

# Математическое моделирование

том 3 номер 10 / 1991

## ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ АЛГОРИТМЫ И МЕТОДЫ

### АЛГОРИТМ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ГИДРОДИНАМИЧЕСКОГО ВАРИАНТА ЗАДАЧИ СТЕФАНА ПРИ ПОМОЩИ ДИНАМИЧЕСКИ АДАПТИРУЮЩИХСЯ СЕТОК

© П.В. Бреславский, В.И. Мажукин

Всесоюзный центр математического моделирования АН СССР, Москва

Предлагается алгоритм численного решения задачи Стефана с явным выделением фазового фронта. Приводятся разностные схемы, выписанные на сетках с динамической адаптацией. В качестве примера численно исследуется задача о динамике плавления перегретого твердотельного стержня конечной длины. Результаты расчетов сравниваются с автомодельным решением.

#### COMPUTATIONAL ALGORITHM OF A HYDRODYNAMICAL VERSION OF STEFAN PROBLEM BY DYNAMIC ADAPTING GRID

*P.V. Breslavsky, V.I. Mazhukin*

National center for mathematical modeling Ac. of Sc. USSR, Moscow

The numerical solution algorithm of Stefan problem with explicit front-tracking is suggested. Finite-difference schemes using dynamic adapting grids are presented. The problem to be investigated is a melting dynamic of overheated solid core of a finite length. Computational results are compared with selfsimilar solution.

**Введение.** Одной из центральных проблем численного решения уравнений математической физики является построение расчетных сеток. Использование оптимальных расчетных сеток во многом облегчает вычислительный процесс при решении конкретных задач и их построение является неотъемлемой частью численного алгоритма. Одним из наиболее перспективных направлений в этой области являются методы, в которых распределение узлов, связанное с искомым решением, производится с помощью так называемых адаптирующихся сеток. Применение адаптирующихся к решению сеток позволяет либо существенно упростить вычислительный процесс, например, при решении многомерных стационарных задач, либо решать задачи повышенной сложности с высокой точностью [1].

В настоящей работе в качестве примера задачи повышенной сложности рассматривается гидродинамический вариант задачи Стефана, описывающий поведение твердотельного стержня, находящегося в начальный момент времени в перегретом метастабильном состоянии. Отметим, что подобная постановка задачи важна не только с точки зрения вычислительного процесса, но представляет и само-

стоятельный интерес в плане интенсивных исследований метастабильных состояний, возникающих в различных областях науки и техники, в частности, при воздействии на конденсированные среды концентрированных потоков энергии [2].

Основная сложность решения задач типа Стефана связана с наличием подвижных межфазных границ, положение которых определяется в ходе решения. Для решения задачи Стефана в гидродинамической постановке предлагается использовать метод динамически адаптирующихся сеток [3, 4], в котором проблема построения расчетной сетки формулируется на дифференциальном уровне. При этом в дифференциальной задаче часть уравнений описывает физические процессы, а другая — поведение узлов сетки. Метод динамически адаптирующихся сеток предназначен для решения нестационарных одномерных [4, 5] и многомерных [6] задач. В основу метода положена процедура перехода к произвольной нестационарной системе координат. Преобразование координат осуществляется автоматически с помощью искомого решения, что позволяет производить размещение узлов сетки в зависимости от особенностей решения. Таковыми могут быть распространение больших градиентов, ударных волн, контактных и фазовых границ. Сгущение узлов в областях сильного изменения решения в методе динамической адаптации осуществляется с помощью функции преобразования  $Q$ , которая в общем случае представляет собой комбинацию из нескольких производных численного решения. Проблемы, связанные с подвижными границами, снимаются посредством перехода к произвольной нестационарной системе координат, в которой узлы сетки и границы оказываются неподвижными. В этом отношении метод подобен лагранжевым. Однако имеется принципиальное отличие. В лагранжевых методах нестационарной системе координат навязывается гидродинамическая скорость движения, что не всегда удобно и значительно сужает класс решаемых задач. В методе динамической адаптации скорость движения системы координат (а соответственно и распределение узлов) заранее не указывается, а зависит от искомого решения и определяется в ходе решения задачи. Это в принципе позволяет получать любое желаемое распределение узлов и применение метода не ограничивается задачами гидро- и газодинамики. Однако методы динамической адаптации в настоящее время не разработаны достаточно подробно. В частности, при решении ряда конкретных задач нет информации об исследовании области устойчивости для различных функций преобразования, применяемых для адаптации. Поэтому при использовании динамической адаптации следует соблюдать определенную осторожность.

В вычислительном аспекте предлагаемая работа является дальнейшим вкладом в развитие метода адаптации [3–5]. В ней впервые выписываются разностные схемы для уравнений гидродинамики с теплопроводностью в схемах с динамической адаптацией.

**1. Постановка задачи.** Теоретическое описание динамики фазовых превращений первого рода в общем случае является весьма сложной задачей. Классический вариант задачи Стефана, сформулированный для фазовых переходов типа плавления или затвердевания, сводится к уравнению теплопроводности в области с заранее неизвестной границей  $\Gamma_{sl}$ , разделяющей твердую  $s$  и жидкую  $l$  фазы. На межфазной границе выполняются так называемое дифференциальное условие Стефана

$$\lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial x} - \lambda_l \frac{\partial T_l}{\partial x} = L_m \rho_s \cdot V_{sl} \quad (1)$$

и условие, налагаемое на температуру на этой границе. В задачах плавления или кристаллизации чистого вещества полагается, что температура на границе раздела фаз непрерывна и равна равновесной температуре фазового перехода  $T_m$ , которая обычно считается постоянной величиной:

$$T_s = T_l = T_m. \quad (2)$$

В общем случае значение температуры  $T_m$  не является постоянным. Изменение ее может быть обусловлено, например, вариацией свойств вещества или изменением внешнего давления  $P$ .

В случаях, когда физические условия допускают возникновение перегретых или переохлажденных состояний, применение классического варианта становится проблематичным. Известное и широко используемое автомодельное решение [7] для задачи о плавлении твердого полуограниченного образца, начальная температура которого  $T_0$  превышает температуру плавления  $T_m$ , в начальный момент времени является нефизичным, поскольку скорость движения фазовой границы имеет зависимость  $V_{sl} \sim at^{-1/2}$  и при  $t \rightarrow 0$  обращается в бесконечность. Возникает закономерный вопрос: имеет ли в целом данное решение физический смысл, или же оно является чисто математическим результатом? Отметим, что сингулярное поведение решения на малых временах требует внесения изменений в исходную математическую модель фазового перехода.

Описание динамики быстрых фазовых превращений может быть реализовано при различных модификациях соотношения (2). Вместо равенства (2), исходя из общей теории кинетики фазовых превращений [8, 9], выписывают условие, связанное с кинетикой фазового перехода:

$$V_{sl}(T) = C \exp \left[ - \frac{Q}{RT} \right] \left[ 1 - \exp \left[ - \frac{\Delta G}{RT} \right] \right], \quad (3)$$

где  $C$  – константа,  $Q$  – энергия активации,  $\Delta G$  – изменение свободной энергии. В математическом моделировании этот подход пока не получил широкого распространения и применялся [10, 11] в основном для описания процесса кристаллизации. Ограничения в данном подходе связаны в основном с отсутствием надежных данных для величин  $Q$  и  $C$ , а также отсутствием экспериментального подтверждения предполагаемых теоретических функциональных зависимостей для  $V_{sl}(T)$  для конкретных режимов воздействия.

В настоящей работе приводятся результаты математического моделирования ситуации с сильно перегретым в исходном состоянии конденсированным веществом. Описание фазового превращения производится в рамках классического варианта задачи Стефана со следующей модификацией. Неограниченный рост скорости движения фазового перехода  $V_{sl}$  приводит к такому же росту давления в твердой фазе, что необходимо учитывать при задании температуры фазового перехода  $T_m$ . Для ряда веществ, таких как Al, Si, Ge, Zn, зависимости  $T_m(P)$  хорошо изучены экспериментально [12]. Учет зависимости температуры фазового перехода от давления требует для корректного математического описания привлечения полной системы уравнений гидродинамики.

Рассмотрим твердотельный стержень конечной длины  $L$  с начальной температурой  $T_0$ , существенно превышающей равновесную температуру плавления  $T_m$ . Подобные ситуации могут возникать в случае, если процесс плавления начинается после прохождения волны разгрузки через быстро нагретый приповерхностный слой вещества. С учетом сказанного задача Стефана описывается следующей системой уравнений:

$$\begin{aligned} \left[ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) = 0 \right]_I, \quad \left[ \frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u^2) = - \frac{\partial p}{\partial x} \right]_I, \\ \left[ \frac{\partial}{\partial t} \left[ \rho \left( \varepsilon + \frac{u^2}{2} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \rho u \left( \varepsilon + \frac{u^2}{2} \right) \right] = \right. \\ \left. = - \frac{\partial}{\partial x}(p u) + \frac{\partial}{\partial x} \lambda(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right]_I, \quad I = s, l \end{aligned} \quad (4)$$

$$x_0 < x < \Gamma_{sl} \quad I = s,$$

$$\Gamma_{sl} < x < x_N \quad I = l.$$

Данная система дополняется соответствующими уравнениями состояния:

$$[\mathcal{E} = \mathcal{E}(\rho, T)]_I,$$

$$[p = p(\rho, T)]_I.$$

Принятые обозначения:  $\rho$ ,  $u$ ,  $p$  — плотность, гидродинамическая скорость, давление;  $\lambda$  — теплопроводность;  $L_m$  — теплота перехода;  $\mathcal{E}$  — внутренняя энергия;  $V_{sl}$  — скорость фазового фронта.

Г р а н и ч н ы е у с л о в и я. Левый конец стержня  $x = x_0$  жестко закреплен и теплоизолирован, то есть ему соответствуют условия

$$u = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial x} = 0. \quad (5)$$

Правый конец стержня  $x = x_N$  полагается свободным и также теплоизолированным:

$$p = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial x} = 0. \quad (6)$$

На межфазной границе  $x = \Gamma_{sl}$  выполняются три закона сохранения и задается закон изменения температуры  $T_{sl}$  в зависимости от давления:

$$\rho_s V_{sl} = \rho_l (u_s - u_l + V_{sl}),$$

$$\rho_s V_{sl}^2 + P_s = \rho_l (u_s - u_l + V_{sl})^2 + p_l,$$

$$\lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial x} - \lambda_l \frac{\partial T_l}{\partial x} = L_m \rho_s V_{sl}, \quad (7)$$

$$T_{sl} = T_m(P_s).$$

Н а ч а л ь н ы е у с л о в и я. Начальные условия выбирались из следующих соображений. Предполагалось, что тонкий слой материала мгновенно нагрет до температуры  $T_0$ , превышающей равновесную температуру  $T_m$ , а процесс плавления начинается после прохождения волны разгрузки (то есть давление в среде стало равным нулю). Эта ситуация моделируется заданием уравнений состояния в виде  $p_I = p_I(\rho - \rho_0, T - T_0)$  и пространственных распределений температуры  $T(0, x)$  и плотности  $\rho(0, x)$  в виде однородных ступенчатых функций, претерпевающих разрыв на межфазной границе:

$$\left. \begin{aligned} T(0, x) &= T_0 \\ \rho(0, x) &= \rho_s \\ u(0, x) &= 0 \end{aligned} \right\} x_0 < x < \Gamma_{sl},$$

$$\left. \begin{aligned} T(0, x) &= T_{sl} \\ \rho(0, x) &= \rho_l \\ u(0, x) &= u_l \end{aligned} \right\} \Gamma_{sl} < x < x_N. \quad (8)$$

В качестве теплофизических параметров и уравнений состояния в расчетах использовались величины, характерные для алюминия [13]:

$$\mathcal{E}_I = [C_p T]_I;$$

$$p_s = \frac{3}{2} P_{s_0} [z_s^{7/3} - z_s^{5/3}] [1 + \alpha [z_s^{2/3} - 1]] + 3R\rho [T_0 - T] [\gamma + 4[z_s - 1]];$$

$$p_l = P_{l_0} [z_l - 1 + \beta [T - T_{sl}]], \quad z_I = \rho / \rho_I, \quad I = s, l,$$

где  $T_m = 933,6$  К,  $\rho_s = 2,7$  г/см<sup>3</sup> =  $\rho_l = 2,382$  г/см<sup>3</sup>,  $R = 0,30793$  Дж/(г · К),  $P_{s_0} =$

$= 7,27 \cdot 10^5$  бар,  $P_{I_0} = 10^5$  бар,  $\alpha = 0,225$ ,  $\gamma = 2,136$ ,  $\beta = 3 \cdot 10^{-5}$  (К) $^{-1}$ . Для зависимости  $T_{sl} = T_m(P_s)$  использовались экспериментальные данные [12], которые аппроксимировались выражением:

$$T_{sl} = T_m + 0,00644 P_s.$$

Вычисления начинались с решения нелинейной системы (7), (8), из которой определяются значения  $T_{sl}$  и все связанные с ней величины.

**2. Метод и алгоритм решения.** Численное решение задачи (4)–(8) осуществлялось с помощью конечно-разностного метода с динамически адаптирующимися сетками [4, 5]. Согласно этому методу на первом этапе с помощью замены общего вида  $x = f(q, \tau)$ ,  $t = \tau$  осуществляется переход от переменных  $x, t$  к произвольной нестационарной системе координат с переменными  $q, \tau$ . Применяя указанное преобразование к системе (4) и записывая ее в строго дивергентном виде, получим

$$\begin{aligned} \left[ \frac{\partial}{\partial t} \left[ \frac{\psi}{\rho} \right] = \frac{\partial u}{\partial q} - \frac{\partial}{\partial q} \left[ \frac{Q}{\rho} \right] \right]_I, \quad \left[ \frac{\partial}{\partial t} [\psi \cdot u] = - \frac{\partial p}{\partial q} - \frac{\partial}{\partial q} [Q \cdot u] \right]_I, \\ \left[ \frac{\partial}{\partial t} \left[ \psi \cdot \left[ \varepsilon + \frac{u^2}{2} \right] \right] = - \frac{\partial}{\partial q} [p \cdot u] + \right. \\ \left. + \frac{\partial}{\partial q} \left[ \frac{\lambda \cdot \rho}{\psi} \cdot \frac{\partial T}{\partial q} \right] - \frac{\partial}{\partial q} \left[ Q \left[ \varepsilon + \frac{u^2}{2} \right] \right] \right]_I, \\ \left[ \frac{\partial \psi}{\partial t} = - \frac{\partial Q}{\partial q}, \quad \frac{\partial x}{\partial q} = \frac{\psi}{\rho} \right]_I, \quad I = s, l, \end{aligned}$$

где  $\psi$  – метрический коэффициент. В этой системе первые три уравнения описывают непосредственно исследуемое явление, а два других – динамику расчетной сетки, связанную с поведением искомого решения, и связь расчетной переменной  $q$  с исходной  $x$ . Конкретное преобразование координат определяется видом функции  $Q$ . Выбор ее должен производиться с учетом особенностей рассматриваемой задачи. В данном случае, когда решается задача с одной подвижной границей и предполагается отсутствие больших градиентов внутри области функция  $Q$  задавалась в виде:

$$[Q = -D \frac{\partial \psi}{\partial q}]_I. \quad (10)$$

При достаточно больших значениях  $D$  эта функция обеспечивает квазиравномерный шаг в каждой из фаз вещества. Граничные условия в связи с переходом к расчетным координатам и изменением дифференциальной постановки задачи будут иметь вид

$$q = q_0: u = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial q} = 0, \quad Q = 0; \quad (11)$$

$$q = q_N: p = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial p} = 0, \quad Q = 0; \quad (12)$$

$$\begin{aligned} q = q_{sl}: \rho_s V_{sl} = \rho_l (u_s - u_l + V_{sl}), \\ \rho_s V_{sl}^2 + P_s = \rho_l (u_s - u_l + V_{sl})^2 + p_l, \\ \frac{\lambda_s \rho_s}{\psi_s} \cdot \frac{\partial T_s}{\partial q} - \frac{\lambda_l \cdot \rho_l}{\psi_l} \cdot \frac{\partial T_l}{\partial q} = L_m \rho_s V_{sl}, \end{aligned} \quad (13)$$

$$Q = Q_{sl} = -\rho_s V_{sl},$$

$$T_{sl} = T_m(P_s).$$

Для решения задачи (9)–(13) в расчетном пространстве введем сетку с неравномерным шагом  $h_{i+1/2}$  по переменной  $q$  и шагом  $\tau^j$  по переменной  $t$ :

$$\omega = \{(q_i, t^j), (q_{i+1/2}, t^j); q_{i+1} = q_i + h_{i+1/2}, q_{i+1/2} = q_i + 0,5h_{i+1/2}, t^{j+1} = t^j + \tau; i = 0, \dots, N-1\}.$$

В области твердого тела  $0 \leq q \leq q_{sl}$  находится  $N_s$  ячеек, а в области жидкости  $q_{sl} \leq q \leq q_l - N_l$  ячеек. Первый и последний шаг в каждой из областей положим равными нулю, то есть  $h_{1/2} = h_{N_s-1/2} = h_{N_s+1/2} = h_{N-1/2} = 0$ . К целым узлам сетки  $(q_i, t^j)$  будем относить переменную  $x_i^j$  и функции  $Q_i^j, p_i^j$ ; к полужелым точкам  $(q_{i+1/2}, t^j)$  – сеточные функции  $\psi_{i+1/2}^j, \rho_{i+1/2}^j, u_{i+1/2}^j, T_{i+1/2}^j$ . Аппроксимация системы уравнений (9) производилась с помощью полностью неявной разностной схемы:

$$\begin{aligned} & \left[ \frac{\psi}{\rho} \right]_k^{j+1} - \left[ \frac{\psi}{\rho} \right]_k^j = \frac{\tau}{h_k} \left\{ u_{i+1}^{j+1} - u_i^{j+1} - \left[ \frac{Q}{\rho} \right]_{i+1}^{j+1} + \left[ \frac{Q}{\rho} \right]_i^{j+1} \right\}; \\ & [\psi u]_k^{j+1} - [\psi u]_k^j = \frac{\tau}{h_k} \left\{ -p_{i+1}^{j+1} + p_i^{j+1} - [Qu]_{i+1}^{j+1} + [Qu]_i^{j+1} \right\}; \\ & \left[ \psi \left[ \varepsilon + \frac{u^2}{2} \right] \right]_k^{j+1} - \left[ \psi \left[ \varepsilon + \frac{u^2}{2} \right] \right]_k^j = \frac{\tau}{h_k} \left\{ -[pu]_{i+1}^{j+1} + [pu]_i^{j+1} + \right. \\ & + \left[ \frac{\lambda \rho}{\psi} \right]_{i+1}^{j+1} \frac{T_{k+1}^{j+1} - T_k^{j+1}}{0,5 \cdot (h_{k+1} + h_k)} - \left[ \frac{\lambda \rho}{\psi} \right]_i^{j+1} \frac{T_i^{j+1} - T_{i-1}^{j+1}}{0,5 \cdot (h_{k-1} + h_k)} - \\ & \left. - \left[ Q \left[ \varepsilon + \frac{u^2}{2} \right] \right]_{i+1}^{j+1} + \left[ Q \left[ \varepsilon + \frac{u^2}{2} \right] \right]_i^{j+1} \right\}; \\ & \psi_k^{j+1} - \psi_k^j = \frac{\tau}{h_k} \left\{ -Q_{i+1}^{j+1} + Q_i^{j+1} \right\}; \quad x_{i+1}^{j+1} - x_i^{j+1} = h_k \left[ \frac{\psi}{\rho} \right]_k^{j+1}; \quad k = i + 1/2; \\ & i = 1, 2, \dots, N_s - 2, N_s + 1, N_s + 2, \dots, N - 2, \end{aligned} \quad (14)$$

Линеаризуем систему (14), представляя решение в виде  $y^{r+1} = y^r + \delta y^r$ , где  $r = m, s, n$  – индексы итерационных циклов. Записывая относительно неизвестного приращения  $\delta y^r$ , получим следующую систему:

$$\begin{aligned} & \delta \psi_k^n + \frac{\tau}{h_k} \left[ D \frac{\delta \psi_k^n - \delta \psi_{k-1}^n}{0,5(h_k + h_{k-1})} - D \frac{\delta \psi_{k+1}^n - \delta \psi_k^n}{0,5(h_k + h_{k+1})} \right] = \\ & = \psi_k^j - \psi_k^n - \frac{\tau}{h_k} [Q_{i+1}^n - Q_i^n], \\ & \delta \rho_k^m = \rho_k^m - \frac{[\rho_k^m]^2}{\psi_k^n} \left\{ \frac{\psi_k^j}{\rho_k^m} + \frac{\tau}{h_k} [u_{i+1}^m - u_i^m - \frac{Q_{i+1}^n}{\rho_{i+1}^m} + \frac{Q_i^n}{\rho_i^m}] \right\}, \\ & \delta u_k^m = -u_k^m + \frac{1}{\psi_k^n} \left\{ \psi_k^j \cdot u_k^j - \frac{\tau}{h_k} [p_{i+1}^m - p_i^m + Q_{i+1}^n u_{i+1}^m - Q_i^n u_i^m] \right\}, \\ & \delta T_k^s \left[ \frac{\partial^s \varepsilon}{\partial T} \right]_k + \frac{\tau}{h_k \cdot \psi_k^n} \left[ \frac{\lambda \rho_i^n \delta T_k^s - \delta T_{k-1}^s}{\psi_i^n 0,5(h_k + h_{k-1})} - \right. \\ & \left. - \frac{\lambda \rho_{i+1}^n}{\psi_{i+1}^n} \frac{\delta T_{k+1}^s - \delta T_k^s}{0,5(h_k + h_{k+1})} \right] = -\varepsilon_k^s - \frac{[u_k^j]^2}{2} + \frac{\psi_k^j}{\psi_k^n} [\varepsilon_k^j + \frac{[u_k^j]^2}{2}] - \end{aligned} \quad (15)$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{\tau}{h_k \psi_k^n} \left\{ \frac{\lambda \rho_i^n}{\psi_i^n} \cdot \frac{T_k^s - T_{k-1}^s}{0,5(h_k + h_{k-1})} - \frac{\lambda \rho_{i+1}^n}{\psi_{i+1}^n} \cdot \frac{T_{k+1}^s - T_k^s}{0,5(h_k + h_{k+1})} + \right. \\
& + p_{i+1}^s u_{i+1}^n - p_i^s u_i^n + Q_{i+1}^n [\xi_{i+1}^s + 0,5 [u_{i+1}^n]^2] - \\
& \left. - Q_i^n [\xi_i^s + 0,5 [u_i^n]^2] \right\} - \delta \rho_k^n \left[ \frac{\partial^s \xi}{\partial \rho} \right]_k,
\end{aligned}$$

где  $k = i + 1/2$ ,  $i \in [1, N_s - 2] \cup [N_s + 1, N - 2]$ , а потоки  $Q$  с учетом граничных условий (11)–(13) определяются по формулам

$$Q_i^n = \begin{cases} 0, & \text{при } i = \{1, N - 1\} \\ -\rho_s^n V_{sl}^n, & \text{при } i = \{N_s - 1, N_s + 1\} \\ -D \frac{\psi_k^n - \psi_{k-1}^n}{0,5(h_k + h_{k-1})}, & \text{при } i \in [2, N_s - 2] \cup [N_s + 2, N - 2], \end{cases}$$

Сеточные функции  $\psi$ ,  $\rho$ ,  $u$ ,  $T$  в целых точках определяются через значения этих же функций в полуцелых точках по интерполяционной формуле

$$y_i = \frac{y_k \psi_{k-1} h_{k-1} \rho_k + y_{k-1} \psi_k h_k \rho_{k-1}}{\psi_{k-1} h_{k-1} \rho_k + \psi_k h_k \rho_{k-1}}.$$

К полученной системе алгебраических уравнений (15) добавятся еще несколько уравнений, вытекающих из граничных условий (11), (12) и уравнений состояний:

$$\begin{aligned}
\delta u_{1/2}^m &= 0, \quad \delta T_{1/2}^s = \delta T_{3/2}^s, \quad \delta \psi_{1/2}^n = \delta \psi_{3/2}^n, \\
\delta p_{N-1/2}^m &= \frac{\partial p}{\partial \rho} \cdot \delta \rho_{N-1/2}^m + \frac{\partial p}{\partial T} \cdot \delta T_{N-1/2}^n = 0, \\
\delta T_{N-1/2}^s &= \delta T_{N-3/2}^s, \quad \delta \psi_{N-1/2}^n = \delta \psi_{N-3/2}^n,
\end{aligned} \tag{16}$$

Более сложным образом определяются значения на межфазной границе, где известны пять нелинейных уравнений (13) и два уравнения состояния  $p_I = [p(\rho, T)]_I$ ,  $I = s, l$ , из которых необходимо определить девять функций  $\rho_s, \rho_l, u_s, u_l, P_s, P_l, T_{sl}, V_{sl}, Q_{sl}$ . Для однозначного разрешения этих соотношений привлекались еще два уравнения: движения и неразрывности, с помощью которых значения скорости  $u_s$  и плотности  $\rho_l$  экстраполировались на границу. Остальные семь функций определялись из решения нелинейной системы (13) итерационным методом Ньютона. Величины невязок функции  $\psi$  определялись по известным значениям потока  $Q_{sl}$  с помощью уравнения (10):

$$\begin{aligned}
\delta \psi_{N_s-1/2}^n &= \delta \psi_{N_s-3/2}^n + \psi_{N_s-3/2}^n - \psi_{N_s-1/2}^n - Q_{sl}^n 0,5 h_{N_s-3/2} / D \\
\delta \psi_{N_s+1/2}^n &= \delta \psi_{N_s+3/2}^n + \psi_{N_s+3/2}^n - \psi_{N_s+1/2}^n + Q_{sl}^n 0,5 h_{N_s+3/2} / D.
\end{aligned} \tag{17}$$

Для численной реализации разностных схем (15)–(17), по аналогии с методом отдельных прогонок [14], был разработан специальный алгоритм, состоящий из нескольких вложенных итерационных процедур. Схематически вычислительный процесс для одного шага по времени изображен на рис. 1. Согласно этой схеме алгоритм состоит из трех внутренних и одной внешней итерационных процедур. Вычисления при переходе с  $j$ -го на  $j + 1$ -й временной слой выполняются в следующей очередности. Сначала при помощи метода Ньютона решаются уравнения (13) на межфазной границе, тогда по известной величине  $Q_{sl}$  прогонкой определяются значения  $\delta \psi_k^n$ . Затем в каждой из фазовых областей выполняются внутренние итерационные циклы. В итерационном цикле с индексом  $m$  вычисляются невязки газодинамических функций  $\delta \rho_k^m, \delta u_k^m$ . После их определения выполняются ите-

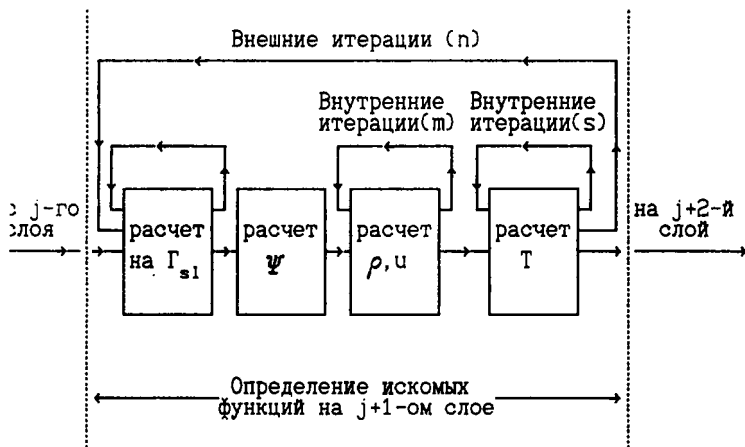


Рис. 1

рационный цикл с индексом  $s$ , в котором на каждой итерации с помощью прогонки находят невязки функции  $\delta T_k^s$ . По достижении сходимости во внутренних циклах начинается выполнение внешней итерационной цикла, в котором по известным значениям функций  $\rho$ ,  $u$ ,  $T$ ,  $\psi$  переопределяются значения на межфазной границе  $q = \Gamma_{s1}$ . В частности, вычисляются новые значения скорости движения фазовой границы  $V_{s1}$  и связанного с ней потока  $Q_{s1}$ , через который затем определяются новые значения  $\psi$  и  $x$ . Вычисления в любом из итерационных циклов прекращаются при выполнении условий сходимости

$$|\delta y_k^r| < \epsilon_1 |y_k^r| + \epsilon_2, \quad r = m, s, n;$$

где  $\epsilon_1$ ,  $\epsilon_2$  — требуемая точность. Значения функций считаются вычисленными на временном шаге  $\tau^{l+1}$ , если сошелся внешний итерационный цикл.

Расчеты показали, что разбиение вычислительного процесса на отдельные итерационные циклы существенно ускоряет сходимость итераций и позволяет в несколько раз уменьшить время счета по сравнению с вычислениями по единой итерационной схеме.

Основное же преимущество предложенного алгоритма заключается в том, что переход к произвольной нестационарной системе координат позволяет избавиться от трудностей, связанных с подвижными границами, и производить расчеты по формулам сквозного счета.

Отметим также, что с помощью указанного алгоритма впервые реализуется численное решение уравнений гидродинамики с теплопроводностью на сетках с динамической адаптацией.

**3. Анализ результатов расчетов.** В расчетах для твердой фазы использовалась неравномерная сетка по пространственной переменной  $x$ , содержащая 40 узлов, и равномерная для жидкой фазы, состоящая из 20 узлов. Толщина твердой фазы в начальный момент задавалась равной  $10^{-4}$  см, жидкой варьировалась в пределах  $5 \div 20$  Å. Целью исследований являлось изучение поведения всей совокупности процессов, сопровождающих фазовое превращение вещества, в зависимости от задаваемого первоначального перегрева твердой фазы. В частности представляется интересным вопрос о соотношении получаемых значений скорости движения фазового фронта с автомодельным решением для классического варианта задачи Стефана, так как при использовании кинетического условия (3) вместо (2) автомодельное решение отсутствует.

Величина начального перегрева варьировалась в температурном диапазоне  $70 \div 300$  К. Моделирование показало, что в начальный момент времени скорость



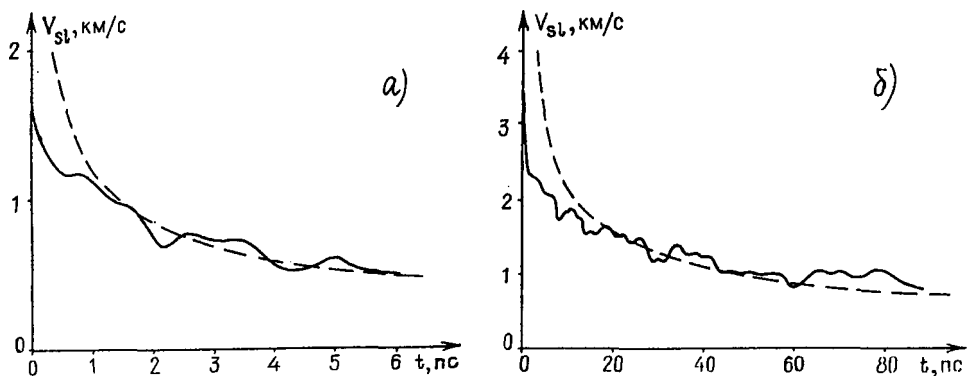


Рис. 2. Временная зависимость скорости фазового фронта при: а)  $\Delta T = 70$  К; б)  $\Delta T = 270$  К. Сплошная линия – численное решение, штриховая – автомодельное решение

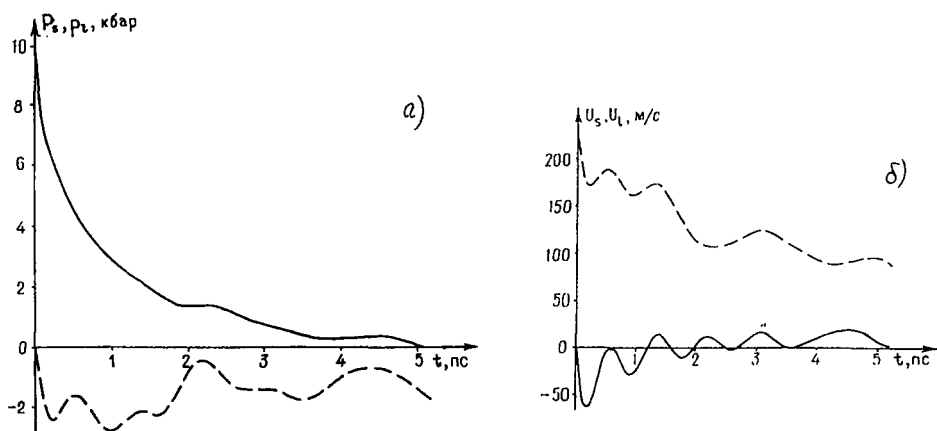


Рис. 3. Временные зависимости давлений  $P_s$ ,  $p_l$  и скоростей  $u_s$ ,  $u_l$  на межфазной границе  $\Gamma_{sl}$  для перегрева  $\Delta T = 70$  К, сплошные линии – со стороны твердой фазы, штриховые – со стороны жидкой

фазового фронта  $V_{sl}$  из-за огромных температурных градиентов на границе раздела фаз резко возрастает, что генерирует на поверхности раздела фаз давление  $P_s$ -порядка нескольких десятков килобар. Поскольку температура на межфазной границе является функцией давления  $T_{sl} = T_m(P_s)$ , то с ростом давления растет температура  $T_{sl}$  и температурные градиенты на границе раздела выравниваются, что приводит к ограничению скорости  $V_{sl}$ , так для  $\Delta T = 70$  К  $V_{sl}^{max} \cong \cong 1,7$  км/с (рис. 2, а). С увеличением первоначального перегрева растет и  $V_{sl}^{max}$  (рис. 2, а, б), при  $\Delta T = 140$  К  $V_{sl}^{max} \cong \cong 2,2$  км/с, а при  $\Delta T = 270$  К максимальная скорость  $V_{sl}^{max} \cong \cong 3,7$  км/с становится сравнимой со скоростью звука (рис. 1, б). Повышение  $\Delta T$  до 400 К приводит к появлению сверхзвуковой скорости  $V_{sl}^{max}$ . Таким образом скорость фазового фронта максимальна в начальный момент времени, а затем быстро, но немонотонно спадает. Немонотонный характер поведения  $V_{sl}$  обусловлен сложными гидродинамическими процессами, развивающимися в твердой и жидкой фазах. На рис. 3, 4 представлены временные зависимости гидродинамических величин  $P_s$ ,  $p_l$ ,  $u_s$ ,  $u_l$  на межфазной границе со стороны твердой и жидкой фаз для  $\Delta T = 70$  К (рис. 3, а, б) и  $\Delta T = 270$  К (рис. 4, а, б). На рис. 5, 6 представлены пространственные профили температуры и давления в твер-

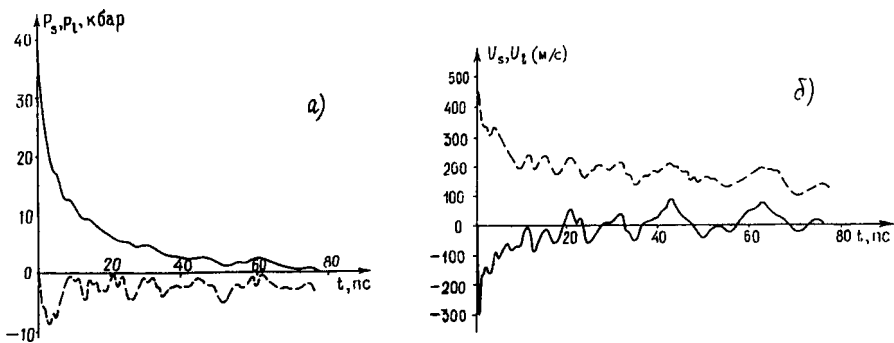


Рис. 4. Временные зависимости давлений  $P_s$ ,  $P_l$  и скоростей  $u_s$ ,  $u_l$  на межфазной границе  $\Gamma_{sl}$  для перегрева  $\Delta T = 270$  К, сплошные линии – со стороны твердой фазы, штриховые – со стороны жидкой

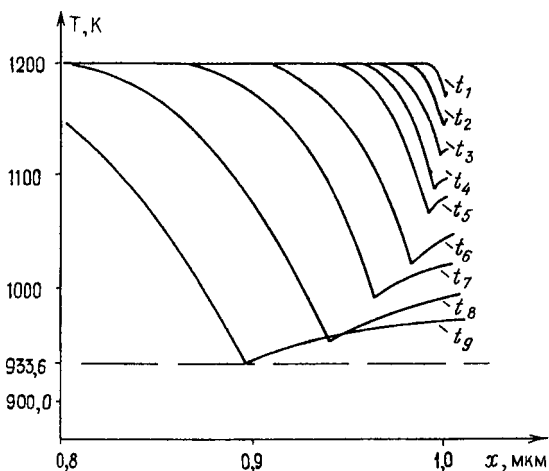


Рис. 5. Пространственное распределение температуры в твердой и жидкой фазах для перегрева  $\Delta T = 270$  К в различные моменты времени:  $t_1 = 6,5 \cdot 10^{-14}$  с,  $t_2 = 4,1 \cdot 10^{-13}$  с,  $t_3 = 1,0 \cdot 10^{-12}$  с,  $t_4 = 2,0 \cdot 10^{-12}$  с,  $t_5 = 3,1 \cdot 10^{-12}$  с,  $t_6 = 7,5 \cdot 10^{-12}$  с,  $t_7 = 1,5 \cdot 10^{-11}$  с,  $t_8 = 3,5 \cdot 10^{-11}$  с,  $t_9 = 7,7 \cdot 10^{-11}$  с

дой и жидкой фазах в различные моменты времени. На всех температурных кривых имеется явно выраженный минимум, соответствующий положению межфазной границы  $x = \Gamma_{sl}$ . По мере распространения фазового фронта температура в твердой и жидкой фазах понижается вплоть до достижения равновесного значения  $T_{sl} = T_m$  на межфазной границе. Пространственное распределение давления  $p(x)$  свидетельствует, что в твердой и жидкой фазах максимальные значения достигаются в начальные моменты времени. С течением времени давление, распространяясь от границы  $\Gamma_{sl}$ , затухает (рис. 6). Пунктирная линия соответствует положению межфазной границы. Сравнение получаемых зависимостей  $V_{sl}(t)$  с автомодельным решением (штриховая линия рис. 2, а, б), неограниченно возрастающим при  $t \rightarrow 0$ , свидетельствует о том, что учет гидродинамических эффектов позволяет получать конечные значения скорости фазового фронта и тем самым устранять область нефизичности решения. С понижением температуры  $T_{sl}$  до равновесного значения  $T_m$  давление на поверхности твердой фазы  $P_s$  падает до нуля, а скорость  $V_{sl}$  приближается к автомодельному решению. Время выхода на автомодельное

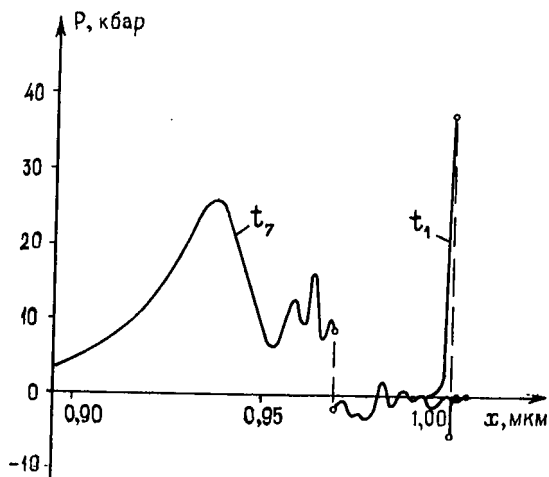


Рис. 6. Пространственное распределение давления в твердой и жидкой фазах для перегрева  $\Delta T = 270$  К в моменты времени:  $t_1 = 6,5 \cdot 10^{-14}$  с;  $t_7 = 1,5 \cdot 10^{-11}$  с

решение существенно зависит от величины первоначального перегрева. Так с увеличением  $\Delta T$  от 70 до 270 К время выхода увеличивается с 7 до 90 пс.

Таким образом, исследование динамики фазового перехода в веществе, находящемся в метастабильном состоянии, при помощи задачи Стефана в гидродинамическом приближении дает разумные физические результаты и позволяет установить один из возможных механизмов ограничения скорости фазовых превращений. Выполненное математическое моделирование свидетельствует о том, что нефизичность автомодельного решения носит локальный характер, и оно, вообще говоря, может использоваться не только для целей тестовых расчетов. Однако вопрос о том, какое из приближений задачи Стефана необходимо использовать для описания конкретной ситуации, всегда требует дополнительного анализа с привлечением экспериментальных данных.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Thompson J.F.* Grid generation technics in computation fluid dynamics // *AIAA J.* – 1984. – V. 22, N 11. – P. 1505–1523.
2. *Williamson S., Mourou G., Li J.C.* Time-resolved laserinduced phase transformation in aluminum // *Phys. Rev. Lett.* – 1984. – V. 52, N 26. – P. 2364–2367.
3. *Дарьин Н.А., Мажукин В.И.* Об одном подходе к построению адаптивных разностных сеток // *ДАН СССР.* – 1988. – Т. 28, № 1. – С. 64–68.
4. *Бреславский П.В., Мажукин В.И.* Математическое моделирование процессов импульсного плавления и испарения металла с явным выделением фазовых частиц // *ИФЖ.* – 1989. – Т. 57, № 1. – С. 107–114.
5. *Мажукин В.И., Такоева Л.Ю.* Принципы построения динамически адаптирующихся к решению сеток в одномерных краевых задачах. // *Математическое моделирование.* – 1990. – Т. 2, № 3. – С. 101–117.
6. *Дарьин Н.А., Мажукин В.И.* Математическое моделирование нестационарных краевых задач на сетках с динамической адаптацией // *Математическое моделирование.* – 1989. – Т. 1, № 3. – С. 29–43.
7. *Карслоу Г., Егер Д.* Теплопроводность твердых тел. – М.: Наука, 1964. – 488 с.
8. *Кристиан Дж.* Теория превращений в металлах и сплавах. Часть 1. – М.: Мир, 1978. – 806 с.
9. *Современная кристаллография. Т. 3. Образование кристаллов / Под ред. Б.К. Вайнштейна.* – М.: Наука, 1980. – 408 с.
10. *Металлические стекла / Под ред. Г. Гюнтеродта, Г. Бека.* – М.: Мир, 1983. – 376 с.

11. Шкловский В.А. К теории лазерного остекловывания с учетом кинетики фазового превращения // Поверхность. – 1986. – № 6. – С. 91–98.
12. Lees J., Williamson B.H.J. Combined very high pressure / high temperature calibration of the tetrahedral anvil apparatus, fusion curves of Zinc, Aluminum, Germanium and Silicon to 60 kilobars // Nature, Physics. – 1965. – V. 208, N 5007. – P. T84–T85.
13. Holian K.S. A new equation of state for aluminum // J. Appl. Phys. – 1986. – V. 59, N 1. – P. 149–157.

Поступила в редакцию  
01.10.91