto vět) se místo stejnoměrné monotonie funkcí α_i^{-1} nebo β_i^{-1} použije stejnoměrná eliptičnost prostorové části příslušného operátoru (včetně okrajových forem).

3. Aproximace teploty slabě v prostoru $L^2(0, T; H^1(\Omega))$

Budeme používat následujících odhadů ($u, v \in V_h^0$, konstanty C nezávisí na h):

$$(3.1) \quad |(u, v)_\Omega - (u, v)_\Omega^h| \leq C_4 h^2 \|u\|_{H^1(\Omega)} \|v\|_{H^1(\Omega)},$$

$$(3.2) \quad \|u\|_{H^1(\Omega)} \leq (C_5/h) \|u\|_\Omega,$$

$$(3.3) \quad \|u\|_\Omega \leq \|u\|_\Omega^h \leq C_6 \|u\|_\Omega, \text{ kde } \|u\|_\Omega^h = ((u, u)_\Omega^h)^{1/2},$$

$$(3.4) \quad \|u - r_h u\|_{H^1(\Omega)} \leq C_7 h \|u\|_{H^2(\Omega)} \quad \forall u \in H^2(\Omega),$$

$$(3.5) \quad \forall K \in \mathcal{T}_h: (\nabla r_h \beta \circ \alpha^{-1}(u), \nabla u)_K \geq C_3 \|\nabla u\|_K^2,$$

$$(3.6) \quad \text{triangulace je "akutního typu" (úhly stěn jednotlivých simplexů jsou menší než } \pi/2 \text{ .}$$

C_3 je konstanta z (2.3). Odhad (3.1) byl dokázán v [3; Lemma 2.1], (3.2) je tzv. inverzní nerovnost, zaručená inverzní podmínkou: $\text{diam } K \geq \mu h$ pro nějaké $\mu > 0$ a všechna $h > 0$, $K \in \mathcal{T}_h$; viz [2]. Ekvivalenci norem (3.3) dokázal Raviart, viz [3].

Odhad chyby interpolace (3.4) byl dokázán v [2]. Podmínka (3.5) je ve dvou dimenzích implikována podmínkou (3.6); viz [3; Lemma 3.1].

Dále budeme používat další předpoklady na data úlohy, zajišťující L -odhady teploty i entalpie:

$$(3.7) \quad \exists M_1, M_2 : M_1 \leq \alpha(w_0(\cdot)) \leq M_2 \quad \text{s.v. na } \Omega,$$

$$g(\cdot, \cdot, M_1) \leq 0, \quad g(\cdot, \cdot, M_2) \geq 0 \quad \text{s.v. na } \Sigma,$$

$$(3.8) \quad \lim_{|w| \rightarrow \infty} \alpha_i(w) = +\infty, \quad i = 1, \dots, m.$$

Dokážeme nejprve několik apriorních odhadů pro přibližné řešení w_{hk} . Označme $\hat{w}_{hk} \in C^0(0, T; V_h)$ lineární interpolaci w_{hk} na každém časovém intervalu $[(n-1)k, nk]$, $n=1, \dots, T/k$; tj. \hat{w}_{hk} je lineární na každém z těchto intervalů a $\hat{w}_{hk}(nk) = w_{hk}^n$ pro $n=0, \dots, T/k$.

Věta 3.1. Nechť platí (2.3), (2.4), (2.5), (3.6), (3.7) a (3.8). Je-li w_{hk} přibližné řešení Stefanovy úlohy podle Def. 2.1, pak

$$(3.9) \quad \|w_{hk}\|_{L^\infty(Q)} \leq C_8.$$

Platí-li navíc (3.3) a (3.5), pak

$$(3.10) \quad \|r_h^*(w_{hk})\|_{L^2(0, T; H^1(\Omega))} \leq C_9.$$

Platí-li navíc (3.1) a (3.2), pak

$$(3.11) \quad \|\partial \hat{w}_{hk} / \partial t\|_{L^2(0, T; (H^1(\Omega))^*)} \leq C_{10} + C_{11} h^2 / k^2, \quad \text{a}$$

$$(3.11 \text{ i}) \quad \|\partial w_{hk} / \partial t\|_{L^2(0, T; (H^1(\Omega_i))^*)} \leq C_{10} + C_{11} h^2 / k^2,$$

pro $i=1, \dots, m$; konstanty C nezávisí samozřejmě na h a k .

Důkaz. Z (3.6) plyne, že matice tuhosti je diagonálně dominantní se zápornými nediagonálními prvky. Z monotonie funkcí α_i a β_i se obvyklým způsobem (vzhledem ke skutečnosti, že matice hmotností je diagonální) dokáže, že teplota $\alpha(w_{hk})$ nemůže nabývat maxima, resp. minima ve vnitřním uzlovém bodě oblasti Ω ; viz např. [15]. Z (3.7) se pak dokáže, že maximum na Σ není větší než M_2 , a podobně též minimum není menší než M_1 . Stejný odhad platí i pro $t=0$ přímo z podmínky (3.7). Odhad (3.9) pak plyne z (3.8).

Nyní dokážeme (3.10). Do (2.2) můžeme dosadit $v=r_h \alpha(w_{hk}^n)$, a sečíst pro $n=1, \dots, T/k$. Dostáváme:

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{T/k} k (\nabla r_h \beta(w_{hk}^n), \nabla r_h \alpha(w_{hk}^n))_{\Omega}^h &= \\ &= - \sum_{n=1}^{T/k} ((w_{hk}^n - w_{hk}^{n-1}), \alpha(w_{hk}^n))_{\Omega}^h + k (g(\alpha(w_{hk}^n)), \alpha(w_{hk}^n))_{\Gamma}^h = \\ &= (\partial \hat{w}_{hk} / \partial t, \alpha(\hat{w}_{hk}))_{\Omega}^h - (\partial \hat{w}_{hk} / \partial t, \alpha(w_{hk}) - \alpha(\hat{w}_{hk}))_{\Omega}^h \\ &\quad - (g(\alpha w_{hk}), \alpha(w_{hk}))_{\Sigma}^h = I_1 + I_2 + I_3, \end{aligned}$$

kde $(\dots)_{\Omega}^h$ označuje $\int_0^T (\dots)_{\Omega}^h dt$, a podobně $(\dots)_{\Sigma}^h$ označuje $\int_0^T (\dots)_{\Sigma}^h dt$. Vzhledem k (2.3) a (3.5) můžeme levou stranu odhadnout zdola jako $C_3 \|\nabla r_h \alpha(w_{hk})\|_{\Omega}^2$. Označme A_i primitivní funkci k α_i . Člen I_1 můžeme zapsat takto:

$$I_1 = - (\partial A(w_{hk}) / \partial t, 1)_{\Omega}^h = - (A(w_{hk}^{T/k}), 1)_{\Omega}^h + (A(w_{hk}^0), 1)_{\Omega}^h$$

a dále použít odhad (3.9). Pomocí (3.9) můžeme též jednoduše odhadnout člen I_3 . Uvědomíme-li si, že člen I_2 je záporný v důsledku toho, že α_i jsou neklesající, dostáváme již přímo odhad (3.10), neboť omezenost $r_h \alpha(w_{hk})$ byla již dokázána.

Nyní budeme dokazovat (3.11). Z (2.2) vidíme, že pro všechna $v \in H^1(\Omega) \cap C^0(\bar{\Omega})$ platí:

$$\begin{aligned} (3.12) \quad ((w_{hk}^n - w_{hk}^{n-1})/k, v)_{\Omega}^h &= \\ &= - (\nabla r_h \beta(w_{hk}^n), \nabla r_h v)_{\Omega}^h - (g(\alpha w_{hk}^n), v)_{\Gamma}^h. \end{aligned}$$

Použitím (3.1) a (3.2) (se záměnou Ω na Ω_i a potom sečtením pro $i=1, \dots, m$) dostaneme odhad:

$$\begin{aligned} |(u, v)_{\Omega} - (u, v)_{\Omega}^h| &\leq C_4 C_5 h \|u\|_{\Omega} \cdot \|v\|_{H^1(\Omega)} \\ &\leq C_4 C_5 (h^2 \|u\|_{\Omega}^2 + \|v\|_{H^1(\Omega)}^2). \end{aligned}$$

Podobně záměnou Ω za Γ a použitím (3.2) ještě jednou dostaneme:

$$|(u, v)_{\Gamma} - (u, v)_{\Gamma}^h| \leq C_4 C_5^2 (\|u\|_{\Gamma}^2 + \|v\|_{\Gamma}^2).$$

Pro všechna $t \in (0, T)$ takto dostaneme odhad:

$$\begin{aligned} |(\partial \hat{w}_{hk} / \partial t, v)_{\Omega}| &\leq C_{12} (h^2 \|\partial \hat{w}_{hk} / \partial t\|_{\Omega}^2 + \|v\|_{H^1(\Omega)}^2 + \|w_{hk}(t)\|_{\Omega}^2 \\ &\quad + \|v\|_{\Omega}^2 + \|g(\alpha w_{hk}(t))\|_{\Gamma}^2 + \|v\|_{\Gamma}^2). \end{aligned}$$

Použili jsme přitom (3.3) a Lipschitzovskosti funkcí $\alpha_i \circ \Delta_i^{-1}$ s konstantou C_3 (viz (2.3)). Dále použijeme odhad

$$\|\partial \hat{w}_{hk} / \partial t\|_{\Omega} \leq (\text{meas}_N \Omega)^{1/2} C_8 / k,$$

který plyne z (3.9) a z definice funkce \hat{w}_{hk} . Použitím nerovnosti $\|\nabla_{\Gamma} v\|_{\Omega} \leq \|v\|_{\Omega}$, apriorního odhadu stopy $\alpha(w_{hk})$ na Γ pomocí (3.9) a zámě nerovnosti $\|v\|_{\Gamma} \leq C_{13} \|v\|_{H^1(\Omega)}$, dostaneme odhad:

$$|(\partial \hat{w}_{hk} / \partial t, v)_{\Omega}| \leq C_{14} + C_{15} h^2 / k^2 + C_{16} \|v\|_{H^1(\Omega)}^2.$$

Protože vnoření $H^1(\Omega) \cap C^0(\bar{\Omega}) \subset H^1(\Omega)$ je husté, platí poslední odhad dokonce pro všechna $v \in H^1(\Omega)$. Integrací přes časový interval $(0, T)$ dostaneme odhad:

$$|(\partial \hat{w}_{hk} / \partial t, v)_{\mathbb{C}}| \leq T \cdot C_{14} + T \cdot C_{15} h^2 / k^2 + T \cdot C_{16} \|v\|_{L^2(0, T; H^1(\Omega))}^2.$$

Podle definice duální normy platí:

$$\begin{aligned} \|\partial \hat{w}_{hk} / \partial t\|_{L^2(0, T; (H^1(\Omega))^*)} &= \\ &= \sup \{ |(\partial \hat{w}_{hk} / \partial t, v)_{\mathbb{C}}| ; \|v\|_{L^2(0, T; H^1(\Omega))} = 1 \} \leq \\ &\leq T \cdot (C_{14} + C_{16}) + T \cdot C_{15} h^2 / k^2, \end{aligned}$$

z čehož dostáváme (3.11) s $C_{10} = T.(C_{14} + C_{16})$ a $C_{11} = T.C_{15}$.

Odhad (3.11 i) se dokáže analogicky jako (3.11), jen s tím rozdílem, že místo (3.12) použijeme identitu:

$$\begin{aligned} ((w_{hk}^n - w_{hk}^{n-1})/k, v)_{\Omega_i}^h &= - (\nabla r_h \beta_i(w_{hk}^n), \nabla r_h v)_{\Omega_i} - (g_i(\alpha_i(w_{hk}^n)), v)_{\Gamma_i}^h \\ &\quad - \sum_{i \neq j} (\partial(r_h \beta_i(w_{hk}^n))/\partial \nu, r_h v)_{\Gamma_{ij}}, \end{aligned}$$

kde ν je normála orientovaná vždy ven z Ω_i . Členy s Γ_{ij} představují integrál ze součinu tepelného toku přes Γ_{ij} a stopy testovací funkce. Z těchto členů přibudou navíc odhady:

$$\begin{aligned} (\partial(r_h \beta_i(w_{hk}^n))/\partial \nu, r_h v)_{\Gamma_{ij}} &\leq \\ &\leq C_{17} \cdot \|\partial(r_h \beta_i(w_{hk}^n))/\partial \nu\|_{H^{-1/2}(\Gamma_{ij})} \cdot \|r_h v\|_{H^{1/2}(\Gamma_{ij})} \\ &\leq C_{18} (\|r_h \beta_i(w_{hk}^n)\|_{H^1(\Omega)}^2 + \|v\|_{H^1(\Omega)}^2). \end{aligned}$$

Dokončení odhadu (3.11 i) je pak již stejné jako pro 3.11). ■

Nyní použijeme získané apriorní odhady k důkazu konvergence přibližných řešení k řešení spojité úlohy podle Def. 1.1. Jako "vedlejší efekt" takto dostaneme existenci tohoto řešení. Bohužel ale budeme muset učinit poněkud omezující předpoklad na okrajové podmínky, totiž:

$$(3.13) \quad \forall i=1, \dots, m, \quad \forall (x, y) \in \Sigma_i: \quad g_i(x, t, \cdot) \text{ je konkávní,}$$

což vylučuje např. Stefan-Boltzmanovy okrajové podmínky. Vzhledem k tomu, že entalpie je vztahem (1.3) definována až na aditivní konstantu, můžeme funkce α_i volit tak, aby $\alpha_i(0)=0$ pro všechna $i=1, \dots, m$.

Věta 3.2. Nechť platí (2.3)-(2.5), (3.1)-(3.8), a nechť $\{w_{hk}\}_{h,k>0}$ je posloupnost přibližných řešení podle Def. 2.1 taková, že $h \rightarrow 0, k \rightarrow 0, h/k$ je omezené. Pak existuje vybraná posloupnost (pro jednoduchost značená stejnými indexy) taková, že

$$r_h \alpha(w_{hk}) \rightharpoonup \alpha(w) \quad \text{slabě v } L^2(0, T; H^1(\Omega)) \text{ a}$$

$$\hat{w}_{hk} \rightarrow w \quad \text{silně v } L^2(0, T; (H^1(\Omega))^*),$$

kde w je slabé řešení Stefanovy úlohy podle Def. 1.1.

Důkaz: Uvažujme pevnou testovací funkci z pro (1.10), tj. $z \in H^1(\Omega)$ a $z(\cdot, T) = 0$. Vzhledem k hustotě můžeme navíc předpokládat např. $z \in C^2(Q)$. Položme v (2.2) $v = r_h z(\cdot, (n-1)k)$. Sečteme (2.2) pro $n=1, \dots, T/k$ a použijeme diskrétní analógie integrace per partes:

$$\sum_{n=1}^{T/k} (w^n - w^{n-1}) z^{n-1} = w^{T/k} z^{T/k} - w^0 z^0 - \sum_{n=1}^{T/k} w^n (z^n - z^{n-1}).$$

Dostaneme tak:

$$\sum_{n=1}^{T/k} (k(\nabla r_h \beta(w_{hk}), \nabla r_h z(\cdot, (n-1)k)))_{\Omega}^h$$

$$- (w^n, z(\cdot, nk) - z(\cdot, (n-1)k))_{\Omega}^h + (g(\alpha(w_{hk}^n), z(\cdot, (n-1)k)))_{\Gamma}^h$$

$$+ (w_0, z(\cdot, 0))_{\Omega}^h = 0.$$

Zavedem funkci \bar{z}_k definovanou vztahem $\bar{z}_k(x, t) = z(x, (n-1)k)$ pro $(n-1)k \leq t < nk$. Dále z_k bude značit lineární interpolaci funkce z na jednotlivých časových intervalech. Předšlou identitu tak můžeme přepsat do tvaru:

$$(\nabla r_h \beta(w_{hk}), \nabla r_h \bar{z}_k)_Q^h - (w_{hk}, \partial z_k / \partial t)_Q^h + (g(\alpha(w_{hk})), \bar{z}_k)_Z^h$$

$$- (w_0, z(\cdot, 0))_{\Omega}^h = 0.$$

Přejdeme-li k původní testovací funkci z a přesným integrálům, dostaneme:

$$(3.14) \quad \sum_{i=1}^m (\nabla r_h \beta(w_{hk}), \nabla z)_Q - (w_{hk}, \partial z / \partial t)_Q + (g(r_h \alpha(w_{hk})), z)_Z$$

$$- (w_0, z(\cdot, 0))_{\Omega} = R_{hk},$$

kde po zbytek R_{hk} zřejmě platí:

$$\begin{aligned}
R_{hk} &= \sum_{i=1}^m (\nabla_{r_h} \beta(w_{hk}), \nabla(z - r_h \bar{z}_k))_{\mathcal{Q}} \\
&+ (w_{hk}, \partial(z_k - z)/\partial t)_{\mathcal{Q}} \\
&+ ((w_{hk}, \partial z_k/\partial t)_{\mathcal{Q}}^h - (w_{hk}, \partial z_k/\partial t)_{\mathcal{Q}}) \\
&+ (g(r_h \alpha(w_{hk})), \bar{z}_k - z) \\
&+ ((g(\alpha(w_{hk})), \bar{z}_k)_{\Sigma}^h - (g(r_h(w_{hk})), \bar{z}_k)_{\Sigma}) \\
&+ ((w_0, z(\cdot, 0))_{\Omega}^h - (w_0, z(\cdot, 0))_{\Omega}) = \\
&= \sum_{j=1}^6 R_{hk}^j.
\end{aligned}$$

Člen R_{hk}^1 konverguje k nule pro $h \rightarrow 0$ a $k \rightarrow 0$, protože posloupnost $\{\nabla_{r_h} \beta(w_{hk})\}$ je omezená v $L^2(\mathcal{Q}_i)$ v důsledku (3.10) a Lipschitzovskosti funkcí $\beta_i \circ \alpha_i^{-1}$, a protože $\|\nabla(z - r_h \bar{z}_k)\|_{\mathcal{Q}}^2 = \mathcal{O}(h+k)$ v důsledku (3.4) a předpokladu $z \in C^2(\bar{\mathcal{Q}})$.

Člen R_{hk}^2 konverguje k nule pro $k \rightarrow 0$, neboť posloupnost $\{w_{hk}\}$ je omezená v $L^2(\mathcal{Q})$ a $\partial z_k/\partial t \rightarrow \partial z/\partial t$ v $L^2(\mathcal{Q})$ v důsledku předpokládané hladkosti z .

Užitím (3.1) a (3.2) lze člen R_{hk}^3 odhadnout takto:

$$|R_{hk}^3| \leq h \cdot c_4 c_5 \|w_{hk}\|_{\mathcal{Q}} \|\partial z_k/\partial t\|_{L^2(0, T; H^1(\Omega))}.$$

Z předpokládané hladkosti z dostaneme $R_{hk}^3 = \mathcal{O}(h)$.

Podobně R_{hk}^4 konverguje k nule pro $k \rightarrow 0$ v důsledku apriorního odhadu $g(r_h \alpha(w_{hk}))$ v $L^2(\Sigma)$ (dokonce v $L^\infty(\Sigma)$ s ohledem na (3.9)), a v důsledku hladkosti z .

Člen R_{hk}^5 je $\mathcal{O}(h)$, neboť užitím (3.1) a (3.2) se záměnou Ω na Γ dostaneme odhad:

$$|R_{hk}^6| \leq h \cdot c_4 c_5 \|g(r_h \alpha(w_{hk}))\|_{\Sigma} \|\bar{z}_k\|_{L^2(0, T; H^1(\Gamma))}.$$

S ohledem na $z \in C^2(\bar{\mathcal{Q}})$ je zřejmě stopa \bar{z}_k na Γ_0 omezená dokonce v $L^\infty(0, T; C^2(\Gamma_0))$, kde Γ_0 je hladká komponenta Γ (připomeňme, že Ω je polygonální oblast). Zřejmě tedy \bar{z}_k je omezené v $L^\infty(0, T; W^{1, \infty}(\Gamma))$, a tím spíše i v $L^2(0, T; H^1(\Gamma))$.

Analogicky R_{hk}^6 je $\mathcal{O}(h)$, neboť:

$$|R_{hk}^6| \leq h \cdot C_4 C_5 \|w_0\|_{\underline{z}(\cdot, 0)} \|H^1(\Omega) \cdot$$

Dokázali jsme tedy, že

$$(3.15) \quad R_{hk} \rightarrow 0 \quad \text{pro } h \rightarrow 0, k \rightarrow 0.$$

Vzhledem k apriorním odhadům (3.9), (3.10), (3.11) a (3.11 i) a předpokladu, že h/k je omezené můžeme vybrat z posloupnosti $\{w_{hk}\}_{h,k>0}$ podposloupnost (označme ji pro jednoduchost stejnými indexy) takovou, že:

$$(3.16) \quad \hat{w}_{hk} \rightarrow w \quad \text{slabě v } H^1(0, T; H^1(\Omega))^* \text{ a v } L^2(Q),$$

$$(3.17) \quad \hat{w}_{hk} \rightarrow w \quad \text{slabě v } H^1(0, T; H^1(\Omega_i))^* \text{ a v } L^2(Q_i),$$

$$(3.18) \quad r_h \beta_i(w_{hk}) \rightarrow y_i \quad \text{slabě v } L^2(0, T; H^1(\Omega_i)), \quad i=1, \dots, m,$$

$$(3.19) \quad r_h \alpha(w_{hk}) \rightarrow \Theta \quad \text{slabě v } L^2(0, T; H^1(\Omega)), \quad \text{a}$$

$$(3.20) \quad g(r_h \alpha(w_{hk})) \rightarrow \gamma \quad \text{slabě v } L^2(\underline{z}).$$

Všimněme si, že w v (3.17) je skutečně restrikcí w z (3.16) na Q_i , neboť operátor restrikce je lineární a spojitý z $L^2(Q)$ do $L^2(Q_i)$, a tedy je jistě slabě uzavřený. Pro (3.18) byl použit odhad (3.10) spolu s Lipschitzovskostí funkce $\beta_i = \alpha_i^{-1}$ s konstantou C_2 (viz (2.3)).

Užitím (3.15), (3.16), (3.18), (3.19) a (3.20) můžeme provést limitní přechod v (3.14), čímž dostaneme:

$$(3.21) \quad \sum_{i=1}^m (\nabla y_i, \nabla z)_{Q_i} - (w, \partial z / \partial t)_Q + (\gamma, z)_{\underline{z}} - (w_0, z(\cdot, 0))_{\Omega} = 0.$$

Použitím [7; Kap. I, Věta 5.1] dostaneme kompaktnost vnoření $H^1(0, T; (H^1(\Omega))^*) \cap L^2(Q)$ do $L^2(0, T; (H^1(\Omega))^*)$, tedy vidíme, že

$$(3.22) \quad \hat{w}_{hk} \rightarrow w \quad \text{silně v } L^2(0, T; (H^1(\Omega))^*).$$

Je zřejmé, že věta bude dokázána, jestliže dokážeme

$$(3.23) \quad \theta = \alpha(w) \text{ s.v. v } Q$$

a w je slabým řešením podle Def. 1.1. Srovnáním (3.21) s (1.10) vidíme, že k tomu, aby w bylo slabým řešením, stačí ukázat, že

$$(3.24) \quad y_i = \beta_i(w) \text{ s.v. v } Q_i, \quad i=1, \dots, m, \quad a$$

$$(3.25) \quad \gamma = g(\theta) \text{ s.v. na } \Sigma.$$

Pro důkaz (3.23) použijeme modifikovaný postup z [13] užívající samozřejmě monotonie α_i . Označme \mathcal{M}_T množinu všech $\tilde{w} \in L^2(Q)$ takových, že $\tilde{w}(\cdot, t) \in \mathcal{M}$ pro s.v. $t \in (0, T)$ a $\alpha(w) \in L^2(0, T; H^1(\Omega))$. Uvažujme nějaké $w \in \mathcal{M}_T$. Z (3.19) a (3.22) plyne, že

$$\langle r_h \alpha(w_{hk}) - \alpha(\tilde{w}), \hat{w}_{hk} - \tilde{w} \rangle \text{ konverguje k } \langle \theta - \alpha(\tilde{w}), w - \tilde{w} \rangle$$

kde $\langle \dots \rangle$ označuje dualitu mezi $L^2(0, T; H^1(\Omega))$ a $L^2(0, T; (H^1(\Omega))^n)$ vzniklou současným prodloužením a zúžením skalárního součinu $(\dots)_Q$. Protože navíc $w - \tilde{w} \in L^2(Q)$, můžeme $\langle \dots \rangle$ zaměnit $(\dots)_Q$. Platí zřejmě:

$$\begin{aligned} (r_h \alpha(w_{hk}) - \alpha(\tilde{w}), \hat{w}_{hk} - \tilde{w})_Q &= (\alpha(w_{hk}) - \alpha(\tilde{w}), w_{hk} - \tilde{w})_Q^h \\ &+ ((r_h \alpha(w_{hk}) - \alpha(\tilde{w}), w_{hk} - \tilde{w})_Q - (r_h \alpha(w_{hk}) - \alpha(\tilde{w}), w_{hk} - \tilde{w})_Q^h) \\ &+ (r_h \alpha(w_{hk}) - \alpha(\tilde{w}), \hat{w}_{hk} - w_{hk})_Q = \\ &= I_1 + I_2 + I_3. \end{aligned}$$

V důsledku monotonie α_i (viz (2.3)) je $I_1 \geq 0$. Užitím (3.1) a (3.2) dostaneme odhad:

$$|I_2| \leq h \cdot C_4 C_5 \|r_h \alpha(w_{hk}) - \alpha(\tilde{w})\|_{L^2(0, T; H^1(\Omega))} \|w_{hk} - \tilde{w}\|_Q = \mathcal{O}(h).$$

Člen I_3 konverguje k nule pro $h \rightarrow 0, k \rightarrow 0$, neboť posloupnost $\{r_h \alpha(w_{hk}) - \alpha(\tilde{w})\}$ je omezená v $L^2(0, T; H^1(\Omega))$ a platí odhad:

$$\begin{aligned} & \| \hat{w}_{hk} - w_{hk} \|_{L^2(0,T;(H(\Omega))^*)}^2 = \\ & = \sum_{n=1}^{T/k} \int_{(n-1)k}^{nk} \| (w_{hk}^n - w_{hk}^{n-1})(t-(n-1)k)/k \|_{(H^1(\Omega))^*}^2 dt = \\ & = \frac{k}{3} \sum_{n=1}^{T/k} \| w_{nk}^n - w \|_{(H^1(\Omega))^*}^2 = \\ & = (k^2/3) \| \partial w_{hk} / \partial t \|_{L^2(0,T;(H^1(\Omega))^*)}^2 = O(h^2 + k^2). \end{aligned}$$

Použili jsme přitom apriorního odhadu (3.11). Vidíme tedy, že $\lim_{h,k \rightarrow 0} I_1 + I_2 + I_3 \geq 0$, tj.

$$(3.26) \quad (\Theta - \alpha(\tilde{w}), w - \tilde{w})_Q \geq 0.$$

Ukážeme nyní, že množina \mathcal{M}_T je hustá v $L^2(Q)$. Vezměme nějaké $\bar{w} \in L^2(Q)$. Pro každé $\epsilon > 0$ definujeme \bar{w}_ϵ tak, že $\bar{w}_\epsilon(x,t) = 0$ je-li (x,t) v ϵ -okolí nějakého Γ_{ij} , jinak položíme $\bar{w}_\epsilon(x,t) = \bar{w}(x,t)$, a dále vezměme \tilde{w}_ϵ jako výsledek zhlazení \bar{w}_ϵ mollifierem s nosičem v kouli v R^{N+1} o poloměru menším než ϵ . Zřejmě $\tilde{w}_\epsilon \rightarrow \bar{w}_\epsilon$ v $L^2(Q)$ pro $\epsilon \rightarrow 0$, $\tilde{w}_\epsilon \in C^\infty(Q)$. Vzhledem k (2.3) je $\alpha_i(\tilde{w}_\epsilon) \in H^1(Q_i)$ pro $i=1, \dots, m$, a protože jsme předpokládali $\alpha_i(0) = 0$, je $\alpha_i(\tilde{w}_\epsilon) = 0$ na Σ_{ij} pro všechna $i \neq j$, a tudíž je "slepená" funkce $\alpha(\tilde{w}_\epsilon)$ v $H^1(Q)$. Tedy $\tilde{w}_\epsilon \in \mathcal{M}_T$.

Vzhledem k tomu, že (3.26) platí pro všechna $\tilde{w}_\epsilon \in \mathcal{M}_T$, \mathcal{M}_T je hustá množina v $L^2(Q)$ a Nemyckého operátor $\tilde{w} \rightarrow \alpha(\tilde{w})$ je spojité v $L^2(Q)$ v důsledku podmínky (2.3), dostaneme (3.23) modifikovaným Mintyho trikem: dosaďme do (3.26) $\tilde{w} = w + \epsilon \bar{w} + \epsilon^2 w_\epsilon$ s $\bar{w} \in L^2(Q)$ libovolným a w_ϵ takovým, aby $\|w_\epsilon\|_Q \leq 1$ a $w_\epsilon \in \mathcal{M}_T$ pro všechna $\epsilon > 0$; pak zkraťme ϵ , a limitním přechodem $\epsilon \searrow 0$ dostaneme $(\Theta - \alpha(w), \bar{w})_Q \leq 0$, z čehož již (3.26) ihned plyne neboť \bar{w} bylo libovolné.

Vztahy (2.24) se dokáží analogicky s použitím (3.18) místo (3.19) a (3.7) místo (3.6) (tedy (3.11 i) místo (3.11)). Odpadne přitom "slepování" funkcí \tilde{w}_ϵ mezi jednotlivými oblastmi Ω_i , které bylo použito při důkazu hustoty \mathcal{M}_T v $L^2(Q)$.

Zbývá dokázat (3.25). Z (3.19) dostaneme slabou konvergenci příslušných stop na Σ v prostoru $L^2(0, T; H^{1/2}(\Gamma))$, a tedy i v $L^2(\Omega)$. Užitím (3.19), (3.20) a předpokladu (3.13) dostaneme pro libovolné $\tilde{\theta} \in L^2(\Sigma)$:

$$\limsup_{h, k \rightarrow 0} (g(r_h \alpha(w_{hk})) - g(\tilde{\theta}), r_h \alpha(w_{hk}) - \tilde{\theta})_{\Sigma} \leq (\gamma - g(\tilde{\theta}), \theta - \tilde{\theta})_{\Sigma},$$

neboť funkcionál $\xi \mapsto (g(\xi), \xi)_{\Sigma}$ je konkávní, a tedy slabě shora polospojité na $L^2(\Sigma)$. Použitím monotonie g (viz předpoklad (2.4)) dostaneme ihned:

$$(g(r_h \alpha(w_{hk})) - g(\tilde{\theta}), r_h \alpha(w_{hk}) - \tilde{\theta})_{\Sigma} \geq 0,$$

a tedy také $(\gamma - g(\tilde{\theta}), \theta - \tilde{\theta})_{\Sigma} \geq 0$. Vztah (3.25) se již dostane obvyklým Mintyho trikem. ■

Bohužel se nepodařilo udělat přechod v hraničním členu technikou z [13] nevyžadující podmínku (3.13) (s předpokladem (2.6) by se ovšem tento přechod udělal celkem snadno).

Zmiňme se ještě o problému s jednoznačností slabého řešení podle Def.1.1. Lze konstatovat, že tento problém je dosud obecně neřešený, a to i pro homogenní prostředí ($m=1$). Původní technika navržená Kamenomostskou [6] byla použita v [9], avšak pouze pro hladké oblasti. Pro Lipschitzovské oblasti existuje velmi jednoduchý způsob důkazu existence, vyžadující ale jistý speciální tvar okrajových podmínek (totiž linearitu vzhledem ke Kirchhoffově teplotě); pro případ smíšené okrajové úlohy s Dirichletovými okrajovými podmínkami viz [14], pro pouhé Newtonovy podmínky viz [12; Remark 4.5]. Podobně se též dokazuje jednoznačnost pro Stefanovy úlohy formulované pomocí Duvautovy transformace ve tvaru variační nerovnice, viz [11], přitom je opět nutno omezit se na speciální okrajové podmínky. V našem případě pro $m \geq 2$ vyžaduje bohužel tento jednoduchý způsob ještě omezující podmínku (2.6).

Lemma 3.3 Nechť platí (2.3), (2.4), (2.6) a $g(x, t, \theta) = g^0(x, t) + g^1(x, t) \cdot \theta$ (tj. (1.5) jsou klasické lineární Newtonovy okrajové podmínky). Pak existuje nejvýše jedno slabě řešení podle Def. 1.1.

Důkaz: Nechť $w_1, w_2 \in L^2(Q)$ jsou dvě slabá řešení. Odečtení (1.10) pro w_1 a w_2 dostaneme identitu:

$$(3.27) \quad (w_1 - w_2, \partial z / \partial t)_Q - \sum_{i=1}^m (\nabla \beta(w_1) - \nabla \beta(w_2), \nabla z)_Q - (g^1 \cdot (\alpha(w_1) - \alpha(w_2)), z)_\Sigma = 0.$$

Položíme $z(x, t) = \int_t^T (\alpha(w_2) - \alpha(w_1))(x, \tau) d\tau$. Zřejmě $z \in H^1(Q)$ a $z(\cdot, T) = 0$, tedy takto definované z je dobrá testovací funkce pro (3.27). Dosazením tohoto z do (3.27) a použitím identity:

$$\int_0^T (f(t) \cdot \int_t^T f(\tau) d\tau) dt = \frac{1}{2} \left(\int_0^T f(t) dt \right)^2$$

dostaneme:

$$(w_1 - w_2, \alpha(w_1) - \alpha(w_2))_Q + \sum_{i=1}^m (\sqrt{\lambda_i} / 2) \left\| \int_0^T (\nabla \alpha(w_1) - \nabla \alpha(w_2)) dt \right\|_{\Omega_i}^2 + \frac{1}{2} \int_{\Gamma} g^1 \cdot \left(\int_0^T (\alpha(w_1) - \alpha(w_2)) dt \right)^2 dS = 0.$$

V důsledku (2-3.) a (2.4) (pak zřejmě $g^1 \geq 0$) dostaneme $\alpha(w_1) = \alpha(w_2)$ s.v. v Q , a také $\beta(w_1) = \beta(w_2)$ s.v. v Q . Dosazením do (3.27) dostaneme $w_1 = w_2$ s.v. v Q , neboť z lze vzít libovolně. ■

Poznamenejme ještě, že pro homogenní prostředí ($m=1$) se dokazuje jednoznačnost řešení Stefanovy úlohy ve Grandall-Liggettově smyslu v [8]. Není ale zcelařejmé, jak toto řešení, generované pomocí kontraktivní semigrupy v $L^1(\Omega)$, souvisí s řešením podle Def.1.1.

4. Aproximace teploty v "lepších" prostorech, speciální případy

Fatální nedostatek přístupu z odst. 3 je ten, že nedává žádný odhad pro časovou derivaci teploty, a tedy neumožňuje dokázat konvergenci přibližných teplot lepší než ve slabé topologii prostoru typu $L^2(0, T; \cdot)$.

Zmínme se o jednom triviálním případě, totiž c_i z (1.3) jsou teplotně nezávislé (což také vyloučí Stefanovu úlohu). Pak totiž odhad (3.11) platí též pro lineárně interpolovanou (myšleno v čase) teplotu $\alpha(\hat{w}_{hk})$ a z kompaktnosti vnoření $L^2(0, T; H^1(\Omega)) \cap \Omega H^1(0, T; (H^1(\Omega))^*)$ do $L^2(0, T; H^{1-\epsilon}(\Omega))$ s libovolným $\epsilon > 0$ (což plyne z [7; Kap. 1, Věta 5.1]) můžeme dostat silnou konvergenci teplot např. v $L^2(Q)$, a to i bez předpokladu (3.33), neboť stopy

teplot $\alpha(\hat{w}_{hk})$ na Σ konvergují silně v $L^2(0, T; H^{1/2-\epsilon}(\Gamma))$, a tedy i v $L^2(\Sigma)$, což umožňuje použít spojitosti Němyckého operátoru generovaného funkcí g na $L^2(\Sigma)$.

Jiný, poněkud méně triviální speciální případ nastane v situaci (2.16). Pak můžeme totiž použít techniky testovacích funkcí pro (2.2) nikoli $v = r_h \alpha(w_{hk}^n)$ jako v důkazu Věty 3.1., ale $v = r_h (\alpha(w_{hk}^n) - \alpha(w_{hk}^{n-1}))$. Tato technika byla použita v homogenním případě (tj. $n=1$) pro diskrétní případ v [10], a pro regularizovanou spojitou úlohu v [13]. Tato technika vyžaduje některé další předpoklady na data úlohy, což je přirozené, neboť dává silnější výsledky. Na druhé straně se ale obejde bez předpokladu (3.7) a (3.13) (předpoklad (3.7) by bylo nutno užít v případě okrajových podmínek, které nemají lineární růst, např. Stefan-Boltzmannova typu). Budeme předpokládat:

$$(4.1) \quad g(x, t, \theta) = g_a(x, \theta) + g_b(x, t), \\ |g_a(x, \theta)| \leq C_{20} + C_{21} |\theta| \quad \forall x \in \Gamma, \theta \in \mathbb{R}, \\ \partial g_b / \partial t \in L^2(\Sigma),$$

$$(4.2) \quad w_0 \in M_{NH^1}(\Omega).$$

Označme $\theta_{hk} \in C^0(0, T; V_h^0)$ lineární interpolaci $r_h \alpha(w_{hk}^n)$ na intervalech $[(n-1)1, nk]$ takovou, že $\theta_{hk}(\cdot, nk) = r_h \alpha(w_{hk}^n)$, $n=0, \dots, T/k$.

Věta 4.1. Nechť platí (2.3), (2.4), (2.6), (3.3), (4.1) a (4.2). Pak existuje C_{22} (nezávislá na h a k) taková, že:

$$(4.3) \quad \|\theta_{hk}\|_{L^1(0, T; H^1(\Omega))} + \|\partial \theta_{hk} / \partial t\|_{L^2(Q)} \leq C_{22}, \\ \|r_h \alpha(w_{hk}^n)\|_{L^\infty(0, T; H^1(\Omega))} \leq C_{22}.$$

Důkaz: (Nochetto [10], modifikováno). Označme $\alpha^n = r_h \alpha(w_{hk}^n)$ a $B_j = \frac{1}{k} \sum_{n=1}^j \|\alpha^n - \alpha^{n-1}\|_{\Omega}^2$. Dosaďme do (2.2) $v = \alpha^n - \alpha^{n-1}$ (zřejmě v je dobrá testovací funkce neboť α^n jsou z V_h^0), počteme (2.2) pro $n=1, \dots, j$, $j \leq T/k$, uijeme nerovnosti

$$2 \sum_{n=1}^j \xi^n (\xi^n - \xi^{n-1}) \geq (\xi^j)^2 - (\xi^0)^2.$$

při použití (2.6) dostaneme:

$$(4.4) \quad \sum_{i=1}^m \lambda_i \|\nabla^j\|_{\Omega_i}^2 + 2C_1 B^j \leq \\ \leq \sum_{i=1}^m \lambda_i \|\nabla \alpha^0\|_{\Omega_i}^2 - 2 \sum_{n=1}^j (g(\alpha^n), \alpha^n - \alpha^{n-1})_{\Gamma}^h = I_1 + I_2.$$

Byl přitom použit odhad užívající (2.3) a (3.3):

$$\|\alpha^n - \alpha^{n-1}\|_{\Omega}^2 \leq (\alpha^n - \alpha^{n-1}, \alpha^n - \alpha^{n-1})_{\Omega}^h \leq (1/C_1) (w^n - w^{n-1}, \alpha^n - \alpha^{n-1})_{\Omega}^h$$

Vzhledem k (4.2) má primitivní funkce k g_a vzhledem kp proměnné θ , označme ji G_a , kvadratický růst, tj. $|G_a(x, \theta)| \leq C_{20} + C_{21} \theta^2/2$ pro všechna $x \in \Gamma, \theta \in \mathbb{R}$. Člen I_2 v (4.4) můžeme potom odhadnout následovně:

$$I_2 = - \int_0^{jk} (g(\theta_{hk}), \partial \theta_{hk} / \partial t)_{\Gamma}^h dt - \\ - \sum_{n=1}^j \int_{(n-1)k}^{nk} (g(\alpha^n) - g(\theta_{hk}(t)), \alpha^n - \alpha^{n-1})_{\Gamma}^h dt \leq \\ \leq - [G_a(\theta_{hk}, 1)]_{\Gamma}^h \Big|_{t=0}^{jk} + \int_0^{jk} (\partial g_b / \partial t, \theta_{hk})_{\Gamma}^h dt - \\ - [G_b, \theta_{hk}]_{\Gamma}^h \Big|_{t=0}^{jk} \leq \\ \leq C_{22} + C_{23} (\|\alpha^j\|_{\Gamma}^2 + k \sum_{n=1}^j \|\alpha^n\|_{\Gamma}^2).$$

Opět bylo použito (3.3). Konstanta C_{22} závisí pouze na C_{20} , $\|\partial g_b / \partial t\|_2$, $\|g_b(0)\|_{\Gamma}$ a $\text{meas}_{N-1} \Gamma$. Dále použijeme následující odhady:

$$\|\alpha^j\|_{\Gamma}^2 \leq a_1 \|\nabla \alpha^j\|_{\Omega}^2 + C_{24} \|\alpha^j\|_{\Omega}^2, \\ \|\alpha^j\|_{\Omega}^2 \leq \|\alpha^0\|_{\Omega}^2 + 2 \sum_{n=1}^j (\alpha^n, \alpha^n - \alpha^{n-1})_{\Omega} \leq \\ \leq \|\alpha^0\|_{\Omega}^2 + a_2 B^j + C_{25} k \sum_{n=1}^j \|\alpha^n\|_{\Omega}^2,$$

$$(4.5) \quad \|\alpha^n\|_{\Omega}^2 \leq (\|\alpha^0\|_{\Omega}^2 + \sum_{\lambda=1}^n \|\alpha^{\lambda} - \alpha^{\lambda-1}\|_{\Omega}^2) \leq 2 \|\alpha^0\|_{\Omega}^2 + 2TB^n.$$

Postupným dosazováním dostaneme odhad:

$$I_2 \leq C_{26} + a_3 \|\nabla \alpha^j\|_{\Omega}^2 + a_4 B^j + C_{27} k \sum_{n=1}^j (\|\nabla \alpha^n\|_{\Omega}^2 + B^n).$$

Přitom konstanty $a_k, a_2 > 0$, a tím také $a_3, a_4 > 0$ mohou být vzaty libovolně malé (konstanty C ovšem závisí na této volbě). Speciálně můžeme zvolit $a_3 \ll \min_{i=1, \dots, m} \lambda_i$, $a_4 < 2C_1$. Pak můžeme příslušné členy absorbovat v levé straně (4.4). Dostaneme tak odhad:

$$\|\nabla \alpha^j\|_{\Omega}^2 + B^j \leq C_{28} + C_{29}^k \sum_{n=1}^j (\|\nabla \alpha^n\|_{\Omega}^2 + B^n).$$

Diskretní Gronwallovou nerovností pak dostaneme odhad:

$$\max_{j=1, \dots, T/k} (\|\nabla \alpha^j\|_{\Omega}^2 + B^j) \leq C_{30},$$

a pomocí (4.5) též

$$\max_{j=1, \dots, T/k} \|\alpha^j\|_{\Omega}^2 \leq C_{31}.$$

Uvědomíme-li si, že $B^{T/k} = \|\partial \theta_{hk} / \partial t\|_Q^2$, dostaneme ihned dokazované odhady (4.3). ■

Poznámka 4.1. Předpoklad (4.2) nepopisuje dosti dobře situaci, kdy je žhaví tavenina vlita poměrně rychle do chladné formy. Počáteční podmínky pak vyhovují spíše pouze slabšímu předpokladu (2.5). Pro takový předpoklad bychom ovšem dostali slabší apriorní odhady (nahrazením prostoru $H^1(\Omega)$ prostorem funkcí, jejichž restrikce na jednotlivé oblasti Ω_i jsou v $H^1(\Omega_i)$). Tyto odhady by se použily ve větě 4.2 dále zhruba stejně jako (4.3), ale navíc by se muselo použít odhadu (3.10) k důkazu, že limitní teplota je v prostoru $L^2(0, T; H^1(\Omega))$.

Poznámka 4.2. Předpoklad (4.1) nepřipouští časovou změnu okrajových podmínek skokem v průběhu procesu chlazení odlitku, což nastane např. v případě náhlého zakrytí volného povrchu nálitku (Γ_1 na obr. 1) vrstvou žhavého koksu. Zobecnění na případ skoku v čase $t = t_k$ je ale jednoduché: v odhadu členu I_2 přibude člen $(\delta g_b(t_k), \alpha^1)_{\Gamma}$, kde $\delta g_b(t)$ značí skok funkce g_b v čase t . Tento člen se použitou technikou snadno odhadne např. tehdy, bude-li $\delta g_b(t) \in L^2(\Gamma)$.

Budeme navíc předpokládat, že

$$(4.6) \quad \forall i=1, \dots, m: \alpha_i^{-1} \text{ mají lineární růst.}$$

Věta 4.2. Nechť platí (2.3.1), (2.4), (2.6), (3.1.)-(3.4), (4.1), (4.2) a (4.6). Pak existuje podposloupnost posloupnosti přibližných řešení $\{w_{hk}\}$ (označme ji pro jednoduchost opět stejnými indexy) taková, že

$$\begin{aligned} r_h^\alpha(w_{hk}) &\rightharpoonup \alpha(w) && \text{slabě}^* \text{ v } L^\infty(0, T; H^1(\Omega)) , \\ \theta_{hk} &\rightharpoonup \alpha(w) && \text{slabě v } H^1(Q) , \\ w_{hk} &\rightharpoonup w && \text{slabě}^* \text{ v } L^\infty(0, T; L^2(\Omega)) , \end{aligned}$$

kde w je slabé řešení Stefanovy úlohy podle Def. 1.1.

Důkaz: Stejně jako v důkazu 3.2 věty dojdeme k identitě (3.14). Použitím předpokladu (4.6) a apriorního odhadu (4.3) dostaneme omezenost posloupnosti $\{w_{hk}\}$ v $L^\infty(0, T; L^2(\Omega))$. Dále z (4.3) dostaneme omezenost posloupnosti stop $\{r_h^\alpha(w_{hk})|_\Sigma\}$ v prostoru $L^\infty(0, T; H^{1/2}(\Gamma))$, a tím i v $L^2(\Sigma)$. Takto dostaneme (3.15). Nyní můžeme použít techniky z [12]. Vzhledem k apriorním odhadům (4.3) můžeme vzít takovou posloupnost posloupnosti $\{w_{hk}\}$ (označenou stejnými indexy), že

$$(4.7) \quad w_{hk} \rightharpoonup w \quad \text{slabě}^* \text{ v } L(0, T; L^2(\Omega)) ,$$

$$(4.8) \quad \theta_{hk} \rightharpoonup \theta \quad \text{slabě v } H^1(Q) , \text{ a}$$

$$(4.9) \quad r_h^\alpha(w_{hk}) \rightharpoonup \tilde{\theta} \quad \text{slabě}^* \text{ v } L^\infty(0, T; H^1(\Omega)) .$$

Platí:

$$\begin{aligned} \|\theta_{hk} - r_h^\alpha(w_{hk})\|_Q^2 &= \sum_{n=1}^{T/k} \int_{(n-1)k}^{nk} \|(\alpha^n - \alpha^{n-1})((t-(n-1)k)/k)\|_\Omega^2 dt = \\ &= (k/3) \sum_{n=1}^{T/k} \|\alpha^n - \alpha^{n-1}\|_\Omega^2 = (1^2/3) \|\partial\theta_{hk}/\partial t\|_Q^2 = O(k^2) . \end{aligned}$$

Použili jsme přitom samozřejmě (4.3). Odtud vidíme, že $\theta = \tilde{\theta}$.

Z (4.8) a z kompaktnosti vnoření $H^1(Q) \subset L^2(Q)$ vidíme, že

$\theta_{hk} \rightarrow \theta$ silně v $L^2(Q)$, a tudíž také

$$(4.10) \quad r_h^\alpha(w_{hk}) \rightarrow \theta \quad \text{silně v } L^2(Q) .$$

Dále platí odhad pro stoty na Σ :

$$\begin{aligned} \|\theta_{hk} - r_h \alpha(w_{hk})\|_{\Sigma}^2 &= (k/3) \sum_{n=1}^{T/k} \|\alpha^n - \alpha^{n-1}\|_{\Sigma}^2 = \\ &= (k/3) \sum_{n=1}^{T/k} \int_{(n-1)k}^{nk} \int_{(n-1)k}^{nk} \|(\theta_{hk}(t) - \theta_{hk}(\tau)) / (t - \tau)\|_{\Sigma}^2 dt d\tau \\ &\leq (k/3) \int_0^T \int_0^T \|(\theta_{hk}(t) - \theta_{hk}(\tau)) / (t - \tau)\|_{\Sigma}^2 dt d\tau \\ &\leq C_{32} k \|\theta_{hk}\|_{H^{1/2}(\Sigma)}^2 \leq C_{33} k \|\theta_{hk}\|_{H^1(Q)}^2 = O(k). \end{aligned}$$

Konstanty C_{32}, C_{33} závisí pouze na T a Ω . Z (4.8) a z kompaktnosti operátoru stop z $H^1(Q)$ do $L^2(\Sigma)$ vidíme, že $\theta_{hk}|_{\Sigma} \rightarrow \theta|_{\Sigma}$ silně v $L^2(\Sigma)$, a tedy také $r_h \alpha(w_{hk})|_{\Sigma} \rightarrow \theta|_{\Sigma}$ silně v $L^2(\Sigma)$. Spojitostí Německého operátoru generovaného funkcí g v $L^2(\Sigma)$ (tato spojitost je zaručena podmínkami (2.4) a (4.1) dostaneme:

$$(4.11) \quad g(r_h \alpha(w_{hk})) \rightarrow g(\theta) \quad \text{silně v } L^2(\Sigma).$$

Nyní dokážeme, že

$$(4.12) \quad \theta = \alpha(w).$$

Vezmeme $\tilde{w} \in \mathcal{M}_T$ (\mathcal{M}_T jako v důkazu věty 3.2). Z (4.7) a (4.10) vidíme, že $(r_h \alpha(w_{hk}) - \alpha(\tilde{w}), w_{hk} - \tilde{w})_Q$ konverguje k $(\theta - \alpha(\tilde{w}), w - \tilde{w})_Q$. Zřejmě platí:

$$\begin{aligned} (r_h \alpha(w_{hk}) - \alpha(\tilde{w}), w_{hk} - \tilde{w})_Q &= (\alpha(w_{hk}) - \alpha(\tilde{w}), w_{hk} - \tilde{w})_Q^h + \\ + (r_h \alpha(w_{hk}) - \alpha(\tilde{w}), w_{hk} - \tilde{w})_Q - (\alpha(w_{hk}) - \alpha(\tilde{w}), w_{hk} - \tilde{w})_Q^h &= I_1 + I_2. \end{aligned}$$

V důsledku monotonie α_i je zřejmě $I_1 \geq 0$. Pro druhý člen máme odhad:

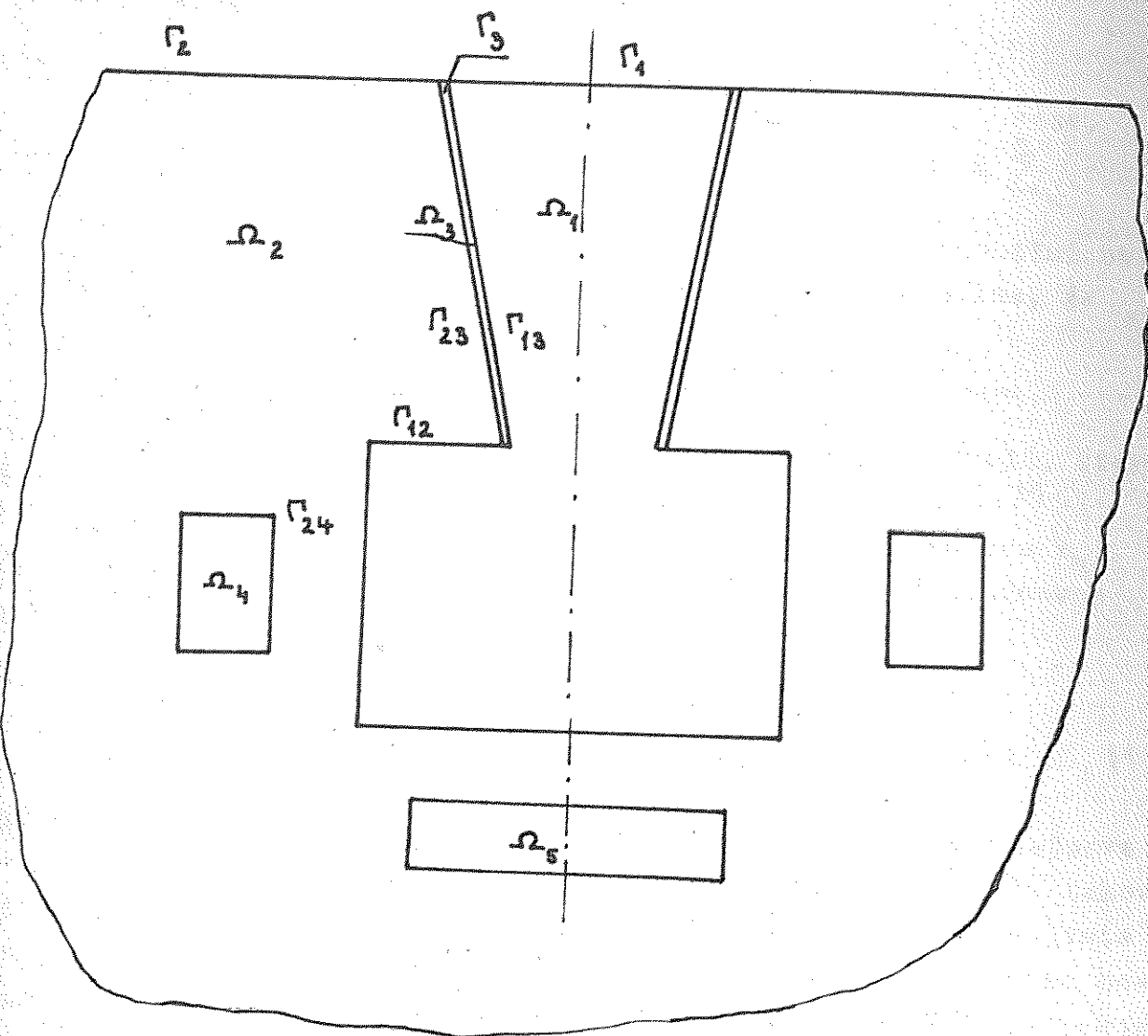
$$|I_2| \leq C_4 C_5 h \|r_h \alpha(w_{hk}) - \alpha(\tilde{w})\|_{L^2(0, T; H^1(\Omega))} \|w_{hk} - \tilde{w}\|_Q = O(h).$$

Vidíme tedy, že $(\theta - \alpha(\tilde{w}), w - \tilde{w})_Q \geq 0$. Odtud již (4.12) plyne modifikovaným Nintyho trikem s použitím hustoty \mathcal{M}_T v $L^2(Q)$ jako v důkazu věty 3.2.

S použitím (4.10), (4.12) a (2.6) vidíme ihned, že

$$(4.13) \quad r_h \beta(w_{hk}) \rightarrow \beta(w) \quad \text{silně v } L^2(Q) .$$

Použitím (3.15), (4.11) a (4.13) můžeme provést limitní přechod v (3.14), a vidíme, že w je slabým řešením podle Def. 1.1. \square



Obr. 1.: Schematické znázornění situace při tuhnutí odlitku:

- Ω_1 odlitek (= vlastní odlitek+nálitok)
- Ω_2 slévarenský písek
- Ω_3 izolační deska
- Ω_4, Ω_5 .. chladítka (=velká kovová tělesa)
- Γ_1 volný povrch nálitku, (který je možno ohřívat horkým koksem)

5. Implementace diskretizovaného modelu

Za interpolační operátor $r_h: M \rightarrow V_h$ zvolíme lineární interpolační polynom takový, že

$$(5.1) \quad \forall r \in M: (r_h r) Q_i = r(Q_i); \quad \forall Q_i \in \Sigma_h - \overset{\circ}{\Sigma}_h, \quad \text{resp.} \\ (r_h r) Q_i = \lim_{\substack{x \rightarrow Q_i \\ x \in \text{int } K}} r(x), \quad k \in Z_h \text{ pevné}, \quad Q_i \in \overset{\circ}{\Sigma}_h.$$

Z je množina uzavřených simplexů obsažených v polygonální oblasti $\bar{\Omega}_h$, která aproximuje oblast $\bar{\Omega}$. Přitom předpokládáme, že

$$(5.2) \quad \bar{\Omega}_h = \bigcup_{m=1}^M \Omega_{h,m} \quad \text{a} \quad \partial \Omega_h = \bigcup_{m=1}^M \Gamma_{h,m}$$

Σ_h značíme množinu vrcholů Z_h a $\overset{\circ}{\Sigma}_h$ množinu těch vrcholů, které leží na společných hranicích oblastí $\Omega_{h,m}$, $m = 1, 2, \dots, M$.

$N(h)$ budeme označovat dimenzi konečně rozměrného prostoru V_h . Za bázi $\{\pi_i\}$ tohoto prostoru volíme po částech lineární funkce takové, že

$$(5.3) \quad \pi_i(Q_j) = \delta_{ij} \quad \forall Q_j \in \Sigma_h$$

které mají nosič právě v jedné oblasti $\bar{\Omega}_{h,m}$, $m = 1, 2, \dots, M$.

Budeme předpokládat, že máme Σ_h očíslovánu a to tak, že nejprve očíslovujeme vrcholy simplexů $k \in \Omega_{h,1}$, pak $\Omega_{h,2}$ atd. Při takovém očíslování bude ještě existovat vrchol $Q \in \bigcap_{m \in I} \bar{\Omega}_{h,m}$. I je jistá indexová množina. To znamená, že takový vrchol lze referovat pomocí různých (tzv. konicidenčních) indexů. Je-li $Q_i \in \Sigma_h$ definujeme $I(i) = \{j \in N; Q_i = Q_j\}$. Speciálně $I(i) \neq \emptyset$. V dalším zvolíme testovací funkci π_i takovou, že

$$\text{supp } \pi_i \subset \bar{\Omega}_{h,m}, \quad \text{pro jisté } m.$$

Pro výpočet bilineárních forem (\dots) , $a(\dots)$, $\langle \dots \rangle$, definovaných vztahy

$$(u, r) = \int_{\Omega} u \cdot r \, dx, \\ a(u, r) = \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla r \, dx, \\ \langle u, r \rangle = \int_{\partial \Omega} u \cdot r \, dS; \quad \forall u, r \in H^1(\Omega),$$

Použijeme kvadraturní formule (2.1) ve tvaru ($N=2$)

$$(5.4) \quad a) \quad I_k(\nu) = \frac{1}{3} \text{meas}(k) \sum_{i=1}^3 \nu(Q_i); \quad Q_i \in \Sigma_h - \overset{\circ}{\Sigma}_h, \quad i = 1, 2, 3$$

$$b) \quad I_k(\nu) = \frac{1}{3} \text{meas}(k) \sum_{i=1}^3 \lim_{\substack{x \rightarrow Q_i \\ x \in \text{int} k}} \nu(x); \quad Q_i \in \overset{\circ}{\Sigma}_h \text{ pro nějaké } i = 1, 2, 3$$

Označme dále

$$(5.5) \quad (u, \nu)_{\Omega_h}^h = \sum_{k \in \mathcal{T}_h} I_k(u, \nu)$$

$$(5.6) \quad a_h(u, \nu)_{\Omega_h} = \sum_{k \in \mathcal{T}_h} I_k(\nabla u \cdot \nabla \nu)$$

$$(5.7) \quad \langle u, \nu \rangle_{\Gamma_h}^h = \sum_{k' \subset \Gamma_h} I_{k'}(u, \nu) \quad \forall u, \nu \in V_h$$

$\partial\Omega_h = \Gamma_h$ a $k' \in \overline{\mathcal{T}}_h$. Přitom

$$I_{k'}(\nu) = \frac{1}{2} \text{meas}(k') \sum_{i=1}^2 \nu(Q_i); \quad Q_i \in \Sigma_h - \overset{\circ}{\Sigma}_h, \quad i = 1, 2, 3$$

$$I_{k'}(\nu) = \frac{1}{2} \text{meas}(k') \sum_{i=1}^2 \lim_{\substack{x \rightarrow Q_i \\ x \in \text{int} k'}} \nu(x); \quad Q_i \in \overset{\circ}{\Sigma}_h \text{ pro nějaké } i = 1, 2, 3$$

Řešení rovnice (2.2) hledáme ve tvaru

$$(5.8) \quad w_{hk}^n = \sum_{j=1}^{N(h)} \lambda_j^n \nu_j, \quad \nu_j \in V_h$$

Vzhledem k (5.1), (5.3) a (5.4) je

$$(5.9) \quad (w_{hk}^n, \nu_i)_{\Omega_{h,m}}^h = \frac{1}{3} \lambda_i^n \sum_{k \in \text{Supp } \nu} \text{meas}(k)$$

Užijeme-li (5.4) a (5.6) dostaneme

$$a_h(r_h \beta_m(w_{hk}^n), \nu_i)_{\Omega_{h,m}} = \frac{1}{3} \sum_{k \in \text{Supp } \nu} \text{meas}(k) \sum_{L=1}^3 (\nabla r_h \beta_m(w_{hk}^n) \cdot \nabla \nu_i) Q_L^k$$

Q_L^k jsou vrcholy simplexu K a $\beta_m = \beta|_{\Omega_{h,m}}$.

Vzhledem k (5.1) platí

$$r_h \beta_m(w_{hk}^n) = \sum_{j=1}^{N(h)} \beta_m(\lambda_j^n) \nu_j$$

Z toho plyne

$$(\nabla r_h \beta_m(w_{hk}^n) \cdot \nabla \nu_i) Q_L^k = \sum_{j=1}^{N(h)} \beta_m(\lambda_j^n) (\nabla \nu_j \cdot \nabla \nu_i) Q_L^k$$

Odtud dostaneme

$$(5.10) \quad a_h(r_h \beta_m(N_{hk}^n), N_i)_{\Omega_{h,m}} = \sum_{k \in \text{supp } N_i} \text{meas}(k) \sum_{j=1}^{N(h)} \beta_m(\ell_j^n) (\nabla N_j \cdot \nabla N_i) \Big|_k \\ = \sum_{j \in I(\text{supp } N_i)} \beta(\ell_j^n) \cdot \sum_{k \in \text{supp } N_j \cap \text{supp } N_i} \text{meas}(k) \cdot (\nabla N_j \cdot \nabla N_i) \Big|_k.$$

Přitom jsme využili toho, že $\nabla N_i \Big|_k = \text{const.} \forall N_i \in V_h$.
 $I(\text{supp } v_i)$ je množina indexů vrcholů všech $k \in \text{supp } N_i$; $k \in \mathcal{T}_h$.
 Použijeme-li (5.4) a (5.7) máme

$$\begin{aligned} \mathbb{I}_k'(g(\alpha_m(N_{hk}^n)), N_i) &= \frac{1}{2} \text{meas}(k') \sum_{j \in I(k')} (g(\alpha_m(N_{hk}^n)) N_i) Q_j^{k'} \\ &= \frac{1}{2} \text{meas}(k') g(\alpha_m(N_{hk}^n)) Q_i^k = \frac{1}{2} \text{meas}(k') g(\alpha_m(\ell_i^n)), \end{aligned}$$

a tedy

$$(5.11) \quad \langle g(\alpha_m(N_{hk}^n)), N_i \rangle_{\Gamma_{h,m}} = \frac{1}{2} g(\alpha_m(\ell_i^n)) \sum_{k' \in \text{supp } N_i} \text{meas}(k').$$

Vztahy (5.9), (5.10) a (5.11) nám umožňují definovat matici MT, vektory MH a MB: (matice tuhosti, hmotnosti a okrajových podmínek; poslední dvě lze redukovat na vektory, protože jsou diagonální)

$$MT(i, j) = \sum_{k \in \text{supp } N_j \cap \text{supp } N_i} \text{meas}(k) (\nabla N_j \cdot \nabla N_i) \Big|_k$$

$$MH(i) = \frac{1}{3} \sum_{k \in \text{supp } N_i} \text{meas}(k)$$

$$MB(i) = \frac{1}{2} \sum_{k' \in \text{supp } N_i \cap \Gamma_{h,m}} \text{meas}(k')$$

Rovnici (2.2) můžeme nyní přepsat do vektorového tvaru pro neznámý vektor $(e_{\lambda}^n)_{\lambda=1}^{N(h)}$. Jestliže zvolíme $Q_{\lambda} \in \sum_n$, odpovídají tomuto vrcholu hodnoty $\{e_j^n, j \in I(\lambda)\}$. To znamená, že v takovém uzlu řešíme nelineární systém rovnic pro $\{e_j^n; j \in I(\lambda)\}$.

Pomocí množiny $I(\lambda)$ zapíšeme rovnici (2.2) takto:

$$(5.12) \quad \sum_{\lambda_c \in I(\lambda)} [MH(\lambda_c) \cdot e_{\lambda_c}^n + k \sum_{j=1}^{N(h)} MT(\lambda_c, j) / \beta_{m(j)}(e_j^n) + k MB(\lambda_c) g(\alpha_{m(\lambda_c)}(e_{\lambda_c}^n))] = \sum_{\lambda_c \in I(\lambda)} MH(\lambda_c) e_{\lambda_c}^{n-1}; \lambda = 1, 2, \dots, N(h)$$

m_j představuje číslo oblasti v závislosti na indexu j ; $m(\lambda_c)$ obdobně.

Jelikož je $I(\lambda) > 1$, doplňujeme pro toto λ rovnici z (5.12) o systém

$$\alpha_{m(j)}(e_j^n) = \alpha_{m(\lambda)}(e_{\lambda}^n) \quad \forall j, \lambda \in I(\lambda) \quad \alpha \neq \lambda.$$

Tato podmínka plyne z požadavku, $\alpha \in \dot{V}_h$.

V modelu, který bude dále popisován, předpokládáme, že je

$$(5.13) \quad \max_{\lambda} I(\lambda) \leq 2.$$

Tato podmínka ve skutečnosti znamená, že se mohou stýkat nevíce dva různé materiály.

6. Řešení systému (5.12).

Systém (5.12) představuje nelineární soustavu rovnic pro neznámý vektor $(e_j^n)_{j=1}^{N(h)}$. Vzhledem k tvaru systému se ukazuje vhodné využít k jeho řešení nelineární verze Gauss.-Seidelovy metody. V našem případě se liší od lineární Gauss.-Seidelovy metody v tom, že pro výpočet další iterace e_j^n nepoužívá jedno-nebo dvou rozměrná Newtonova metoda. Označme tedy λ -tou iteraci vektoru $(e_j^n)_{j=1}^{N(h)}$ získaném (nelineární Gauss.-Seidelovou metodou $(e_j^{n, \lambda})_{j=1}^{N(h)}$).
 Je-li $Q_{\lambda} \in \sum_n$ a současně $Q_{\lambda} \in \Gamma$ je třeba pro výpočet $e_{\lambda}^{n, \lambda+1}$ a $e_{\lambda_c}^{n, \lambda+1}$ (neboť $I(\lambda) = \{\lambda, \lambda_c\}$) vyřešit tuto soustavu:

$$\begin{aligned}
 & MH(i) x_i^{n, l+1} + MH(i_c) x_{i_c}^{n, l+1} + k \cdot MT(i) \beta_{m(i)} (x_i^{n, l+1}) + \\
 & + k \cdot MT(i_c) \beta_{m(i_c)} (x_{i_c}^{n, l+1}) + k \cdot MB(i) g(u_{m(i)}(x_i^{n, l+1})) + \\
 (6.1) \quad & + k \cdot MB(i_c) g(u_{m(i_c)}(x_{i_c}^{n, l+1})) = F
 \end{aligned}$$

$$u_{m(i)}(x_i^{n, l+1}) = u_{m(i_c)}(x_{i_c}^{n, l+1}).$$

Do pravé strany jsme zahrnuli všechny členy, které nezávisí na $x_i^{n, l+1}$ a $x_{i_c}^{n, l+1}$.

Je-li $Q_i \in \sum_h$ a $Q_i \notin \Gamma$ odpadnou z prvních rovnic (6.1) členy

$$k \cdot MB(i) g(u_{m(i)}(x_i^{n, l+1})) \text{ a } k \cdot MB(i_c) g(u_{m(i_c)}(x_{i_c}^{n, l+1})).$$

V obou těchto případech používáme pro výpočet $x_i^{n, l+1}$ a $x_{i_c}^{n, l+1}$ dvourozměrné Newtonovy metody.

Jestliže $Q_i \in \sum_h - \sum_h$ je nutno řešit jedinou nelineární rovnici pro výpočet $x_i^{n, l+1}$.

$$MH(i) x_i^{n, l+1} + k \cdot MT(i) \beta_{m(i)} (x_i^{n, l+1}) + k \cdot MB(i) g(u_{m(i)}(x_i^{n, l+1})) = F.$$

Přitom poslední člen na levé straně se v této rovnici objeví v závislosti na tom, zda je Q_i hraniční bod.

Popišme první z uvedených možností.

Označme pro jednoduchost $x = x_i^{n, l+1}$ a $y = x_{i_c}^{n, l+1}$.

Rovnice v (6.1) mají tvar:

$$(6.2) \quad A \cdot x + B \cdot y + C \cdot f_1(x) + D \cdot f_2(y) + E \cdot g_1(x) + F \cdot g_2(y) = G$$

Definujme, $\mathcal{F} = (F_1, F_2)$, kde F_1, F_2 jsou po řadě rozdíly levých a pravých stran v (6.2). Potom

$$x^{n+1} = x^n - \left(\frac{\partial F_2}{\partial y} \cdot x^n - \frac{\partial F_1}{\partial y} \cdot y^n \right) \cdot \alpha$$

$$y^{n+1} = y^n - \left(-\frac{\partial F_2}{\partial x} \cdot x^n + \frac{\partial F_1}{\partial x} \cdot y^n \right) \cdot \alpha$$

$$\alpha = \left(\frac{\partial F_1}{\partial x} \cdot \frac{\partial F_2}{\partial y} - \frac{\partial F_2}{\partial x} \cdot \frac{\partial F_1}{\partial y} \right)^{-1} (x^n, y^n).$$

Přitom

$$\frac{\partial F_1}{\partial x} = A + C f'_1 + E g'_1$$

$$\frac{\partial F_1}{\partial y} = B + D f'_2 + F g'_2$$

$$\frac{\partial F_2}{\partial x} = \frac{\partial h_1}{\partial x}$$

$$\text{a} \quad \frac{\partial F_2}{\partial y} = - \frac{\partial h_2}{\partial y}$$

Existence derivací f'_1, f'_2, g'_1, g'_2 plyne z předpokladů na funkce α, β , a g . Funkce α, β jsou po částech lineární, proto v krajních bodech intervalů na nichž jsou lineární uvažujeme jednostranné derivace. Nenulovost faktoru α plyne z toho, že $A, B, C, D, E, F > 0$ a $f'_i \geq 0, g'_i \geq 0, i = 1, 2$.
Obdobně lze posoudit ostatní případy.

7. Realizace popsaného modelu.

Uvedený systém (5.12) a z něho odvozené rovnice (6.1) resp. (6.2) vznikly tím, že na společných hranicích oblastí pískochladítka, písk-odlitek uvažujeme vždy dvě různé hodnoty entalpie, např. $\lambda_{i,c}^n$ a $\lambda_{i,c}^n$. Vzhledem k tomu, jak číslujeme seznam Σ_n (viz kap. 5), přísluší tyto hodnoty entalpií formálně dvěma uzlům (různým jen vzhledem ke svým indexům nikoli souřadnicím). Tento přístup se promítá do celého algoritmu výpočtu, který je tak poměrně jednoduchý.

Nejprve inicializujeme vektory obsahující vrcholy seznamu Σ_n ; pomocné vektory, sestavíme matici MT , vektory MI a MB . Spočteme vektory charakterizující funkce α, β a vypočítáme ze zadaných hodnot vektor λ^0 . Potom počítáme λ^{n+1} z vektoru λ^n .

Protože, jak jsme už řekli, je nutné znát při výpočtu vektoru λ^n eventuelně oba indexy vektoru Q_i , ve kterém počítáme λ_i^n , vytváří se během generační triangulace matice $ICION$, která má tuto strukturu:

$$\text{ICOIN}(I,1) = \begin{cases} 0 & \text{i-tý vrchol nekoniciduje s žádným vrcholem} \\ >0 & \text{i-tý vrchol koniciduje s vrcholem } \text{ICOIN}(I,1) \end{cases}$$

Přitom $\text{ICOIN}(I,2)$ je číslo oblasti, ve které i -tý vrchol leží. Toto číslo je podstatné pro výpočet hodnot funkcí α, β , které jsou pro různé materiály různé. Je-li $\text{ICOIN}(I,1) > 0$ je $\text{ICOIN}(\text{ICOIN}(I,1),2)$ číslo oblasti v níž leží konicidující vrchol a navíc platí

$$(7.1) \quad \text{ICOIN}(\text{ICOIN}(I,1),1) = \text{ICOIN}(I,1).$$

Pokud by se v budoucnu ukázalo, že je nutné připustit existenci také takových vrcholů, ve kterých se stýkají více než dva materiály (např. odlitek, chladítko, písek) podm. (7.1) samozřejmě neplatí. Tato struktura popisu triangulace umožňuje velice snadno vyhledat vrcholy společné různým materiálům.

V případě, že hranice odlitku nebo chladítek budou geometricky složité, je nutné na jejich triangulaci použít programů generujících τ_h a Σ_h automaticky. Vzhledem k tomu, že jsme programové vybavení připravovali bez ohledu na to, že jako testovací příklad používáme "uniformní" triangulace oblasti Ω . V případě složitých geometrií společných hranic je tedy velmi pravděpodobné, že triangulaci je nutné generovat automaticky.

Vzhledem k tomu, že podoblast Ω_{h,m_0} vyplněná slévárenským pískem není jednoduše souvislá, bude nutné generovat $\Sigma_{h,m}$ pro $m=1,2,\dots,M$ postupně. V tomto případě by mohla být šířka pásu matice MT značná. Proto ji ukládáme následujícím způsobem: reprezentujeme ji maticí \overline{MT} typu $N(h) \times NN$, kde NN je maximální počet sousedů jednoho uzlu a maticí IB stejného typu. V matici \overline{MT} máme uloženy jen nenulové prvky matice MT a v matici IB (typu INTEGER) jsou uloženy jejich řádkové indexy. Vzhledem k tomu, že používáme vrzi Gauss-Seidelova algoritmu, je vždy $\overline{MT}(I,1) = MT(I,1)$. Dále pak je-li $J_0 = IB(I, J_1)$ pro nějaké $1 \leq J_1 \leq NN$ je

$$MT(I, J_0) = \overline{MT}(I, J_1).$$

Při implementaci nelineární Gauss-Seidelovy metody používáme následující úpravy. Je-li $Q_i \in \Sigma_h$ a je-li např. $Q_i = Q_{i_2}$, vy-

počteme při (L+1)-ním kroku současně $\rho_{i,c}^{n,l+1}$ a $\rho_{i,c}^{n,l}$.

Je-li $i < \bar{I}$ hodnotu $\rho_{i,c}^{n,l+1}$ již znovu nepočítáme.

Prakticky to znamená, že při očíslování oblastí v němž má "pozadí" (tj. např. slévárenský písek) nejvyšší index, nepočítáme nikdy hodnoty $\rho_{i,c}^{n,l+1}$ pro

(7.2) $i \geq \text{IDTRN}(4 * (\text{NR}-1) + 1)$ jestliže $\text{ICOIN}(I,1) \neq \emptyset$.

NR je v tomto případě číslo oblasti obsahující slévárenský písek (a současně počet podoblastí). Vektor IDTRN popisuje \sum_h :

- IDTRN(4*(IR - 1) + 1) ... na začátek soupisu uzlů IR-té oblasti
- IDTRN(4*(IR - 1) + 2) ... počet uzlů na společné hranici
- IDTRN(4*(IR - 1) + 3) ... počet uzlů na hranici se zadanou Neumannovou podmínkou (ev. 0)
- IDTRN(4*(IR - 1) + 4) ... počet vnitřních uzlů IR-té oblasti.

Pro zastavení algoritmu nelineární Gauss-Seidelovy metody požadujeme aby

$$\| \rho^{n,l+1} - \rho^{n,l} \|_{N(h)} \leq \epsilon \| \rho^{n,0} - \rho^{n,l+1} \|_{N(h)}$$

Tuto podmínku lze také užít ve tvaru:

$$\| \rho^{n,l+1} - \rho^{n,l} \|_{N(h)} \leq \epsilon \| \rho^{n,l+1} \|_{N(h)}$$

Za $\rho^{n,0}$ volíme ρ^{n-1} resp. $2\rho^{n-2} - \rho^{n-2}$. Praktické zkušenosti ukazují, že výše uvedené volby podstatně ovlivňují čas CPU potřebný pro výpočet ρ .

Programové vybavení.

Programový soubor pro řešení výše uvedené úlohy je modulový, což umožňuje snadnou adaptaci souboru na různě obtížné verze úlohy (např. vzhledem ke geometrii odlitku nebo chladítek) a jednak hladký další průběh vývoj softwaru. Jediným omezením je přitom pouze nutnost dodržet formát popsaných datových struktur. (Ze všech popsaných možností je nprogramována vždy obecnější situace). Soubor obsahuje tyto části:

- 1) podprogram TRIAN ... triangulace Ω_h , vytváří pole COX, COY, IDTRN, ICOIN (ev. LITRI... τ_h)
- 2) "-" MATRIX .. sestavení matic, vytváří MT, MH, MB
- 3) "-" ENTHLP .. sestaví pole pro popis funkcí α_m, β_m
 $m=1,2,\dots,M$, při dalším volání vyčísluje hodnoty funkcí α_m, β_m
- 4) "-" NLGS ... řešení systému (5.12) .

Data.

Vzhledem k tomu, že počet chladítek i typů materiálů může být pro různé úlohy různý, jsou data vztahující se k popisu konkrétních veličin nebo objektů odděleny.

TRNG-DATA.

Obsahuje popis $\Omega_{h,m}$. Má následující formát: (pro modelový příklad)

1. řádek : A, B, N, M, NR

2. řádek: XR, YR, DXR, DYR

:

(NR-1) řádek: XR, YR, DXR, DYR

Celá oblast Ω_h je obdélník $[0, A] \times [0, B]$. N, M je počet dělících bodů ve směru osy \vec{x} resp. \vec{y} . NR je počet podoblastí.

Chladítka a složeny z obdélníků $[XR, XR+DXR] \times [YR, YR+DYR]$.

ENTHLP. DATA

Obsahuje popis $K(\theta)$, $C(\theta)$, ρ a teploty pro sestavení funkcí α_m, β_m .

1. řádek: počet materiálů = NMAT
2. řádek: INIT (=počet úseků teploty, resp. teploty po
3. řádek: teplota, c , ρ , k , latentní teplo --- 1. úsek
- ⋮
- (INIT + 2) řádek: --- ... INIT úsek
- (INIT + 9) řádek: teplota

Řádky 2 až (INIT + 2) se opakují NMAT krát.

Na posledním řádku jsou hodnoty c_p , c_v pro výpočet funkce g :

$$g(\theta) = c_v \cdot \theta + c_p \cdot \theta^2.$$

MAIN-DATA

V tomto souboru uloženy všechny veličiny řídicí výpočet:

1. řádek: T, K, EPN, EPGS, IWRT

T je celkový čas, $k = \Delta t$, EPN a EPGS jsou hodnoty deformací pro Newtonovu a Gauss-Seidelovu metodu ($EPN \leq EPGS$) IWRT je hodnota tisků.

8. Testovací příklad

Pro testovací příklad jsme zvolili čtvercovou oblast 100 cm x 100 cm (viz obr. 2). Data pro uvažované materiály jsme převzali od Hitachi Research Laboratory, Hitachi, Ltd. Počet dělících bodů jsme volili postupně 20, 30, 40 a 50 v dvou směrech.

odlitek: $k = 0.20934 \text{ J/cm deg s}$
 $c = 0.6280 \text{ J/cm deg}$
 $\rho = 7.3 \text{ g/cm}^3$

latentní teplo: = 267.9552 J/g
 teplota tuhnutí = 1450°C

chladička: $k = 0.3768 \text{ J/cm deg s}$
 $c = 0.6280 \text{ J/g deg}$
 $\rho = 7.6 \text{ g/cm}^3$

slévárenský písek:

$k = 0.01674 \text{ J/cm deg s}$
 $c = 1.0467 \text{ J/g deg}$
 $\rho = 1.6 \text{ g/cm}^3$

Jako počáteční rozložení enthalpie jsme zvolili 7465.6 J/cm^3 pro odlitek, 95.6 J/cm^3 pro chladičko, 33.5 J/cm^3 pro slévárenský písek.

To odpovídá počáteční teplotě 1570°C pro odlitek a 20°C pro písek a chladička.

Pro součinitel přestupu tepla konvekcí c_v a sáláním c_p volíme postupně $50 \text{ W/m}^2 \cdot \text{K}$ a $3.6 \cdot 10^{-8} \text{ W/m} \cdot \text{K}^{-4}$.

Za $T = 10^4 \text{ s}$, $k = 1 \text{ s}$, $\text{EPN} = 10^{-8}$, $\text{EPGS} = 10^{-7}$.

Celkový čas potřebný pro výpočet této úlohy neuvádíme, protože programové vybavení bylo odladěno a testováno na počítači typu PC.

Literatura:

- /1/ A.E.Berger, H.Brezis, J.C.Roger: A numerical method for solving the problem $u_t - \Delta f(u) = 0$. RAIRO Anal. Numer. 13 (1979), 297-312.
- /2/ P. Ciarlet: The Finite Element Method for Elliptic Problems. North-Holland, Amsterdam, 1978.
- /3/ J.F.Ciavaldini: Analyse numerique d'un probleme de Stefan a deux phases par une methode d'elements finis. SIAM J. Numer. Anal. 12(1975), 464-487.
- /4/ C.M.Elliott: Error Analysis of the Enthalpy Method for the Stefan problem. IMA J. Numer. Anal. 7(1987), 61-71.
- /5/ A.Friedman: The Stefan problem in several space variables. Trans. A.M.S. 133(1968), 51-87.
- /6/ S. Kamanostskaya: O probleme Stefana (v ruštině). Mat. Sb. 53 (1961), 488-514.
- /7/ I.L.Lions: Quelques méthodes de résolution des problèmes aux limites non linéaires. Dunod Gauthier-Villars, Paris, 1969.
- /8/ E.Magenes, C.Verdi, A.Véintin: Semigroup approach to the Stefan problem with non-linear flux. Atti Acc. Lincei Ren. fis.-S. VIII, 75(1983), 24-33.
- /9/ M.Nieźgódko, I. Pawłow: A generalized Stefan problem in several space variables. Appl. Math. Optim. 9 (1983), 193-224.
- /10/ R.H.Nochetto: Error estimates for two-phase Stefan problems in several space variables. Calcoco (vyjde nebo vyšlo).
- /11/ I. Pawłow: A variational inequality approach to generalized two-phase Stefan problem in several space variables. Annali di Matematica pura ed applicata (IV)131(1982), 333-373.

- /12/ T.Roubíček: Optimal control of a Stefan problem with statespace constraints. *Numerische Math.* 50 (1987), 723-744.
- /13/ A.Visintin: Sur le probleme de Stefan avec flux non linéaire. *Boll. U.M.I. Anal.Funz. Appl.* C.18(1981), 63-86.
- /14/ A.Visintin: The Stefan problem for a class of degenerate parabolic equation. In: *Free boundary problems, Theory and Applications* (Eds.: A. Fasano, M. Primicerio) *Res. Notes Math.* 79. Pitman, Boston 1983.
- /15/ M. Zlámal: A finite element solution of the nonlinear heat equation. *Rairo Anal. Numer.* 14(1980), 203-216.