



Ордена Л е н и н а  
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ  
имени М.В. Келдыша  
А к а д е м и и н а у к С С С Р

В.И. Мажукин, Ю.А. Повещенко,  
С.Б. Попов, Ю.П. Попов

ОБ ОДНОРОДНЫХ АЛГОРИТМАХ  
ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ СТЕФАНА

Препринт № 122 за 1985 г.

Москва

ОРДЕНА ЛЕНИНА  
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ  
ИМ. М.В.КЕДЫША АН СССР

Мажукин В.И., Повещенко Ю.А., Попов С.Б., Попов Ю.П.

ОБ ОДНОРОДНЫХ АЛГОРИТМАХ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ СТЕВАНА

Москва - 1985 г.

Аннотация

В настоящей работе подробно исследована одна из методик сквозного расчета задач с фазовыми превращениями вещества. В качестве примера рассмотрена вторая краевая двумерная по пространству нестационарная задача о кристаллизации расплавленного металла, охлаждаемого с поверхности заданным потоком тепла. Численные расчеты выполнены с помощью пакета программ ТЕКОН.

Ключевые слова: численные методы, задача Стефана, пакет программ.

Mazhukin V.I., Poveschenko Yu.A., Popov S.B., Popov Yu.P.

On the uniform algorithms of Stefan problem numerical solving

Abstract

In the paper one of the uniform numerical methods of calculating the problems with phase transformations of a matter is detally considered on the example of a second bondary value twodimensional problem of the melted metall cristallization by a surface heat flow freezing. The numerical calculations were carried out by the computer programme package TEKON.

Key words: numerical methods, Stefan problem, programme package.

## Содержание

	Стр.
§ 1. Введение.....	4
§ 2. Постановка задачи.....	7
§ 3. Одномерный случай.....	9
п. 1. Формулировка одномерной модели.....	9
п. 2. Квазистационарный метод.....	10
п. 3. Разностная схема.....	11
п. 4. Результаты численных расчетов одномерного варианта.....	13
§ 4. Алгоритм решения двумерной задачи.....	14
§ 5. Результаты численных расчетов.....	16
Литература.	

## § I. Введение

Термин "Задача Стефана" подразумевает широкий класс задач с подвижными границами в теории параболических уравнений. Такие задачи возникают в различных областях науки и техники, теории вероятностей, экономике и т.д. Исторически одной из первых областей физики, в которой возникла необходимость в постановке и решении подобных задач является раздел, посвященный динамике фазовых переходов. Простейшая классическая формулировка одномерной двухфазной (например, лед-вода) задачи Стефана имеет следующий вид [1,2]: в исходной области  $\Omega$  требуется найти распределение температуры в твердой  $\Omega_s$  и жидкой  $\Omega_l$  фазах ( $\Omega = \Omega_s \cup \Omega_l$ ), а также закон движения во времени  $t$  границы раздела фаз  $\xi(t) = \Omega_l \cap \Omega_s$ . Эти распределения температуры  $T$  ищутся из уравнения теплопроводности:

$$(I.1) \quad \frac{\partial \varepsilon_i(T)}{\partial t} = \operatorname{div}(\lambda_i \operatorname{grad} T) + Q_i, \quad x \in \Omega_i, \quad t > 0,$$

соответствующих граничных и начальных условий, а также условий на фазовой границе:

$$(I.2) \quad \lambda_s \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=\xi(t)} - \lambda_l \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=\xi(t)} = L^* \frac{d\xi}{dt},$$

$$(I.3) \quad T \Big|_{x=\xi(t)} = T \Big|_{x=\xi(t)} = T^*,$$

где  $i = \begin{cases} s & \text{- твердая фаза} \\ l & \text{- жидкая фаза} \end{cases}$ ,

$\varepsilon_i = \int_0^T c_i \rho_i dT$  - внутренняя энергия,

$c_i, \lambda_i$  - коэффициенты теплоемкости, теплопроводности,  $\rho_i$  - плотность среды,  $Q_i$  - мощность объемных источников тепла,  $x$  - пространственная координата,  $T^*, L^*$  - температура и скрытая теплота фазового перехода.

В достаточно общей постановке задача Стефана сводится к

краевой задаче для квазилинейного параболического уравнения второго порядка с кусочно-непрерывными коэффициентами, имеющими разрывы первого рода на заранее неизвестных подвижных поверхностях, подлежащих определению, на которых задаются значения искомой функции, а кроме того выполняется дифференциальное условие Стефана типа (I.2). Эта задача является нелинейной даже при постоянных значениях коэффициентов  $c, \rho, \lambda$ . Ее аналитическое решение известно только для некоторых специальных случаев [2,3], поэтому возникает вопрос об эффективном методе ее численного решения.

Существующие в настоящее время численные методы, основанные на явном выделении границы раздела двух фаз (см. например, [4,5]), обладают высокой точностью определения этой границы, но, как правило, становятся практически неприменимыми в случае многомерных, многофазных задач с переменным числом фаз.

Для исследования и решения таких задач эффективными являются численные методы, основанные на принципиально другом подходе, предложенном в [3]. Суть его состоит в отказе от непосредственного поиска неизвестной фазовой границы. При этом используется специальная форма записи уравнения теплопроводности, одинаковая ("однородная") во всей области (во всех фазах). Один из наиболее распространенных вариантов такого подхода, применительно к задаче (I.1) + (I.3), состоит во введении в уравнение теплопроводности функции энтальпии  $H(T)$ , имеющей разрыв первого рода на межфазовой границе, совпадающей с изотермой  $T = T^*$  [6-9]:

$$(I.4) \quad \frac{\partial H(T)}{\partial t} = \operatorname{div}(\lambda \operatorname{grad} T) + Q, \quad x \in \Omega,$$

$$\text{где } H(T) = \varepsilon(T) + L^* \rho \vartheta(T - T^*),$$

$$(I.5) \quad \vartheta(T - T^*) = \begin{cases} 1, & T > T^* \\ 0, & T < T^* \end{cases}$$

- единичная функция Хевисайда.

При таком подходе все сводится к решению параболического уравнения (I.4) во всей области  $\Omega$  при соответствующих краевых и начальных условиях: условия (I.2), (I.3) при этом становятся не нужны, так как они автоматически следуют из (I.4).

Этот метод несложно обобщить на многомерный, многофазный случай.

Заметим, что принцип однородности [10,11] уравнений и соответствующих им численных алгоритмов отнюдь не ограничивается рамками задачи Стефана, имея важное значение при математическом моделировании разнообразных процессов, описываемых уравнениями математической физики. Например, в газовой динамике широко используется метод однородного (сквозного) расчета разрывных течений, основанный на сглаживании разрывов, путем введения в уравнения механизма искусственной вязкости [11].

Следует отметить, однако, что существует ряд постановок задач с подвижными границами, в которых реализация принципа однородной записи уравнений затруднена, либо вообще не осуществима. К такого рода задачам относятся задачи с неизотермическим фазовым переходом, с переохлаждением или перегревом конденсированной фазы, с мгновенным удалением образующейся фазы (например, задача об абляции твердых тел, обтекаемых сверхзвуковым потоком газа) и т.д., - в подобных случаях приходится либо применять явные численные методы, либо использовать комбинацию явных и однородных методов численного интегрирования [12,13]. Например, в [13] излагается метод численного решения одномерных многофазных задач Стефана, в котором фронт раздела фаз выделяется явно, а численные расчеты ведутся по схеме сквозного счета с использованием метода конечных элементов.

Ограничимся рассмотрением класса задач Стефана, для которых может быть выполнено требование однородной формулировки уравнений. При численном интегрировании однородного параболического уравнения типа (1.4) с помощью метода конечных разностей [10], возникает необходимость в сглаживании разрыва функции энтальпии (а также и других коэффициентов уравнения) в окрестности фазовой границы, вводя в качестве параметра численного алгоритма эффективную ширину  $\Delta$  размазывания разрыва по температуре. Погрешность определения положения границы раздела двух фаз при этом будет стремиться к нулю с уменьшением значения  $\Delta$  и размеров ячеек разностной сетки. Заметим, однако, что при этом может сильно возрастать время расчета задачи на ЭВМ, что ограничивает реальную точность метода.

Наряду с параметром  $\Delta$  результаты численных расчетов зависят, вообще говоря, от выбора формы "размазывания" разрыва энтальпии. В большинстве работ [6,8,9] используется простей-

шая линейная интерполяция, либо сглаживание с помощью полиномов более высокого порядка [7]. В [6] утверждается, что результаты мало зависят от профиля сглаживания. Однако, от степени гладкости этого профиля зависят, в частности, скорость и условия сходимости итерационного процесса, с помощью которого решаются нелинейные разностные уравнения. В настоящей работе предложен один способ аппроксимации энтальпии, обладающий большой степенью гладкости.

Исследование численной методики ведется на примере двумерной задачи о поверхностном охлаждении и кристаллизации жидкого металла, заполняющего заданный объем. При этом на поверхности расплава ставится второе краевое условие (остывание металла происходит под воздействием постоянного во времени охлаждающего теплового потока с поверхности). Подобные задачи имеют существенное значение при оптимизации ряда технологических процессов [14]. Отметим, что численное интегрирование второй краевой задачи исследовано в меньшей степени, нежели – первой, встречающейся в большинстве работ [6–13]. В то же время вторая краевая задача обладает рядом особенностей. Например, в ней в случае  $T_{|t=0} = T^*$  (начальное распределение температуры совпадает с температурой фазового перехода) интервал изменения температуры  $T_{\min}(t) \leq T \leq T_{\max}(t)$  для начальных моментов времени, много меньше или сопоставим с размерами выбранной фиксированной  $\Delta$ -окрестности температуры кристаллизации  $T^*$ , тогда как для правильного учета фазового перехода данная окрестность должна содержаться в этом интервале. Последнее обстоятельство налагает, в частности, повышенные требования к малости параметра расчетов  $\Delta$ .

Численные расчеты в работе выполнены с помощью пакета прикладных программ ТЕКОН [15].

## § 2. Постановка задачи.

Опишем физическую постановку задачи. На поверхности расплавленного металла, заполняющего "ванну" прямоугольной формы с теплоизолированными стенками (термостат), действует охлаждающий тепловой поток  $q$ . Расплав (цинк) находится при температуре плавления  $T_{|t=0} = T^*$ . Требуется определить эволюцию фронта кристаллизации, образующегося у поверхности металла и распространяющегося вглубь расплава (см. рис. 1), а также пространственно-



временные распределения тепловых полей при различных пространственных профилях потока  $q$ .

Будем предполагать, что охлаждающий поток  $q$  зависит только от координаты  $x$ , — тогда рассматриваемая задача является двумерной в  $(x, y)$  координатах (ось  $y$  направим вертикально вглубь расплава), и в математическом отношении сводится в соответствии с изложенным во введении к интегрированию нестационарного уравнения теплопроводности в прямоугольнике  $G = [0, \xi_x] \times [0, \xi_y]$  (рис. 1):

$$(2.1) \quad \frac{\partial H}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{W} = 0, \quad \vec{W} = -\lambda \operatorname{grad} T, \quad (x, y) \in G, t > 0,$$

$$H(T) = \int_0^T c_p dT + L^* \rho \mathcal{X}(T - T^*)$$

с граничными и начальными условиями:

$$(2.2) \quad \begin{cases} y|_{y=0} = q(x), \quad xW|_{x=0} = xW|_{x=\xi_x} = 0, \\ T|_{y=\xi_y} = T^*, \quad T|_{t=0} = T^* \end{cases}$$

В (2.1), (2.2)  $T$  — температура,  $H$  — энтальпия,  $\vec{W} = (w, yw)$  — вектор потока тепла,  $c$  — коэффициент теплоемкости,  $\rho$  — плотность,  $\lambda$  — коэффициент теплопроводности.

Приведем геометрические размеры области, а также основные справочные данные по теплофизическим константам для цинка [16].  
 $\xi_x = 10$  см,  $\xi_y = 5$  см,  $T^* = 419.5^\circ \text{C} = 692.5^\circ \text{K}$ ,  
 $\rho = 7.1$  г/см<sup>3</sup>,  $L^* = 1.01 \cdot 10^5$  Дж/кг.

$T, ^\circ\text{C}$	300	400	500	600	700
$\lambda, \frac{\text{Вт}}{\text{м} \cdot ^\circ\text{C}}$	100	95.4	57.6	57.0	56.4
$c, \frac{\text{кДж}}{\text{кг} \cdot ^\circ\text{C}}$	0.438	0.457	0.521	0.521	0.521

Табличные значения  $c, \lambda$  аппроксимировались линейными функциями температуры, различными в твердой и жидкой фазе:

$$f(T) = f_i^{(1)} + f_i^{(2)} \tilde{T}, \quad i = \begin{cases} 3, & \tilde{T} < 0 \\ c, & \tilde{T} > 0 \end{cases}, \quad f_i^{(1,2)} = \text{const},$$

где под  $f$  понимается  $c$  или  $\lambda$ ,  $\tilde{T} = T - T^*$ . Заметим, что удобно во всех уравнениях перейти к величине  $\tilde{T} = T - T^*$ ,

сведем тем самым к нулю значение критической температуры:

Были рассмотрены два варианта задания функции  $q(x)$ . В первом варианте использовалась синусоидальная зависимость теплового потока от координаты  $x$ :

$$(2.3) \quad q(x) = -q_0 \left( 1 + A \sin \frac{2\pi x}{l_x} \right), \quad q_0 = 10 \frac{\text{Вт}}{\text{см}^2}, \quad A = 0.2.$$

Во втором варианте применялся гауссовский закон излучения тепла с верхней поверхности "ванны":

$$(2.4) \quad q(x) = -q_0 \exp\left\{-\frac{(x-m)^2}{\kappa}\right\}, \quad q_0 = 21 \frac{\text{Вт}}{\text{см}^2}, \quad m = \frac{l_x}{2}, \quad \kappa = 3.382.$$

В последнем случае съем тепла с поверхности осуществляется в небольшой окрестности середины интервала по оси  $x$ . Заметим, что в случае, когда  $q(x) = \text{const}$ , задача (2.1), (2.2) становится одномерной, — решение зависит только от координаты  $y$ . Поэтому в § 3 предварительно рассматривается упрощенный одномерный вариант задачи, на примере которой можно подробно рассмотреть некоторые методические особенности, проявляющиеся при расчете многомерных задач с наличием фазовых переходов. Там же излагается один приближенный аналитический метод решения одномерной задачи.

### § 3. Одномерный случай.

#### п. I. Формулировка одномерной модели.

В случае  $q(x) = \text{const}$ , как отмечалось выше, задача становится одномерной. При этом уравнения (2.1), (2.2) принимают вид ( $\tilde{T} = T - T^*$ ):

$$(3.1) \quad \frac{\partial H(\tilde{T})}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial y} \left( \lambda \frac{\partial \tilde{T}}{\partial y} \right), \quad 0 < y < \infty, \quad t > 0,$$

$$(3.2) \quad -\lambda \frac{\partial \tilde{T}}{\partial y} \Big|_{y=0} = q < 0, \quad \tilde{T} \Big|_{t=0} = 0.$$

Для определенности выберем следующие значения величин  $C, \rho, L^*, \lambda, q$ :

$$(3.3) \begin{cases} c = 0.5 \text{ Дж/(г} \cdot \text{}^\circ\text{К)}, \rho = 7.0 \text{ г/см}^3, L^* = 1.0 \cdot 10^5 \text{ Дж/кг}, \tilde{T}^* = 0, \\ \lambda = 100 \text{ Вт/(м} \cdot \text{}^\circ\text{К)}, |q| = 10 \text{ Вт/см}^2. \end{cases}$$

## п. 2. Квазистационарный метод.

Существует аналитический метод [1,2] нахождения приближенного решения задачи Стефана, состоящий в замене действительного распределения температуры внутри каждой фазы квазистационарным, т.е. таким, которое удовлетворяет по пространственным координатам уравнению Лапласа в области с границей, изменяющейся согласно условию Стефана. Во многих случаях такое приближенное решение оказывается достаточно эффективным, например, при определенных условиях оно асимптотически (с ростом времени) приближается к истинному решению, передавая таким образом не только основные качественные, но и количественные его характеристики. Применение квазистационарного метода к задаче (3.1) ÷ (3.3) выглядит следующим образом. В качестве приближенного решения  $u(y, t)$  принимается функция, удовлетворяющая уравнению Лапласа в области с подвижной правой границей (фронт кристаллизации)  $y = \xi(t)$  :

$$(3.4) \begin{cases} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0, \\ -\lambda \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{y=0} = q < 0, \quad u|_{y=\xi(t)} = 0 \end{cases}$$

Решение (3.4) есть линейная функция переменной  $y$  :

$$(3.5) \quad u(y, t) = \frac{q}{\lambda} (\xi(t) - y).$$

Для определения  $\xi(t)$  воспользуемся интегральным соотношением, вытекающим из (3.1):

$$(3.6) \quad \frac{\partial}{\partial t} \left[ \int_0^{\xi} c \rho \tilde{T} dy - L^* \rho \xi \right] = w|_{y=0} - w|_{y=\infty} = q.$$

После подстановки (3.5) в (3.6) вместо  $\tilde{T}$ , учитывая условие  $\xi(0) = 0$ , имеем:

$$(3.7) \quad \xi(t) = \sqrt{p^2 + \tau t} - p,$$

$$\text{где } p = \frac{L^* \lambda}{c |q|}, \quad \tau = \frac{2\lambda}{c \rho}.$$

Отметим, что для малых моментов времени,  $t \ll t_1$ , скорость фронта кристаллизации, в соответствии с (3.7), постоянна:

$$(3.8) \quad \frac{d\xi}{dt} = \gamma, \quad \xi(t) = \gamma t,$$

$$\text{где } \gamma = \frac{\tau}{2\rho} = \frac{|\eta|}{L^* \rho}, \quad t_1 = \frac{\rho^2}{\tau} = \frac{L^{*2} \lambda \rho}{2 \cdot g^2 c}.$$

Отсюда следует, в частности, что при  $t \ll t_1$  величины  $C$  и  $\lambda$  слабо влияют на формирующееся поле температур.

Для выбранных значений параметров (3.3), величины  $\rho, \tau, \gamma, t_1$  в (3.7), (3.8) составляют:

$$(3.9) \quad \rho = 20.0 \text{ см}, \tau = 4/7.0 \frac{\text{см}^2}{\text{сек} \cdot \text{г}} = 1/70 \text{ см/сек}, t_1 \approx 700 \text{ сек}.$$

### п.3. Разностная схема.

Для численного интегрирования уравнения (3.1) заменим его разностной схемой [10, II]:

$$(3.10) \quad H_t = -W_y^{(\sigma)}, \quad W = -\lambda \cdot T_y,$$

$$\text{где } H_t = (\hat{H} - H) / \tau, \quad W^{(\sigma)} = \sigma \hat{W} + (1 - \sigma) W,$$

$$T_y = (T_{i+1} - T_i) / h_{i+1}, \quad W_y = (W_i - W_{i-1}) / h_i,$$

$$\hat{H} = H(y_i, t^{j+1}), \quad H = H(y_i, t^j),$$

$$h_i = (h_i + h_{i+1}) / 2.$$

Схема (3.10) записана на разностной сетке

$$w_{k\tau} = \{(y_i, t^j) : y_{i+1} = y_i + h_{i+1}, t^{j+1} = t^j + \tau\}$$

с шагами  $h_i, \tau^j$  по пространству и времени. Разностная схема (3.10) решается с помощью итерационного метода Ньютона [10, II], сводящегося к обращению на каждой итерации трехточечного линейного разностного уравнения методом прогонки.

В расчетах полагалось  $\sigma = 1$ ,  $h = 0.02$ , шаг по времени  $\tau$  варьировался.

При аппроксимации дифференциальных уравнений разностными

разрывная функция  $\mathcal{D}(T)$ , определяемая (1.5), приближенно заменяется непрерывной функцией  $\mathcal{D}_\Delta(T)$ , где параметр  $\Delta$  означает эффективную ширину "размазывания" разрыва. Необходимость такой замены в однородных численных алгоритмах подчеркивалась во введении. Очевидно, для правильного учета тепловыделения на границе фазового перехода в разностной схеме должно выполняться:

$$(3.11) \quad \int_{I_\Delta} \delta_\Delta(T) = 1,$$

$$\text{где } \delta_\Delta(T) = \frac{d\mathcal{D}_\Delta(T)}{dT},$$

$I(t) = [T_{\min}(t), T_{\max}(t)]$  - диапазон изменения температуры во всей области по пространству,  $I_\Delta$  - интервал температур, на котором  $\delta_\Delta(T) \neq 0$ .

Рассмотрим следующие два варианта аппроксимации единичной функции Хевисайда, отличающиеся степенью гладкости функции  $\mathcal{D}_\Delta(T)$ .

1. Линейная интерполяция (см. рис. 2а):

$$(3.12) \quad \mathcal{D}_\Delta(T) = \begin{cases} 1 & , T \geq T_+ \\ (T - T_-) / \Delta & , T \in (T_-, T_+) \\ 0 & , T \leq T_- \end{cases}$$

Здесь  $\Delta = T_+ - T_- > 0$ ,  $I_\Delta = (T_-, T_+)$ . В этом варианте фронт размазывания функции  $\mathcal{D}(T)$  конечен, в крайних точках интервала размазывания,  $T_\pm$ , функция  $\mathcal{D}_\Delta(T)$  имеет разрыв производной первого рода. Этот простейший способ аппроксимации используется в большинстве работ [6, 8, 9].

2. С помощью экспоненты (форма выбрана по аналогии с профилем ударной волны в диссипативной среде [III]):

$$(3.13) \quad \mathcal{D}_\Delta(T) = 1 - [1 + \exp\{\epsilon(T - T_0) / \Delta\}]^{-1}.$$

Здесь  $T_0$  - точка перегиба функции  $\mathcal{D}_{\Delta, T_0}(T)$ . На рис. 2б приведен график этой функции для двух значений  $T_0$ , равных 0 и  $-\Delta/2$ . В данном случае фронт размазывания бесконечен ( $I_\Delta = (-\infty, \infty)$ ), но можно говорить об эффективном интервале размазывания ( $T_0 - \frac{\Delta}{2}, T_0 + \frac{\Delta}{2}$ ) ширины  $\Delta$ . Функция  $\mathcal{D}_{\Delta, T_0}(T)$  является бесконечно гладкой.

Отметим, что наряду с рассматриваемыми вариантами существу-

ют и многие другие, например, с помощью парабол 3-го, 4-го порядка и выше (см. [7]), тригонометрическими функциями и т.д., занимающие в определенном смысле промежуточное место по степени гладкости функции  $\vartheta_{\Delta}(T)$  между (3.12) и (3.13), но мы ограничимся исследованием отмеченных "крайних" случаев.

Интервал сглаживания  $(T_-, T_+)$  в (3.12), (3.13) выбирается не только из соображений точности и экономии машинного времени, но и с учетом условия (3.11). Например, нетрудно видеть, что на момент времени  $t$  в правой части (3.11) вместо 1 будет стоять величина  $\vartheta_{\Delta}(T_{max}(t)) - \vartheta_{\Delta}(T_{min}(t))$ , которая с ростом  $t$  стремится в рассматриваемой задаче к значению  $\vartheta_{\Delta}(0)$ . В результате, для того, чтобы обеспечить выполнение (3.11) хотя бы асимптотически (когда  $max |T| \gg \Delta$ ), в случае использования (3.12) следует выбрать значения  $T_{\pm}$  равными  $T_- = -\Delta$ ,  $T_+ = 0$ . В случае же (3.13) при любых конечных значениях  $\Delta, T_0$  величина  $\vartheta_{\Delta, T_0}(0)$  не равна единице (см. рис. 3), поэтому для "компенсации" следует рассматривать модифицированное выражение

$$(3.14) \quad \tilde{\vartheta}_{\Delta, T_0}(T) = \vartheta_{\Delta, T_0}(T) / \vartheta_{\Delta, T_0}(0).$$

#### п. 4. Результаты численных расчетов одномерного варианта.

На рис. 4 приведены результаты расчетов задачи (3.1) + (3.3) по схеме (3.10) с линейным способом интерполяции (3.12)  $\vartheta_{\Delta}(\tilde{T})$  для значений параметра  $\Delta = 1$  и  $\Delta = 1/4$ : на два момента времени,  $t = 10$  и  $t = 15$  сек изображены формирующиеся численные профили температуры. Здесь же штрих-пунктиром представлено решение, полученное по формуле (3.7), отвечающей квазистационарному методу. Из этих графиков видно, что численные решения хорошо согласуются с квазистационарным (особенно, естественно, при  $\Delta = 1/4$ ) в области  $\tilde{T} \leq -\Delta/2$ , причем с ростом времени эти решения сближаются. Отметим, что указанные моменты времени для значения параметра  $\Delta = 1$  слишком малы (еще не выполнено условие:  $max |\tilde{T}| \gg \Delta$ ), тем не менее и в данной ситуации профиль температуры при  $\tilde{T} \leq -\Delta/2$  воспроизводится удовлетворительно. Разностные решения нигде не обращаются в нуль, монотонно стремясь к значению  $\tilde{T}^* = 0$  с ростом координаты  $y$ , поэтому положение фронта кристаллизации нельзя отслеживать в данной постановке задачи по линии уровня  $\tilde{T} = \tilde{T}^* = 0$ , однако, как видно из графиков, фазовую границу можно оценивать по линии уровня  $\tilde{T} = -\frac{\Delta}{2}$ .

На рис. 5 показаны результаты численных расчетов, выполненных по схеме (3.10) с (3.13), (3.14) - экспоненциальной формой сглаживания функции  $\mathcal{V}(T)$ . Здесь на те же моменты времени 10 и 15 сек приведены температурные профили, соответствующие четырем наборам значений  $\Delta, T_0$  в (3.13), (3.14):  $\Delta = 1$  и  $\Delta = 1/4$  с  $T_0 = (T_- + T_+)/2 = -\Delta/2$  и  $T_0 = 0$ . Можно убедиться, что результаты расчетов с  $\tilde{\mathcal{V}}_{1/4, -\Delta/2}$  практически совпадают с данными, полученными с использованием  $\mathcal{V}_{1/4}$ , тогда как  $\tilde{\mathcal{V}}_{1, -\Delta/2}$  дают результаты несколько хуже, чем  $\mathcal{V}_1$ . В расчетах с  $T_0 = -\Delta/2$  в (3.13), (3.14) граница раздела двух сред эффективно отслеживается, также как и при применении формулы (3.12), по линии уровня  $\tilde{T} = -\Delta/2$ , тогда как при  $T_0 = 0$  положение этой границы лучше определяется по линии  $\tilde{T} = -\Delta/4$ . Вообще, как можно заметить из рис. 3, случай  $T_0 = 0$  передает профиль температуры лучше, нежели вариант с  $T_0 = -\Delta/2$ . Результаты расчетов показали, что использование функции  $\tilde{\mathcal{V}}_{\Delta, 0}$  с  $T_0 = \tilde{T}^* = 0$  дает приблизительно те же численные профили, что и при  $T_0 = (T_- + T_+)/2 = -\Delta/2$ , но с уменьшенным в два раза значением параметра  $\Delta$ :  $\tilde{\mathcal{V}}_{\Delta/2, -\Delta/4}$ .

В расчетах шаги по времени выбирались так, чтобы сходились итерации по Ньютону (начальный шаг  $\tau_0 = 0.05$  дробился пополам до тех пор, пока не достигалась сходимости). При этом в расчетах с (3.12) при уменьшении значения параметра  $\Delta$  с 1 до 1/8 допустимый шаг по времени снижался почти на 2 порядка, что резко увеличивало время счета, тогда как при использовании (3.13), (3.14) при уменьшении  $\Delta$  с 1 до 1/100 шаг  $\tau$  не менялся, по-видимому вследствие большей степени гладкости фигурирующей здесь функции  $\mathcal{V}_{\Delta, T_0}(T)$ . Это обстоятельство представляется важным с точки зрения численных расчетов: ограничения на шаги, обусловленные малостью параметра  $\Delta$ , в последнем случае значительно ниже, что позволяет считать с меньшими значениями  $\Delta$ , обеспечивая большую точность вычислений.

#### § 4. Алгоритм решения двумерной задачи.

Введем в рассматриваемом прямоугольнике  $G = {}^x G \times {}^y G$  (см. рис. 1) прямоугольную пространственную сетку  $\mathcal{W}_h = \mathcal{W}_h^x \times \mathcal{W}_h^y$ :  
 $\mathcal{W}_h^x = \{x_i : x_{i+1} = x_i + h_{i+1}, i = 0, 1, \dots, N; x_0 = 0, x_N = \xi_x\}$ ,  
 $\mathcal{W}_h^y = \{y_k : y_{k+1} = y_k + h_{k+1}, k = 0, 1, \dots, M; y_0 = 0, y_M = \xi_y\}$ .

В области  ${}^xG$ , соответствующей оси  $x$ , сетка равномерна. В  ${}^yG$  шаг сетки  ${}^y h_k$  возрастает с ростом номера  $k$  в геометрической прогрессии с показателем  $q = 1.2$ . В расчетах число разностных пространственных ячеек было равно  $N \times M = 20^2$ . Введем также сетку по времени  ${}^zG$ :

$${}^zG = \{t^j : t^{j+1} = t^j + \tau^j, j = 0, 1, \dots, J; t^0 = 0\}.$$

Задача (2.1), (2.2) численно интегрировалась с помощью пакета прикладных программ ТЕКОН [15]. Применительно к рассматриваемой системе уравнений алгоритм, реализованный в этом пакете, имеет следующий вид.

В каждой разностной ячейке записывается уравнение теплового баланса (опускаем в дальнейшем знак волны над  $T$ ):

$$(4.1) \quad H_i + \frac{1}{{}^x h} ({}^x W_{i+1} - {}^x W) + \frac{1}{{}^y h} ({}^y W_{k+1} - {}^y W) = 0,$$

$$0 \leq i \leq N, \quad 0 \leq k \leq M-1,$$

где обозначено  ${}^x h_i = ({}^x h_i + {}^x h_{i-1})/2$ ,  ${}^y h_k = ({}^y h_k + {}^y h_{k-1})/2$ ,

$${}^x W = \begin{cases} -\lambda_{ik} T_x, & 1 \leq i \leq N, \\ 0, & i = 0; \end{cases}$$

$${}^x W_{i+1} = \begin{cases} -\lambda_{i+1,k} T_x, & 0 \leq i \leq N-1, \\ 0, & i = N; \end{cases}$$

$${}^y W = \begin{cases} -\lambda_{ik} T_y, & 1 \leq k \leq M-1, \\ q(x_i), & k = 0; \end{cases}$$

$${}^y W_{k+1} = -\lambda_{i,k+1} T_y, \quad 0 \leq k \leq M-1;$$

$$T_x = (T_{i+1,k} - T_{ik}) / {}^x h_{i+1}, \quad T_x = (T_{ik} - T_{i-1,k}) / {}^x h_i;$$

$$T_y = (T_{i,k+1} - T_{ik}) / {}^y h_{k+1}, \quad T_y = (T_{ik} - T_{i,k-1}) / {}^y h_k.$$

Сеточные функции температуры  $T$  и энтальпии  $H$  в схеме (4.1) отнесены к узлам пространственной сетки, тогда как величины проекций потоков  ${}^x W$ ,  ${}^y W$  относятся к центрам ячеек.

Для решения системы разностных уравнений (4.1) в пакете ТЕКОН используется линейно-квадратичный итерационный процесс (внешние итерации), на каждом  $S$ -ом шаге которого решается линеаризованная система уравнений (4.1), с использованием двух-слойного итерационного метода с Чебышевским упорядоченным набо-



ром параметров [10,14] (внутренний итерационный процесс). Итерации заканчиваются, если модуль разности между двумя значениями сеточной функции на двух соседних итерациях в каждом узле сетки по пространству становится меньше некоторого параметра  $\epsilon$ , характеризующего относительную точность вычислений.

В качестве сглаженной единичной функции Хевисайда, входящей в определение энтальпии  $H = \int_0^x c_p dT + L_f^* \vartheta(T)$ , была выбрана экспоненциальная форма (3.13), модифицированная согласно (3.14).

Очевидно, в случае слабой зависимости функции теплового потока  $q$  от переменной  $x$ , что выполняется, например, для первого варианта задания этого потока (2.3), будут справедливы приближенные формулы (3.7), (3.8) для определения положения фронта кристаллизации  $y = \xi(x, t)$ , полученные в предположении  $q = \text{const}$  квазистационарным методом:

$$(4.2) \quad \xi(x, t) \approx \frac{|q(x)|}{L_f^*} t, \quad t \ll t_1 = \frac{L^{*2} \lambda_p}{2c \cdot \max_x q^2} \approx \frac{7 \cdot 10^4 \text{ сек}}{\max_x q^2 \left( \frac{L^{*2}}{c \lambda_p^2} \right)}$$

### § 5. Результаты численных расчетов.

Параметры сглаживания в (3.13) в численных расчетах по схеме (4.1) составляли:  $T_- = -1$ ,  $T_+ = 0$  ( $\Delta = 1$ ),  $T_0 = (T_- + T_+)/2$ . На рис. 6 представлены результаты расчета первого варианта (2.3) теплового потока  $q(x)$  на верхней границе "ванны". Здесь на ряд последовательных моментов времени ( $t = 10, 20, 30, 40$  сек) показаны линии уровня температуры: цифрами  $n = 1, 2, \dots, 7$  изображены изотермы  $\tilde{T} = -n$ . Линия, помеченная нулем, соответствует линии уровня  $\tilde{T} = -\Delta/2 = -1/2$ , отвечающей, согласно одномерным тестам, фронту кристаллизации. Масштабы величин по осям равны 1 см. Для сравнения при  $t = 20$  сек пунктиром приведены линии уровня, соответствующие приближению (4.2). Как и ожидалось, результаты оказались близки. Форма изолиний отражает синусоидальную зависимость потока температуры  $q(x)$  на границе  $y = 0$ .

На рис. 7 показаны результаты счета второго варианта (2.4) выбора функции теплового потока с верхней границы  $q(x)$ , особенностью которого является то, что поток тепла здесь мощнее почти в 2 раза, будучи сосредоточенным в основном в центре этой гра-

нищ. Результаты расчетов соответствуют этим моментам: понижение температуры в данном случае почти в 2 раза сильнее, процесс кристаллизации идет только в верхней центральной части "ванны", не достигая ее боковых поверхностей.

Таким образом, приведенные в работе результаты расчетов демонстрируют эффективность рассмотренной методики численного моделирования фазового перехода в прикладных задачах.

### Литература

1. Лейбензон Л.С. Собрание трудов. т. IV. М., изд-во АН СССР, 1955 г., 399 с.
2. Рубинштейн Л.И. Проблема Стефана. Рига, Звайгзне, 1967, 457с.
3. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. М., ГИИТД, 1953.
4. Bonnerot R., Camet P.A. Second order finite element method for the one-dimensional Stefan problem. - Int. J. Numer. Meth. Eng. 1974, v. 8, No 4, p. 811 - 820.
5. Бакирова О.И. О некоторых методах решения задачи Стефана. Диф. уравнения, 1963, т. 19, № 3, с. 491 - 500.
6. Самарский А.А., Моисеенко Г.Д. Экономичная схема сквозного счета для многомерной задачи Стефана. ЖММ и МФ, 1965, т. 5, № 5, с. 816 - 827.
7. Будах Е.М., Соловьева Е.Н., Успенский А.Б. Разностный метод со сглаживанием коэффициентов для решения задачи Стефана. ЖММ и МФ, 1965, т. 5, № 5, с. 828 - 840.
8. Meyer G.H. Multidimensional Stefan Problems. - SIAM J. Numer. Anal., 1973, v. 10, No 3, p. 522 - 538.
9. Rogers I.S.W., Berger A.B., Ciment M. The alternating phase truncation method for numerical solution of a Stefan Problem. - SIAM J. Numer. Anal., 1979, v. 16, No 4, p.563-587.
10. Самарский А.А. Тесрия разностных схем. М., Наука, 1977.
11. Самарский А.А., Попов Ю.П. Разностные методы решения задач газовой динамики. М., Наука, 1980, 352 с.
12. Соловьева Е.Н., Успенский А.Б. Схемы сквозного счета численного решения краевых задач с неизвестными границами для одномерных уравнений параболического типа. В сб.: Методы решения краевых и обратных задач теплопроводности. М., МГУ, 1975, с. 3 - 23.

13. Пригожин Л.Б., Булгач А.А. Численное решение одномерных задач Стефана в теплопроводности и диффузии. Сб.: Численные методы механики сплошной среды. Новосибирск, 1981 г., т. 12, № 2, с. 71 - 83.
14. Рыкалин Н.Н. Расчеты тепловых процессов при сварке. М., Машиностроение, 1961 г.
15. Повещенко Ю.А., Попов Ю.П. ТЕКОН. Пакет программ для решения тепловых задач. Препринт № 65, М., ИТМ им. М.В.Келдыша АН СССР, 1978 г., 24 с.
16. Варгафтик Н.Б. Теплофизические свойства веществ. Справочник. Энергоиздат, 1956 г.

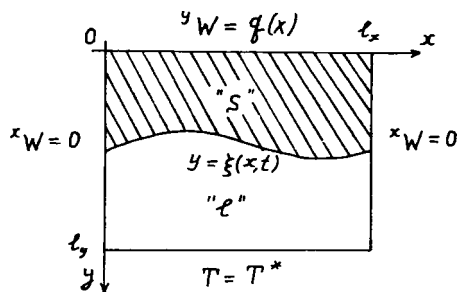


Рис. I

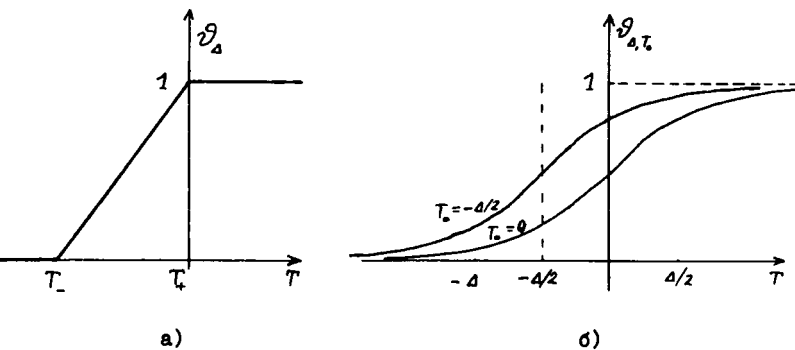


Рис. 2

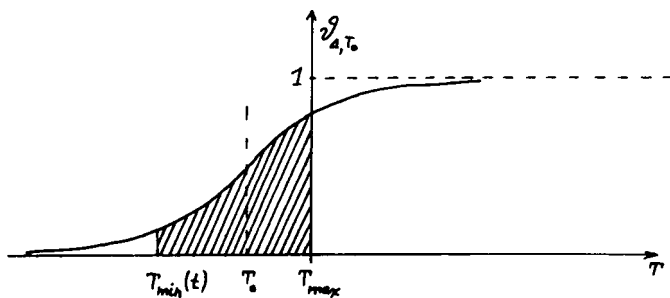


Рис. 3

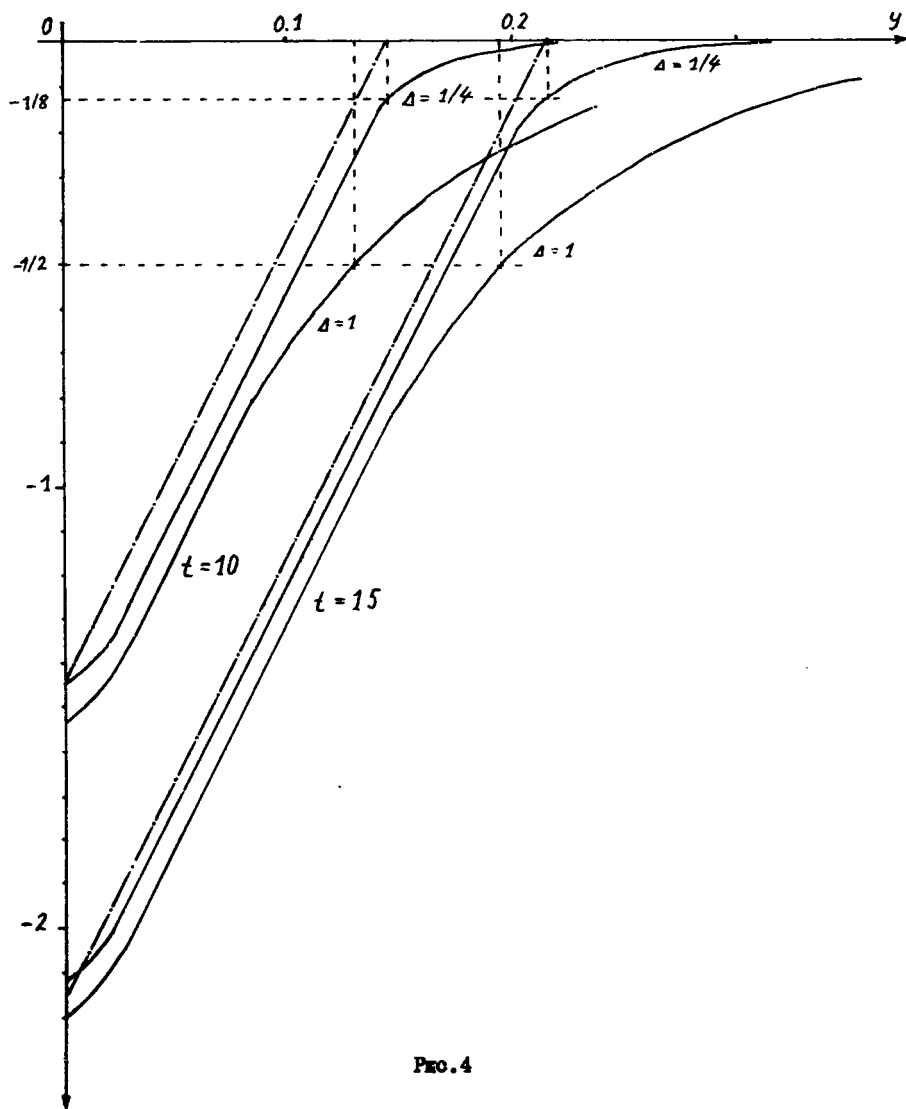


FIG. 4

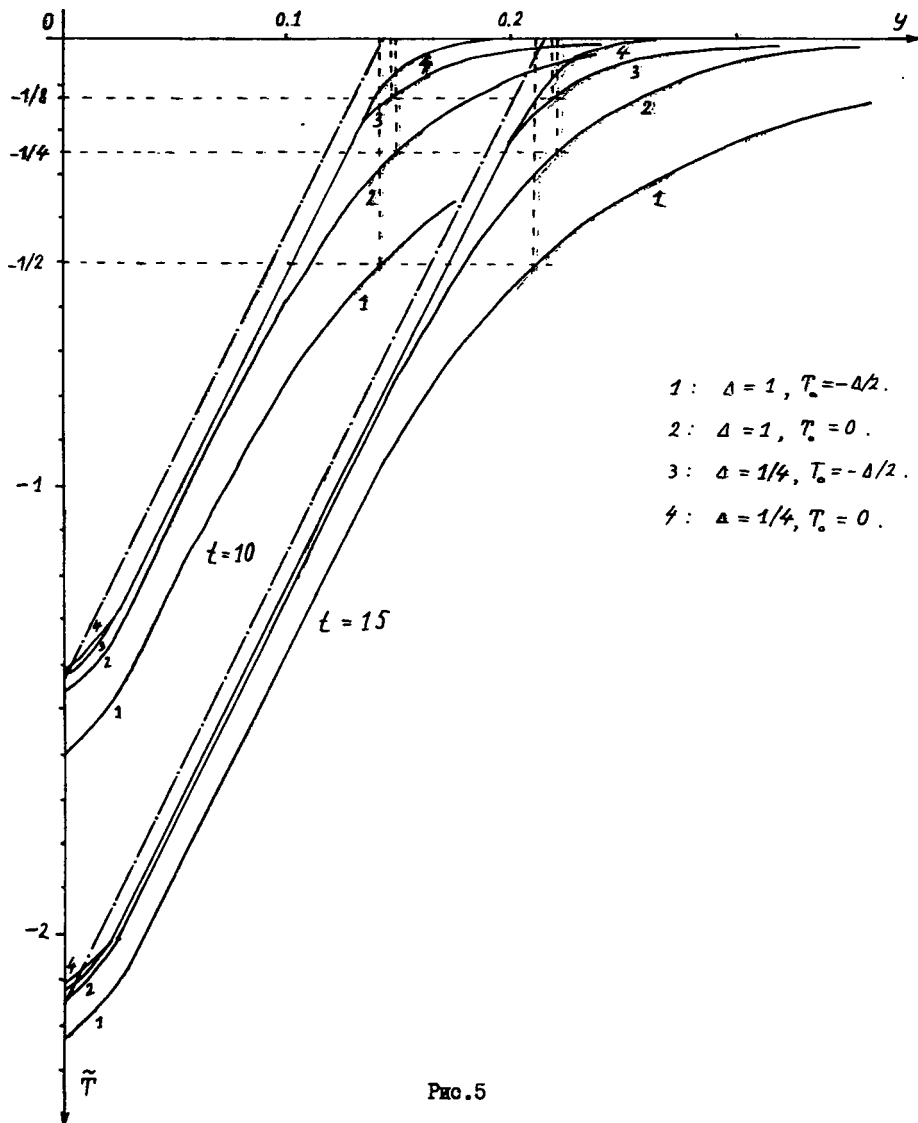


Рис. 5

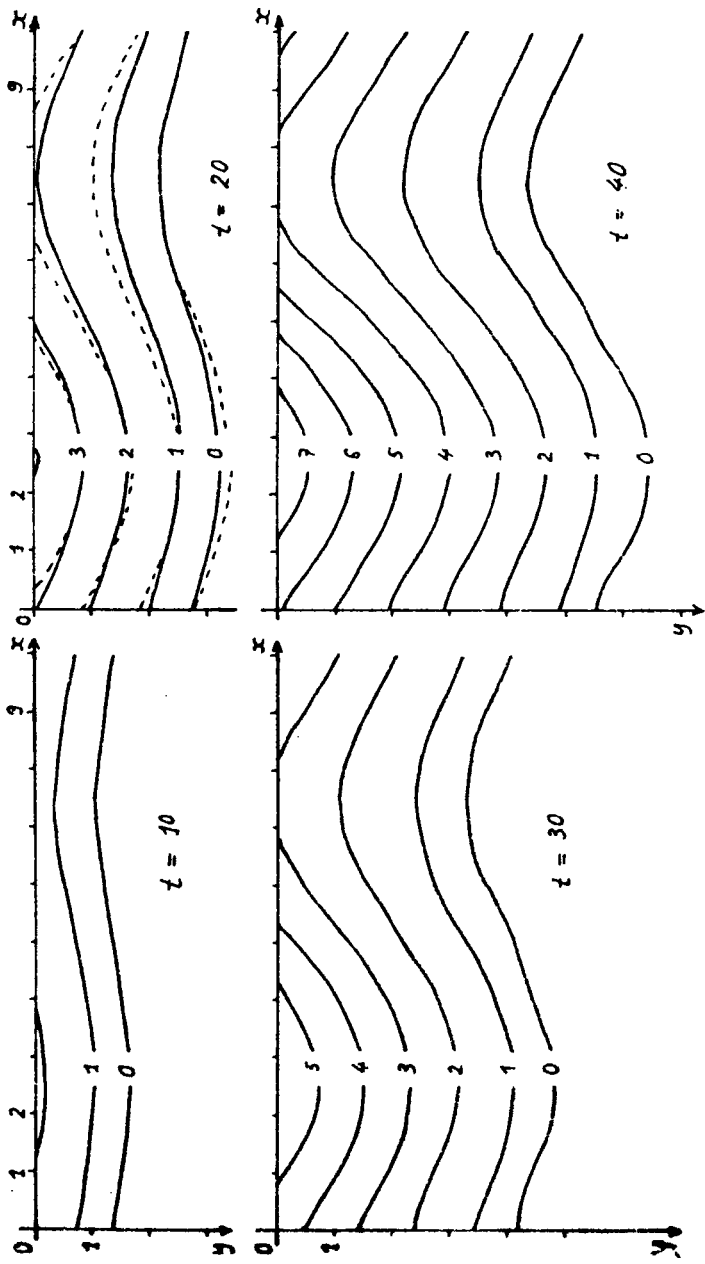


FIG. 6

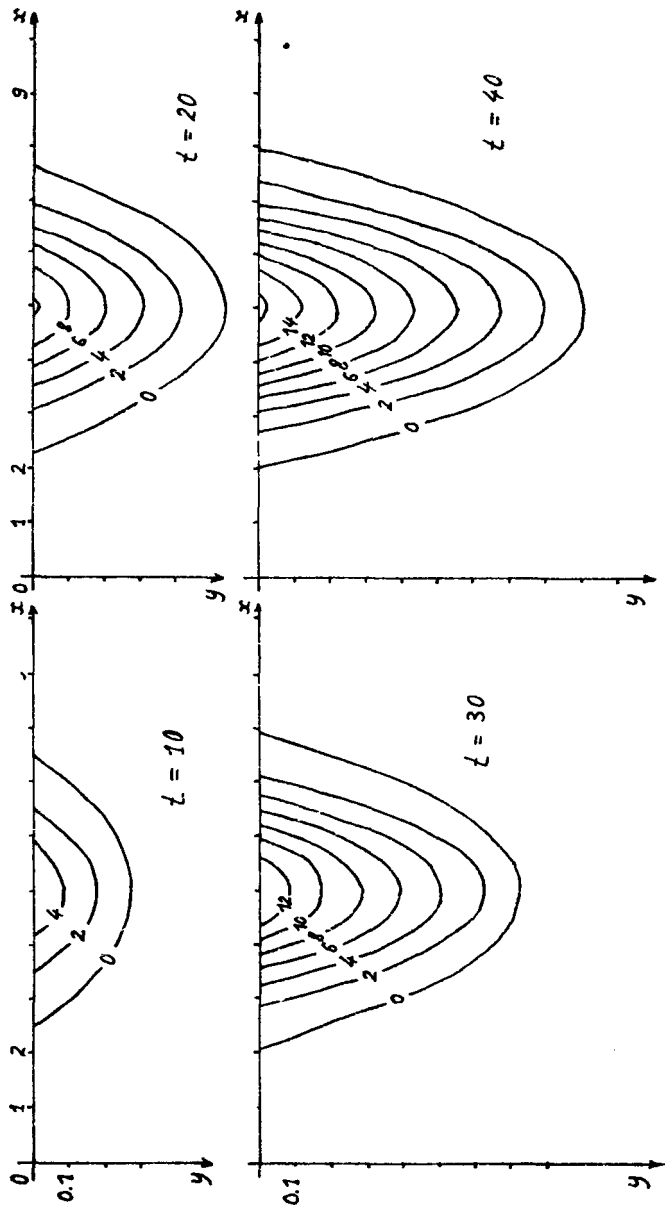


FIG. 7