

Национальная академия наук Беларуси

АНК “Институт тепло- и массообмена
им.А.В.Лыкова” НАНБ

ТЕПЛОМАССОБМЕН ММФ-2000

HEAT/MASS TRANSFER MIF-2000

IV Минский международный форум
(22-26 мая 2000 г.)

Том 5

ТЕПЛОМАССОБМЕН В ДВУХФАЗНЫХ СИСТЕМАХ

Минск 2000

ДВУМЕРНАЯ МНОГОФРОНТОВАЯ ЗАДАЧА СТЕФАНА С ЯВНЫМ ВЫДЕЛЕНИЕМ МЕЖФАЗНЫХ ГРАНИЦ

⁽¹⁾Институт математического моделирования РАН

⁽²⁾Институт математики НАНБ

1. Интерес к задачам типа Стефана вызван как их теоретической значимостью /1/, связанной с развитием математического аппарата для нелинейных задач с подвижными и свободными границами, так и важными физическими и технологическими приложениями, возникающими, в частности, при воздействии концентрированных потоков энергии на металлы и керамики /2/. В данной работе рассматривается метод численного решения многофронтовых нестационарных двумерных по пространству задач Стефана с явным выделением межфазных границ в произвольных областях. В основу метода положена идея динамической адаптации расчетной сетки, выполняемой посредством перехода к произвольной нестационарной системе координат. Преобразование координат осуществляется автоматически с помощью искомого решения.

Изложение метода проводится на примере решения задачи, типичной для обработки материалов концентрированными потоками энергии. Основной особенностью подобных задач является наличие двух фазовых переходов: плавления-кристаллизации и испарения и существенное, достигающее нескольких порядков, различие между характерными размерами рассматриваемой области и зоны выделения энергии (пятно фокусировки) /3/.

2. Явления плавления и кристаллизации чистых веществ в простейшем приближении описываются классической задачей Стефана, в рамках которой процесс рассматривается как движение среды с сильным разрывом, соответствующим положению фазового фронта. На межфазной границе при этом скачком изменяются внутренняя энергия, плотность и теплофизические характеристики вещества: теплоемкость и теплопроводность. Математическая формулировка классического варианта нестационарной двумерной задачи Стефана сводится к квазилинейному уравнению теплопроводности

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \operatorname{div} \lambda(T) \operatorname{grad} T = - \frac{\partial W_1}{\partial x} - \frac{\partial W_2}{\partial y} \quad (1)$$

в области $\Omega_{x,y}$, состоящей из двух подобластей: $\Omega_s(t)$ и $\Omega_l(t)$: $\Omega_{x,y} = \Omega_s(t) \cup \Omega_l(t)$, разделенных подвижной межфазной границей $\Gamma_{sl}(t)$, на которой выполняются дифференциальное условие Стефана и равенство температур:

$$W_l^n - W_s^n = L_m \rho_s \vartheta_{sl}^n, \quad T_s = T_l = T_m, \quad (2)$$

где $H = c_p \rho T$ - энтальпия, $\vec{W} = (W_1, W_2)$ - тепловой поток, T_m , L_m - температура и теплота плавления (кристаллизации), ϑ_{sl} - скорость движения границы раздела фаз, индексы s, l обозначают принадлежность вещества к твердой и жидкой фазам, n - нормальную компоненту.

Учет испарения осуществляется в рамках однофазного варианта задачи Стефана /4/ и приводит к появлению второй подвижной границы раздела фаз $\Gamma_{lv}(t)$ жидкость-

пар в области $\Omega_{x,y}(t) = \Omega_s(t) \cup \Omega_l(t)$. Процесс развитого поверхностного испарения на этой границе описывается с помощью трех законов сохранения (массы, импульса и энергии):

$$\rho_l \vartheta_{lv}^n = \rho_v (u - \vartheta_{lv}^n), \quad P_l + \rho_l (\vartheta_{lv}^n)^2 = P_v + \rho_v (u - \vartheta_{lv}^n)^2, \quad -\lambda \frac{\partial T}{\partial n} = G^n - L_v \rho_l \vartheta_{lv}^n, \quad (3)$$

и двумя дополнительными соотношениями, характеризующими кинетику фазового перехода и определяемыми из приближения Кнудсеновского слоя [5]: $T_v = T_v(T_l, M)$, $\rho_v = \rho_v(\rho_H, M)$. При испарении в вакуум постоянным по времени источником энергии $M=1$, а $T_v=0,633T_l$, $\rho_v = 0,326\rho_H$. Здесь T_v , ρ_v – температура и плотность пара, u – газодинамическая скорость, ϑ_{lv}^n – скорость фронта, L_v – теплота парообразования, M – число Маха, ρ_H – плотность насыщенного пара.

3. Введем некоторое расчетное пространство в котором определена произвольная нестационарная криволинейная система координат (ξ, η, τ) . Предположим, что на каждый момент времени существует невырожденное взаимно однозначное преобразование $\xi = \xi(x, y, t)$, $\eta = \eta(x, y, t)$, $\tau = t$, отображающее физическую область произвольной формы $\Omega_{x,y}$ в прямоугольник $\Omega_{\xi,\eta}$ в плоскости криволинейных координат (ξ, η) . Границы области и границы раздела фаз в $\Omega_{\xi,\eta}$ сопряжены с соответствующими координатными линиями и остаются неизменными во времени. Якобианом такого преобразования является функция J :

$$\rho J^{-1} = \rho \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi} \right) = \psi.$$

Математическая постановка задачи (1)-(3) в произвольной нестационарной криволинейной системе координат (ξ, η, τ) приобретает вид

$$\left[\frac{\partial(\psi H)}{\partial \tau} = - \frac{\partial}{\partial \xi} \left\{ (\rho W_1 + HQ_1) \frac{\partial y}{\partial \eta} - (\rho W_2 + HQ_2) \frac{\partial x}{\partial \eta} \right\} - \frac{\partial}{\partial \eta} \left\{ -(\rho W_1 + HQ_1) \frac{\partial y}{\partial \xi} + (\rho W_2 + HQ_2) \frac{\partial x}{\partial \xi} \right\} \right]_{in}, \quad m = s, l, \quad (4)$$

$$\left[\frac{\partial x}{\partial \tau} = - \frac{Q_1}{\rho} \right]_k, \quad Q_1 = -\rho \left(D_\xi \frac{\partial^2 x}{\partial \xi^2} + D_\eta \frac{\partial^2 x}{\partial \eta^2} \right), \quad (5)$$

$$\left[\frac{\partial y}{\partial \tau} = - \frac{Q_2}{\rho} \right]_k, \quad Q_2 = -\rho \left(D_\xi \frac{\partial^2 y}{\partial \xi^2} + D_\eta \frac{\partial^2 y}{\partial \eta^2} \right), \quad (6)$$

где

$$W_1 = - \frac{\lambda \rho}{\psi} \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \frac{\partial T}{\partial \xi} - \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial T}{\partial \eta} \right), \quad W_2 = - \frac{\lambda \rho}{\psi} \left(- \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial T}{\partial \xi} + \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial T}{\partial \eta} \right),$$

$$(\xi, \eta = \eta_{sl}) \in \Gamma_{sl} : \left[\left(- \frac{\partial y}{\partial \xi} W_1 + \frac{\partial x}{\partial \xi} W_2 \right)_1 - \left(- \frac{\partial y}{\partial \xi} W_1 + \frac{\partial x}{\partial \xi} W_2 \right)_s \right] \gamma^{-1/2} = -L_m Q_{sl}^n, \quad (7)$$

$$\begin{aligned}
(\xi, \eta) \in \Gamma_{lv} : \quad Q_{lv}^n &= -\rho_v (u + Q_{lv}^n / \rho_l), \\
P_1 + (Q_{lv}^n)^2 / \rho_l &= P_v + \rho_v (u + Q_{lv}^n / \rho_l)^2, \\
\left(-\frac{\partial y}{\partial \xi} W_1 + \frac{\partial x}{\partial \xi} W_2 \right)_1 \gamma^{-1/2} &= G^n + L_v Q_{lv}^n, \quad \eta = \text{const}, \\
\left(\frac{\partial y}{\partial \eta} W_1 - \frac{\partial x}{\partial \eta} W_2 \right)_1 \alpha^{-1/2} &= G^n + L_v Q_{lv}^n, \quad \xi = \text{const}.
\end{aligned} \tag{8}$$

4. Полное решение задачи плавления-испарения, описываемой в приближении двумерной нестационарной задачи Стефана (4) - (8), состоит из двух этапов: простого нагрева тела без фазовых превращений и нагрева, сопровождающегося фазовыми переходами твердое тело – жидкость и жидкость – пар.

На первом этапе решение осуществляется на сетке с фиксированными узлами, построенной до начала расчетов. Ее построение осуществляется с помощью численного решения специальных эллиптических уравнений /6/, которые позволяют построить преобразование, отображающее произвольную область $\Omega_{x,y}$ на прямоугольник $\Omega_{\xi,\eta}$. Задача генерации сетки состоит в установлении связи между точками (ξ, η) регулярной расчетной области $\Omega_{\xi,\eta}$ и точками (x, y) области $\Omega_{x,y}$. Соответствующая система уравнений имеет вид

$$\begin{aligned}
\alpha \frac{\partial^2 x}{\partial \xi^2} - 2\beta \frac{\partial^2 x}{\partial \xi \partial \eta} + \gamma \frac{\partial^2 x}{\partial \eta^2} + (J^{-1})^2 \left(P_1 \frac{\partial x}{\partial \xi} + P_2 \frac{\partial x}{\partial \eta} \right) &= 0, \\
\alpha \frac{\partial^2 y}{\partial \xi^2} - 2\beta \frac{\partial^2 y}{\partial \xi \partial \eta} + \gamma \frac{\partial^2 y}{\partial \eta^2} + (J^{-1})^2 \left(P_1 \frac{\partial y}{\partial \xi} + P_2 \frac{\partial y}{\partial \eta} \right) &= 0, \\
\alpha = \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right)^2, \quad \beta = \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} + \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta}, \quad \gamma = \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \right)^2, \\
J = \frac{\partial(x, y)}{\partial(\xi, \eta)} = \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi}.
\end{aligned}$$

Специальным выбором управляющих функций $P_1(\xi, \eta)$, $P_2(\xi, \eta)$ узлы сетки могут сгущаться как внутри области $\Omega_{x,y}$, так и на границе $\partial\Omega_{x,y}$. В рамках рассматриваемой задачи сгущение узлов сетки является обязательным в зоне действия источника концентрированной энергии. Управляемое распределение узлов внутри области осуществляется с помощью функций P_1, P_2 /6/, а на границе - с помощью двухпараметрической функции растяжения /7/.

На втором этапе решения задачи Стефана, связанном с зарождением и распространением фазовых границ $\Gamma_{sl}(t)$ и $\Gamma_{lv}(t)$, использовались расчетные сетки с динамическим распределением узлов. Динамическое распределение основывалось на стремлении получить на каждый момент времени квазиравномерное распределения координатных линий по обоим направлениям. Такое распределение получалось с помощью соотношений обратного преобразования (5), (6), задаваемых в виде уравнений диффузионного типа:

$$\frac{\partial x}{\partial \tau} = D_\xi \frac{\partial^2 x}{\partial \xi^2} + D_\eta \frac{\partial^2 x}{\partial \eta^2}, \tag{9}$$

$$\frac{\partial y}{\partial \tau} = D_{\xi} \frac{\partial^2 y}{\partial \xi^2} + D_{\eta} \frac{\partial^2 y}{\partial \eta^2}, \quad (10)$$

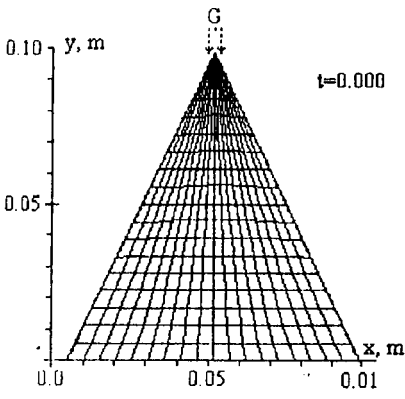
$$D_{\eta} = \left(\frac{L_y(\tau)}{L_y^0} \right)^2 \left(\frac{\Delta l_{\eta}^0}{\Delta l_y(\tau)} \right)^2 \frac{1}{h_{\eta}} \left(|v_{st}^{\tau}| + |v_{lv}^{\tau}| \right), \quad D_{\xi} = \left(\frac{L_x(\tau)}{L_x^0} \right)^2 \left(\frac{\Delta l_{\xi}^0}{\Delta l_x(\tau)} \right)^2 \frac{1}{h_{\xi}} \left(|v_{st}^{\tau}| + |v_{lv}^{\tau}| \right),$$

где D_{ξ} , D_{η} имеют смысл коэффициентов диффузии, определяемых через параметры задачи, $L_x(\tau)$, $L_y(\tau)$, L_{ξ} , L_{η} , $\Delta l_x(\tau)$, $\Delta l_y(\tau)$, Δl_{ξ} , Δl_{η} - длины координатных линий и длины ребер ячеек в физическом и расчетном пространствах соответственно. Численное решение уравнений (9), (10) позволяет определять координаты узлов сетки на каждый момент времени.

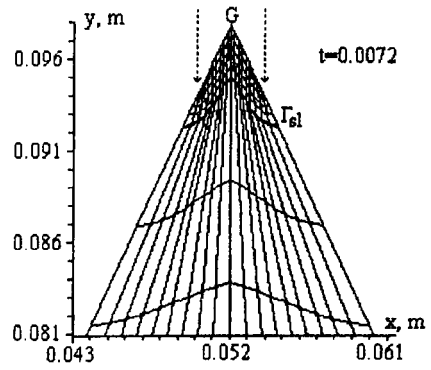
Рассмотрим примеры задач с сильно деформирующимися областями, численное решение которых сопровождается радикальной перестройкой сетки. Результаты расчетов воздействия лазерного импульса прямоугольной формы и интенсивностью $G=10^5$ Вт/см² на мишени различной формы с параметрами, близкими к параметрам свинца, представлены на рис. 1 - 3.

На этапе нагрева в расчетах использовались сетки с фиксированными узлами общим количеством 19×23 , рис. 1а. В физическом пространстве $\Omega_{x,y}$ координатные линии криволинейной сетки концентрируются в области воздействия источника энергии и остаются неподвижными вплоть до момента плавления. Второй этап расчетов начинается с момента достижения облучаемым участком поверхности температуры плавления T_m . Для введения новой фазы допускался перегрев облучаемой поверхности на 0,1 К. Затем из соотношения энергии перегрева твердой фазы и теплоты фазового перехода L_m определяется толщина новой (жидкой) фазы, порядка $10^{-7} + 10^{-6}$ см. В области $\Omega_{x,y}$ вводится новая подобласть Ω_1 (тем самым $\Omega_{x,y} = \Omega_s \cup \Omega_1$), в которой строится расчетная сетка с общим числом узлов 19×6 , рис. 1б. Последующее движение фронта плавления, определяемое скоростью ϑ_{sl} , вызывает деформацию фазовых подобластей, а уравнения (9), (10) обеспечивают динамическое перераспределение координатных линий. Ситуация усложняется после достижения на поверхности температуры равновесного кипения, при которой становятся заметными процессы испарения. Их появление приводит к формированию нового фазового фронта, характеризующегося скоростью ϑ_{lv} и дополнительной деформации подобласти Ω_1 , рис. 1с. В частности, процесс развитого поверхностного испарения вызывает удаление вершины треугольника. Дальнейший нагрев поверхности приводит к росту скорости ϑ_{lv} и формированию в жидкой фазе глубокого кратера, рис. 1д.

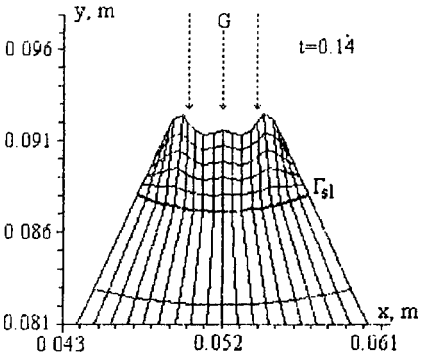
Отметим, что появление второй подвижной границы $\Gamma_{lv}(t)$, вызывающее сильную деформацию подобласти Ω_1 , не приводит к усложнению вычислительного алгоритма и не требует дополнительных вычислительных усилий, поскольку в методе динамической адаптации возникновение подвижной границы $\Gamma(t)$ связано лишь с появлением в соответствующих граничных условиях потока Q_{Γ} , отличного от нуля, т.е. $Q_{\Gamma} \neq 0$. Полученные результаты свидетельствуют об отсутствии серьезных ограничений, накладываемых используемым математическим аппаратом на наличие подвижных границ. По этой причине число подвижных границ может быть любым и их количество будет определяться физическими условиями задачи. Рассмотренный пример свидетельствует также о том, что динамическая адаптация является надежным средством решения целого ряда проблем, задач, ранее считавшихся не решаемыми, к которым, в частно-



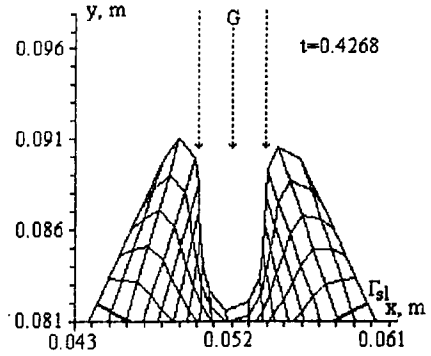
a)



b)

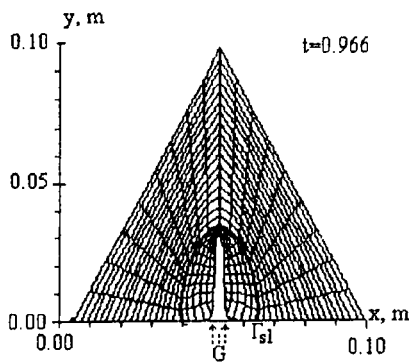
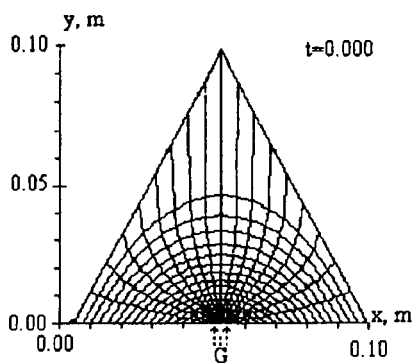


c)

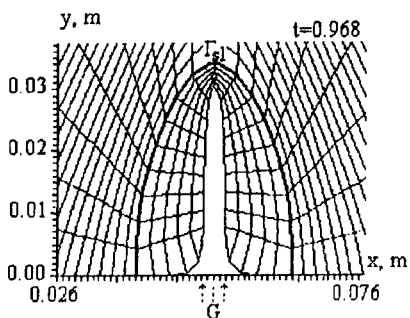
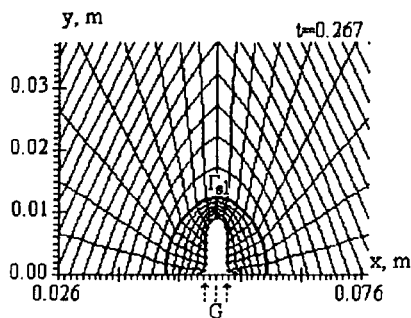


d)

Рис. 1. Расчетная сетка в физическом пространстве при плавлении и испарении мишени треугольной формы, воздействие на вершину: а) начало воздействия; б) стадия плавления; в) стадия развитого испарения; д) испарение с образованием глубокого канала



a)



b)

Рис. 2. Расчетная сетка в физическом пространстве при плавлении и испарении мишени треугольной формы, воздействие в центр стороны: а) вся область, б) фрагмент

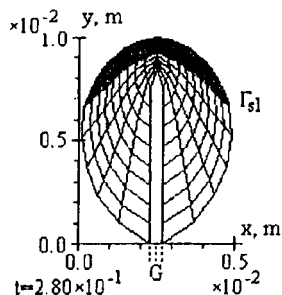
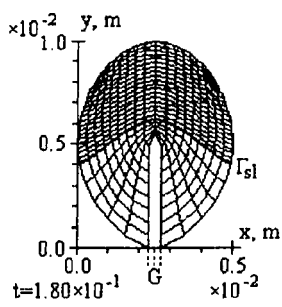
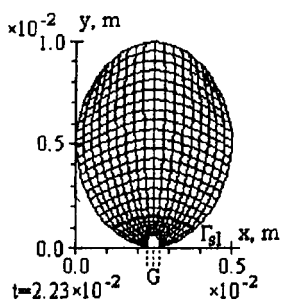


Рис. 3. Расчетная сетка в физическом пространстве при плавлении и испарении мишени свинца эллиптической формы, воздействие на вершину

сти, относятся проблемы, связанные с сильной динамической деформацией области определения.

Процесс перестройки сетки в расчетах лазерного плавления и испарения для двух других конфигураций луча и мишени представлен на рис. 2,3.

Литература

1. Данилюк И.И. // УМН, 1985, т.40, с.133-185.
2. Рыкалин Н.Н., Углов А.А., Зуев И.В., Кокора А.Н. Лазерная и электронно-лучевая обработка материалов: Справочник. М.: Машиностроение, 1985. 495с
3. Mazhukin V.I., Samarskii A.A. // *Surveys on Mathematics for Industry*. 1994, v.4, p. 85-149.
4. Masters J.I. // *J. App. Phys.* 1956, v.27, p. 477-484.
5. Мажукин В.И., Прудковский П.А., Самохин А.А. // *Математическое моделирование*, 1994, т.6, с. 3-10.
6. J.F.Thompson, Z.U.A.Warsi, C.W.Mastin // *J.Comput.Phys.* 1982, v.47, p.1-108.
7. M.Vinokur. // *J.Comput. Phys.* 1983, v.50, p. 215-234.