

УДК 519.63

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ В ОДНОМЕРНЫХ ЗАДАЧАХ С ФАЗОВЫМИ ПЕРЕХОДАМИ МЕТОДОМ СКВОЗНОГО СЧЕТА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СХЕМЫ "РОМБ"

А. М. Мустафин, Н. Н. Пашенцева, С. Н. Лебедев
(ФГУП "РФЯЦ-ВНИИТФ им. академика Е. И. Забабахина",
г. Снежинск Челябинской области)

Рассмотрено численное решение одномерной задачи Стефана методом сквозного счета с использованием схемы "Ромб" и исследована эффективность применения адаптивной сетки для поставленной задачи. Приведен алгоритм построения адаптивной разностной сетки для трехфазовой задачи теплопроводности. На адаптивно встраиваемой сетке получена разностная схема "Ромб", аппроксимирующая решаемое уравнение в пределах одной ячейки и позволяющая работать с граничными условиями, заданными в различных формах. Получены численные решения трех вариантов задачи Стефана: двух — с тремя фазами в плоской постановке и одной прикладной двухфазовой задачи о плавлении микрочастицы железа в сферической постановке. Показано согласие решений с результатами исследований аналогичных задач другими авторами. Наглядно показаны преимущества применения адаптации разностных сеток перед использованием традиционных сеток в случае решения задач типа Стефана.

Ключевые слова: задача Стефана, разностная схема "Ромб", адаптивная разностная сетка, гибридная структура данных, бинарное дерево, двусвязный список.

Введение

В работе исследуется один из подходов к решению уравнения теплопроводности в трехфазных средах с двумя нестационарными межфазовыми границами. Подобный тип задач относится к задаче Стефана [1] и находит свое применение во многих отраслях человеческой деятельности — от производства и энергетики до медицины [2–4]. Рассматривается общий случай динамики температурных полей твердого вещества в результате нагрева с учетом возникновения при этом еще двух его фазовых состояний с подвижными границами между ними. Непостоянство положения границ областей с разными фазами затрудняет построение вычислительного алгоритма. Существует множество методов решения этой задачи [2]: метод энтальпий, метод ловли фронта фазового перехода в узле сетки, квазистационарный подход, метод выпрямления фронта, использование δ -функции и сглаживание коэффициентов.

Данная работа рассматривает метод сквозного счета со сведением нескольких уравнений для разных фаз к одному общему уравнению теплопроводности посредством введения δ -функции. Зоны в окрестности фазовых переходов требуют особого внимания, так как от того, насколько точно в них учитывается влияние процесса фазового превращения, значительно зависит точность решения всей задачи. Для повышения точности вместо классической разностной сетки используется адаптивная сетка [5, 6], показавшая свою эффективность на одномерных и двумерных задачах о распространении тепла [7, 8].

В данном случае разностная схема "Ромб" [9], аппроксимирующая исходное дифференциальное уравнение в пределах одной ячейки, преобразована для работы с адаптивной разностной сеткой, которая основана на дроблении ячеек в зоне фронтов фазовых переходов. В статье приводятся две

задачи типа Стефана с тремя фазами в плоской постановке и одна задача в сферической постановке. Для каждой задачи проведено сравнение численных результатов, полученных в условиях адаптации в области фронтов фазовых переходов, с численными результатами, полученными на постоянных разностных сетках.

Физическая постановка задачи

Вещество, заполняющее полупространство вдоль положительной оси Ox (рис. 1), в начальный момент времени находится в твердом состоянии при некоторой постоянной температуре T_0 . На его поверхности устанавливается мощный источник тепла с температурой T_h , причем $T_h > T_s > T_f$, где T_f, T_s — соответственно температура плавления и испарения данного вещества.

В поставленных условиях вещество начнет плавиться и в последующем испаряться. Обозначим точку фронта расплавленного вещества как $X_{front1} = \xi_1(t)$, при этом заметим, что температура в точке $x = X_{front1}$ всегда будет равна температуре плавления T_f . Точку фронта испарения обозначим $X_{front2} = \xi_2(t)$ с условием, что температура в точке $x = X_{front2}$ всегда будет равна температуре кипения T_s .

Таким образом, рассматриваемая часть вещества имеет три зоны с соответствующими фазами состояния — твердого, жидкого и газообразного, а также две границы фазовых переходов — плавления и испарения. Переход вещества из твердого в жидкое состояние на границе осуществляется при затрачивании удельной теплоты L_f . При испарении затраты соответствуют удельной теплоте парообразования L_s . В текущей постановке предполагается, что перенос тепла осуществляется только за счет теплопроводности. Движением вещества пренебрегается.

На практике полупространство ограничивается конечным значением $x = X$ таким, что волна тепла на конечный момент времени не успевает дойти до точки $x = X$.



Рис. 1. Схема физической постановки задачи

Математическая постановка задачи

Рассматриваемая задача о плавлении и испарении вещества — это задача Стефана [1]. Распространение тепла описывается уравнением теплопроводности [10] вида

$$\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\chi \frac{\partial T}{\partial x} \right) + f, \quad (1)$$

где $T = T(x, t)$ — температура; $\varepsilon(\rho, T)$ — удельная внутренняя энергия; $\rho(x)$ — плотность; $\chi(\rho, T)$ — коэффициент теплопроводности; $f(x, t)$ — плотность тепловых источников.

Тепловой поток определяется в соответствии с законом Фурье: $S = -\chi \frac{\partial T}{\partial x}$.

Для межфазовых границ плавления и испарения соответственно вводятся дополнительные условия Стефана

$$\chi \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=\xi_1(t)-0} - \chi \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=\xi_1(t)+0} = L_f \rho \frac{d\xi_1}{dt}; \quad \chi \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=\xi_2(t)-0} - \chi \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=\xi_2(t)+0} = L_s \rho \frac{d\xi_2}{dt}, \quad (2)$$

где $\xi_1(t)$ — функция, описывающая изменение положения границы раздела твердой и жидкой фаз с течением времени; $\xi_2(t)$ — функция положения границы испарения вещества.

Таким образом, для каждой зоны со своим фазовым состоянием вещества решается уравнение со своими коэффициентами. Однако учесть фазовые превращения можно не только через граничные условия для фаз. Для этого необходимо добавить энергию фазовых превращений [11] к исходной энергии. В случае трехфазовой задачи Стефана суммарная энергия определяется в виде

$$\tilde{\varepsilon}(T) = \begin{cases} \varepsilon, & T < T_f; \\ \varepsilon + L_f, & T_f < T < T_s; \\ \varepsilon + L_f + L_s, & T > T_s, \end{cases}$$

где T_f, T_s — температуры плавления (кристаллизации) и испарения (конденсации) при условии $T_s > T_f$; L_f — скрытая теплота плавления, поглощаемая при плавлении или выделяемая при кристаллизации; L_s — скрытая теплота парообразования, поглощаемая при испарении или выделяемая при конденсации.

Данное выражение, определяющее суммарную энергию, можно записать с помощью функции Хевисайда $\hbar(x)$:

$$\tilde{\varepsilon}(T) = \varepsilon + L_f \hbar(T - T_f) + L_s \hbar(T - T_s), \quad \hbar(x) = \begin{cases} 0, & x < 0; \\ 1, & x > 0. \end{cases}$$

Отметим, что производная функции Хевисайда есть не что иное, как δ -функция Дирака. Подставляя выражение для суммарной энергии в уравнение (1), получаем

$$\frac{\partial \tilde{\varepsilon}(T)}{\partial t} = \frac{\partial \tilde{\varepsilon}(T)}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} = \left[\frac{\partial \varepsilon}{\partial T} + L_f \delta(T - T_f) + L_s \delta(T - T_s) \right] \frac{\partial T}{\partial t} = \tilde{C}(T) \frac{\partial T}{\partial t}.$$

В таком случае уравнение, описывающее трехфазную задачу Стефана (1), (2), приобретает вид

$$\rho \tilde{C}(T) \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\chi \frac{\partial T}{\partial x} \right) + f, \quad \tilde{C}(T) = \frac{\partial \varepsilon}{\partial T} + L_f \delta(T - T_f) + L_s \delta(T - T_s), \quad (3)$$

где в случае линейной зависимости энергии от температуры внутренняя энергия определена выражением $\varepsilon(T) = C_V T$, в котором C_V — коэффициент удельной теплоемкости.

Уравнение (3) является общим уравнением для всей области определения, которое объединяет в себе уравнения для областей с разными фазами состояния вещества [1, 12].

Необходимо ввести разрывные функции для плотности, коэффициента теплоемкости и коэффициента теплопроводности, так как в зависимости от фазы они меняют свои значения. Поскольку смена фазы определяется температурой, то и эти величины будут зависеть от интервала температур для каждой фазы. То есть

$$C_V(T) = \begin{cases} C_s, & T < T_f; \\ C_l, & T_f \leq T \leq T_s; \\ C_g, & T > T_s; \end{cases} \quad \chi(T) = \begin{cases} \chi_s, & T < T_f; \\ \chi_l, & T_f \leq T \leq T_s; \\ \chi_g, & T > T_s; \end{cases} \quad \rho(T) = \begin{cases} \rho_s, & T < T_f; \\ \rho_l, & T_f \leq T \leq T_s; \\ \rho_g, & T > T_s, \end{cases}$$

где C_s, C_l, C_g — удельные теплоемкости, χ_s, χ_l, χ_g — удельные теплопроводности, ρ_s, ρ_l, ρ_g — плотности соответственно для твердого, жидкого и газообразного состояний исследуемого вещества.

В соответствии с условием $\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx = 1$ для использования в разностной схеме δ -функция Дирака заменяется аппроксимацией

$$\delta(x) = \frac{1}{a\sqrt{\pi}} e^{-(x/a)^2},$$

где $a = \frac{\Delta}{2\sqrt{\pi}}$, Δ — параметр, определяющий полуширину "колокола" функции [13].

В области действия δ -функции ($x \leq |\Delta|$) производится сглаживание перехода от одного значения к другому в разрывных функциях теплоемкости, теплопроводности и плотности. Вводится функция сглаживания

$$\gamma(x) = \frac{1}{2} \cos\left(\frac{\pi(x + \Delta)}{2\Delta}\right) + \frac{1}{2}.$$

Ранее записанные функции плотности, удельной теплопроводности и удельной теплоемкости корректируются:

$$(\circ)(T) = \begin{cases} (\circ)_g, & T > T_s + \Delta_s; \\ (\circ)_l \gamma(T - T_s) + (\circ)_g (1 - \gamma(T - T_s)), & T_s - \Delta_s \leq T \leq T_s + \Delta_s; \\ (\circ)_l, & T_f + \Delta_f < T < T_s - \Delta_f; \\ (\circ)_s \gamma(T - T_f) + (\circ)_l (1 - \gamma(T - T_f)), & T_f - \Delta_f \leq T \leq T_f + \Delta_f; \\ (\circ)_s, & T < T_f - \Delta_f, \end{cases}$$

где (\circ) заменяется на ρ, χ или C , а параметр δ -функции записан для каждой границы фазового перехода отдельно: Δ_f — для плавления, Δ_s — для испарения.

В области $G = [a \leq x \leq b] \times [0 < t \leq t_{\max}]$ для уравнения (3) решается начально-краевая задача

$$\begin{aligned} T(x, 0) &= \varphi_0(x), \quad a \leq x \leq b; \\ \alpha' T(a, t) + \beta' S(a, t) &= \psi_1(t), \quad \alpha'' T(b, t) - \beta'' S(b, t) = \psi_2(t), \quad 0 < t \leq t_{\max}, \end{aligned}$$

где $\varphi_0(x)$ — заданное начальное распределение температуры; $\psi_1(t), \psi_2(t)$ — заданные функции на границах системы; $\alpha', \beta', \alpha'', \beta''$ — параметры, с помощью которых можно задавать различные граничные условия.

Адаптивная разностная сетка

На плоскости (x, t) , используя за исходную основу равномерную разностную сетку, введем адаптивную сетку [7]

$$\omega_{h\tau} = \omega_h \times \omega_\tau, \quad \omega_h = \left\{ x_0 = a; x_k = x_{k-1} + \frac{h}{2^L}, k = \overline{1, K}; L = 0, 1, 2 \right\}, \quad \omega_\tau = \{t_j = j\tau, j = \overline{0, J}\}$$

с начальным пространственным шагом основной сетки h (по x) и шагом τ по t ; K — число ячеек, полученных в результате адаптации; L — уровень адаптации.

Тогда шаг для каждой конкретной ячейки определяется как $h_k = h / 2^{L_k}$, $k = \overline{0, K-1}$.

Процесс адаптации проводится так, что на каждой итерации по времени перед вычислениями согласно разностной схеме осуществляется построение сетки. Ячейки, попадающие под условие адаптации, измельчаются, т. е. делятся пополам, температура ячеек-потомков определяется температурой исходной ячейки. При этом полученные ячейки вновь проверяются на соответствие условиям дробления. Измельченные на предыдущих шагах ячейки, не удовлетворяющие на данном шаге

условию дробления, восстанавливаются до исходной родительской ячейки. При этом температура определяется по суммарной энергии ячеек, образующих исходную ячейку.

Условием адаптации при переходе с нулевого уровня на первый выступает ε -окрестность точки фронта $O_\varepsilon(X_{front}) = [X_{front} - \varepsilon, X_{front} + \varepsilon]$, где ε — малый параметр. Для перехода на второй уровень дробления ячейка должна входить в окрестность дробления, уменьшенную в два раза.

Вычисления на равномерных разностных сетках производятся при помощи статических массивов или матриц, так как их размеры заранее известны и не меняются со временем. Однако введение адаптации сетки имеет несколько особенностей: массив данных должен формироваться динамически на каждом временном слое, необходимо сохранять связь между ячейками разных уровней адаптации, а также важно иметь возможность последовательно переходить от одного элемента к другому при осуществлении прогонки.

Ввиду непостоянных размеров разностной сетки и процесса адаптации, требующего хранения данных изначальных ячеек, предложено использовать структуру, содержащую блок информации и блок ссылок. Блок ссылок совмещает в себе особенности построения связей двусвязного списка и бинарного дерева [14]. Строится гибридная структура данных, в которой элементы двусвязного списка хранят все температуры адаптивной сетки, а бинарные деревья хранят температуры родительских ячеек исходной постоянной сетки. Разностные схемы и алгоритм прогонки работают только с данными из двусвязного списка, в то время как деревья скрыты внутри класса адаптивной сетки и работа с ними ведется только из самого класса методами адаптации и консолидации.

Схема "Ромб" на адаптивной сетке

Уравнение теплопроводности (3) записывается в потоковой форме

$$\tilde{C}\rho \frac{\partial T}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} (S) + f, \quad S = -\chi \frac{\partial T}{\partial x}.$$

Для решения системы уравнений используется схема "Ромб". Интегрированием уравнений по времени и пространству в пределах ячейки разностной сетки получаем систему в разностном виде

$$\begin{aligned} \frac{T^{j+1} - T^j}{\tau} &= -\frac{1}{\tilde{C}\rho h_k} \Delta (S^{j+1}) + \frac{1}{\tilde{C}\rho} f^{j+1/2}; \\ S^{j+1} &= -\frac{\chi^j}{h_k} \Delta T^{j+1}, \end{aligned} \quad (4)$$

где $\Delta(\circ) = (\circ)_{k+1} - (\circ)_k$ — величины в узлах ячейки; остальные величины, не входящие в оператор Δ , относятся к центру ячейки; h_k — шаг k -й ячейки адаптивной сетки.

В случае, когда имеет место нелинейность коэффициента теплопроводности, вводятся простые μ -итерации. Замыкают систему (4) дополнительные соотношения схемы "Ромб" [9]

$$T^{\mu+1} = \frac{T_{k+1}^{\mu+1} + T_k^{\mu+1}}{2} + \delta \Delta S^{\mu+1}; \quad S^{\mu+1} = \frac{S_{k+1}^{\mu+1} + S_k^{\mu+1}}{2} + \Theta \Delta T^{\mu+1} - \Theta \sigma \Delta T^j. \quad (5)$$

В данной работе схема используется с параметрами $\sigma = 0$; $\Theta = 0$; $\delta = h/(4\chi)$.

Исключение из системы (4) с помощью соотношений (5) величин в центрах ячеек приводит к системе

$$\begin{aligned} T_{k+1}^{\mu+1} + T_k^{\mu+1} + \left(2\delta + \frac{2\tau}{\tilde{C}\rho h_k}\right) S_{k+1}^{\mu+1} - \left(2\delta + \frac{2\tau}{\tilde{C}\rho h_k}\right) S_k^{\mu+1} &= 2 \left(T_{k+1/2}^j + \frac{\tau}{\tilde{C}\rho} f^{j+1/2}\right); \\ \frac{2\chi^\mu}{h_k} \left(T_{k+1}^{\mu+1} - T_k^{\mu+1}\right) + S_{k+1}^{\mu+1} + S_k^{\mu+1} &= 0. \end{aligned}$$

Замыкается система разностными граничными условиями. На левой границе $\alpha_0 T_0 - \beta_0 S_0 = \varphi_0(t)$, на правой границе $\alpha_K T_K - \beta_K S_K = \varphi_K(t)$.

В результате имеем систему двухточечных разностных уравнений

$$\begin{aligned} T_k^{\mu+1} + T_{k+1}^{\mu+1} + c_{k+1/2}^0 S_k^{\mu+1} + d_{k+1/2}^0 S_{k+1}^{\mu+1} &= f_{k+1/2}^0; \\ a_{k+1/2}^0 T_{k+1}^{\mu+1} - a_{k+1/2}^0 T_k^{\mu+1} + S_k^{\mu+1} + S_{k+1}^{\mu+1} &= 0, \end{aligned} \quad (6)$$

где коэффициенты системы записываются в виде

$$\begin{aligned} a_{k+1/2}^0 &= \frac{2\chi^\mu}{h_k}; \quad c_{k+1/2}^0 = - \left(2\delta + \frac{2\tau}{\widetilde{C}\rho h_k} \right); \quad d_{k+1/2}^0 = 2\delta + \frac{2\tau}{\widetilde{C}\rho h_k}; \\ f_{k+1/2}^0 &= 2 \left(T_{k+1/2}^j + \frac{\tau}{\widetilde{C}\rho} f^{j+1/2} \right) = 2T_{k+1/2}^j. \end{aligned}$$

Система (6) решается одним из вариантов метода потоковой прогонки [9], в результате применения которой вычисляются значения температуры и потока в узлах сетки. Значения температуры в центрах ячеек определяются из уравнения баланса

$$T_{k+1/2}^{\mu+1} = - \frac{\tau}{\widetilde{C}\rho h_k} \Delta (S^{\mu+1}) + \left(T_{k+1/2}^j + \frac{\tau}{\widetilde{C}\rho} f^{j+1/2} \right).$$

Итерационный процесс заканчивается при выполнении условия

$$\left| T_{k+1/2}^{\mu+1} - T_{k+1/2}^\mu \right| \leq \varepsilon_\mu \left(1 + T_{k+1/2}^\mu \right), \quad k = \overline{0, K-1}.$$

Результаты расчетов

Модельная трехфазовая задача Стефана. Решается начально-краевая задача, определенная в области $G = [0 \leq x \leq 0,1] \times [0 < t \leq t_{\max}]$,

$$\begin{aligned} T(x, 0) &= T_0, \quad 0 \leq x \leq 0,1; \\ T(0, t) &= T_h, \quad -S(X, t) = 0, \quad 0 < t \leq t_{\max}, \end{aligned}$$

где $X = 0,1$; $T_h = 2000$ К — температура теплоисточника, $T_0 = 300$ К — начальная температура вещества.

Заполняющее область G вещество имеет следующие характеристики: $\rho_s = \rho_l = \rho_g = 2000$ кг/м³; $C_s = C_l = C_g = 1500$ Дж/(кг·К); $\chi_s = \chi_l = \chi_g = 1$ Вт/(м·К); $a_s = a_l = a_g = \chi / (C\rho) = 1/3 \cdot 10^{-6}$ м²/с; $T_f = 600$ К; $T_s = 1000$ К; $L_f = 8 \cdot 10^5$ Дж/кг; $L_s = 6 \cdot 10^5$ Дж/кг. Для δ -функции задаются параметры $\Delta_f = 5$ К; $\Delta_s = 50$ К. Единицы измерения всех параметров текущей и рассматриваемых далее задач соответствуют системе СИ.

В статье [15] представлено аналитическое решение данной задачи, полученное при помощи разложения в ряд Фурье по собственным функциям решения соответствующей задачи Штурма—Лиувилля с трансформацией ряда в интеграл ошибок. Согласно методу решения из [15] границы фазовых переходов определены как

$$\xi_1(t) = \widetilde{\chi}_2 2\sqrt{a_s t} = 7,779 \cdot 10^{-4} \sqrt{t}; \quad \xi_2(t) = \widetilde{\chi}_1 2\sqrt{a_l t} = 4,843 \cdot 10^{-4} \sqrt{t},$$

где $\widetilde{\chi}_1 = 0,4194$; $\widetilde{\chi}_2 = 0,6737$. Температура на всем участке области определения задается следующим образом:

$$T(x, t) = \begin{cases} T_f \frac{1 - \operatorname{erf}(x / (2\sqrt{a_s t}))}{1 - \operatorname{erf}(\widetilde{\chi}_2)} + T_0 \frac{\operatorname{erf}(x / (2\sqrt{a_s t})) - \operatorname{erf}(\widetilde{\chi}_2)}{1 - \operatorname{erf}(\widetilde{\chi}_2)}, & x > \xi_1(t); \\ \frac{T_f \operatorname{erf}(\widetilde{\chi}_1) - T_s \operatorname{erf}(\widetilde{\chi}_2) + (T_s - T_f) \operatorname{erf}(x / (2\sqrt{a_l t}))}{\operatorname{erf}(\widetilde{\chi}_1) - \operatorname{erf}(\widetilde{\chi}_2)}, & \xi_2(t) \leq x \leq \xi_1(t); \\ T_h - (T_h - T_s) \frac{\operatorname{erf}(x / (2\sqrt{a_g t}))}{\operatorname{erf}(\widetilde{\chi}_1 \sqrt{a_l / a_g})}, & x < \xi_2(t). \end{cases}$$

При помощи схемы "Ромб" были получены температурные профили на различные моменты времени (рис. 2), а также графики изменения положения межфазовых границ с течением времени (рис. 3). Положение данных границ определялось как координата узла сетки между двумя ячейками с разными фазами состояния вещества.

Из рис. 2, 3 видно, что в целом имеет место хорошее соответствие численных результатов точному решению.

Для уточнения положения фронта фазового перехода исходная разностная сетка (число ячеек $N = 1000$) измельчалась в ε -окрестности границы смены фаз с двумя уровнями адаптации, $\varepsilon = 0,002$ м. Таких границ две, поэтому адаптация производилась на двух участках. В результате получено численное решение на момент времени $t_{\max} = 400$ с. На рис. 4 показаны участки профилей в области фазовых переходов, полученных на адаптивной сетке с числом ячеек N (далее *сетка N*) и различных основных сетках ($N/2, N, 2N, 4N$) на один момент времени.

Отметим, что в случае решения на основной постоянной сетке граница плавления при $t_{\max} = 400$ с находилась в точке $x = 15,6 \cdot 10^{-3}$ м. Решение на адаптивной разностной сетке показало, что в тот же момент времени межфазовая граница плавления находится в точке $x = 15,575 \cdot 10^{-3}$ м. На положение границы испарения введение адаптации не повлияло: численное решение в обоих случаях показало, что граница испарения на момент времени $t_{\max} = 400$ с находилась в точке $x = 9,7 \cdot 10^{-3}$ м.

В табл. 1 представлены значения разностных норм полученных численных решений на адаптивной сетке и постоянных разностных сетках с различным числом ячеек. Приведено отклонение значений нормы численных решений от нормы для решения на основной разностной сетке $4N$. Норма представлена разностным интегралом температурного распределения, нормированным на длину интервала:

$$\|T\| = \left(\sum_{i=1}^N T_i h_i \right) / |b - a|. \quad (7)$$

Из анализа табл. 1 можно сделать вывод, что измельчение разностной сетки ведет к сходимости численных решений. Решение на адаптивной сетке с исходным числом ячеек $N = 1000$ полностью совпадает с решением, полученным на основной постоянной сетке $4N$.

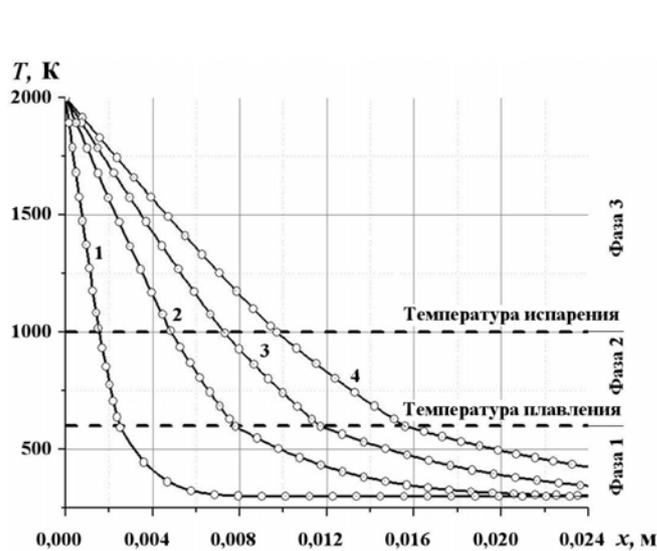


Рис. 2. Распределения температур, полученные на различные моменты времени: — — численное решение; —○— — точное решение; 1 — $t = 10$ с; 2 — $t = 100$ с; 3 — $t = 225$ с; 4 — $t = 400$ с

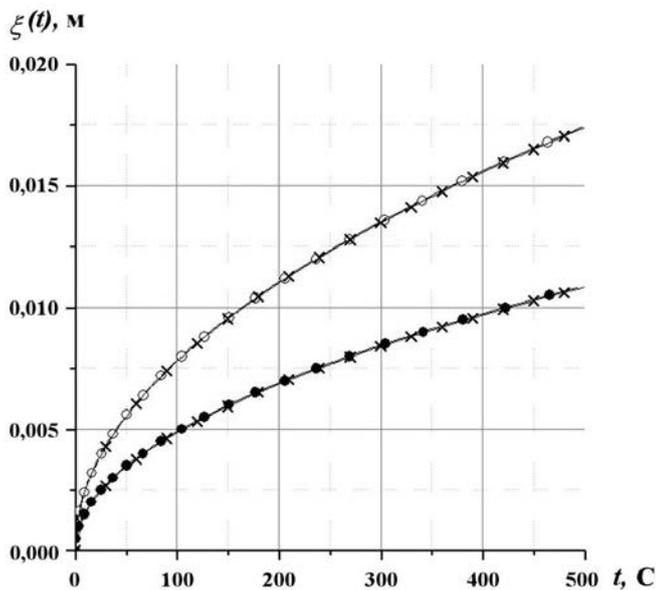


Рис. 3. Изменение положения границ раздела фаз $\xi_1(t)$ и $\xi_2(t)$ с течением времени: —○— — $\xi_1(t)$, расчет; —●— — $\xi_2(t)$, расчет; —×— — точное решение

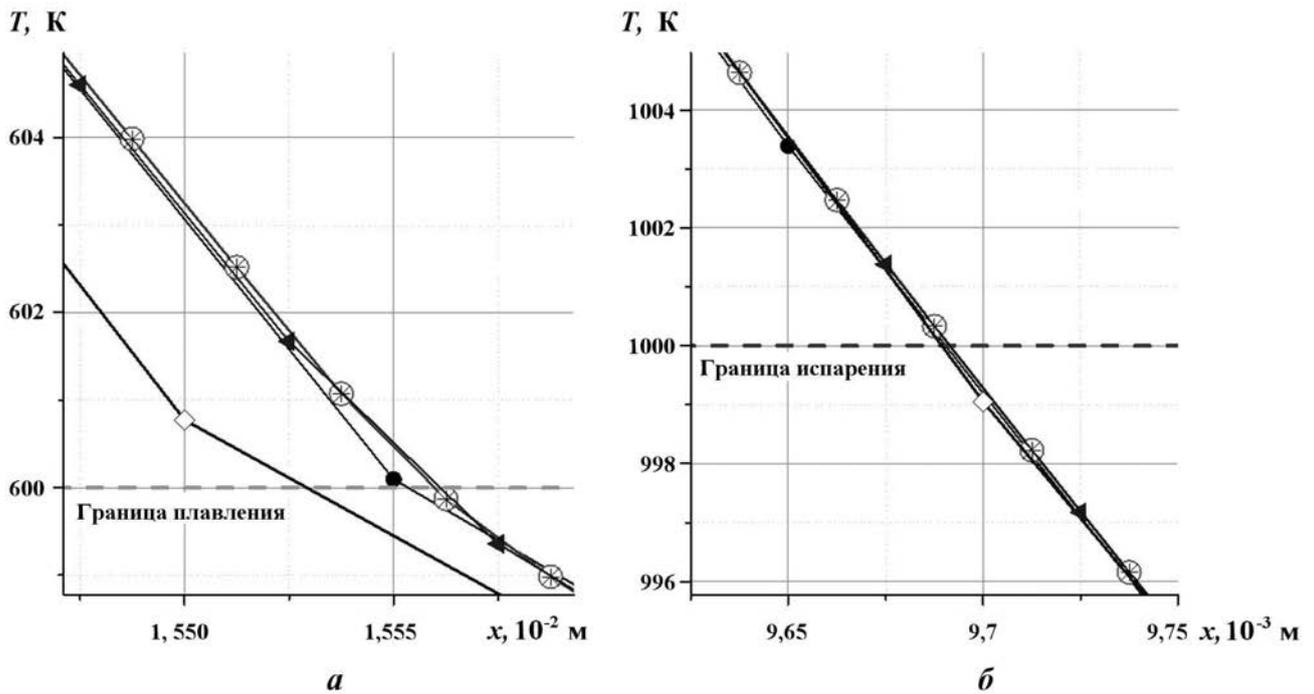


Рис. 4. Участки температурных профилей в областях границ плавления (а) и испарения (б): на постоянной сетке: \diamond — $N = 500$; \bullet — $N = 1000$; \blacktriangleleft — $N = 2000$; \ast — $N = 4000$; на адаптивной сетке с двумя уровнями адаптации: \circ — $N = 1000$

Таблица 1

Сравнение нормы разностной функции распределения температуры для полученных решений на различных сетках

Число ячеек исходной сетки	h , м	Норма решения (7)	δ , %
Основные разностные сетки			
500	$2 \cdot 10^{-4}$	469,807	0,0019
1000	$1 \cdot 10^{-4}$	469,803	0,0011
2000	$5 \cdot 10^{-5}$	469,801	0,0006
4000	$2,5 \cdot 10^{-5}$	469,798	0
Адаптивная разностная сетка			
1000	$1 \cdot 10^{-4} - 2,5 \cdot 10^{-5}$	469,798	0

Введение адаптации в окрестности фронта фазового перехода позволило точнее описать процесс в данной области и уточнить положение самой межфазовой границы. В целом для данной частной задачи использование адаптивной сетки повысило точность численного решения незначительно. Это связано с тем, что выбранная исходная разностная сетка в 1000 ячеек уже сама по себе является достаточно мелкой для данной задачи.

Сравним скорость получения решений на адаптивной разностной сетке и постоянной сетке. В табл. 2 приведены данные по времени вычисления на постоянных сетках ($N = 250$ и $N = 1000$) и адаптивной сетке с исходным числом ячеек $N = 250$ до момента времени $t_{\max} = 400$ с.

Из приведенных в табл. 2 данных можно судить о том, что с увеличением числа ячеек в 4 раза время вычисления на постоянной сетке увеличивается также в 4 раза. Использование адаптации разностной сетки увеличивает время счета относительно исходной сетки приблизительно в 1,77 раза, а результат при этом соответствует решению, полученному на сетке, уменьшенной в 4 раза. Таким образом, адаптивная сетка обладает преимуществом в отношении точности и скорости вычислений.

Сравнение времени вычисления на разных сетках

Тип сетки	Число ячеек N	Шаг по пространству h , м	Время вычисления, с
Постоянная	250	$4 \cdot 10^{-4}$	7,8
	1000	$1 \cdot 10^{-4}$	32,6
Адаптивная	250	$4 \cdot 10^{-4} - 1 \cdot 10^{-4}$	13,8

Задача плавления льда с последующим испарением. Рассматривается начально-краевая задача, определенная в области $G = [0 \leq x \leq 0,2] \times [0 < t \leq t_{\max}]$,

$$\begin{aligned} T(x, 0) &= T_0, & 0 \leq x \leq 0,2; \\ T(0, t) &= T_h, & -S(X, t) = 0, & 0 < t \leq t_{\max}, \end{aligned}$$

где $X = 0,2$; $T_h = 473 \text{ K}$ — температура теплоисточника; $T_0 = 253 \text{ K}$ — начальная температура льда.

Физические свойства льда не одинаковы для каждой из трех фаз. Таким образом, заполняющее область G вещество имеет следующие характеристики [16]: в состоянии льда $\rho_s = 900 \text{ кг/м}^3$, $C_s = 2100 \text{ Дж/(кг}\cdot\text{K)}$, $\chi_s = 2,33 \text{ Вт/(м}\cdot\text{K)}$; в состоянии воды $\rho_l = 1000 \text{ кг/м}^3$, $C_l = 4187 \text{ Дж/(кг}\cdot\text{K)}$, $\chi_l = 0,6 \text{ Вт/(м}\cdot\text{K)}$; в состоянии пара $\rho_g = 0,59 \text{ кг/м}^3$, $C_g = 2020 \text{ Дж/(кг}\cdot\text{K)}$, $\chi_g = 0,03 \text{ Вт/(м}\cdot\text{K)}$. Температура и удельная теплота каждого перехода соответственно $T_f = 273 \text{ K}$ и $L_f = 3,3 \cdot 10^5 \text{ Дж/кг}$, $T_s = 373 \text{ K}$ и $L_s = 22,58 \cdot 10^5 \text{ Дж/кг}$. Для δ -функции задаются параметры $\Delta_f = 2 \text{ K}$, $\Delta_s = 10 \text{ K}$.

На рис. 5 представлены температурные профили, полученные на сетке $N = 1000$ с шагом по времени $\tau = 1 \cdot 10^{-3} \text{ с}$ на различные моменты времени: $t = 100$; 500; 1000 с.

В данной задаче процесс распространения тепла происходит по аналогии с модельной задачей, описанной выше. Однако здесь сильное влияние оказывают различные физические характеристики вещества (удельные теплопроводность и теплоемкость, плотность) для каждой из фаз. Так, низкая теплопроводность пара влечет за собой медленное движение фронта испарения.

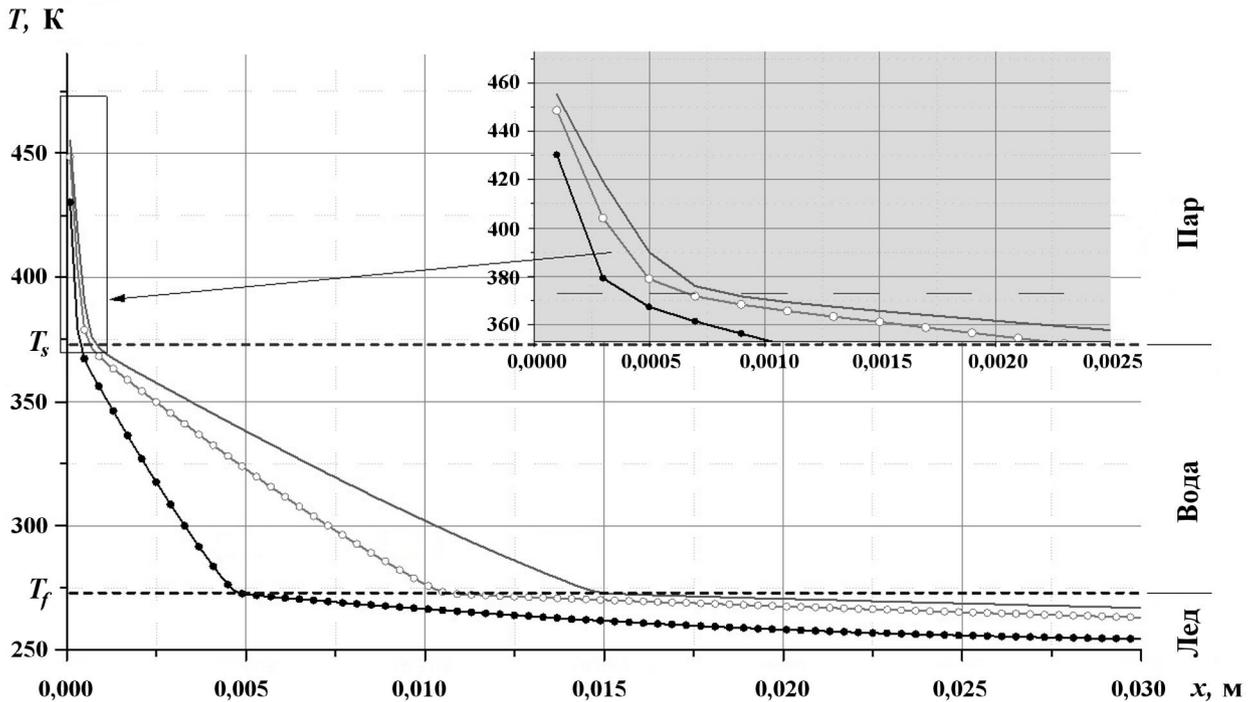


Рис. 5. Распределения температур на различные моменты времени для сетки $N = 1000$: —●— — $t = 100 \text{ с}$; —○— — $t = 500 \text{ с}$; — — — $t = 1000 \text{ с}$

Далее проводились вычисления на адаптивной разностной сетке $N = 1000$ с измельчением в ε -окрестности границы смены фаз ($\varepsilon = 0,002$ м) с двумя уровнями адаптации. На момент времени $t_{\max} = 500$ с получен профиль температуры. На рис. 6 показаны участки температурного профиля с наложением решений, полученных на основных постоянных сетках $N = 500; 1000; 2000; 4000$ в тот же момент времени.

Из рис. 6 можно заключить, что измельчение разностной сетки ведет к сходимости численных решений. Решение на адаптивной сетке с исходным числом ячеек $N = 1000$ практически совпадает с решением, полученным на основной постоянной сетке, измельченной в 4 раза.

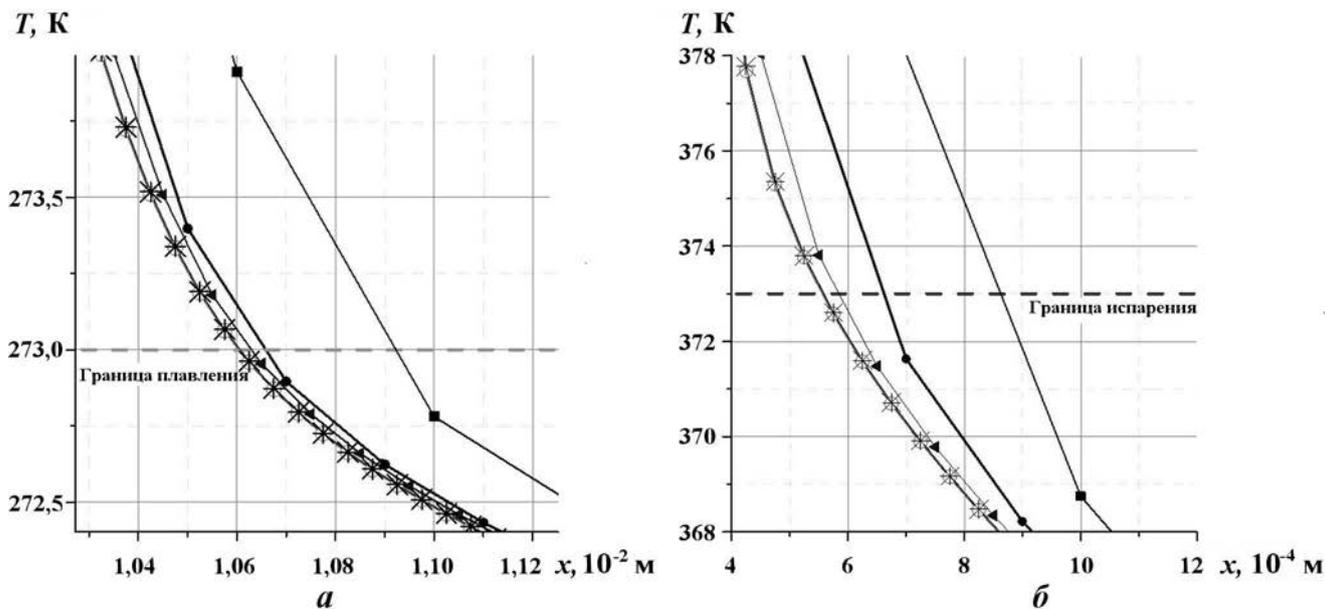


Рис. 6. Участки температурных профилей в областях границы плавления (а) и границы испарения (б): на постоянной сетке: —■— $N = 500$; —●— $N = 1000$; —◄— $N = 2000$; —*— $N = 4000$; на адаптивной сетке с двумя уровнями адаптации: —○— $N = 1000$

Задача плавления микрочастицы железа. В данной работе также рассматривается задача нагрева и плавления микрочастицы железа в виде сферы под воздействием лазерного излучения (рис. 7) [17]. Задача решается в одномерной постановке в сферических координатах. В центре частицы задается нулевой тепловой поток, а на внешней границе сферы — нелинейный поток

$$q = \mu(T) I - \frac{2\chi_{air} T_{air}}{3R} \left[\left(\frac{T}{T_{air}} \right)^{3/2} - 1 \right] - \sigma (T^4 - T_{air}^4). \quad (8)$$

Здесь первое слагаемое учитывает воздействие лазерного излучения с интенсивностью I ; $\mu(T)$ — коэффициент поглощения излучения: $\mu(T) = \begin{cases} 0,1 + 2,7 \cdot 10^{-4} (T - T_0), & T < T_f; \\ 0,6, & T \geq T_f. \end{cases}$ Второе и третье

слагаемые в (8) отвечают за кондуктивное и радиационное охлаждение частицы: χ_{air} — коэффициент теплопроводности воздуха; T_{air} — температура воздуха; σ — постоянная Стефана—Больцмана (имеет значение $5,67 \cdot 10^{-8}$ Вт/(м²·К²)).

Решается начально-краевая задача, определенная в области $G = [0 \leq r \leq 1 \cdot 10^{-5}] \times [0 < t \leq t_{\max}]$,

$$\begin{aligned} T(r, 0) &= T_0, \quad 0 \leq r \leq R; \\ S(0, t) &= 0, \quad \alpha'' T(R, t) - S(R, t) = \psi_2(t), \quad 0 < t \leq t_{\max}, \end{aligned} \quad (9)$$

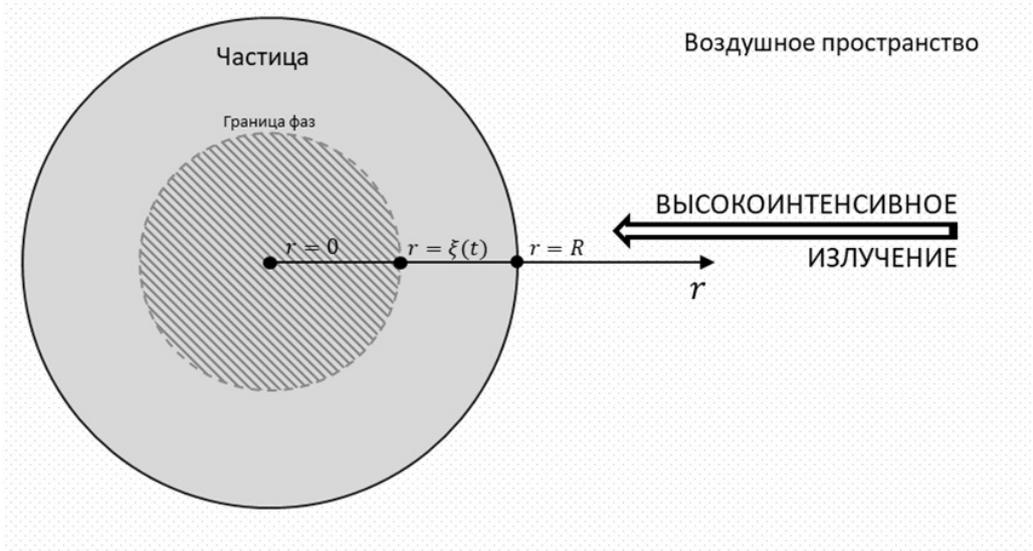


Рис. 7. Схематичное изображение задачи о плавлении частицы

где $R = 1 \cdot 10^{-5}$ м — радиус частицы; $T_0 = T_{air} = 273$ К — начальная температура частицы, равная температуре воздуха.

Для постановки краевого условия (9) для разностной задачи условие (8) линеаризуется. При этом на внешней границе при $r = R$ коэффициенты приобретают вид

$$\alpha'' = -\mu'(T^\nu) I + \frac{\chi_{air}}{R\sqrt{T_{air}}} \sqrt{T^\nu} + 4\sigma (T^\nu)^3;$$

$$\psi_2(t) = (\mu(T^\nu) - \mu'(T^\nu)) I + \frac{\chi_{air}}{3R\sqrt{T_{air}}} \left((T^\nu)^{3/2} + 2 \right) + \sigma \left(3(T^\nu)^4 + T_{air}^4 \right).$$

Физические свойства вещества, используемые в данной работе, заданы следующим образом: $\rho_s = \rho_l = 7874$ кг/м³; $C_s = 450$ Дж/(кг·К); $\chi_s = 15$ Вт/(м·К); $\chi_l = 32$ Вт/(м·К); $\chi_{air} = 0,03$ Вт/(м·К). Температура и удельная теплота плавления: $T_f = 1813$ К и $L_f = 2,67 \cdot 10^5$ Дж/кг соответственно. Для δ -функции задается параметр $\Delta_f = 1$ К. Интенсивность лазерного излучения $I = 6 \cdot 10^8$ Вт/м².

В ходе расчетов были получены результаты на постоянной сетке $N = 100$ с шагом по времени $\tau = 1 \cdot 10^{-10}$ с.

На рис. 8 показана динамика изменения температур на границах области определения. Видно, что температура частицы до момента плавления равномерно растет как в центре частицы, так и снаружи. Однако при достижении этапа плавления рост температуры в центре замедляется, и вскоре температура практически перестает расти до тех пор, пока все вещество не перейдет в новое фазовое состояние. Данный эффект вызван тем, что поступающая энергия в большей степени затрачивается на разрушение кристаллической решетки, а не на дальнейший нагрев.

Сравнение полученных результатов показало хорошее соответствие результатам из работы [17], найденным методом конечных разностей с реализацией нелинейной разностной схемы на основе итерационного уточнения коэффициентов.

Сопоставим решения на адаптивной и постоянных разностных сетках. Адаптация исходной разностной сетки ($N = 100$) проводится с двумя уровнями в ε -окрестности границы смены фаз, $\varepsilon = 5 \cdot 10^{-7}$ м. В табл. 3 представлены значения разностных норм численных решений, полученных на адаптивной и постоянных разностных сетках с различным числом ячеек. Приведено отклонение значений нормы численных решений от нормы для решения на основной разностной сетке $N = 400$.

По результатам табл. 3 можно сделать вывод, что измельчение разностной сетки ведет к сходности численного решения. Решение на адаптивной сетке с исходным числом ячеек $N = 100$ достаточно близко к решению, полученному на основной постоянной сетке $N = 400$.

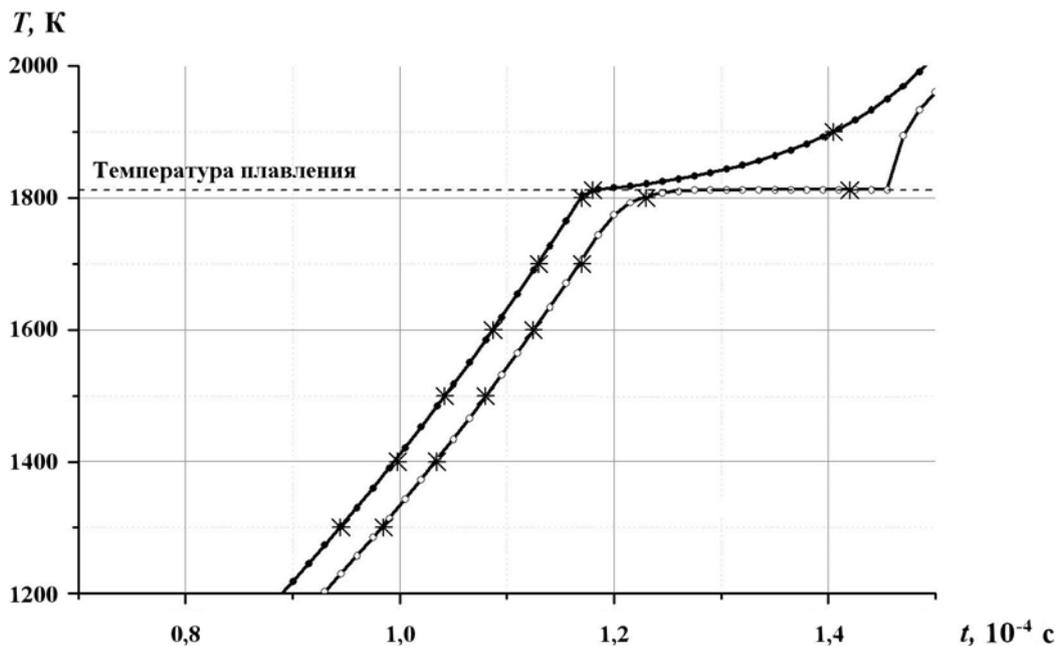


Рис. 8. Динамика температуры в центре (—●—) и снаружи (—○—) микрочастицы с течением времени в сравнении с данными, полученными в работе [17] (*)

Таблица 3

Сравнение нормы разностной функции распределения температуры для полученных решений на различных сетках на момент времени $t_{\max} = 1,3 \cdot 10^{-4}$ с

Число ячеек исходной сетки	h , м	Норма решения (7)	δ , %
Основные разностные сетки			
50	$2 \cdot 10^{-7}$	1 815,811	0,0091
100	$1 \cdot 10^{-7}$	1 815,932	0,0024
200	$5 \cdot 10^{-8}$	1 815,963	0,0007
400	$2,5 \cdot 10^{-8}$	1 815,976	—
Адаптивная разностная сетка			
100	$1 \cdot 10^{-7} \div 2,5 \cdot 10^{-8}$	1 815,958	0,0010

Заключение

В работе рассмотрен метод сквозного счета без явного выделения границы фазового перехода с использованием разностной схемы "Ромб" совместно с адаптивной сеткой. Данный метод был применен для решения задач типа Стефана. Адаптация разностной сетки в области границы фазового перехода повысила точность решения со значительным преимуществом по времени счета. Описанная методика оказалась достаточно эффективной при решении задач со сменой фаз состояния вещества как в случае низкотемпературного прогрева, так и высокотемпературного с быстропротекающими физическими процессами.

Список литературы

1. Самарский А. А., Моисеенко Б. Д. Экономичная схема сквозного счета для многомерной задачи Стефана // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 1965. Т. 5, вып. 5. С. 816–827.
SamarSKIY A. A., Moiseenko B. D. Ekonomichnaya skhema skvoznogo schyeta dlya mnogomernoy zadachi Stefana // Zhurnal vychisl. mat. i mat. fiz. 1965. T. 5, vyp. 5. S. 816–827.

2. *Рубинштейн Л. И.* Проблема Стефана. Рига: Звайгзне, 1967.
Rubinshteyn L. I. Problema Stefana. Riga: Zvaygzne, 1967.
3. *Alexiades V., Solomon A. D.* Mathematical Modeling of Melting and Freezing Processes. Washington DC: Hemisphere Publ. Co, 1993.
4. *Бородин С. Л.* Численные методы решения задачи Стефана // Вестник Тюменского гос. ун-та. Физ.-мат. моделирование. Нефть, газ, энергетика. 2015. Т. 1, вып. 3. С. 164–175.
Borodin S. L. Chislennye metody resheniya zadachi Stefana // Vestnik Tyumenskogo gos. un-ta. Fiz.-mat. modelirovanie. Neft, gaz, energetika. 2015. Т. 1, вып. 3. С. 164–175.
5. *Дарьин Н. А., Мажукин В. И.* Об одном подходе к построению адаптивных сеток // Докл. АН СССР. 1988. Т. 298, вып. 1. С. 64–68.
Darin N. A., Mazhukin V. I. Ob odnom podkhode k postroeniyu adaptivnykh setok // Dokl. AN SSSR. 1988. Т. 298, вып. 1. С. 64–68.
6. *Thompson J. F.* Grid generation techniques in computational fluid dynamics // AIAA J. 1984. Vol. 22, No 11. P. 1505–1523.
7. *Мустафин А. М., Пашенцева Н. Н.* Численное сравнение некоторых схем решения уравнения теплопроводности на подвижных сетках // Науч. сессия НИЯУ МИФИ-2020 "Инновационные ядерные технологии". Сб. науч. трудов Всерос. науч.-практ. конф. 22–23 декабря 2020 г. М.: НИЯУ МИФИ; Снежинск: СФТИ НИЯУ МИФИ, 2020.
Mustafin A. M., Pashentseva N. N. Chislennoe sravnenie nekotorykh skhem resheniya uravneniya teploprovodnosti na nepodvizhnykh setkakh // Nauch. Sessiya NIYaU MIFI-2020 "Innovatsionnye yadernye tekhnologii". Sb. nauch. trudov Vseros. nauch.-prakt. konf. 22–23 dekabrya 2020 g. M.: NIYaU MIFI; Snezhinsk: SFTI NIYaU MIFI, 2020.
8. *Мустафин А. М., Пашенцева Н. Н., Лебедев С. Н.* Решение двумерного уравнения теплопроводности разностной схемой "Ромб" на адаптивно-встраиваемых сетках // Науч. сессия НИЯУ МИФИ-2022 "Инновационные ядерные технологии". Сб. науч. трудов Всерос. науч.-практ. конф. 23–24 марта 2022 г. М.: НИЯУ МИФИ; Снежинск: СФТИ НИЯУ МИФИ, 2022.
Mustafin A. M., Pashentseva N. N., Lebedev S. N. Reshenie dvumernogo uravneniya teploprovodnosti raznostnoy skhemoy "Romb" na adaptivno-vstraivaemykh setkakh // Nauch. Sessiya NIYaU MIFI-2020 "Innovatsionnye yadernye tekhnologii". Sb. nauch. trudov Vseros. nauch.-prakt. konf. 23–24 marta 2022 g. M.: NIYaU MIFI; Snezhinsk: SFTI NIYaU MIFI, 2022.
9. *Писарев В. Н.* Параметрическое семейство схем "Ромб" для одномерного уравнения теплопроводности // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. 1986. Вып. 2. С. 67–75.
Pisarev V. N. Parametricheskoe semeystvo skhem "Romb" dlya odnomernogo uravneniya teploprovodnosti // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Metodiki i programmy chislennogo resheniya zadach matematicheskoy fiziki. 1986. Вып. 2. С. 67–75.
10. *Тихонов А. Н., Самарский А. А.* Уравнения математической физики. М.: Наука, 1966.
Tikhonov A. N., Samarskiy A. A. Uravneniya matematicheskoy fiziki. M.: Nauka, 1966.
11. *Мазо А. В.* Основы теории и методы расчета теплопередачи: учеб. пособие. Казань: Казанский ун-т, 2013.
Mazo A. V. Osnovy teorii i metody raschyeta teploperedachi: ucheb. posobie. Kazan: Kazanskiy un-t, 2013.
12. *Будак Б. М., Соловьева Е. Н., Успенский А. В.* Разностный метод со сглаживанием коэффициентов для решения задач Стефана // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 1965. Т. 5, вып. 5. С. 828–840.
Budak B. M., Solovyeva E. N., Uspenskiy A. V. Raznostnyy metod so sglazhivaniem koeffitsientov dlya resheniya zadach Stefana // Zhurnal vychisl. mat. i mat. fiz. 1965. Т. 5, вып. 5. С. 828–840.
13. *Владимиров В. С.* Уравнения математической физики. М.: Наука, 1971.
Vladimirov V. S. Uravneniya matematicheskoy fiziki. M.: Nauka, 1971.

14. *Кормен Т., Лейзерсон Ч., Ривест Р., Штайн К.* Алгоритмы: построение и анализ: Пер. с англ. 3-е изд. М.: Вильямс, 2019.
Kormen T., Leyzerson Ch., Rivest R., Shtayn K. Algoritmy: postroenie i analiz: Per. s angl. 3-e izd. M.: Vilyams, 2019.
15. *Формалев В. Ф., Рабинский Л. Н.* О задаче типа Стефана с двумя нестационарно подвижными границами фазовых переходов // Изв. Академии Наук. Энергетика. 2014. Вып. 4. С. 74–81.
Formalev V. F., Rabinskiy L. N. O zadache tipa Stefana s dvumya nestatsionarno podvizhnymi granitsami fazovykh perekhodov // Izv. Akademii Nauk. Energetika. 2014. Vyp. 4. S. 74–81.
16. *Бабичев А. П., Бабушкина Н. А., Братковский А. М. и др.* Физические величины: справочник / Под ред. И. С. Григорьева, Е. З. Мейлихова. М.: Энергоатомиздат, 1991.
Babichev A. P., Babushkina N. A., Bratkovskiy A. M. i dr. Fizicheskiye velichiny: spravochnik / Pod red. I. S. Grigoryeva, E. Z. Meylikhova. M.: Energoatomizdat, 1991.
17. *Гришаев Р. В., Мирзаде Ф. Х., Хоменко М. Д.* Численное моделирование кинетики плавления микрочастиц при селективном лазерном спекании. http://nuclphys.sinp.msu.ru/school/s10/10_16.pdf.
Grishaev R. V., Mirzade F. Kh., Khomenko M. D. Chislennoe modelirovanie kinetiki plavleniya mikrochastits pri selektivnom lazernom spekanii. http://nuclphys.sinp.msu.ru/school/s10/10_16.pdf.

Статья поступила в редакцию 17.05.22.
