

# ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ

ВСЕСОЮЗНЫЙ ЕЖЕМЕСЯЧНЫЙ НАУЧНО-ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ

АВГУСТ

№ 8

ОТДЕЛЬНЫЙ ОТТИСК

ТОМ 23



МИНСК  
«НАУКА И ТЕХНИКА»  
1987

Н. А. ДАРЬИН, В. И. МАЖУКИН

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАДАЧИ СТЕФАНА НА АДАПТИВНОЙ СЕТКЕ

**Введение.** Под классической задачей Стефана обычно понимается класс математических моделей, описывающих тепловые процессы с фазовыми превращениями I рода в чистом веществе. Решение ее состоит в определении тепловых полей и границы фазового перехода. В переменных Эйлера положение границы раздела фаз  $\Gamma(t)$ , а тем самым и область определения решения  $\Omega_x(t)$  неизвестны и подлежат определению в ходе решения задачи. С этим обстоятельством связаны основные трудности математического исследования задачи Стефана.

Существующие в настоящее время методы численного решения задач типа Стефана можно условно разбить на два класса: с явным выделением фронта и сквозного счета. Численные методы, основанные на явном выделении фронта (см., например, [1—3]), обладают высокой точностью определения межфазной границы, но, как правило, чрезвычайно громоздки алгоритмически и для получения решения требуют больших затрат машинного времени. По этим причинам они зачастую неприменимы для многофазных задач. Для математического моделирования определенного класса задач с фазовыми превращениями, в которых точное положение границы раздела фаз не играет существенной роли, эффективными оказались методы, основанные на принципиально ином подходе [4]. Идея этого метода состоит в отказе от непосредственного поиска неизвестной фазовой границы и замене его процедурой сглаживания функции теплосодержания. Введение процедуры сглаживания позволяет получать обобщенное решение задачи Стефана с помощью экономичного алгоритма сквозного счета [5, 6], эффективность которого особенно заметна в многомерных постановках. Однако эти методы весьма чувствительны к выбору параметра сглаживания [7], определить значение которого априори в ряде случаев затруднительно. К тому же методы сквозного счета обладают сравнительно низкой точностью определения положения фазового фронта, что бывает важным в ряде приложений. Кроме того, существует класс задач, таких, как задачи с переохлаждением жидкой фазы, термодиффузии и др., в которых фазовые превращения описываются в приближении неклассических постановок проблемы Стефана [8, 9]. Реализация принципа однородной записи в этих случаях может быть вообще неосуществима.

Один из широко применяемых приемов в математическом моделировании задач с неизвестными границами состоит в использовании подвижных сеток, т. е. в переходе к нестационарным системам координат, скорость движения которых может либо совпадать, либо не совпадать со скоростью движения среды. Если скорость движения системы коор-

динат совпадает со скоростью течения, то разностная сетка, как известно, представляет собой сетку в переменных Лагранжа. Использование таких сеток наиболее эффективно в задачах со свободными и контактными границами. Для математического моделирования проблемы Стефана переменные Лагранжа не применяются из-за наличия источника массы в системе. Однако нестационарные системы координат довольно широко используются для однофазного варианта задачи, см., например, [10]. Двухфазная задача, как правило, требует специальной процедуры выделения фронта и связанного с ней итерационного механизма перестройки сетки. Несомненный интерес в задачах типа Стефана могут представлять методы решения на адаптивных сетках, динамически связанных с движением границы.

Целью настоящей работы является изложение одного из возможных подходов к математическому моделированию двухфазной задачи Стефана на адаптивной сетке. В основу метода положена идея описания движения узлов сетки на дифференциальном уровне с помощью уравнения в частных производных. Координаты узлов при этом являются дополнительными неизвестными и должны определяться наряду с искомыми значениями сеточных функций из численного решения единой дифференциальной задачи. Построение дифференциальной модели осуществляется посредством выбора некоторой неподвижной системы координат, эйлеровы образы которой могут изменяться во времени под влиянием одной из особенностей решения: больших градиентов или перемещения границ расчетной области.

**Дифференциальная постановка задачи.** Рассмотрим предлагаемый метод решения на примере нестационарной одномерной задачи Стефана в классической постановке. Математическая формулировка задачи сводится к нелинейному уравнению теплопроводности в двух подобластях  $\Omega_s(t)$  и  $\Omega_l(t)$  области  $\Omega_x$ , разделенных заранее неизвестной межфазной границей  $\Gamma(t)$ :

$$\frac{\partial \varepsilon_i}{\partial t} = - \frac{\partial W_i}{\partial x} + g, \quad \varepsilon_i = (c_p T)_i, \quad W_i = -\lambda_i(T) \frac{\partial T}{\partial x}, \quad i=s, l, \quad x_0 < x < x_R. \quad (1)$$

На межфазной границе  $\Gamma(t)$  выполняется дифференциальное условие Стефана

$$W_l - W_s = L_m \rho_s v_{sl}. \quad (2)$$

В классическом варианте задачи Стефана, кроме условия (2) на границе  $\Gamma(t)$ , предполагается также постоянство температуры перехода

$$T_l = T_s = T_m. \quad (3)$$

Здесь  $s, l$  — индексы, означающие принадлежность величин к твердой и жидкой фазам соответственно;  $\rho$  — плотность вещества;  $c_p, \lambda$  — коэффициенты теплоемкости и теплопроводности;  $T_m, L_m$  — температура и удельная теплота фазового перехода;  $v_{sl}$  — скорость движения границы раздела;  $g$  — объемный источник. Вид граничных условий на концах отрезка  $[x_0, x_R]$  может быть любым.

В предлагаемом подходе проблема Стефана рассматривается как движение сплошной среды с сильным разрывом (разрыв I рода), на котором скачком изменяются внутренняя энергия, плотность и теплофизические характеристики вещества. Для нахождения численного решения предлагается перейти к таким переменным, в которых положение фазового перехода было бы заранее известно и постоянно во времени и тем самым область решения также оказалась бы известной. Условие Стефана на фазовой границе используется для определения потока массы через границу раздела. Относительное изменение количества массы в каждой из подобластей описывается дифференциальным уравнением в частных производных. После конечно-разностной аппроксимации исход-

ной задачи это уравнение применяется для построения адаптивной сетки, динамически связанной с границей раздела фаз  $\Gamma(t)$ .

Введем некоторое расчетное пространство  $\Omega_{q,t} : q_0 \leq q \leq q_R, t > 0$ , и предположим, что на каждый момент времени существует невырожденное преобразование  $x = x(q, t)$ ,  $x_0 = x(q_0, t)$ ,  $x_R = x(q_R, t)$ ,  $x_\Gamma = x(q_\Gamma, t)$ .

Пусть якобианом такого преобразования является некоторая функция  $\psi(q, t)/\rho$ , ставящая в соответствие элементу  $dx$  элемент  $dq$ . Пространственная переменная  $q_0 \leq q \leq q_R$  выбирается такой, что каждому элементу течения  $dq$  соответствует масса  $\psi(q, t)dq$ , зависящая от времени вследствие обмена массой между соседними элементами. Введем функцию  $Q(q, t)$ , характеризующую плотность потока массы между элементами течения, и запишем задачу Стефана в переменных  $q, t$ . Для этого выпишем в интегральной форме законы сохранения энергии и массы для элементарного объема  $\Delta q$ :

$$\begin{aligned} & \int_q^{q+\Delta q} [\varepsilon(q, t+\Delta t)\psi(q, t+\Delta t) - \varepsilon(q, t)\psi(q, t)]dq = \\ & = \int_t^{t+\Delta t} \{ [W(q, t) - W(q+\Delta q, t)] + [\varepsilon(q, t)Q(q, t) - \\ & - \varepsilon(q+\Delta q, t)Q(q+\Delta q, t)] \} dt + \int_t^{t+\Delta t} \int_q^{q+\Delta q} \frac{\psi}{\rho} g dq dt, \\ & \int_q^{q+\Delta q} [\psi(q, t+\Delta t) - \psi(q, t)]dq = \int_t^{t+\Delta t} [Q(q, t) - Q(q+\Delta q, t)]dt. \end{aligned}$$

Предполагая дифференцируемость подынтегральных функций и переходя к пределу при  $\Delta t, \Delta q \rightarrow 0$ , получаем эти законы в дифференциальной форме

$$\frac{\partial(\psi\varepsilon)}{\partial t} = -\frac{\partial W}{\partial q} - \frac{\partial(\varepsilon Q)}{\partial q} + \frac{\psi}{\rho} g, \quad W = -\lambda(T) \frac{\rho}{\psi} \frac{\partial T}{\partial q}, \quad (4)$$

$$\partial\psi/\partial t = -\partial Q/\partial q. \quad (5)$$

Полученная система уравнений (4), (5) дополняется уравнением связи между переменными  $x$  и  $q$

$$dx/dq = \psi/\rho. \quad (6)$$

Условие на границе раздела фаз в переменных  $q, t$  записывается достаточно просто. Согласно требованию, что положению межфазной границы  $\Gamma(t)$  в этих переменных соответствует постоянное значение  $q = q_\Gamma$ , для уравнения теплопроводности (4) достаточно одного условия вида (3):  $T(q_\Gamma, t) = T_m$ . Для уравнения (5) задается поток массы, определяемый из условия Стефана (2):

$$Q(q_\Gamma, t) = L_m^{-1}(W_s - W_l). \quad (7)$$

Значение и знак потока  $Q(q_\Gamma, t)$  однозначно определяют в переменных  $x, t$  скорость и направление движения фазовой границы  $v_{sl} = dx_\Gamma/dt = -Q(q_\Gamma, t)/\rho_s$ . Функция  $Q(q, t)$ ,  $q_0 < q < q_R$ , в общем случае может быть произвольной. Произвольность ее конструкции можно использовать в различных целях, определяемых особенностями рассматриваемых задач. В сложных системах вид функции  $Q(q, t)$ , по-видимому, должен определяться доминирующим процессом. В задаче Стефана в простейшем, например для более равномерного распределения узлов, случае ее можно задавать в виде диффузионного потока  $Q = -D\partial\psi/\partial q$ , где  $D$  —

произвольная константа, подбираемая в процессе расчетов. В более общем случае величину  $D$  можно представить в виде функции, выражаемой через теплофизические характеристики среды.

Если через внешние границы области потоки вещества отсутствуют, то точки  $x_0, x_R$  неподвижны и граничные условия имеют вид  $Q(q_0, t) = Q(q_R, t) = 0$ .

**Разностная схема.** Система уравнений (4) — (6) с соответствующими граничными условиями решается в области  $\Omega_{q,t}$ :  $q_0 \leq q \leq q_R, t > 0$ . Для каждой из подобластей  $\Omega_s, \Omega_l$  вводится расчетная сетка

$$\omega_p = \{(q_i, t^J), (q_{i+1/2}, t^J), q_{i+1} = q_i + h, q_{i+1/2} = q_i + 0,5h, \\ i = 0, 1, \dots, N-1, t^{J+1} = t^J + \tau\}, p = s, l.$$

К узлам сетки  $(q_i, t^J)$  будем относить сеточные функции эйлеровой переменной  $x_i^J$  и потоков  $W_i^J, Q_i^J$ , к полущелым точкам  $(q_{i+1/2}, t^J)$  — сеточные функции  $\varepsilon_{i+1/2}^J, T_{i+1/2}^J, \psi_{i+1/2}^J, \rho_{i+1/2}^J, g_{i+1/2}^J$ . Для аппроксимации уравнений (4) — (6), согласно [11], можно использовать семейство разностных схем

$$\frac{(\varepsilon\psi)_{i+1/2}^{J+1} - (\varepsilon\psi)_{i+1/2}^J}{\tau} = - \frac{W_{i+1}^\sigma - W_i^\sigma}{h} \quad (8)$$

$$- \frac{(\varepsilon Q)_{i+1}^\sigma - (\varepsilon Q)_i^\sigma}{h} + \left( \frac{\psi}{\rho} g \right)_{i+1/2}^\sigma,$$

$$(\psi_{i+1/2}^{J+1} - \psi_{i+1/2}^J) / \tau = -(Q_{i+1}^\sigma - Q_i^\sigma) / h, \quad (9)$$

$$(x_{i+1}^{J+1} - x_i^{J+1}) / h = (\psi/\rho)_{i+1/2}^{J+1}, \quad \sigma = 0; 0,5; 1, \quad (10)$$

$$Q_i = -D \frac{\psi_{i+1/2} - \psi_{i-1/2}}{h}, \quad W_i = - \frac{\lambda_i \rho_i}{\psi_i} \frac{T_{i+1/2} - T_{i-1/2}}{h},$$

$$\lambda_i = \lambda(T_i), \quad \rho_i = \rho(T_i).$$

Значения функций  $\varepsilon_i, T_i, \psi_i$  вычисляются по формуле

$$y_i = (\psi_{i-1/2} y_{i+1/2} + \psi_{i+1/2} y_{i-1/2}) / (\psi_{i-1/2} + \psi_{i+1/2}).$$

На межфазной границе записываются следующие разностные соотношения:

$$T_\Gamma^{J+1} = T_m, \quad W_{\Gamma s}^{J+1} - W_{\Gamma l}^{J+1} = L_m v_{sl}^{J+1} \rho_s. \quad (11)$$

В расчетах использовались схемы с  $\sigma = 0,5$  и  $1$ , приводящие к необходимости решения двух трехточечных нелинейных уравнений в каждой из подобластей  $\Omega_s, \Omega_l$ . Для решения этой системы использовалась встречная матричная прогонка [12] с итерациями по нелинейности. Сшивка встречных прогонок осуществлялась в точке  $q_\Gamma$  с помощью условий (11). В начальный момент времени  $t = 0$  сетки в расчетном и физическом пространствах практически совпадают, так как начальное значение  $\psi = 1, \rho = \text{const}$ . В дальнейшем сетка в расчетном пространстве остается постоянной, а в физическом она перестраивается с помощью уравнений (9) — (10) и с учетом (11). Величина  $\psi_{i+1/2}^J$  при этом показывает, во сколько раз изменилась масса каждого элемента или, что то же самое (для выбранных переменных), во сколько раз изменился шаг пространственной сетки по сравнению с начальным.

**Результаты моделирования.** В качестве теста для рассматриваемой методики была использована модельная задача о промерзании [13], допускающая, в частности, автомодельное решение

$$T = \begin{cases} -1 + \Phi(x/2\sqrt{\beta})/\Phi(\beta), & 0 \leq x \leq x_\Gamma, \\ 0, & x_\Gamma < x \leq 1, \end{cases}$$

$$\Phi(x) = \frac{2}{\pi^{1/2}} \int_0^x e^{-y^2} dy, \quad x_\Gamma = 2\beta t^{1/2}, \quad \beta = 0,6202.$$

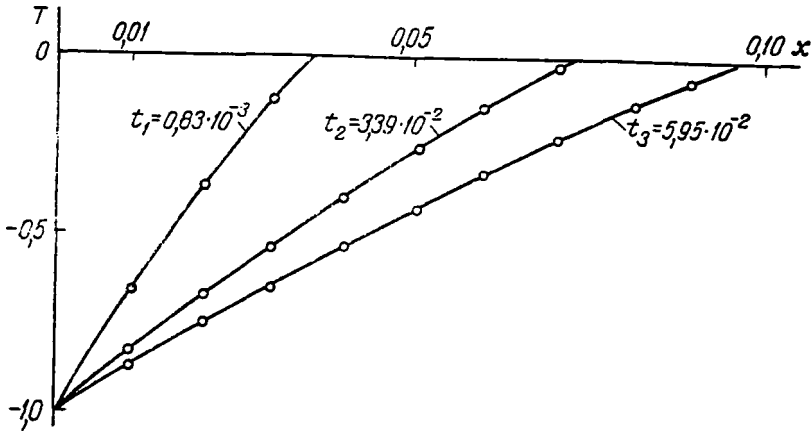


Рис. 1

Решение получено для постоянных теплофизических величин  $c_p = 1$ ,  $\lambda = 1$ ,  $\rho = 1$  и следующих краевых условий:  $T(x, 0) = 0$ ,  $T(0, t) = -1$ ,  $T(1, t) = 0$ .

При численной реализации рассматриваемой задачи для системы (8) — (10) объем твердой фазы задавался равным  $2,3 \cdot 10^{-3}$ . Начальные сетки в обеих подобластях задавались равномерными и состояли из 20 интервалов каждая. Таким образом, первоначальный шаг по пространственной переменной в области, занимаемой одной фазой, отличался на несколько порядков от шага в другой. Постоянная  $D$  задавалась равной 10. На рис. 1 представлены профили температуры на различные моменты времени. Точками обозначены значения численного решения. Видно, что они практически не отличаются от точного. Максимальная относительная ошибка в определении температуры не превышала 0,5%. Относительная ошибка в определении скорости оказалась не более 0,05%. В качестве другого примера рассматривалась задача об импульсном нагреве металлической пластины толщиной 100 мкм. Поверхность металла подвергалась тепловому воздействию источника с гауссовым распределением интенсивности  $G = G_0 \exp[-(t/\tau)^2]$ , где

$$G_0 = 2 \cdot 10^7 \text{ Вт/см}^2; \quad \tau = 2,5 \cdot 10^{-8} \text{ с.}$$

Задача Стефана (1) — (3) дополнялась граничными условиями

$$\lambda(T) \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=x_R} = -G,$$

$$T(x_0, t) = T_0.$$

В расчетах использовались теплофизические характеристики алюминия [14].

Результаты моделирования представлены на рис. 2—4. В рассматриваемом примере численно исследовалось влияние величины теплоты пе-

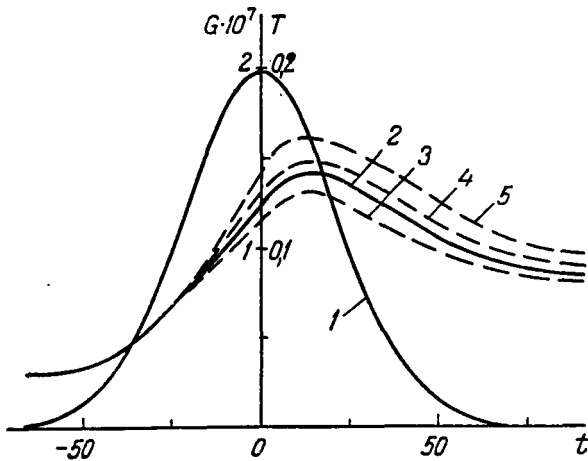


Рис. 2.

рехода  $L_m$  на процесс плавления. На рис. 2 кривая 1 характеризует распределение интенсивности  $G$ , Вт/см<sup>2</sup> источника, кривые 2—5 — временные зависимости температуры поверхности при различных значениях  $L_m$ . Сплошная кривая соответствует  $L_m = L_m^0 = 0,369$  кДж/г, штриховые —  $L_m = 2L_m^0$  (3),  $L_m = 0,5L_m^0$  (4),  $L_m = 0$  (5). На рис. 3 приведено для тех же значений  $L_m$  пространственное распределение температуры в один и тот же момент времени. Момент плавления на всех кривых, для которых  $L_m \neq 0$ , характеризуется изломом профиля температуры (рис. 2, 3), величина которого тем больше, чем больше величина  $L_m$ . При  $L_m = 0$  излом отсутствует, что означает, что процесс плавления не учитывается. Возрастание  $L_m$  свыше  $L_m^0$  соответствует увеличению затрат энергии на процесс плавления. В расчетах это приводит к уменьшению значений температуры на поверхности и глубине, к уменьшению толщины расплава  $H$ , мкм и скорости  $v$ , м/с. Уменьшение теплоты плавления приводит к росту температурных зависимостей  $T(t)$  и  $T(x)$ . Предельными значениями для этих температурных зависимостей являются кривые при  $L_m = 0$ . На рис. 4 представлены зависимости скорости движения фронта  $v_{sl}$  при  $L_m = L_m^0$  и толщины жидкой фазы  $H$  при различных значениях  $L_m$ .

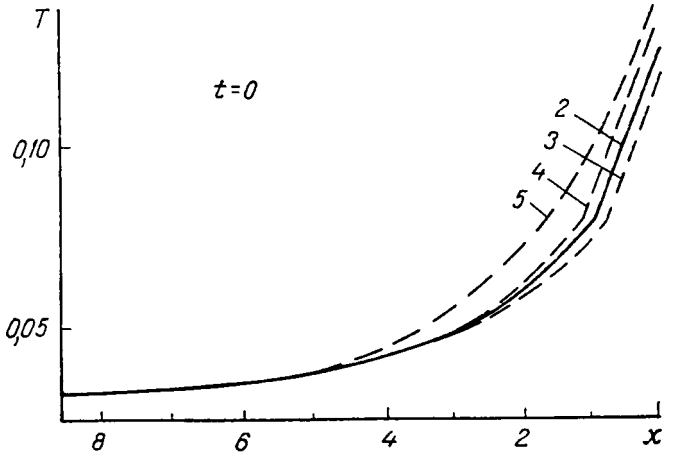


Рис. 3

В расчетах для каждой фазы использовались равномерные сетки, содержащие по 30 узлов. Шаги первоначальных сеток  $h_s$  и  $h_l$  существенно отличались по величине  $h_s \gg h_l$ . Первоначальную сетку для отсутствующей фазы можно вводить двумя способами. При первом ( $T < T_m$ ) учитывается одно уравнение теплопроводности. При  $T = T_m$  с помощью простой процедуры подсчитывается количество перетекшей массы за один временной шаг, которое затем распределяется на все интервалы, и тем самым определяется первоначальная сетка для новой фазы. Второй способ заключается в том, что при  $T = T_m$  вводится расчетная сетка со сколь угодно малым шагом. Введение сетки вторым способом приводит лишь к увеличению числа итераций на первых шагах.

Включение механизма адаптации приводит к автоматическому отслеживанию положения границы раздела фаз и изменению координат в эйлеровом пространстве. Размеры области и величина шагов сетки вновь зарождающейся фазы увеличиваются, а старой уменьшаются. Динамику поведения сетки в каждой из подобластей  $\Omega_s$  и  $\Omega_l$  удобно характеризовать величиной  $\psi$ , значения которой в исходной фазе могут уменьшаться от единицы до нуля, а в зарождающейся — увеличиваться от единицы до

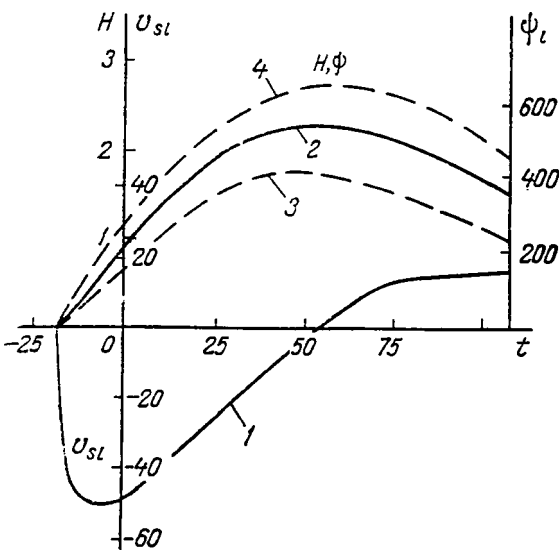


Рис. 4

сколь угодно большого числа. При выборе достаточно большого значения  $D$  величины  $\psi_s, \psi_l$  могут практически не зависеть от пространственной переменной. Временные зависимости  $\psi_l(t)$  в жидкой фазе для различных значений  $L_m$  показаны на рис. 4. Эти зависимости показывают, во сколько раз изменилась масса жидкости по сравнению с массой в начальный момент плавления или, что то же самое, во сколько раз изменяется пространственный шаг сетки по отношению к первоначально заданному значению.

В заключение отметим следующее:

1. Предлагаемый метод, как показали расчеты в широком диапазоне изменения интенсивности источника и теплофизических характеристик вещества, отличается высокой скоростью сходимости. Используемое число итераций при погрешности  $10^{-3}$ — $10^{-4}$  обычно равнялось 2—3.

2. Начальная сетка может выбираться равномерной или неравномерной с сильно отличающимися шагами (несколько порядков) для различных фаз. Это делает метод весьма удобным для исследования задач о зарождении новой фазы.

3. Предлагаемый метод пригоден к решению задач с подвижными границами, закон движения которых может быть задан или определен из решения самой задачи.

4. Выделение фронта и перестройка сетки в переменных  $x, t$  производятся автоматически и не связаны с итерационными процедурами. В то же время использование метода встречной прогонки позволяет организовать вычисление по схеме сквозного счета.

### Литература

1. Успенский А. Б. // Докл. АН СССР. 1967. Т. 172, № 1. С. 61—64.
2. Вабищевич П. Н., Вабищевич Т. Н. // Вестн. Моск. гос. ун-та. Вычисл. мат. и кибернетика. 1983. № 4. С. 17—22.
3. Бакирова О. И. // Дифференц. уравнения. 1983. Т. 19, № 3. С. 491—500.
4. Тихонов А. Н., Самарский А. А. Уравнения математической физики. М., 1953.
5. Самарский А. А., Моисеенко Б. Д. // Журн. вычисл. мат. и мат. физ. 1965. Т. 5, № 5. С. 816—827.
6. Будаков Б. М., Соловьева Е. Н., Успенский А. Б. // Журн. вычисл. мат. и мат. физ. 1965. Т. 5, № 5. С. 828—840.
7. Мажукин В. И., Повещенко Ю. А., Попов С. Б., Попов Ю. П. Об однородных алгоритмах численного решения задачи Стефана. М., 1985. (Препринт / ИПМ им. М. В. Келдыша АН СССР: № 122).
8. Любов Б. Я. Теория кристаллизации в больших объемах. М., 1975.
9. Авдонин Н. А. Математическое описание процессов кристаллизации. Рига, 1980.
10. Rieger H., Prohahn U., Beer H. // Int. J. Heat Mass Transfer. 1982. Vol. 25, N 1. P. 137—147.
11. Самарский А. А. Теория разностных схем. М., 1977.
12. Самарский А. А., Николаев Е. С. Методы решения сеточных уравнений. М., 1978.
13. Карслоу Г., Егер Д. Теплопроводность твердых тел. М., 1964.
14. Мажукин В. И., Пестрякова Г. А. Численное моделирование процессов поверхностного испарения металла лазерным излучением. М., 1984. (Препринт / ИПМ им. М. В. Келдыша АН СССР: № 48).