

УДК 519.63

Н.А. Красношлык, А.О. Богатырёв

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ С ПОДВИЖНЫМИ МЕЖФАЗНЫМИ ГРАНИЦАМИ

В данной работе рассмотрены физические задачи, приводящие к задачам с подвижными границами, а также характерные особенности задач такого типа. Представлены существующие методы решения задачи Стефана с детальным описанием метода выпрямления фронтов, метода ловли фронта в узел пространственной сетки и метода фиксированной сетки. Для модельной двухфазной задачи проведено сравнение результатов численного моделирования движения межфазной границы представленными методами.

Ключевые слова: задача Стефана, межфазная граница, взаимная диффузия.

1. Введение

При изучении задач различной природы, которые сопровождаются изменением фазового состояния вещества, возник класс задач с подвижными межфазными границами. Наличие границ раздела между фазами, которые не задаются явно и могут смещаться со временем, является характерной особенностью рассматриваемых задач. Скорость смещения межфазных границ определяется дополнительным условием на границе раздела фаз, что приводит задачу к нелинейному виду.

Примерами физических процессов такого типа есть: задача о таянии льда со смещающейся границей между водой и льдом, задача о плавлении твердого вещества с неизвестной границей между твердой и жидкой фазами, задача о перераспределении концентрации между фазами в металлическом бинарном сплаве в процессе диффузионного отжига с подвижными границами между фазами различного химического состава. Как видно из примеров, помимо двухфазных задач с одной подвижной границей раздела фаз, существуют и многофазные задачи с произвольным числом одновременно смещающихся с разной скоростью межфазных границ. Перечисленные выше и другие примеры физические задач, приводящие к задаче с подвижными границами описаны в работах [1–3].

Первой работой в данной области считают статью Г. Ламе и Б.П. Клапейрона «Об отвердевании охлаждающегося жидкого шара» 1831 года, в которой было установлено, что толщина твердой фазы, образующейся при затвердевании однородной жидкости, пропорциональна \sqrt{t} [4].

Значительно позже в 1889 году австрийский физик и математик Й. Стефан опубликовал четыре статьи, посвященные задачам с фазовыми переходами. Впоследствии задачи данного класса с подвижными межфазными границами стали называть задачами Стефана. В своих работах он сформулировал и решил задачи, определяющие процессы теплопроводности и диффузии для однофазной или двухфазной областей, подробное описание данных задач можно найти в работах [1, 4–5]. Кроме того Й. Стефан сформулировал уравнение теплового баланса на границе раздела фаз с учетом скрытой теплоты, и теперь подобные условия сопряжения фаз принято называть условиями Стефана. В литературе задачу Стефана также называют или задачей с подвижными границами (moving

boundary problem), или задачей со свободными границами (free boundary problem), или задачей о фазовом переходе (phase change problem).

В настоящее время задача Стефана привлекает внимание многих ученых, о чем свидетельствует значительное число работ в данной области. Так общее количество работ, посвященных задачам с подвижными границами, увеличивается с каждым годом, о чем свидетельствуют данные из [6], где представлен библиографический список работ данной тематики до 1991 года, включающий 5689 наименований.

Среди множества работ, посвященных задачам с подвижными границами, выделим отдельно некоторые монографии, охватывающие широкий круг вопросов о задаче Стефана. Так первые наиболее значимые результаты по проблеме Стефана были изложены в работе Л.И. Рубинштейна [1], в частности, представлен исторический обзор развития проблемы, доказаны теоремы существования решения задачи Стефана для одномерного случая, приведены численные методы решения рассматриваемых задач. Новые методы и идеи решения задачи Стефана изложены в монографии А.М. Мейрманова [7], которая в основном посвящена вопросам существования и единственности решения в случаях двух и более пространственных переменных и исследованию их структуры. Основные понятия, принципы моделирования и анализа классических задач Стефана детально изложены в работе S.C. Gupta [8]. Особого внимания заслуживает работа [2], где J. Crank описывает различные постановки задач с подвижными границами, существующие аналитические решения, а также приводит наиболее полное описание численных методов решения задач данного класса.

Целью данной статьи является изучение существующих методов решения задачи Стефана и проведение сравнительного анализа численных методов решения, которые относятся к методам с явным выделением межфазных границ.

2. Математическая модель задачи с подвижными границами

Рассмотрим процесс диффузионного взаимодействия в бинарной металлической системе $A-B$. Примерами таких систем могут быть диффузионные пары $Ag-Au$, $Al-Ni$, $Al-Ti$, $Cu-Zn$ и другие. При взаимной диффузии в бинарных системах на границе раздела двух компонентов образуется диффузионная зона, состоящая из одной или нескольких промежуточных фаз, каждая из которых существует в определенном диапазоне концентраций. Фазовый состав диффузионной зоны может изменяться за счёт образования и роста новых фаз или угнетения уже существующих. На данный момент экспериментально исследовано значительное количество бинарных металлических соединений, в результате чего получены сведения об особенностях конкуренции промежуточных фаз в процессе взаимной диффузии. Однако фазовые превращения в диффузионной зоне представляют собой достаточно сложный процесс, не всегда соответствующий диаграмме состояний, которая характеризует изменение структуры сплава в зависимости от концентрации и температуры. Для более детального изучения процессов конкуренции фаз в бинарных системах рассмотрим математическую модель данного процесса.

Опишем одномерную модель процесса взаимной диффузии в бинарной металлической системе $A-B$ с α - и β -фазами, которые представляют собой

регулярные твердые растворы. Изменение концентрации в каждой фазе определяется вторым уравнением Фика:

$$\frac{\partial C_B}{\partial t} = D^\alpha \cdot \frac{\partial^2 C_B}{\partial x^2}, \quad 0 \leq x < s(t), \quad (1)$$

$$\frac{\partial C_B}{\partial t} = D^\beta \cdot \frac{\partial^2 C_B}{\partial x^2}, \quad s(t) < x \leq l, \quad (2)$$

где C_B – относительная концентрация атомов сорта B ($0 \leq C_B \leq 1$, $C_A + C_B = 1$), D^α и D^β – коэффициенты взаимной диффузии в соответствующих фазах ($\text{м}^2 \cdot \text{с}^{-1}$), $s(t)$ – положение подвижной межфазной границы, l – длина образца (м).

Скорость движения межфазных границ определяется разностью результирующих потоков атомов и скачком концентрации на границе, таким образом, уравнение баланса потоков на границе будет иметь вид:

$$(C_B^\beta - C_B^\alpha) \cdot \frac{ds(t)}{dt} = -D^\beta \cdot \frac{\partial C_B}{\partial x} \Big|_{s(t)+0} + D^\alpha \cdot \frac{\partial C_B}{\partial x} \Big|_{s(t)-0}, \quad (3)$$

где $C_B^\alpha \equiv C_B(s(t)-0, t)$ – значение концентрации на правой границе α -фазы, $C_B^\beta \equiv C_B(s(t)+0, t)$ – значение концентрации на левой границе β -фазы. Заметим, что $C_B^\alpha = \text{const}$ и $C_B^\beta = \text{const}$, т.е. на межфазной границе концентрационный профиль имеет разрыв.

На границах образца поток компонента B отсутствует, поэтому граничные условия имеют следующий вид:

$$\frac{\partial C_B}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0, \quad \frac{\partial C_B}{\partial x} \Big|_{x=l} = 0. \quad (4)$$

Схематическое распределение концентрации в системе $A-B$ с α - и β -фазами, представлено на рисунке 1.

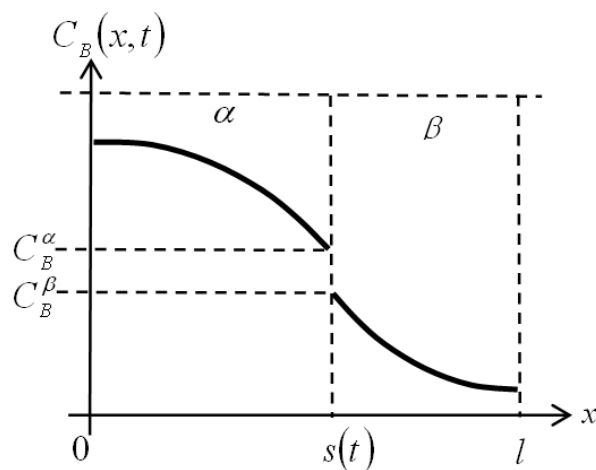


Рис. 1. Концентрационный профиль в двухфазной бинарной системе

Рассмотренная одномерная математическая модель процесса взаимной диффузии в бинарной системе имеет подвижную границу раздела фаз и представляет собой задачу Стефана.

3. Обзор методов решения задач с подвижными границами

Решение задачи Стефана состоит в вычислении температурного или концентрационного профиля и определении положения межфазных границ в различные моменты времени. Основные трудности при решении данной задачи связаны с тем, что подвижные границы раздела фаз формируют переменные области для вычисления значений температуры или концентрации, а положение этих межфазных границ заранее не известно и также должно определяться в ходе решения.

В настоящее время существуют аналитические и численные методы решения классической задачи Стефана. Однако нахождение решения задачи Стефана в замкнутой аналитической форме является не простой проблемой, решение которой возможно лишь для ограниченного количества случаев, когда рассматривают упрощенную постановку задачи [9]. Детальное описание подхода к построению аналитического решения задачи Стефана для полубесконечного образца рассмотрено в работах [2–3, 10].

Аналитическое решение двухфазной диффузионной задачи с подвижной границей, разделяющей полубесконечные фазы, приведено в работе [11]. При этом смещение межфазной границы пропорционально \sqrt{t} , а именно:

$$\Delta s = 2\lambda\sqrt{t}, \quad (5)$$

где λ – неизвестный параметр, который находится из специального трансцендентного уравнения. Причем, если в самом начале рассматриваемого процесса соответствующие фазы аппроксимировать как бесконечные среды, то искомое трансцендентное уравнение примет вид:

$$(C_B^\alpha - C_B^\beta)\lambda\sqrt{\pi} - \frac{\sqrt{D^\alpha}(C_0^\alpha - C_B^\alpha)}{1 + \operatorname{erf}\left(\frac{\lambda}{\sqrt{D^\alpha}}\right)} \cdot \exp\left(-\frac{\lambda^2}{D^\alpha}\right) + \frac{\sqrt{D^\beta}(C_B^\beta - C_0^\beta)}{1 - \operatorname{erf}\left(\frac{\lambda}{\sqrt{D^\beta}}\right)} \cdot \exp\left(-\frac{\lambda^2}{D^\beta}\right) = 0, \quad (6)$$

где C_0^α и C_0^β – начальное распределение концентрации в соответствующих фазах.

Таким образом, для задачи (1)–(4) получаем закон движения межфазной границы на начальной стадии диффузионного процесса в виде:

$$s(t) = s^0 + 2\lambda\sqrt{t}, \quad (7)$$

где s^0 – начальное положение границы, а параметр λ определяется из уравнения (6).

Большее распространение получили численные методы решения задачи Стефана. Существующие численные методы можно условно разделить на две группы. К первой группе относятся методы сквозного счета, которые позволяют не выделять границу раздела фаз и использовать общее уравнение во всей расчетной области. А ко второй группе относятся методы, предполагающие явное определение положения межфазных границ.

Главной особенностью методов сквозного счета является отсутствие необходимости точного отслеживания положения межфазных границ, что оказывается достаточно эффективным при решении многомерных и многофазных задач. Для применения данного подхода исходную задачу необходимо записать в обобщенной формулировке в виде единого уравнения с разрывными коэффициентами на межфазных границах. Для построения численного алгоритма решения полученной задачи проводят процедуру сглаживания разрывных коэффициентов на некотором интервале. Данный подход был предложен в

работах А.А. Самарского и Б.М. Будака [12–14]. Недостатками данного подхода являются зависимость точности разностного решения от выбора параметра сглаживания и низкая точность определения положения межфазных границ.

Вместе с тем для использования процедуры сквозного счета, когда решают задачу теплопроводности, часто исходную задачу записывают в энтальпийной формулировке. Таким образом, в качестве искомой функции выступает не температура, а энтальпия. Соответственно данный подход называю энтальпийным методом [2–3, 15], изложение которого также приведено в работах [12, 16–17].

В настоящее время среди методов сквозного счета активно развиваются метод функций уровня (level set method) и метод фазового поля (phase field method). Впервые применение метода функций уровня именно к решению задачи Стефана было предложено в работе [18]. Более подробно с данным методом можно ознакомиться в работах [15, 19–20], а с методом фазового поля в [15, 21].

На практике широко применяются методы, в явном виде отслеживающие движение межфазных границ. В основе всех методов данной группы лежит идея использования метода конечных разностей, когда расчёты проводятся на равномерных или же неравномерных сетках. При этом всегда определено, между какими узлами расчётной сетки находится подвижная граница, или же через какой узел она проходит. Наиболее известными среди них являются метод ловли фронта в узел пространственной сетки и метод выпрямления фронтов. Более детально суть данных методов будет изложена далее.

Еще один подход к решению задачи Стефана предполагает использование метода динамически адаптирующихся сеток, предложенный В.И. Мажукиным и его учениками [22–25]. Данный метод позволяет явно выделять положение подвижных межфазных границ. Он применим для решения как одномерных, так и многомерных задач. Суть метода состоит в переходе к произвольной нестационарной системе координат. Пусть рассматривается одномерная нестационарная задача с независимыми переменными (x, t) , переход к новой подвижной системе координат с переменными (q, τ) осуществляется заменой переменных общего вида $x = \varphi(q, \tau)$, $t = \tau$. Тогда частные производные выражаются следующим образом [23]:

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{Q}{\psi} \frac{\partial}{\partial q}, \quad \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\rho}{\psi} \frac{\partial}{\partial q}, \quad \frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{\rho}{\psi} \frac{\partial}{\partial q} \frac{\rho}{\psi} \frac{\partial}{\partial q}, \quad (8)$$

где $\frac{\partial x}{\partial \tau} = -\frac{Q}{\rho}$ – скорость движения нестационарной системы координат, $\psi = \frac{\partial x}{\partial q}$ – метрический коэффициент, Q – функция обратного преобразования.

Преобразование координат позволяет использовать расчетную сетку, размещение узлов которой зависит от поведения искомого решения. Для определения координат узлов сетки используется функция Q , которая заранее не известна и определяется в ходе решения. Установление конкретного вида функции Q является ключевым вопросом при построении динамически адаптирующихся сеток. В задачах с подвижными границами функцию обратного преобразования можно определить следующим образом [22]:

$$Q = D \frac{\partial \psi}{\partial q}, \quad (9)$$

здесь D – имеет смысл коэффициента диффузии.

В итоге получают расширенную задачу в новых переменных с дополнительными уравнениями, характеризующими движение узлов расчетной сетки, для решения которой предлагается использовать интегро-интерполяционный метод.

Для решения задачи Стефана также может быть применен и метод конечных элементов [26].

4. Численные методы с явным выделением межфазных границ

4.1. Метод выпрямления фронтов

Суть метода выпрямления фронтов (front-fixing method) состоит в следующем: задача с подвижными межфазными границами сводится к задаче с фиксированными границами. Для этого в каждой фазе необходимо ввести новые независимые переменные. Соответствующее преобразование переменных также называют подстановкой Ландау. Описание данного метода приводится в работах [2, 12, 15, 27–29].

Здесь и далее полагаем $C_B(x, t) \equiv C$, $s(t) \equiv s$ и $\frac{ds}{dt} = v$.

Для рассматриваемой нами задачи (1)–(4) вводим независимые переменные $\xi_1 = \frac{x}{s}$ в α -фазе и $\xi_2 = \frac{x-s}{l-s}$ в β -фазе, в итоге получим задачу в новых переменных:

$$s^2 \cdot \frac{\partial C}{\partial t} = D^\alpha \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial \xi_1^2} + \frac{\partial C}{\partial \xi_1} \cdot s \cdot \xi_1 \cdot v, \quad 0 \leq \xi_1 \leq 1, \quad (10)$$

$$(l-s)^2 \cdot \frac{\partial C}{\partial t} = D^\beta \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial \xi_2^2} + \frac{\partial C}{\partial \xi_2} \cdot (l-s) \cdot (1-\xi_2) \cdot v, \quad 0 \leq \xi_2 \leq 1. \quad (11)$$

Уравнение Стефана, определяющее закон движения межфазных границ, в новых переменных будет иметь вид:

$$(C^\beta - C^\alpha) \cdot v = -D^\beta \frac{1}{l-s} \cdot \frac{\partial C}{\partial \xi_2} \Big|_{\xi_2=0} + D^\alpha \frac{1}{s} \cdot \frac{\partial C}{\partial \xi_1} \Big|_{\xi_1=1}. \quad (12)$$

Граничные условия:

$$\frac{1}{s} \cdot \frac{\partial C}{\partial \xi_1} \Big|_{\xi_1=0} = 0, \quad \frac{1}{l-s} \cdot \frac{\partial C}{\partial \xi_2} \Big|_{\xi_2=1} = 0. \quad (13)$$

Для полученной задачи строим явную конечно-разностную схему на фиксированной пространственно-временной сетке. Уравнения (10) и (11) аппроксимируются на равномерной сетке $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2$:

$$\Omega_1 = \{\xi_1 \mid \xi_1 = \xi_i \cdot h, i = \overline{0, N}, N \cdot h = 1\}, \quad (14)$$

$$\Omega_2 = \{\xi_2 \mid \xi_2 = \xi_i \cdot h, i = \overline{N+1, 2N+1}, N \cdot h = 1\}. \quad (15)$$

Распределение концентрации в узлах сетки на новом $(j+1)$ -ом временном слое определим следующим конечно-разностным уравнением:

$$s^2 \cdot \frac{C_i^{j+1} - C_i^j}{k} = D^\alpha \frac{C_{i-1}^j - 2C_i^j + C_{i+1}^j}{h^2} + \frac{C_{i+1}^j - C_{i-1}^j}{2h} \cdot s \cdot \xi_1 \cdot v, \quad i = \overline{1, N-1}, \quad (16)$$

$$(l-s)^2 \cdot \frac{C_i^{j+1} - C_i^j}{k} = D^\beta \frac{C_{i-1}^j - 2C_i^j + C_{i+1}^j}{h^2} + \frac{C_{i+1}^j - C_{i-1}^j}{2h} \cdot (l-s) \cdot (1-\xi_2) \cdot v, \quad i = N+2, 2N, \quad (17)$$

где h – шаг по пространству, k – шаг по времени. При этом считаем, что межфазная граница s проходит через N и $N+1$ узлы расчетной сетки.

Скорость движения межфазной границы определим следующим конечно-разностным уравнением, полученным из уравнения Стефана:

$$v = \frac{1}{(C^\beta - C^\alpha)} \cdot \left[-D^\beta \frac{1}{l-s} \cdot \frac{-3C^\beta + 4C_{N+2}^j - C_{N+3}^j}{2h} + D^\alpha \frac{1}{s} \cdot \frac{3C^\alpha - 4C_{N-1}^j + C_{N-2}^j}{2h} \right]. \quad (18)$$

С другой стороны, $v \approx \frac{s^{j+1} - s^j}{k}$, откуда в явном виде можно выразить новое положение границы s^{j+1} .

Конечно-разностная аппроксимация граничных условий (13) имеет вид:

$$C_0^{j+1} = C_2^{j+1}, \quad C_{2N+1}^{j+1} = C_{2N-1}^{j+1}. \quad (19)$$

Таким образом, данная численная схема имеет порядок аппроксимации $O(k + h^2)$.

Общая схема использования метода выпрямления фронтов для решения задачи (1)–(4) состоит в выполнении следующих шагов:

Шаг 1. Исходную задачу записать в новых переменных, используя замену переменных Ландау.

Шаг 2. Для полученной задачи построить конечно-разностную схему на фиксированной расчетной сетке.

Шаг 3. Реализовать программу по алгоритму:

1. Провести инициализацию переменных:
 - задать k – шаг по времени, N – количество узлов сетки по пространству;
 - задать физические параметры задачи: $C(x,0)$, C^α , C^β , D^α , D^β , s^0 , l .
2. Пока $t < t_{end}$ выполнять:
 - 2.1. вычислить скорость движения границы v из уравнения баланса потоков (18),
 - 2.2. вычислить значения концентрации C_i^{j+1} в каждой фазе согласно уравнениям (16)–(17),
 - 2.3. вычислить новое положение границы по формуле $s^{j+1} = s^j + v \cdot k$.

Заметим, что для вычисления истинного положения границы и построения концентрационного профиля необходимо вернуться к старым переменным по формулам: $x = \xi_1 \cdot s$ в α -фазе и $x = \xi_2 \cdot (l-s) + s$ в β -фазе. Эту процедуру можно выполнять как на каждом временном шаге, так и после окончания вычислений.

4.2. Метод ловли фронта в узел сетки

Идея метода ловли фронта в узел пространственной сетки (variable time stepping) строится на предположении о том, что межфазная граница сдвинулась точно в следующий узел пространственной сетки за некоторый временной шаг, подлежащий определению. Описание данного метода представлено в работах [1–2, 12, 15].

Для рассматриваемой нами задачи (1)–(4) вводим равномерную сетку по пространству

$$\Omega_h = \{x \mid x = x_i \cdot h, i = \overline{0, N}, N \cdot h = l\} \quad (20)$$

и неравномерную сетку по времени

$$\Omega_\tau = \{t \mid t^{j+1} = t^j + \tau^{j+1}, j = \overline{0, M}, t^0 = 0, t^M = t_{end}\}, \quad (21)$$

где τ – переменный шаг по времени.

Для уравнений (1)–(2) строим неявную конечно-разностную схему, полагая, что граница находится в p -ом узле сетки по пространству. Тогда:

$$\frac{C_i^{j+1} - C_i^j}{\tau^{j+1}} = D^\alpha \cdot \frac{C_{i-1}^{j+1} - 2C_i^{j+1} + C_{i+1}^{j+1}}{h^2}, \quad i < p, \quad (22)$$

$$\frac{C_i^{j+1} - C_i^j}{\tau^{j+1}} = D^\beta \cdot \frac{C_{i-1}^{j+1} - 2C_i^{j+1} + C_{i+1}^{j+1}}{h^2}, \quad i > p. \quad (23)$$

Для определения шага по времени τ^{j+1} воспользуемся условием Стефана. Если граница сдвинулась ровно на один узел по пространству, то

$$v \approx \frac{s^{j+1} - s^j}{\tau^{j+1}} = \frac{h}{\tau^{j+1}}. \quad (24)$$

Подставив данное выражение для скорости движения границы в условие Стефана, получим:

$$(C^\beta - C^\alpha) \cdot \frac{h}{\tau^{j+1}} = -D^\beta \cdot \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{s(t)+0} + D^\alpha \cdot \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{s(t)-0}. \quad (25)$$

Перейдем к конечно-разностному уравнению и выразим искомый шаг по времени

$$\tau^{j+1} = \frac{(C^\beta - C^\alpha) \cdot 2h^2}{-D^\beta \cdot (-3C^\beta + 4C_{p+1}^{j+1} - C_{p+2}^{j+1}) + D^\alpha \cdot (3C^\alpha - 4C_{p-1}^{j+1} + C_{p-2}^{j+1})}. \quad (26)$$

Таким образом, при переходе на новый временной слой неизвестными будут выступать новые значения концентрации C_i^{j+1} и шаг по времени τ^{j+1} . При этом на каждом временном слое будем использовать итерационную процедуру уточнения шага τ^{j+1} , чтобы определить его с заданной точностью ε . Поскольку, как видно из уравнения (26), τ^{j+1} зависит от значений концентрации слева и справа от границы, проходящей через узел p , то новый концентрационный профиль позволяет уточнить значение шага τ^{j+1} .

Общая схема использования метода ловли фронта в узел пространственной сетки для решения задачи (1)–(4) состоит в выполнении следующих шагов:

Шаг 1. Для исходной задачи построить неявную конечно-разностную схему с переменным шагом по времени.

Шаг 2. Реализовать программу по алгоритму:

1. Провести инициализацию переменных:

- задать N – количество узлов сетки по пространству, τ^0 – начальный шаг по времени, ε – точность вычисления шага τ^{j+1} по времени;

- задать физические параметры задачи: $C(x, 0)$, C^α , C^β , D^α , D^β , s^0 , l .

2. Определить узел p , в котором находится граница в начальный момент времени.

3. Пока $t < t_{end}$ выполнять:

3.1. значение p увеличиваем на 1;

- 3.2. считая $\tau^{j+1} = \tau^j$, методом прогонки решить СЛАУ и найти распределение концентрации C_i^{j+1} по формулам (22) и (23);
- 3.3. вычислить новое τ^{j+1} по формуле (26);
- 3.4. уточнить шаг τ^{j+1} :
Пока не достигнута заданная точность ε :
 - 3.4.1. используя вычисленное τ^{j+1} , методом прогонки решить СЛАУ и найти распределение концентрации C_i^{j+1} по формулам (22) и (23);
 - 3.4.2. вычислить новое τ^{j+1} по формуле (26);
- 3.5. вычислить текущее общее время $t^{j+1} = t^j + \tau^{j+1}$;
- 3.6. вычислить положение границы $s^{j+1} = s^j + h$.

4.3. Метод фиксированной сетки

Идея метода фиксированной сетки (fixed grid method) состоит в том, что расчеты будут проводиться на заданной равномерной пространственно-временной сетке. При этом в любой момент времени известно, что граница находится между p и $(p+1)$ -м узлами сетки, расстояние от узла p до границы равно b ($0 \leq b \leq 1$), как показано на рис. 2. Описание данного метода приводится в работах [2, 11, 15, 17, 30].

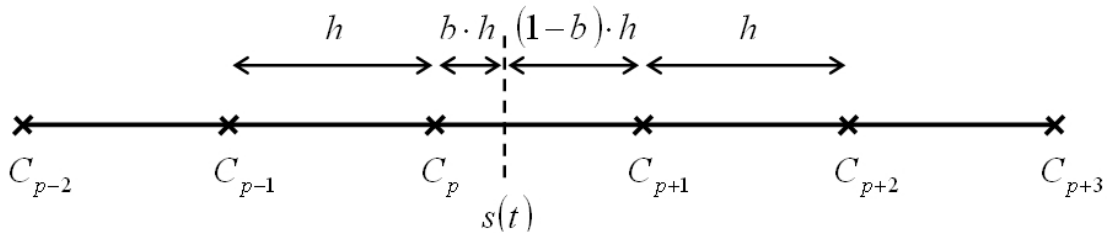


Рис. 2. Расположение узлов сетки в методе фиксированной сетки

Для рассматриваемой нами задачи значение концентрации во всех узлах сетки кроме p и $(p+1)$ -го находят по явной конечно-разностной схеме:

$$\frac{C_i^{j+1} - C_i^j}{k} = D^\alpha \cdot \frac{C_{i-1}^j - 2C_i^j + C_{i+1}^j}{h^2}, \quad i < p, \quad (27)$$

$$\frac{C_i^{j+1} - C_i^j}{k} = D^\beta \cdot \frac{C_{i-1}^j - 2C_i^j + C_{i+1}^j}{h^2}, \quad i > p+1. \quad (28)$$

Значения концентрации в узлах, возле границы определяется с помощью интерполяционного многочлена Лагранжа второй степени, который для функции $f(x)$ с тремя узловыми точками a_1 , a_2 и a_3 выглядит следующим образом [15]:

$$f(x) = f(a_1) \frac{(x-a_2)(x-a_3)}{(a_1-a_2)(a_1-a_3)} + f(a_2) \frac{(x-a_1)(x-a_3)}{(a_2-a_1)(a_2-a_3)} + f(a_3) \frac{(x-a_1)(x-a_2)}{(a_3-a_1)(a_3-a_2)}. \quad (29)$$

В нашем примере точки a_1 , a_2 и a_3 для каждой из фаз выберем, как показано на рис. 3 и подставим в формулу (29).

Далее получив выражения для концентрации $C(x)$, находим:

$$\left. \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right|_p = \frac{2}{h^2} \left(C_{p-1} \frac{1}{1+b} - C_p \frac{1}{b} + C^\alpha \frac{1}{b(1+b)} \right), \quad (30)$$

$$\left. \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right|_{p+1} = \frac{2}{h^2} \left(C^\beta \frac{1}{(1-b)(2-b)} - C_{p+1} \frac{1}{1-b} - C_{p+2} \frac{1}{2-b} \right). \quad (31)$$

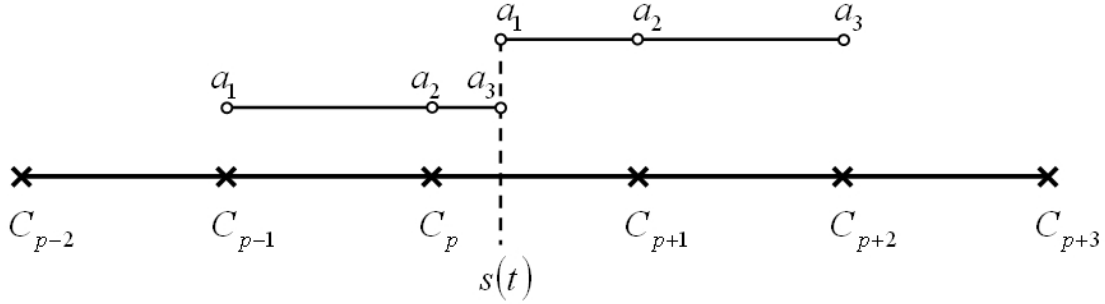


Рис. 3. Расположение узлов сетки и узловых точек для интерполяции

Теперь запишем уравнения (1)–(2) в конечно-разностной форме, применяя формулы (30)–(31):

$$\frac{C_p^{j+1} - C_p^j}{k} = D^\alpha \cdot \frac{2}{h^2} \left(C_{p-1}^j \frac{1}{1+b^j} - C_p^j \frac{1}{b^j} + C^\alpha \frac{1}{b^j(1+b^j)} \right), \quad (32)$$

$$\frac{C_{p+1}^{j+1} - C_{p+1}^j}{k} = D^\beta \cdot \frac{2}{h^2} \left(C^\beta \frac{1}{(1-b^j)(2-b^j)} - C_{p+1}^j \frac{1}{1-b^j} - C_{p+2}^j \frac{1}{2-b^j} \right). \quad (33)$$

Из данных уравнений можем в явном виде выразить искомые значения концентрации, а именно C_p^{j+1} и C_{p+1}^{j+1} .

Однако такая схема может работать некорректно при b^j близком к нулю в первом уравнении и b^j близком к единице во втором уравнении. Для решения возникшей проблемы в работе [11] предлагают использовать альтернативные выражения, определяющие значение концентрации в узлах возле границы. Получить их можно, если в интерполяционном многочлене (29) в качестве узловых выбрать точки $a_1 = C_{p-2}$, $a_2 = C_{p-1}$ и $a_3 = C^\alpha$. Далее по полученному

приближению для концентрации определяют $\left. \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right|_{p-1}$, которая с другой стороны

может быть определена конечно-разностным уравнением. Приравнявая данные соотношения, получают:

$$\frac{2}{h^2} \left(\frac{C_{p-2}}{2+b} + \frac{C_{p-1}}{1+b} + \frac{C^\alpha}{(1+b)(2+b)} \right) = \frac{C_{p-2} - 2C_{p-1} + C_p}{h^2}. \quad (34)$$

Из уравнения (34) выражают C_p , которое рекомендуется использовать при $b < 0.5$:

$$C_p = -\frac{b \cdot C_{p-2}}{2+b} + \frac{2b \cdot C_{p-1}}{1+b} + \frac{2 \cdot C^\alpha}{(1+b)(2+b)}. \quad (35)$$

Аналогичным образом, если в (29) подставить точки $a_1 = C^\beta$, $a_2 = C_{p+2}$ и $a_3 = C_{p+3}$, можно выразить $\left. \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right|_{p+1}$ и приравнять к конечно-разностному соотношению для второй производной:

$$\frac{2}{h^2} \left(\frac{C^\beta}{(2-b)(3-b)} - \frac{C_{p+2}}{2-b} + \frac{C_{p+3}}{3-b} \right) = \frac{C_{p+1} - 2C_{p+2} + C_{p+3}}{h^2}. \quad (36)$$

Теперь, из уравнения (36) получают C_{p+1} , которое необходимо использовать при $b \geq 0.5$:

$$C_{p+1} = \frac{2C^\beta}{(2-b)(3-b)} + \frac{2(1-b)C_{p+2}}{2-b} - \frac{(1-b)C_{p+3}}{3-b}. \quad (37)$$

Учитывая особенности данной вычислительной схемы и продолжая следовать работе [11] уравнение, определяющее скорость движения межфазной границы (3) выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} (C^\beta - C^\alpha) \cdot \frac{s^{j+1} - s^j}{k} = & -\frac{D^\beta}{h} \left(C^\beta \frac{2b^j - 3}{(1-b^j)(2-b^j)} + C_{p+1}^j \frac{2-b^j}{1-b^j} - C_{p+2}^j \frac{1-b^j}{2-b^j} \right) + \\ & + \frac{D^\alpha}{h} \left(C_{p-2}^j \frac{1+b^j}{2+b^j} - C_{p-1}^j \frac{2+b^j}{1+b^j} + C^\alpha \frac{3+2b^j}{(1+b^j)(2+b^j)} \right) \text{ при } b^j < 0.5, \end{aligned} \quad (38)$$

$$\begin{aligned} (C^\beta - C^\alpha) \cdot \frac{s^{j+1} - s^j}{k} = & -\frac{D^\beta}{h} \left(C^\beta \frac{2b^j - 5}{(2-b^j)(3-b^j)} + C_{p+2}^j \frac{3-b^j}{2-b^j} - C_{p+3}^j \frac{2-b^j}{3-b^j} \right) + \\ & + \frac{D^\alpha}{h} \left(C_{p-1}^j \frac{b^j}{1+b^j} - C_p^j \frac{1+b^j}{b^j} + C^\alpha \frac{1+2b^j}{b^j(1+b^j)} \right) \text{ при } b^j \geq 0.5. \end{aligned} \quad (39)$$

Положение границы $s^{j+1} = (p + b^{j+1}) \cdot h$ (см. рис. 2), тогда

$$b^{j+1} = \frac{s^{j+1}}{h} - p. \quad (40)$$

Общая схема использования метода фиксированной сетки для решения задачи (1)–(4) состоит в выполнении следующих шагов:

Шаг 1. Для исходной задачи построить явную конечно-разностную схему.

Шаг 2. Реализовать программу по алгоритму:

1. Провести инициализацию переменных:

- задать k – шаг по времени, N – количество узлов сетки по пространству;

- задать физические параметры задачи: $C(x, 0)$, C^α , C^β , D^α , D^β , s^0 , l .

2. Определить p и $(p+1)$ -й узлы, между которыми находится граница, используя соотношение $p \cdot h < s^0 < (p+1) \cdot h$.

3. Вычислить $b^0 = \frac{s^0}{h} - p$.

4. Пока $t < t_{\text{end}}$ выполнять:

4.1. вычислить значения концентрации C_i^{j+1} в каждой фазе для узлов $i < p$ согласно уравнению (27) и для узлов $i > p+1$ согласно уравнению (28),

- 4.2. вычислить значение концентрации C_p^{j+1} при $b^j < 0.5$ по формуле (35), а при $b^j \geq 0.5$ по формуле (32),
- 4.3. вычислить значение концентрации C_{p+1}^{j+1} при $b^j < 0.5$ по формуле (33), а при $b^j \geq 0.5$ по формуле (37),
- 4.4. вычислить новое положение межфазной границы s^{j+1} при $b^j < 0.5$ по формуле (38), а при $b^j \geq 0.5$ по формуле (39),
- 4.5. определить узлы p и $(p+1)$ -й, между которыми находится граница, используя соотношение $p \cdot h < s^{j+1} < (p+1) \cdot h$;
- 4.6. определить расстояние от узла p до границы по формуле (40).

5. Вычислительный эксперимент и анализ полученных результатов

При проведении численного моделирования целесообразно перейти к безразмерным переменным. В качестве характерных величин для масштабирования были выбраны $l_0 = 10^{-6}$ (м) и $D_0 = 10^{-14}$ (м²·с⁻¹).

Введем безразмерные переменные $\bar{x} = \frac{x}{l_0}$, $\bar{t} = \frac{D_0 \cdot t}{l_0^2}$ и параметры $\bar{D}^\alpha = \frac{D^\alpha}{D_0}$,

$\bar{D}^\beta = \frac{D^\beta}{D_0}$. Из этих соотношений выразим размерные величины и подставим их в

уравнения (1)–(4), в результате получим постановку задачи в безразмерном виде. Опуская черту над безразмерными переменными, вернемся к начальному виду математической модели (1)–(4).

При численном моделировании расчеты проводились для образца длиной 1 мкм. Использовались физические параметры, приведенные в таблице 1.

Таблица 1

Безразмерные физические параметры модельной системы

D^α	D^β	C^α	C^β	s^0
20	1	0.6	0.4	0.4

Начальное распределение концентрации в системе выбрано следующим:

$$C(x,0) = \begin{cases} 0.8, & x < s^0, \\ 0.36, & x > s^0. \end{cases} \quad (41)$$

При заданных параметрах для данной системы со временем наблюдается рост α -фазы, т. е. межфазная граница s смещается в сторону β -фазы, подчиняясь параболическому закону.

Аналитическое решение, отображающее движение межфазной границы на начальной стадии диффузионного процесса, получим из уравнений (6)–(7). Для численного решения рассматриваемой модельной задачи нами были реализованы метод выпрямления фронтов (FFM), метод ловли фронта в узел пространственной сетки (VTS) и метод фиксированной сетки (FGM). Проведем сравнение численного моделирования движения межфазной границы, полученного данными методами с имеющимся точным решением.

При расчетах методом выпрямления фронтов и методом фиксированной сетки полагали $N = 100$ и $k = 10^{-8}$, а в методе ловли фронта в узел пространственной сетки $N = 100\,000$. В последнем методе такое N выбрано, чтобы более точно отслеживать положение межфазной границы, а именно с точностью до 5 значащих цифр, что в целом значительно увеличивает время работы данного алгоритма. Результаты вычислительных экспериментов, приведенные на рис. 4, показали хорошее совпадение с аналитическим решением для всех рассматриваемых численных методов, что говорит о достоверности полученных результатов.

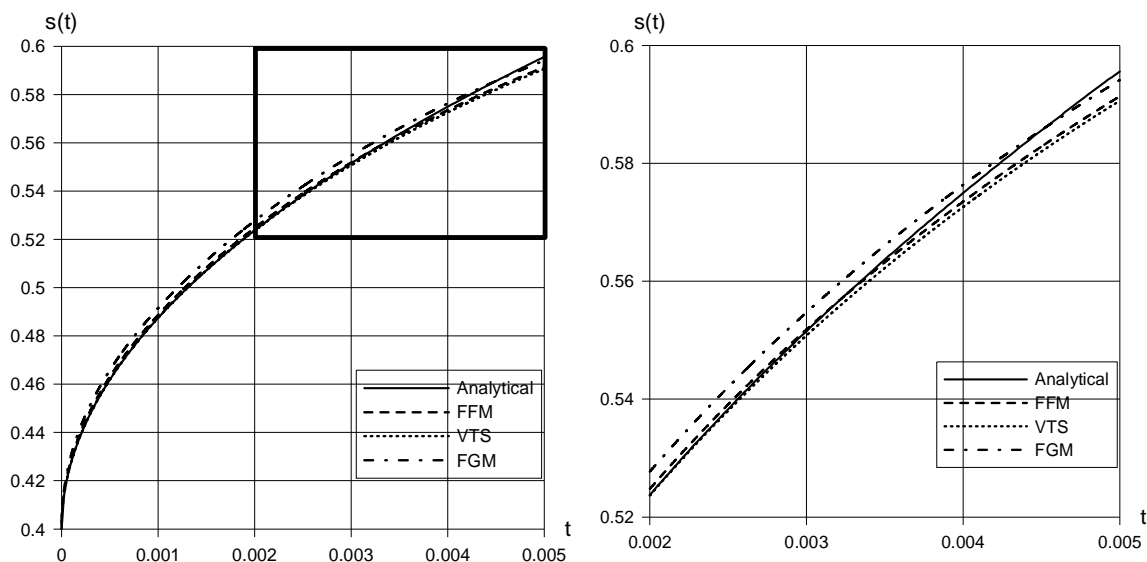


Рис. 4. Зависимость положения межфазной границы от времени

Однако наименьшее совпадение с точным решением было получено методом фиксированной сетки. Для более детальной оценки точности методов была вычислена относительная ошибка, соответствующие данные приводятся в таблице 2.

Таблица 2

Время	Аналитическое решение	s(t)					
		FFM	Ошибка %	VTS	Ошибка %	FGM	Ошибка %
0,0005	0,46186	0,46308	0,26415	0,46191	0,01039	0,46575	0,84224
0,0010	0,48749	0,48869	0,24585	0,48754	0,01097	0,49153	0,82946
0,0015	0,50715	0,50831	0,22900	0,50719	0,00815	0,51121	0,80121
0,0020	0,52372	0,52477	0,19980	0,52368	0,00852	0,52771	0,76021
0,0025	0,53833	0,53910	0,14391	0,53804	0,05356	0,54202	0,68614
0,0030	0,55153	0,55181	0,05130	0,55080	0,13255	0,55472	0,57765
0,0035	0,56367	0,56321	0,08166	0,56225	0,25232	0,56609	0,42910
0,0040	0,57497	0,57351	0,25480	0,57261	0,41098	0,57635	0,23983
0,0045	0,58559	0,58286	0,46601	0,58203	0,60741	0,58566	0,01214
0,0050	0,59563	0,59139	0,71199	0,59063	0,83875	0,59414	0,24978
Средняя ошибка, %		0,26484		0,23336		0,54278	

Следует заметить, что в методе фиксированной сетки нужно использовать очень маленький шаг по времени, иначе, не смотря на устойчивость численной схемы, в процессе расчетов межфазная граница может заиклиться между двумя соседними узлами. Также установлено, что можно улучшить точность метода, если, например, в пунктах 4.2–4.3 данного алгоритма использовать формулу (35) при $b < 0.01$, а не при $b < 0.5$, и формулу (37) – при $b \geq 0.99$, а не при $b \geq 0.5$. Аналогично и положение межфазной границы необходимо будет вычислять по-разному в зависимости от величины b на промежутках $b < 0.01$, $0.01 \leq b \leq 0.99$ и $b > 0.99$.

6. Выводы

Проведенные вычислительные эксперименты продемонстрировали хорошее совпадение полученных численных решений с существующим аналитическим решением для всех трех рассмотренных методов. При этом в методе выпрямления фронтов и методе фиксированной сетки использовалась явная конечно-разностная схема, однако могут использоваться также и неявные схемы необходимого порядка точности. В методе ловли фронта в узел пространственной сетки для более точного определения положения межфазной границы необходимо уменьшать шаг по пространству, что в итоге приводит к значительному увеличению времени, необходимого для расчетов.

Преимуществом методов выпрямления фронтов [27, 31] и фиксированной сетки является их применимость для решения многофазных задач. Метод выпрямления фронтов также предполагает обобщение на двумерный случай. В то время как метод ловли фронта в узел пространственной сетки используется для одномерных задач с одной подвижной границей, что существенно сужает область его применимости.

В целом, из рассмотренных численных методов, наиболее простым в реализации, по нашему мнению, является метод выпрямления фронтов.

Дальнейшие исследования предполагают применение численных методов с явным выделением межфазных границ для решения многофазных задач, описывающих процесс взаимной диффузии в бинарных металлических системах.

Литература:

1. Рубинштейн Л.И. Проблема Стефана / Л.И. Рубинштейн – Рига: Звайгзне, 1967. – 458 с.
2. Crank J. Free and Moving Boundary Problems / J. Crank – Oxford.: Clarendon Press, 1984. – 425 p.
3. Alexiades V. Mathematical Modeling of Melting and Freezing Processes / V. Alexiades, A.D. Solomon. – Washington DC: Hemisphere Publ. Co, 1993. – 323 p.
4. Данилюк И.И. О задаче Стефана / И.И. Данилюк // Успехи мат. наук. – 1985. – Т. 40. – №5. – С. 133-185.
5. Гусейнов Ш.Э. Метод сведения обобщенной задачи Стефана к нелинейному интегродифференциальному уравнению типа Вольтера / Ш.Э. Гусейнов // Computer Modeling and New Technologies. – 2006. – Vol.10. – №2. – P. 57-67.
6. Tarzia D.A. A bibliography on moving-free boundary problems for the heat-diffusion equation. The Stefan and related problems. / D.A. Tarzia. – MAT. – Serie A. – №2, 2000. – 297 p.
7. Мейрманов А.М. Задача Стефана: монография / А.М. Мейрманов – Новосибирск: Наука. Сибирское отделение, 1986. – 239 с.
8. Gupta S.C. The classical Stefan Problem: Basic Concepts, Modelling and Analysis / S.C. Gupta. – Elsevier, 2003. – 385 p.
9. Вайнберг А.М. Математическое моделирование процессов переноса. Решение нелинейных краевых задач / А.М. Вайнберг – Москва-Иерусалим, 2009. – 210 с.

10. Тихонов А.Н. Уравнения математической физики : [учеб. пособие для ун-тов] / А.Н. Тихонов, А.А. Самарский. – [6-е изд., испр. и доп.]. – М.: Изд-во Моск. ун-та, 1999. – 798 с.
11. Zhou Y. Kinetic modelling of diffusion-controlled, two-phase moving interface problems / Y. Zhou, T.H. North // *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* – 1993. – Vol. 1. – № 4. – P. 505–516.
12. Самарский А.А. Вычислительная теплопередача / Самарский А.А., Вабищевич П.Н. – М.: Едиториал УРСС, 2003. – 784 с.
13. Вабищевич П.Н. Численные методы решения задач со свободной границей / Вабищевич П.Н. – М.: Изд-во Моск. ун-та, 1987. – 164 с.
14. Будак Б.М. Разностный метод со сглаживанием коэффициентов для решения задач Стефана / Будак Б.М., Соловьева Е.Н., Успенский А.Б. // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* – 1965. – Т. 5. – № 5. – С. 828-840.
15. Javierre-Perez E. Literature Study: Numerical methods for solving Stefan problems / E. Javierre-Perez. – Delft: Delft University of Technology, Report 03-16, 2003. – 94 p.
16. Бучко Н.А. Энтальпийный метод численного решения задач теплопроводности в промерзающих или протаивающих грунтах / Н.А. Бучко // *Вестн. Междунар. акад. холода.* – 2009. – №2. – С. 25-29.
17. Hu H. Mathematical modelling of solidification and melting: a review / Henry Hu, Stavros A. Argyropoulos // *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* – 1996. – №4. – P. 371-396.
18. Chen S. A simple level set method for solving Stefan problems / S. Chen, B. Merriman, S. Osher, P. Smereka // *J.Comput.Phys.* – 1997. – Vol. 135. – P. 8-29.
19. Javierre E. The Level Set Method for Solid-Solid Phase Transformations / E. Javierre, C. Vuik, F. Vermolen, A. Segal and S. van der Zwaag // *Numerical Mathematics and Advanced Applications.* – 2006. – Part 18. – P. 712-719.
20. Javierre E. A level set method for particle dissolution in a binary alloy / E. Javierre, C. Vuik, F.J. Vermolen, A. Segal. – Delft: Delft University of Technology, Report 05-07, 2005. – 20 p.
21. Fabbri M. Phase-Field Solutions for the Classic One-Dimensional Two Phase Supercooled Solidification Problem / M. Fabbri // *Projecoes, Braganca Paulista – Sao Paulo.* – 2000. – V. 18. – P.11-20.
22. Мажукин В.И. Принципы построения динамически адаптирующихся к решению сеток в одномерных краевых задачах. / В.И. Мажукин, Л.Ю. Такоева // *Мат. Моделирование.* – 1990. – Т. 2. – № 3. – С. 101-118.
23. Королёва О.Н. Математическое моделирование лазерного плавления и испарения многослойных материалов / О.Н. Королёва, В.И. Мажукин // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* – 2006. – Т. 46. – № 5. – С. 887-901.
24. Бреславский П.В. Алгоритм численного решения гидродинамического варианта задачи Стефана при помощи динамически адаптирующихся сеток / П.В. Бреславский, В.И. Мажукин // *Математическое моделирование.* – 1991. – Т. 3. – № 10. – С. 104-115.
25. Mazhukin V. Solution of the multi-interface Stefan problem by the method of dynamic adaptation / V. Mazhukin, M. Chuiko // *Comput. Meth. Appl. Math* 2. – 2002. – P. 283-294.
26. Rincon M.A. The Stefan problem with moving boundary / M.A. Rincon, A. Scardua // *Boletim da Sociedade Paranaense de Matematica.* – 2008. – V. 26 (1-2). – P. 91-106.
27. Будак Б.М. Разностные схемы с выпрямлением фронтов для решения многофронтовых задач типа Стефана / Будак Б.М., Гольдман Н.Л., Успенский А.Б. // *ДАН СССР.* – 1966. – Т.167. – №4. – С. 735-738.
28. Caldwell J. Numerical methods for one-dimensional Stefan problems / J. Caldwell, Y.Y. Kwan // *Commun. Numer. Meth. Engng.* – 2004. – №20. – P. 535-545.
29. Illingworth T.C. Numerical modelling of transient liquid phase bonding and other diffusion controlled phase changes / T.C. Illingworth, I.O. Golosnoy, V. Gergely, T.W. Clyne // *Journal of Materials Science.* – 2005. – vol. 40. – № 9-10. – P. 2505-2511.
30. Lee B.-J. Numerical Treatment of Moving Interface in Diffusional Reactions / B.J. Lee, K.H. Oh // *Z. Metallkunde.* – 1996. – № 87. – P. 195-204.
31. Богатырёв А.О. Моделирование многофазной диффузии в бинарной металлической системе / А.О. Богатырёв, Н.А. Красношлык. // *Вісник Черкаського університету. Серія «Фізико-математичні науки»* – 2010. – Т. 185. – С. 80-91.

Прийнято до друку 06.11.2011

Анотація

Н.О. Красношлик, О.О. Богатирьев. Чисельне розв'язання задач з рухомими міжфазними границями

У даній роботі розглянуто фізичні задачі, що приводять до задач з рухомими границями, а також характерні особливості задач такого типу. Представлені існуючі методи розв'язання задачі Стефана з детальним описом методу випрямлення фронтів, методу ловлі фронту у вузол просторової сітки і методу фіксованої сітки. Для модельної двофазної задачі проведено порівняння результатів чисельного моделювання руху міжфазної границі представленими методами.

Ключові слова: задача Стефана, міжфазна границя, взаємна дифузія.

Summary

N.A. Krasnoshlyk, A.O. Bogatyrev. Numerical solution of moving boundary problems

In this work presents some physical problems that lead to problems with moving boundaries and characteristics of problems of this type. Existing methods for solving the Stefan problem with a detailed description of the front-fixing method, the variable time stepping method and the fixed grid method are presented. Compare of results the numerical simulation of the moving of interphase boundary for a model two-phase problem with presented methods are realized.

Keywords: Stefan problem, interphase boundary, interdiffusion.