Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
Высшего профессионального образования
«Санкт-Петербургский государственный университет»
Физический факультет
Образовательная программа «Прикладная физика и математика»

Отчёт по научно-исследовательской работе:

«Численное моделирование замерзания воды в ледниковой трещине»

Выполнил:
студент 4 курса группы 19.Б23-фз
Андреев М. М.

Научный руководитель:
к.ф.-м.н., доцент **Степанова М. М.**

Санкт-Петербург
2022 г.

Содержание

1 Введение

Задачи теплопроводности с фазовыми превращениями встречаются в различных областях науки и промышленности. Например, процессы кристаллизации и плавления в металлургии, сварка металлов, намерзание льда на различных поверхностях, таяние ледников.

Задачи фазового перехода включают в себя подвижную границу, что делает их решение значительно труднее решения аналогичных задач в областях со статичной границей, поэтому в большинстве случаев приходится прибегать к численным методам, среди которых: метод выпрямление фронта, метод сглаживающих коэффициентов, метод ловли фронта в узел сетки и другие.

В настоящей работе предполагается создать численную модель замерзания воды в ледниковой трещине и её программную реализацию на языке программирования Python.

2 Физическая модель

Для простоты вначале было предложено реализовать упрощенную модель с несколькими допущениями:

- Температура фазового перехода лёд-вода постоянна
- Плотность, теплоемкость, теплопроводность в пределах одной фазы постоянны и однородны
- Вода в начальный момент времени находится при температуре замерзания, поэтому задача является однофазной
- Не учитывается конвективный перенос
- Нет источников тепла

3 Математическая постановка задачи

Рассматривается однофазная двумерная задача Стефана. Пусть $u(x, y, t)$ – температурное поле в твердой фазе (лёд). Пусть также в начальный момент времени вода находилась при темпераутре фазового перехода $u_{p.t.}$, а лёд при некоторой заданной температуре $U < u_{p.t.}$.
Справедливо уравнение теплопроводности для льда:

$$c\rho\frac{\partial u}{\partial t} = k\Delta u, \tag{1}$$

для $(x, y) \in \Omega(t), \quad 0 < t < t_{max}$. С начальным условием:

$$u(x, y, 0) = u_0(x, y) = U, \tag{2}$$

и граничными условиями:

$$\begin{cases} u(x,y,t) = u_{p.t.}, \qquad (x,y) \in \gamma_1 \\ \\ u(x,y,t) = U. \qquad (x,y) \in \gamma_2. \end{cases} \tag{3}$$

Где γ_1 – подвижная часть границы, γ_2 – неподвижная. Также выполняется условие Стефана:

$$\lambda\rho\frac{\partial f(x,t)}{\partial t} = k\frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}}, \tag{4}$$

где $f(x,t) : y = f(x,t)$ – зависимость, описывающая границу фазового перехода. Соответственно, $\frac{\partial f(x,t)}{\partial t}$ – скорость изменения границы. $\mathbf{n}$ – внешняя нормаль к гранцие фазового перехода. λ – удельная теплота плавления льда.
Так как $\frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} = \nabla u \cdot \mathbf{n}$, то (4) можно записать следующим образом:

$$\lambda\rho\frac{\partial f(x,t)}{\partial t} = k\frac{\partial u}{\partial y} - k\frac{\partial f}{\partial x}\frac{\partial u}{\partial x}. \tag{5}$$

На границе $y = f(x,t)$ выполняется:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{\partial f}{\partial x}\frac{\partial u}{\partial y}, \tag{6}$$

поэтому в итоге условие Стефана запишется следующим образом:

$$\lambda\rho\frac{\partial f(x,t)}{\partial t} = \left[1 + \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)^2\right] k\frac{\partial u}{\partial y}. \tag{7}$$

4 Выпрямление фронта

Можно произвести выпрямление фронта по переменной y, используя следующее преобразование координат (Самарский А.А., Вычислительная теплопередача, стр. 350):

$$\begin{cases} \tilde{y} = \dfrac{y}{f(x,t)}, \\ \\ \tilde{x} = \dfrac{x}{x_0}. \end{cases}$$

Где x_0 – характерный масштаб по оси Ox (например, глубина щели). Пусть $u(x,y,t) = v(\tilde{x},\tilde{y},t)$. Тогда в новых координатах уравнение теплопроводности для воды перепишется следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{c\rho x_0^2}{k}\left(\frac{\partial v}{\partial t} - \frac{\tilde{y}}{f}\frac{\partial f}{\partial t}\frac{\partial v}{\partial \tilde{y}}\right) = \frac{\partial^2 v}{\partial \tilde{x}^2} - \frac{2\tilde{y}}{f}\frac{\partial f}{\partial \tilde{x}}\frac{\partial^2 v}{\partial \tilde{x}\partial \tilde{y}} + \\ + \left(\frac{2\tilde{y}}{f^2}\left(\frac{\partial f}{\partial \tilde{x}}\right)^2 - \frac{\tilde{y}}{f}\frac{\partial^2 f}{\partial \tilde{x}^2}\right)\frac{\partial v}{\partial \tilde{y}} + \left(\left(\frac{x_0}{f}\right)^2 + \left(\frac{\tilde{y}}{f}\frac{\partial f}{\partial \tilde{x}}\right)^2\right)\frac{\partial^2 v}{\partial \tilde{y}^2}. \end{aligned} \tag{8}$$

Масштабируем теперь время и температуру:

$$\begin{cases} \tilde{t} = \dfrac{t}{t_0}, \\ \\ \tilde{v} = \dfrac{v}{u_{p.t.}}. \end{cases}$$

Исходя из вида уравнения (5), t_0 можно выбрать равным $\frac{c_w \rho_w x_0^2}{k_w}$. Произведя замену и отбросив тильды, получим:

$$\begin{aligned} \frac{\partial v}{\partial t} = \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} - \left(\frac{2y}{f}\frac{\partial f}{\partial x}\right)\frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y} + \frac{y}{f}\left(2\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)^2 + \frac{\partial f}{\partial t} - \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)\frac{\partial v}{\partial y} + \\ + \left(\left(\frac{x_0}{f}\right)^2 + \left(\frac{y}{f}\frac{\partial f}{\partial x}\right)^2\right)\frac{\partial^2 v}{\partial y^2}, \end{aligned} \tag{9}$$

Условие Стефана (4) перепишется следующим образом:

$$\gamma f \frac{\partial f}{\partial t} = \left[1 + \left(\frac{1}{x_0}\frac{\partial f}{\partial x}\right)^2\right] \left.\frac{\partial u}{\partial y}\right|_{y=1}, \tag{10}$$

Где $\gamma = \frac{\lambda \rho_w u_0}{k t_0}$. Решать уравнение (9) с условием (10) и соответсвующими граничными и начальными условиями будем численно с помощью метода предиктор-корректор + прогонки.

5 Разностная схема

Разобъём равномерную сетку:

$$\begin{aligned} x_i &= i\Delta x, \quad i = 0, 1, ..., M. \\ y_j &= j\Delta y, \quad j = 0, 1, ..., M. \\ t_n &= n\Delta t, \quad n = 0, 1, ..., N. \end{aligned} \tag{11}$$

Перепишем условие Стефана в разностной форме:

$$\begin{aligned} &\gamma {f_i}^n \frac{f_i^{n+1} - f_i^n}{\Delta t} = \\ &\left[1 + \left(\frac{1}{x_0}\frac{f_{i+1}^n - f_{i-1}^n}{2\Delta x}\right)^2\right] \frac{3v_{i,N}^{n+1} - 4v_{i,N-1}^{n+1} + v_{i,N-2}^{n+1}}{2\Delta y} + \\ &+ O((\Delta x)^2, (\Delta y)^2, \Delta t) \end{aligned} \tag{12}$$

Из (12) получаем:

$$
\begin{gathered}
f_i^{n+1} = f_i^n + \\
\left[1 + \left(\frac{1}{x_0}\frac{f_{i+1}^n - f_{i-1}^n}{2\Delta x}\right)^2\right] * \\
\frac{\Delta t}{2\gamma f_i^n \Delta y}\left(3v_{i,N}^{n+1} - 4v_{i,N-1}^{n+1} + v_{i,N-2}^{n+1}\right)
\end{gathered} \tag{13}
$$

Для решения уравнения (9) воспользуемся методом предиктор-корректор. Интервал Δt разделим на два подынтервала $\Delta t/2$. Первый подынтервал $\Delta t/2$ поделим также на шага. На первом шаге учитывается только производная второго порядка по координате x:

$$
\frac{v_{i,j}^{n+1/4} - v_{i,j}^n}{\Delta t/2} = \frac{v_{i+1,j}^{n+1/4} - 2v_{i,j}^{n+1/4} + v_{i-1,j}^{n+1/4}}{(\Delta x)^2} \tag{14}
$$

Прогоночное уравнение:

$$
a_i v_{i+1,j}^{n+1/4} + b_i v_{i,j}^{n+1/4} + c_i v_{i-1,j}^{n+1/4} = v_{i,j}^n \tag{15}
$$

$$
a_i = b_i = -\frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2}, \qquad b_i = 1 + \frac{\Delta t}{\Delta x}
$$

Далее имеем:

$$
v_{i-1,j}^{n+1/4} = \alpha_{i-1} v_{i,j}^{n+1/4} + \beta_{i-1} \tag{16}
$$

$$
\alpha_i = -\frac{a_i}{b_i + c_i\alpha_{i-1}}, \qquad \beta_i = \frac{v_{i,j}^n - c_i\beta_{i-1}}{b_i + c_i\alpha_{i-1}}.
$$

Из условия на левой границе: $\alpha_1 = 0$, $\beta_1 = U/u_{p.t.}$, из условия на правой границе: $v_{N,j}^{n+1/4} = U/u_{p.t.}$

На втором шаге учитываются первая и вторая производные по координате y:

$$
\frac{v_{i,j}^{n+1/2} - v_{i,j}^{n+1/4}}{\Delta t/2} = \sigma_{i,j}\frac{v_{i,j+1}^{n+1/2} - 2v_{i,j}^{n+1/2} + v_{i,j-1}^{n+1/2}}{(\Delta y)^2} + \nu_{i,j}\frac{v_{i,j+1}^{n+1/2} - v_{i,j-1}^{n+1/2}}{2\Delta y}, \tag{17}
$$

где

$$
\sigma_{i,j} = \left(\frac{x_0}{f_i^n}\right)^2 + \left(\frac{j\Delta y}{f_i^n}\frac{f_{i+1}^n - f_{i-1}^n}{2\Delta x}\right)^2
$$

$$
\nu_{i,j} = \frac{j\Delta y}{f_i^n}\left(\frac{f_i^{n+1} - f_i^n}{\Delta t} + 2\left(\frac{f_{i+1}^n - f_{i-1}^n}{2\Delta x}\right)^2 - \frac{f_{i+1}^n - 2f_i^n + f_{i-1}^n}{(\Delta x)^2}\right).
$$

Прогоночные коэффициенты:

$$
\tilde{a}_j = -\frac{\sigma_{i,j}\Delta t}{2(\Delta y)^2} - \frac{\nu_{i,j}\Delta t}{4\Delta y},
$$

$$\tilde{b}_j = 1 + \frac{\sigma_{i,j}\Delta t}{(\Delta y)^2},$$

$$\tilde{c}_j = -\frac{\sigma_{i,j}\Delta t}{2(\Delta y)^2} + \frac{\nu_{i,j}\Delta t}{4\Delta y},$$

Далее имеем:

$$v_{i,j-1}^{n+1/2} = \tilde{\alpha}_{j-1} v_{i,j}^{n+1/2} + \tilde{\beta}_{j-1} \tag{18}$$

$$\tilde{\alpha}_i = -\frac{\tilde{a}_i}{\tilde{b}_i + \tilde{c}_i\tilde{\alpha}_{i-1}}, \qquad \tilde{\beta}_i = \frac{v_{i,j}^n - \tilde{c}_i\tilde{\beta}_{i-1}}{\tilde{b}_i + \tilde{c}_i\tilde{\alpha}_{i-1}}.$$

Из условия на нижней границе: $\tilde{\alpha}_1 = 0$, $\tilde{\beta}_1 = U/u_{p.t.}$, из условия на границе фазового перехода: $v_{N,j}^{n+1/2} = 1$.

После решения схем (14) и (17) в совокупности называемых **предиктором**, мы будем иметь значения $v_{i,j}^{n+1/2}$. На втором подынтервале $\Delta t/2$ вычисляется поправочное разностное соотношение, называемое **корректором**. Оно учитывает, как производные по координатам x и y, так и смешанную производную:

$$\begin{aligned}\frac{v_{i,j}^{n+1} - v_{i,j}^n}{\Delta t} &= \frac{v_{i+1,j}^{n+1/2} - 2v_{i,j}^{n+1/2} + v_{i-1,j}^{n+1/2}}{(\Delta x)^2} - \\ &- \left(\frac{2j\Delta y}{f_i^n}\frac{f_{i+1}^n - f_{i-1}^n}{2\Delta x}\right)\left(\frac{v_{i+1,j+1}^{n+1/2} - v_{i+1,j-1}^{n+1/2} - v_{i-1,j+1}^{n+1/2} + u_{i-1,j-1}^{n+1/2}}{4\Delta x\Delta y}\right) + \\ &\sigma_{i,j}\frac{v_{i,j+1}^{n+1/2} - 2v_{i,j}^{n+1/2} + v_{i,j-1}^{n+1/2}}{(\Delta y)^2} + \nu_{i,j}\frac{v_{i,j+1}^{n+1/2} - v_{i,j-1}^{n+1/2}}{2\Delta y},\end{aligned} \tag{19}$$

В этом соотношении неизвестно только $v_{i,j}^{n+1}$, поэтому оно является явным.

Как видно из имеющихся уравнений, чтобы найти $u_{i,j}^{n+1}$, нужно знать f^{n+1}, а чтобы найти f^{n+1} нужно знать $u_{i,j}^{n+1}$. Чтобы расцепить эту систему, можно воспользоваться итерационным методом. Например, рассчитать $u_{i,j}^{n+1/2}$, положив $f^{n+1} = f^n$, затем посчитать $f(u^{n+1/2})$ и т.д. Одна итерация будет состоять из следующих шагов:

1. Решение подсхемы (14).
2. Решение подсхемы (17).
3. Нахождение температуры на новом шаге по времени с помощью соотношения (16).
4. Уточнение f_i^{n+1} с помощью соотношения (10).

Переход к исходным координатам осуществляется следующим образом:

$$u(x,y,t) = v(x_0\tilde{x}, f(x_0\tilde{x})\tilde{y}, t_0\tilde{t}) \tag{20}$$

6 Программная реализация

Описанная выше схема была реализована на языке программирования Python. Этот язык активно используется в научных целях в виду своей простоты, гибкости и наличия множества библиотек для эффективных расчетов, обработки и визуализации данных. Исходный код был выложен в репозиторий хостинга IT-проектов GitHub для демонстрации и контроля вносимых изменений. Пример результата работы программы приведен на рисунке 1.

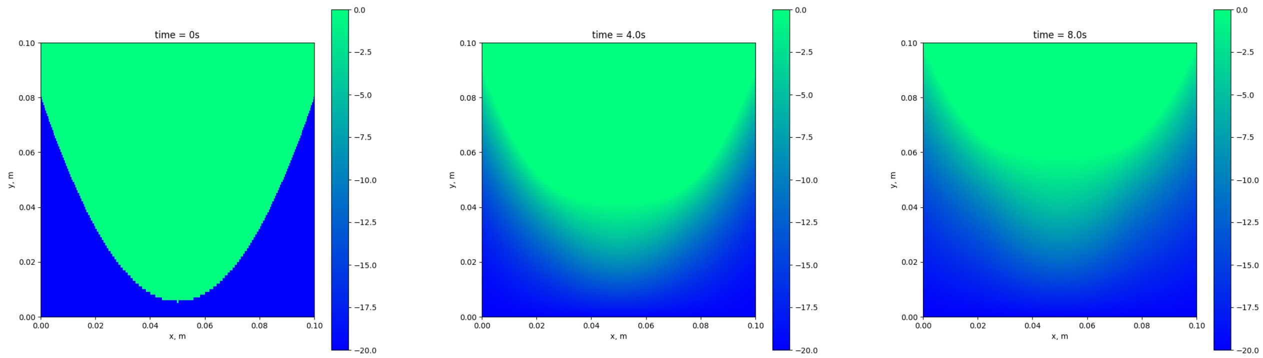

Рис. 1: Замерзание воды для границы параболической формы. Число узлов: $M_x = M_y = 1000$, $\Delta t = 0.1$

7 Выводы

Была реализована схема для решения однофазной двумерной задачи Стефана. В дальнешем планиуется усовершенствовать модель и учесть больше факторов, присутствующих в реальном физическом процессе.