СРАВНЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ НЕКОТОРЫХ АЛГОРИТМОВ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ СТЕФАНА

Гладковский В.И., Долин В.В., Сазонов М.И.,
Черненко В.П., Черненко Н.В.

Для предотвращения фазовых структурных изменений в хрупких металлах при ПМО необходимо обеспечивать локальный нагрев в объеме, ограниченном объемом удаляемого материала. Для определения скорости перемещения границы раздела фаз при ПМО методом АРС решалась задача о фазовом структурном переходе (задача Стефана)[1,2].

Основная трудность при решении задачи Стефана связана с появлением в результате движения межфазной границы нового, ранее принадлежавшего другой фазе узла пространственной сетки в одной из смежных фаз [1]. В [2],[3] был предложен метод устранения указанной трудности для задач теплопроводности путем замены в некоторой облести вблизи межфазной границы разрывных физических характеристик "сглаженными" функциями. Размеры области сглаживания выбирались малыми по отношению к характерным размерам соседствующих фаз. Положение границы определялось по изотерме, соответствующей температуре фазового перехода. Очевидно, что сеточная функция распределения температуры, полученная в результате алгоритмической организации подобной процедуры будет непрерывна вместе, по крайней мере, со своей первой производной [4]. На самом же деле она имеет разрыв второго рода на границе между соседними фазами. Поэтому результаты, получаемые таким образом, неточны вблизи границы фазового перехода.

Методы, в которых производится так называемое "явное выделение границы раздела фаз", являются более перспективными в вычислительном отношении. Например, в методе ловли фронта фазового превращения в узел сетки [5] шаг сетки по пространственной координате принимается постоянным, а величина шага меняется так, чтобы граница раздела фаз переместилась на величину шага по пространственной координате. Этот метод применим для одномерных задач с одной подвижной границей. К недостаткам данного метода можно отнести трудности, связанные с переходом к решению многомерных задач, например при помощи локально-одномерных схем.

В [1] предложен метод вспомогательной сетки, свободный от указанных выше недостатков и не налагающий никаких дополнительных ограничений на шаги сетки по пространственным и временной координатам. Метод применим также для решения многофазных и многомерных задач с подвижными границами.

В качестве примера рассмотрим одномерную задачу Стефана на интервале $[0, 1]$;

$$\frac{\partial T_n}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left[\mathcal{K}_n(T_n)\frac{\partial T_n}{\partial x}\right], \qquad n = 1, 2. \tag{I}$$

$$T_2(x,0) = f(x), \qquad T_1(x,0) = 0, \tag{2}$$

$$\mathcal{K}_1(T_1)\frac{\partial T_1}{\partial x}\Big|_{x=0} = \varphi(t), \quad \mathcal{K}_2(T_2)\frac{\partial T_2}{\partial x}\Big|_{x=1} = \psi(t) \tag{3}$$

дополненную граничным условием и уравнением баланса энергии на границе между фазами:

$$T_1(\xi-0, t) = T_2(\xi+0, t) \tag{4}$$

$$\mathcal{K}_1(T_1)\frac{\partial T_1}{\partial x}\Big|_{x=\xi-0} - \mathcal{K}_2(T_2)\frac{\partial T_2}{\partial x}\Big|_{x=\xi+0} = \lambda\frac{d\xi}{dt}, \tag{5}$$

где ξ – координата границы между фазами, λ – удельная теплота фазового превращения.

Введем пространственно-временную сетку, для чего построим в плоскости (x, t) два семейства прямых, параллельных осям координат:

$$x_i = h(i-1), \quad i = 1, 2, \ldots, N+1, \quad h = 1/N,$$
$$t_k = t_0 + k\tau, \quad k = 0, 1, 2 \qquad \tau = (t_f - t_0)/k \tag{6}$$

где t_0 – начальный, t_f – конечный момент времени.

Применим к системе уравнений (I) – (5) интегро-интерполяционный метод [6] . В результате получим следующие соотношения:

$$T1 - \check{T}1 = \frac{\tau}{2h}(W1_+ - W1) + \frac{\tau}{2h}(\check{W}1_+ - \check{W}1), \tag{7}$$

$$T2 - \check{T}2 = \frac{\tau}{2h}(W2_+ - W2) + \frac{\tau}{2h}(W2_+ - W2), \tag{8}$$

,

$$W1 = A1\,\frac{T1 - T1_-}{h}, \tag{9}$$

$$W2 = A2\,\frac{T2 - T2_-}{h}, \tag{10}$$

$$W1(\xi - 0, t) - W2(\xi + 0, t) = \lambda(\xi - \check{\xi})\,/\,\tau. \tag{11}$$

Здесь, как и ранее, применимы безиндексные обозначения [6]. Выразим температуру $T1$ из уравнения (7) и подставим ее значение в (9):

$$\frac{h}{A1_-}W1 = \check{T}1 + \gamma(W1_+ - W1) + \gamma(\check{W}1_+ - \check{W}1) - \tag{12}$$

$$- \check{T}1_- - \gamma(W1 - W1_-) - \gamma(\check{W}1 - \check{W}1_-),$$

где $\gamma = \tau/2h$. Кроме того, функционалы $A1$ и $A2$ аппроксимируют значения коэффициентов теплопроводности k_1 и k_2 на сетке с погрешностью $O(h^2)$.

Подставляя температуру $T2$ из уравнения (8) в уравнение (10), получим:

$$\frac{h}{A2_-}W2 = \check{T}2 + \gamma(W2_+ - W2) + \tag{13}$$

$$+ \gamma(\check{W}2_+ - \check{W}2) - \check{T}2_- - \gamma(W2 - W2_-) - \gamma(W2 - W2_-).$$

Уравнения (12) - (13) можно переписать в другом виде:

$$\gamma W1_+ - \left(\frac{h}{A1_-} - 2\gamma\right)W1 + \gamma W1_- = F1, \tag{14}$$

$$\gamma W2_+ - \left(\frac{h}{A2_-} - 2\gamma\right)W2 - \gamma W2_- = -F2, \tag{15}$$

где $F1 = \check{T}1 - \check{T}1_- + \gamma(\check{W}1_+ - 2\check{W}1 + \check{W}1_-),$ (16)

$$F2=\check{T}2-T2_- +\gamma(\check{W}2_+ -2\check{W}2+\check{W}2_-). \qquad (17)$$

Разностные схемы (I4) и (I5) можно реализовать методом "предиктор"-"корректор" с неявным использованием дискретного аналога закона сохранения энергии. Для нечетных узлов решение находим, например, методом АРС:

$$\overleftarrow{W1}=(\gamma W1_+ + F1/2)/\left(\frac{h}{2A1_-}+\gamma\right), \qquad (18)$$

$$\overrightarrow{W1}=(\gamma W1_- + F1/2)/\left(\frac{h}{2A1_-}+\gamma\right), \qquad (19)$$

$$\overrightarrow{W2}=(\gamma W2_+ + F2/2)/\left(\frac{h}{2A2_-}+\gamma\right), \qquad (20)$$

$$\overleftarrow{W2}=(\gamma W2_- + F2/2)/\left(\frac{h}{2A2_-}+\gamma\right). \qquad (21)$$

Окончательный результат на верхнем слое по времени для нечетных узлов находим по формулам

$$W1=(\overrightarrow{W1}+\overleftarrow{W1})/2, \quad W2=(\overrightarrow{W2}+\overleftarrow{W2})/2. \qquad (22)$$

Решение для четных узлов находим явным образом по формулам, полученным из неявных разностных схем:

$$W1=(\gamma W1_+ + F1+\gamma W1_-)/\left(\frac{h}{2A1_-}+2\gamma\right), \qquad (23)$$

$$W2=(\gamma W2_+ + F2-\gamma W2_-)/\left(\frac{h}{2A2_-}+2\gamma\right). \qquad (24)$$

Используя известное распределение потоков и температур на каждом предшествующем слое по времени и положении $\check{\xi}$ границы между фазами в этот же предшествующий момент времени, из уравнения баланса энергии (II) можно было бы определить положение ξ подвижной границы в последующий момент времени:

$$\xi=\check{\xi}+\frac{\tau}{\lambda}\left(W1_{\xi}-W2_{\xi}\right). \qquad (25)$$

Однако, то обстоятельство, что потоки $W1$ и $W2$ в точке $x=\xi$, вообще говоря неизвестны, препятствует этому.

Используем методику, предложенную в работе [6]. Для этого введем вспомогательную сетку в той фазе, в которой произошло появление нового регулярного узла. В этом случае должно выполняться слудующее условие:

$$x_i < \check{\xi} < x_{i+1}. \qquad (26)$$

Узлы вспомогательной сетки выбираем следующим образом: I-й узел совпадает с новым положением ξ подвижной границы, 2-й совпадает с старым ее положением $\check{\xi}$, 3-й отстоит на расстоянии $\delta=|\xi-\check{\xi}|$ от 2-го узла в сторону, противоположную движению межфазной границы.

Теперь запишем разностную аппроксимацию уравнения теплопроводности во втором узле вспомогательной сетки;

$$\gamma' W1_{-\xi} - \left(\frac{\delta}{A1_-} + 2\gamma'\right) W1_{\check{\xi}} + \gamma' W1_{\xi} = -F1, \qquad (27)$$

$$\gamma' W2_{-\delta} - \left(\frac{\delta}{A2} + 2\gamma'\right) W2_{\check{\xi}} + \gamma' W2_{\xi} = -F2, \qquad (28)$$

где $\gamma' = \frac{\tau}{2\delta}$. Таким образом, если потоки $W1$ и $W2$ в третьем и во втором узлах будут найдены, то из уравнений (27) и (28) можно будет определить потоки $W_{1\xi}$ и $W_{2\xi}$, что в свою очередь даст возможным определить новое положение ξ из уравнения (25). Очевидно, что потоки во втором и в третьем узлах можно найти используя какую-либо процедуру численного интерполирования, например, процедуру интерполяции по Лагранжу, как это и сделано в работе [6]. При этом в качестве базисных точек интерполяции были выбраны узлы основной сетки.

Очевидно, что если $k = k(T)$, то для нахождения соответсвующих величин необходимо вводить, как и ранее, какой-либо итерационный процесс. Предпочтительней других из-за быстроты сходимости выглядит ньютоновский итерационный процесс.

Для проверки работоспособности изложенного выше алгоритма с методической целью решена следующая одномерная задача, имеющая аналитическое решение в случае постоянства коэффициентов теплопроводности k_1 и k_2 в пределах каждой из фаз [7]:

$$\frac{\partial T_n}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left[k_n(T_n)\frac{\partial T_n}{\partial x}\right], \quad n = 1, 2, \qquad (29)$$

$$T_2(x, 0) = 0, \qquad (30)$$

$$T_1(0,t)=1, \qquad T_2(\infty, t)=0. \tag{31}$$

Кроме того, в общем случае:

$$T_1(\xi-0,\ t)=T_{12}, \qquad T_2(\xi+0,\ t)=T_{21} \tag{32}$$

и

$$k_1(T_{12})\frac{\partial T_1}{\partial x}\Big|_{x=\xi-0}-k_2(T_{21})\frac{\partial T_2}{\partial x}\Big|_{x=\xi+0}=\lambda\frac{\xi}{t}. \tag{33}$$

Последнее уравнение представляет собой баланс энергии на подвижной границе T_{12} и T_{21} – равномерные значения температуры на межфазной границе в первой и во второй фазах соответсвенно.

В том случае, если коэффициенты теплопроводности k_1 и k_2 постоянны в пределах каждой из фаз, система уравнений (29) – (33) имеет аналитическое решение:

$$T1(x,t)=(T_{12}-1)\,erf\left(\frac{x}{2\sqrt{k_1 t}}\right)/erf\left(\frac{\beta}{2\sqrt{k_1 t}}\right), \tag{34}$$

$$T2(x,t)=T_{21}\,erfc\left(\frac{x}{2\sqrt{k_2 t}}\right)/erfc\left(\frac{\beta}{2\sqrt{k_2 t}}\right), \tag{35}$$

$$\xi(t)=\beta(t). \tag{36}$$

Параметр является корнем трансцендентного уравнения:

$$\sqrt{k_1}(1-T_{12})\exp\left(-\frac{\beta^2}{4k_1}\right)/erf\left(\frac{\beta}{2\sqrt{k_1}}\right)-$$

$$-\sqrt{k_2}\,T_{21}\exp\left(-\frac{\beta}{4k_2}\right)/erfc\left(\frac{\beta}{2\sqrt{k_2}}\right)=\frac{\sqrt{\pi}}{2}\,\beta\,(T_{12}-T_{21}). \tag{37}$$

Решение задачи (29) – (33) производилось численно методом АРС, изложенным применительно к задаче Стефана в этом параграфе. Расхождение численного и аналитического решения оказалось небольшим – не превосходило 7–8 %. Следовательно, метод АРС в сочетании с методом сетки может быть успешно применен для решения задачи Стефана о фазовом структурном переходе при ПМО [2].

Литература

1. Таран М.Д., Фаворский А.П. Численное решение двумерного уравнения теплопроводности с сильно меняющимися коэффициентами// Вычислительная математика и математическая физика. - 1979, т. 19, №4: -С. 1069-1073.
2. Гладковский В.И., Каролинский В.Г. Применение ассиметричных разностных схем для решения задачи Стефана о фазовых структурных превращениях// Скоростные процессы при тепловом и механическом воздействии на металлические материалы: Тез. докл. науч.-тех. конф. -Минск: БелНИИНТИ, 1984. -С. 93-94.
3. Беляев Н.М., Рядно А.А. Методы нестационарной теплопроводности. -М.: Высшая школа, 1978. -328 с.
4. Коздоба Л.А. Методы решения нелинейных задач теплопроводности -М.: Наука, 1975. - 227 с.
5. Гухман А.А. Физические основы теплопередачи. -Л. -М.: Энергоиздат, 1934. - 314 с.
6. Самарский А.А. Теория разностных схем. - М.: Наука, 1979. - 656 с.
7. Карслоу Г. , Егер Д. Теплопроводность твердых тел. - М.: Наука, 1964. - 487 с.