УДК 519.63

ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ НА ПРИМЕРЕ ОДНОМЕРНОЙ ЗАДАЧИ СТЕФАНА

ПОДГОРНЫЙ А.Р., СИДОРОВ М.В., ЯЛОВЕГА И.Г.
(Системы и процессы управления)

Рассматривается задача расчета температурного поля в стержне при наличии фазовых превращений (одномерная задача Стефана). На основании метода Галеркина для нестационарных задач строится численный метод решения задачи Стефана. Эффективность численного метода иллюстрируется серией вычислительных экспериментов.

Ключевые слова: одномерная задача Стефана, точка фазового перехода, метод Галеркина.

Key words: one-dimensional Stefan problem, of phase transitions point, the Galerkin method.

Введение

Актуальность исследования. При моделировании процессов тепломассопереноса, которые сопровождаются изменением агрегатного состояния среды (например, её плавлением или затвердеванием) приходят к необходимости решения задачи Стефана. Кроме того, интерес к задаче Стефана возникает при моделировании переходов «жидкая фаза – пар» во влажном материале. В частности, решение задачи Стефана имеет большое значение для строительства, поскольку ею описывается значительное количество процессов, реально происходящих в конструкциях здания во время его эксплуатации [1].

Особенностью данной задачи является переменный размер области, в которой исследуется температурное поле. Это является следствие того, что имеется подвижная граница раздела фаз. Как раз изучение поведения границы раздела с течением времени и составляет основную цель решения задачи. Отметим также, что физические свойства среды при переходе через границу фазовых превращений (в нашем случае это теплопроводность) изменяются скачкообразно. Таким образом, задача Стефана характеризуется существенной геометрической и физической нелинейностями, что крайне затрудняет её решение. Общие аналитические решения этой задачи при произвольной форме области и различных температурных режимах на границе не известны. Известны лишь некоторые частные решения в одномерной задаче [1, 2, 5, 6].

В связи с этим разработка новых методов математического моделирования и численного анализа задачи Стефана является актуальной научной проблемой.

В данной работе рассмотрена проблема математического моделирования и численного анализа фазовых превращений на примере одномерной задачи Стефана. Для решения задачи предлагается приближенный аналитический метод на основе метода Галёркина, с помощью которого были получены численные значения температурного поля и приближенное уравнение границы фазового перехода.

Цели и задачи исследования. Целью настоящего исследования является разработка математических методов решения задачи математического моделирования и численного анализа фазовых превращений на примере одномерной задачи Стефана.

Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие задачи:

- сформулировать задачу компьютерного моделирования и численного анализа процесса фазовых превращений;
- разработать метод решения задачи расчета температурного поля при фазовых превращениях;
- разработать программный продукт, автоматизирующий решение расчета температурного поля при фазовых превращениях;
- провести вычислительные эксперименты для различных параметров модели;
- провести анализ адекватности полученного решения.

1. Постановка задачи

Фазовыми превращениями называют переход вещества из одной фазы в другую при изменении состояния системы. При этом фаза – совокупность телесных объектов, имеющих определенный химический состав и термодинамические свойства, отделенная от других фаз поверхностью раздела [1, 5]. Основной характеристикой фазовых превращений является температура, при которой фазы находятся в состоянии термодинамического равновесия (т.н. точка фазового перехода).

Имеется классификация фазовых переходов, согласно которой для фазовых переходов первого рода характерно, что в точке фазового перехода наблюдается выделение или поглощение тепла и изменение объема.

С точки зрения изменения термодинамических параметров, к фазовым переходам первого рода относятся переходы, характеризующиеся равенством удельных энергий Гиббса (термодинамических потенциалов) обеих фаз в точке фазового перехода, при том, что первые производные энергии Гиббса по температуре и давлению претерпевают скачкообразное изменение. Стоит отметить, что в точке фазового перехода на температурной зависимости энтропии удельного объема, а также энтальпии имеется разрыв. К таким процесса относятся, например, превращение твердого тела в жидкое (плавление) и обратный процесс (кристаллизация), жидкого – в пар (испарение, кипение), одной кристаллической модификации – в другую (полиморфные превращения) и другие [5].

К фазовым переходам второго рода относятся переходы, сопровождающиеся скачком вторых производных энергии Гиббса по функциям состояния в точке превращения. К этому классу фазовых переходов можем отнести процессы перехода нормального проводника в сверхпроводящее состояние, ферромагнетика – в парамагнетик т.д. [5].

Рассмотрим одномерную однофазную задачу Стефана [1, 2, 5, 6].

Рассмотрим отрезок $\Omega = (0, L)$, который точкой $x = \xi(t)$ (граница фазового перехода), $\xi(0) > 0$ разбивается на две подобласти:

$$\Omega^+(t) = \{x \mid 0 < x < \xi(t)\}, \quad \Omega^-(t) = \{x \mid \xi(t) < x < L\}.$$

Будем считать температуру фазового перехода равной нулю ($u^* = 0$), поэтому в твердой фазе, которая занимает область Ω^-, положим $u(x,t) < 0$, а в жидкой (область Ω^+) – $u(x,t) > 0$. Для определения температуры в жидкой фазе рассматривается уравнение теплопроводности (однородная среда)

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0, \ x \in \Omega^+(t), \ 0 < x < \xi(t), \tag{1}$$

а для определения температуры в твердой фазе рассматривается уравнение теплопроводности вида (однородная среда)

$$\beta \frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0, \ x \in \Omega^-(t), \ \xi(t) < t \le L. \tag{2}$$

Дополним уравнение (1) начальным условием:

$$u|_{t=0} = u_0 < 0, \tag{3}$$

Пусть левый и правый концы поддерживаются при заданной температурах:

$$u_1|_{x=0} = u_c, \quad u_2|_{x=L} = u_0, \tag{4}$$

На границе фазового перехода выполнены следующие условия:

$$u_1|_{x=\xi-0} = u_2|_{x=\xi+0}, \tag{5}$$

$$\delta \left.\frac{\partial u_2}{\partial x}\right|_{x=\xi+0} - \left.\frac{\partial u_1}{\partial x}\right|_{x=\xi-0} = \gamma \frac{d\xi}{dt}. \tag{6}$$

Постоянная γ связана с энтальпией фазового перехода [5].

В сформулированных предположениях о граничных и начальных условиях в однофазной задаче Стефана (1) – (6) скорость движения границы фазового перехода ($v_n = \frac{d\xi}{dt}$) положительна, т.е. область жидкой фазы постепенно расширяется. Монотонное возрастание функции $\xi(t)$ следует из принципа максимума для параболических уравнений [5].

2. Применение метода Галёркина

Для решения задачи (1) – (6) применим метод Галёркина [7].

Сделаем в задаче (1) – (6) замену

$$u(x,t) = \varphi(x) + v(x,t), \tag{7}$$

где $v(x,t)$ – новая неизвестная функция, а $\varphi(x)$ – функция, удовлетворяющая условиям

$$\varphi|_{x=0} = u_c, \ \varphi|_{x=L} = u_0.$$

Можно, например, взять

$$\varphi(x) = u_c + \frac{u_c - u_0}{L} x.$$

При таком выборе функции $\varphi(x)$ получим, что $v(x,t)$ является решением задачи

$$\frac{\partial v_1}{\partial t} = \frac{\partial^2 v_1}{\partial x^2}, \ t > 0, \ 0 < x < \xi(t), \tag{8}$$

$$\beta \frac{\partial v_2}{\partial t} = \frac{\partial^2 v_2}{\partial x^2}, \ t > 0 \quad \xi(t) < x < L. \tag{9}$$

$$v_1|_{x=0} = 0, \ v_2|_{x=l} = 0, \tag{10}$$

$$v|_{t=0} = u_0 - \varphi, \tag{11}$$

$$v_1|_{x=\xi-0} = v_2|_{x=\xi+0}, \tag{12}$$

$$\delta \left.\frac{\partial v_2}{\partial x}\right|_{x=\xi+0} - \left.\frac{\partial v_1}{\partial x}\right|_{x=\xi-0} = \gamma \frac{d\xi}{dt} - (\delta - 1)\frac{u_c - u_0}{L}. \tag{13}$$

Согласно методу Галеркина решение задачи (8) – (13) будем искать в виде

$$v^{(n)}(x,t) = \sum_{k=1}^{n} c_k(t)\varphi_k(x), \tag{14}$$

где $c_k(t)$, $k = 1, ..., n$, – неизвестные функции; $\varphi_k(x)$, $k = 1, ..., n$, – координатные функции.

В качестве координатных функций можно взять, например,

$$\varphi_k(x) = x(1-x)P_{k-1}\left(\frac{2x}{l} - 1\right), \ k = 1, ..., n,$$

где $P_m(z)$ – полиномы Лежандра.

Подставив (14) в уравнения (8), (9), получим невязку

$$R^{(n)}(x,t;c_1,...,c_n) = \\ = \begin{cases} \sum_{k=1}^{n} \dot{c}_k(t)\varphi_k - \sum_{k=1}^{n} c_k(t)\frac{\partial \varphi_k}{\partial x^2}, & 0 < x < \xi(t); \\ \beta\sum_{k=1}^{n} \dot{c}_k(t)\varphi_k - \sum_{k=1}^{n} c_k(t)\frac{\partial \varphi_k}{\partial x^2}, & \xi(t) < x < L. \end{cases} \tag{15}$$

Функции $c_1(t), ..., c_n(t)$ найдем из условия ортогональности невязки (15) функциям $\varphi_1(x), ..., \varphi_n(x)$:

$$\left(R^{(n)}(x,\ t;\ c_1,\ ...,\ c_n),\ \varphi_j(x)\right)_{L_2(0,\ L)} = 0, \tag{16}$$

$j = 1, ..., n$.

После преобразований, (16) примет вид

$$\sum_{k=1}^{n} \dot{c}_k(t)a_{kj}(t) + \sum_{k=1}^{n} c_k(t)b_{kj} = 0, \tag{17}$$

$j = 1, ..., n$, где обозначено

$$a_{kj}(t) = \int_0^{\xi(t)} \varphi_k\varphi_j dx + \beta \int_{\xi(t)}^{L} \varphi_k\varphi_j dx,$$

$$b_{kj} = -\int_0^L \frac{\partial^2 \varphi_k}{\partial x^2}\varphi_j dx, \ k, j = 1, ..., n.$$

Подставив (14) в начальное условие, получим невязку

$$r^{(n)}\left(x;\, c_1^0, ..., c_n^0\right) = \sum_{k=1}^{n} c_k^0 \varphi_k - (u_0 - \varphi)\,. \qquad (18)$$

Числа $c_1^0, ..., c_n^0$ найдем из условия ортогональности невязки (18) функциям $\varphi_1(x), ..., \varphi_n(x)$:

$$\left(r^{(n)}\left(x;\, c_1^0, ..., c_n^0\right),\ \varphi_j\right)_{L_2(0,\,L)} = 0\,, \qquad (19)$$

$j = 1, ..., n$.

Итак, начальные условия $c_k(0) = c_k^0$, $k = 1, ..., n$, для системы (17) получим, решив систему линейных алгебраических уравнений, которая получается из условий (19):

$$\sum_{k=1}^{n} c_k^0 g_{kj} = h_j\,,\ j = 1, ..., n\,, \qquad (20)$$

где обозначено

$$g_{kj} = \int_0^L \varphi_k \varphi_j dx\,,$$

$$h_j = \int_0^L (u_0 - \varphi)\varphi_j\, dx\,,\ k, j = 1, ..., n\,.$$

Известно, что для задачи Стефана на полупрямой фронт фазового перехода распространяется по закону $\xi(t) = \alpha\sqrt{t}$ [6]. В нашей задаче зависимость $\xi(t)$ будем искать именно в таком виде. Для нахождения параметра α была использована аппроксимация методом наименьших квадратов на основании условий (12), (13) и полученного приближенного по методу Галёркина решения.

3. Вычислительный эксперимент

Вычислительный эксперимент был проведен на промежутке $0 < x < 1$ ($L = 1$), который, в свою очередь, был разделен на две подобласти $0 < x < \xi(t)$ и $\xi(t) < x < 1$ границей фазового перехода.

Были выбраны следующие значения параметров в задаче (1) – (6):

$\beta = 0{,}125$, $\gamma = 75{,}909$, $\delta = 4$, $u_0 = -1$, $u_c = 1$,

что соответствует переходу воды из твердого состояния в жидкое.

На рис. 1 приведен график зависимости $x = \xi(t)$. Было получено значение $\alpha = 0{,}0263$. Отметим, что точному решению задачи Стефана на полупрямой при числовых данных эксперимента соответствует значение $\alpha = 0{,}0258$.

Полученные результаты были доложены на XVIII и XIX Международных молодежных форумах «Радиоэлектроника и молодежь в XXI веке» (Харьков, ХНУРЭ, 14 – 16 апреля 2014 и 20 – 22 апреля 2015), Международной научной конференции «XL Гагаринские чтения» (Москва, «МАТИ» – РГТУ им. К.Э. Циолковского, 7– 11 апреля 2014), а также на Вісімнадцятій Всеукраїнській (Тринадцятій Міжнародній) студентській науковій конференції з прикладної математики та інформатики „СНКПМІ-2015" (Львів, ЛНУ ім. І.Франка, 22 – 23 квітня 2015) [3, 4, 8, 9].

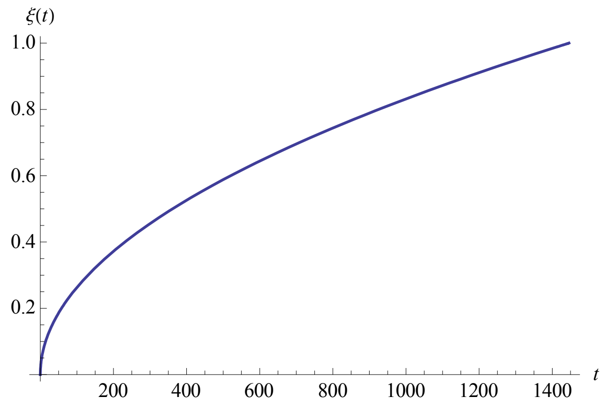

Рис. 1 – График зависимости $x = \xi(t)$

Выводы

В работе впервые предложен метод расчета температурного поля при фазовых превращениях, основанный на применении численно-аналитического метода Галёркина, что позволило получить приближенное решение задачи в аналитическом виде. В ходе выполнения исследований также был разработан программный продукт в пакете Mathematica 10, с помощью которого проведен ряд вычислительных экспериментов.

Результаты работы могут найти применение в научных исследованиях в физики, химии, биологии, а так же в медицине (задача криохирургии). Это и определяет научную новизну и практическую значимость полученных результатов.

Литература: **1.** *Прусаков Г.М.* Математические модели и методы в расчетах на ЭВМ. М.: Наука, 1993. 144 с. **2.** *Левин В.И. Араманович И.Г.* Уравнения математической физики. М.: Наука, 1969. 288 с. **3.** *Подгорный А.Р.* Численный анализ одной задачи фазовых превращений // Научные труды Международной молодёжной научной конференция «XL Гагаринские чтения» в 9 томах (Москва, «МАТИ» – РГТУ им. К.Э. Циолковского, 7 – 11 апреля 2014). Т. 5. С. 158 – 160. **4.** *Подгорный А.Р.* Об одной проблеме математического моделирования фазовых превращений // Материалы XVIII Международного молодежного форума «Радиоэлектроника и молодежь в XXI веке» (Харьков, ХНУРЭ, 14 – 16 апреля 2014). Т. 7. С. 130 – 131. **5.** *Самарский А.А., Вабищевич П.Н.* Вычислительная теплопередача. М.: Едиториал УРСС, 2003. 784 с. **6.** *Мартинсон Л.К., Малов Ю.И.* Дифференциальные уравнения математической физики. 2-е изд. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2002. 368 с. **7.** *Михлин С.Г.* Численная реализация вариационных методов. М.: Наука, 1966. 432 с. **8.** *Подгорный А.Р.* Математическое моделирования фазовых превращений на примере одномерной задачи Стефана // Материалы XIX Международного молодежного форума «Радиоэлектроника и молодежь в XXI веке» (Харьков, ХНУРЭ, 20 – 22 апреля 2015). Т. 7. С. 84 – 85. **9.** *Подгорний О.Р.* Математичне моделювання фазових перетворень на прикладі одновимірної задачі Стефана // Тези доповідей Вісімнадцятої Всеукраїнської (Тринадцятої Міжнародної) студентської наукової конференції з прикладної математики та інформатики „СНКПМІ-2015" (Львів, ЛНУ ім. І.Франка, 22 – 23 квітня 2015). С. 133 – 135.

Транслитерированный список литературы.

1. *Prusakov G.M.* Matematicheskie modeli i metody v raschetah na EVM. M.: Nauka, 1993. 144 p. **2.** Levin V.I. Aramanovich I.G. Uravnenija matematicheskoj fiziki. M.: Nauka, 1969. 288 p. **3.** *Podgornyj A.R.* Chislennyj analiz odnoj zadachi fazovyh prevrashhenij // Nauchnye trudy Mezhdunarodnoj molodjozhnoj nauchnoj konferencija «XL Gagarinskie chtenija» v 9 tomah (Moskva, «MATI» – RGTU im. K.E. Ciolkovskogo, 7 – 11 aprelja 2014). T. 5. Pp. 158 – 160. **4.** *Podgornyj A.R.* Ob odnoj probleme matematicheskogo modelirovanija fazovyh prevrashhenij // Materialy XVIII Mezhdunarodnogo molodezhnogo foruma «Radiojelektronika i molodezh' v XXI veke» (Har'kov, KhNURE, 14 – 16 aprelja 2014). T. 7. Pp. 130 – 131. **5.** *Samarskij A.A., Vabishhevich P.N.* Vychislitel'naja teploperedacha. M.: Editorial URSS, 2003. 784 p. **6.** *Martinson L.K., Malov Ju.I.* Differencial'nye uravnenija matematicheskoj fiziki. 2-e izd. M.: Izd-vo MGTU im. N.E. Baumana, 2002. 368 p. **7.** *Mihlin S.G.* Chislennaja realizacija variacionnyh metodov. M.: Nauka, 1966. 432 p. **8.** *Podgornyj A.R.* Matematicheskoe modelirovanija fazovyh prevrashhenij na primere odnomernoj zadachi Stefana // Materialy XIX Mezhdunarodnogo molodezhnogo foruma «Radiojelektronika i molodezh' v XXI veke» (Har'kov, KhNURE, 20 – 22 aprelja 2015). T. 7. Pp. 84 – 85. **9.** *Podgornyj O.R.* Matematychne modeljuvannja fazovyh peretvoren' na prykladi odnovymirnoi' zadachi Stefana // Tezy dopovidej Visimnadcjatoi' Vseukrai'ns'koi' (Trynadcjatoi' Mizhnarodnoi') students'koi' naukovoi' konferencii' z prykladnoi' matematyky ta informatyky „SNKPMI-2015” (L'viv, LNU im. I.Franka, 22 – 23 kvitnja 2015). Pp. 133 – 135.

Поступила в редколлегию 15.05.2015

Рецензент: д-р физ.-мат. наук, проф. Колосов А.И.

Подгорний Алексей Русланович, магистрант кафедры прикладной математики ХНУРЭ. Научные интересы: математическое моделирование и вычислительная математика, программирование. Адрес: Украина, 61166, Харьков, пр. Ленина, 14, тел. (057) 7021436.

Сидоров Максим Викторович, канд. физ.-мат. наук, доц., доц. каф. прикладной математики ХНУРЭ. Научные интересы: математическое моделирование, численные методы, математическая физика, теория R-функций и её приложения, стохастический анализ и его приложения. Адрес: Украина, 61166, Харьков, пр. Ленина, 14, тел. (057) 7021436.

Яловега Ирина Георгиевна, канд. техн. наук, доц. каф. математики ХНПУ им. Г.С. Сковороды. Научные интересы: математическое моделирование, методика преподавания математики. Адрес: Украина, 61168, г. Харьков, ул. Блюхера, 2.

Podgornyj Alexej Ruslanovich, undergraduate of Department of Applied Mathematics KhNURE. Research interests: mathematical modeling and computational mathematics, programming. Address: Ukraine, 61166, Kharkov, Lenin Ave, 14, phone +38 (057) 7021436.

Sidorov Maxim Victorovich, Ph.D. in Physics and Maths, associate professor, associate professor of Department of Applied Mathematics KhNURE. Research interests: mathematical modeling, numerical methods, mathematical physics, R-functions theory and its applications, stochastic analysis and its applications. Address: Ukraine, 61166, Kharkov, Lenin Ave, 14, phone +38 (057) 7021436.

Yalovega Irina Georgievna, Ph.D. in Engineering, associate professor of Department of Mathematics H.S. Skovoroda KhNPU. Research interests: mathematical modeling, methods of teaching mathematics. Address: Ukraine, 61168, Kharkov, Bluher St., 2.

УДК 519.63

Чисельний аналіз фазових перетворень на прикладі одновимірної задачі Стефана / О.Р. Подгорний, М.В. Сидоров, І.Г. Яловега // Радіоелектроніка та інформатика. 2015. № 2. С. 000 – 000.

Розглянуто задачу розрахунку процесу теплопровідності на відрізку при наявності фазових перетворень (одновимірна задача Стефана). Для її чисельного аналізу запропоновано наближено-аналітичний метод, який базується на методі Гальоркіна. Проведено розрахунки для модельної задачі.

Іл. 1. Бібліогр.: 9 назв.

UDC 519.63

Numerical analysis of phase transformations on the example of one-dimensional Stefan problem / A.R. Podgornyj, M.V. Sidorov, I.G. Yalovega // Radioelektronica i informatika. 2015. № 2. P. 000–000.

The problem of calculating the process of thermal conductivity on the segment in the presence of phase transitions (one-dimensional Stefan problem) was considered. For its numerical analysis the approximate analytical method based on the Galerkin method was suggested. The calculations for the model problem were conducted.

Fig. 1. Ref.: 9 items.