РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ДВУМЕРНЫХ ЗАДАЧ С ФАЗОВЫМИ ПЕРЕХОДАМИ НА АДАПТИВНО-ВСТРАИВАЕМЫХ СЕТКАХ

Мустафин А. М., Веселова Н. Н., Лебедев С. Н.

Постановка задачи

Физическая модель

Вещество, заполняющее область G в пространстве xOy, в начальный момент времени находится в твердом состоянии при некоторой постоянной температуре T_0.

На одной из границ области устанавливается мощный источник тепла, имеющий температуру T_h, причем

$$T_h > T_s > T_f,$$

где T_s - температура испарения/конденсации,
T_f - температура плавления/кристаллизации.

В поставленных условиях вещество начнет плавиться и, в последующем, испаряться. Таким образом имеет место явление фазового превращения.

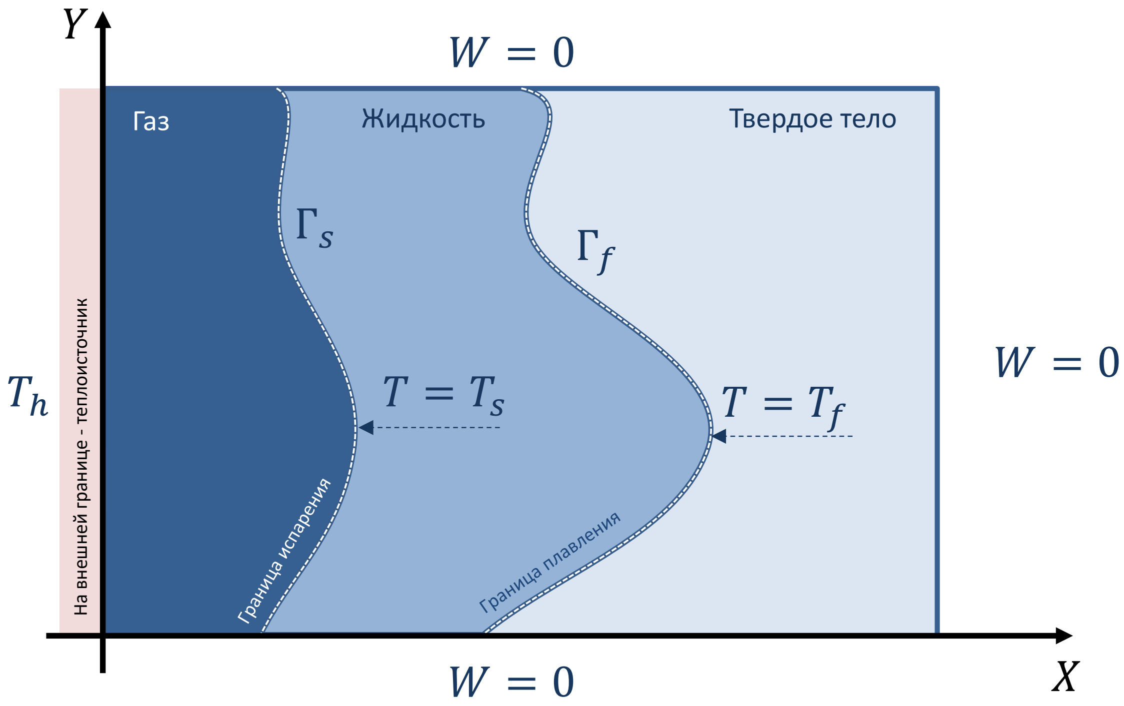


Рисунок 1 – Схематичное изображение рассматриваемой задачи

На рисунке 1:

- Γ_s - граница испарения,
- Γ_f - граница плавления.

Математическая модель

Процесс распространения тепла в веществе описывается дифференциальным уравнением вида

$$\boxed{\rho_i \frac{\partial \varepsilon_i}{\partial t} = div\left(\chi_i \cdot grad\left(T\right)\right) + f,}$$

1

где

$i = \{s, l, g\}$ - индекс состояния вещества (твердое, жидкое, газообразное),

$T = T(x, y, t)$ - температура,

$\varepsilon_i(\rho_i, T)$ - удельная внутренняя энергия,

ρ_i - плотность,

$\chi_i\left(\rho_i, T\right)$ - коэффициент теплопроводности,

$f(x, y, t)$ - плотность тепловых источников.

На границах фазовых переходов (плавления, испарения соответственно) вводятся условия Стефана[1] для потоков:

$$\chi_l\, grad\left(T\right)\Big|_{\Gamma_f - 0} - \chi_s\, grad\left(T\right)\Big|_{\Gamma_f + 0} = L_f \rho \frac{d\xi_1}{dt},$$

$$\chi_g\, grad\left(T\right)\Big|_{\Gamma_s - 0} - \chi_l\, grad\left(T\right)\Big|_{\Gamma_s + 0} = L_s \rho \frac{d\xi_2}{dt},$$

2

где

$\xi_1(x, y, t)$, $\xi_2(x, y, t)$ - функции описывающие изменение положения межфазовых границ с течением времени,

L_f - скрытая теплота плавления, поглощаемая при плавлении или выделяемая при кристаллизации,

L_s - скрытая теплота парообразования, поглощаемая при испарении или выделяемая при конденсации.

[1] Данилюк И. И. О задаче Стефана. // Успехи математических наук. 1985. Том 40, Вып. 5. С. 133-185.

Общая краевая задача

В области двумерного пространства

$$G = [a_x \le x \le b_x] \times [a_y \le y \le b_y]$$

при $t \in [0, t_{\max}]$ для уравнения (1) решаем краевую задачу

$$\begin{cases} T(x,y,0) = \varphi(x,y), & x, y \in G, \\ \alpha T + \beta\left(\vec{W} \cdot \vec{n}\right) = \psi(x,y,t), & x, y \in L, \end{cases}$$

где $\varphi(x,y)$ - заданное начальное распределение температуры,
$\psi(x,y,t)$ - заданные функции на краях,
α, β - заданные параметры,
L - внешняя граница прямоугольной области G

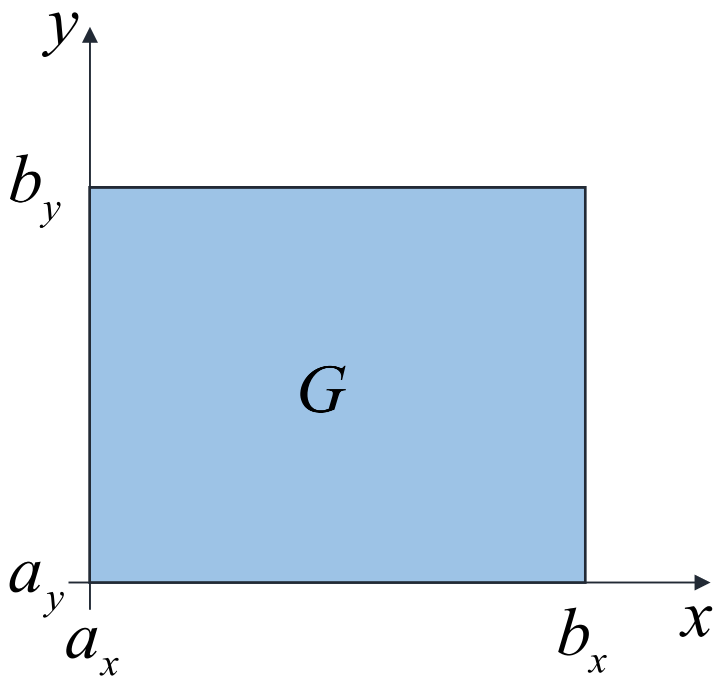


Рисунок 2 – Область определения

Методика решения

Переход к общему уравнению

РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

Внутренняя энергия при фазовых переходах может быть записана с помощью функции Хевисайда[1] $\hbar(x)$:

$$\tilde{\varepsilon}(T) = \varepsilon + L_f \cdot \hbar(T - T_f) + L_s \cdot \hbar(T - T_s),$$

$$\hbar(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ 1, & x > 0, \end{cases}$$

где ε - некая обобщенная функция, определяющая внутреннюю энергию в зависимости от фазового состояния вещества.

При подстановке в выражение (1) получаем уравнение теплопроводности с учетом трех фазовых состояний

$$\boxed{\rho \tilde{C}(T) \frac{\partial T}{\partial t} = div\left(\chi \cdot grad(T)\right) + f}, \qquad (3)$$

$$\tilde{C}(T) = \frac{\partial \varepsilon}{\partial T} + L_f \cdot \delta(T - T_f) + L_s \cdot \delta(T - T_s),$$

где $\rho = \rho(T)$ - функция, задающая плотность вещества; $\chi = \chi(T)$ - функция, задающая коэффициент теплопроводности. В случае линейной зависимости энергии от температуры внутренняя энергия определена выражением $\varepsilon(T) = c_v T$, в котором c_v - функция, определяющая коэффициент удельной теплоемкости.

[1] Мазо А.Б. Основы теории и методы расчета теплопередачи: учебное пособие. – Казань: Казан. ун-т, 2013. – 144 с.

Особенности характеристик вещества

Разрывные функции для плотности, коэффициентов теплоемкости и теплопроводности заменяются следующими непрерывными функциями

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

где $(\circ)$ заменяется на ρ,χ,C , а параметр δ-функции записан для каждой границы фазового перехода отдельно, Δ_f,Δ_s - плавления, испарения, соответственно, γ – функция сглаживания.

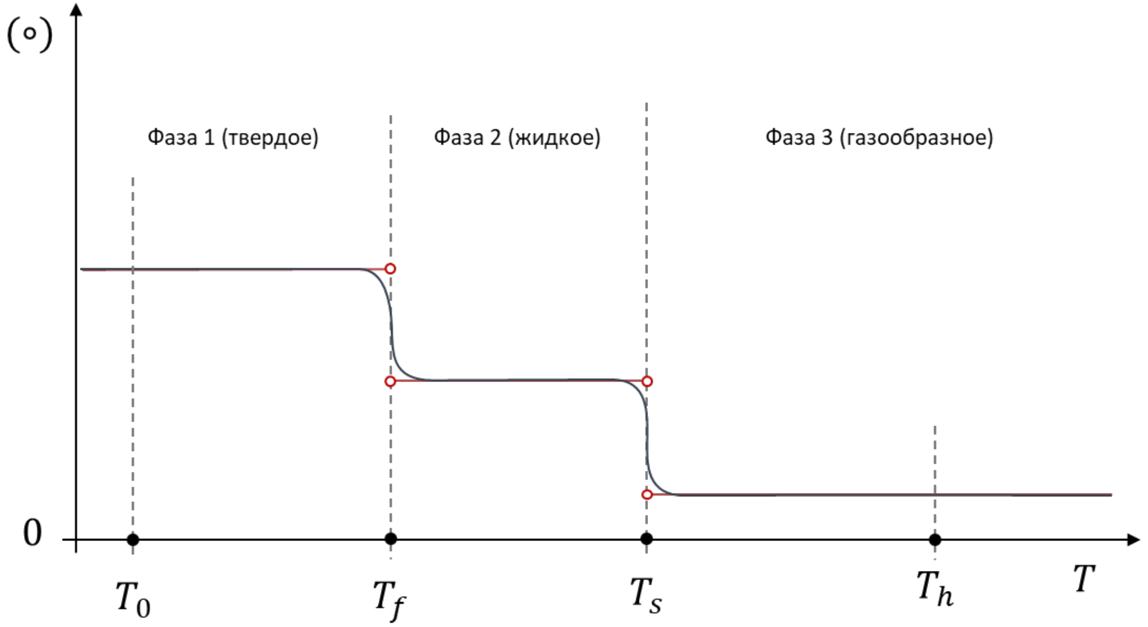


Рисунок 3 – Схематичное изображение функции характеристики вещества

Функция сглаживания и аналог δ-функции

РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

В данной работе используется δ-функция в следующей форме

$$\delta(x) = \frac{1}{a\sqrt{\pi}} \cdot e^{-\left(\frac{x}{a}\right)^2}, \qquad (4)$$

где параметр $a = \Delta\left(2\sqrt{\pi}\right)^{-1}$,
Δ - параметр, задающий полуширину колокола функции.

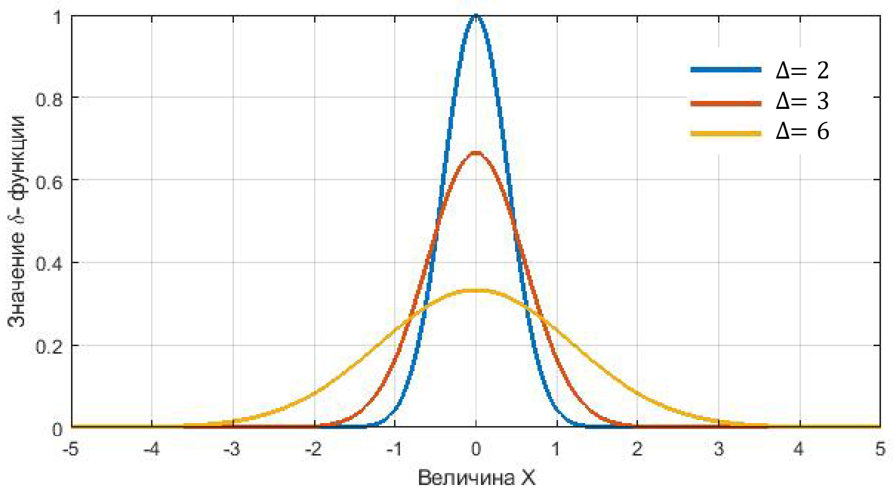


Рисунок 4 – δ-функция с тремя различными параметрами

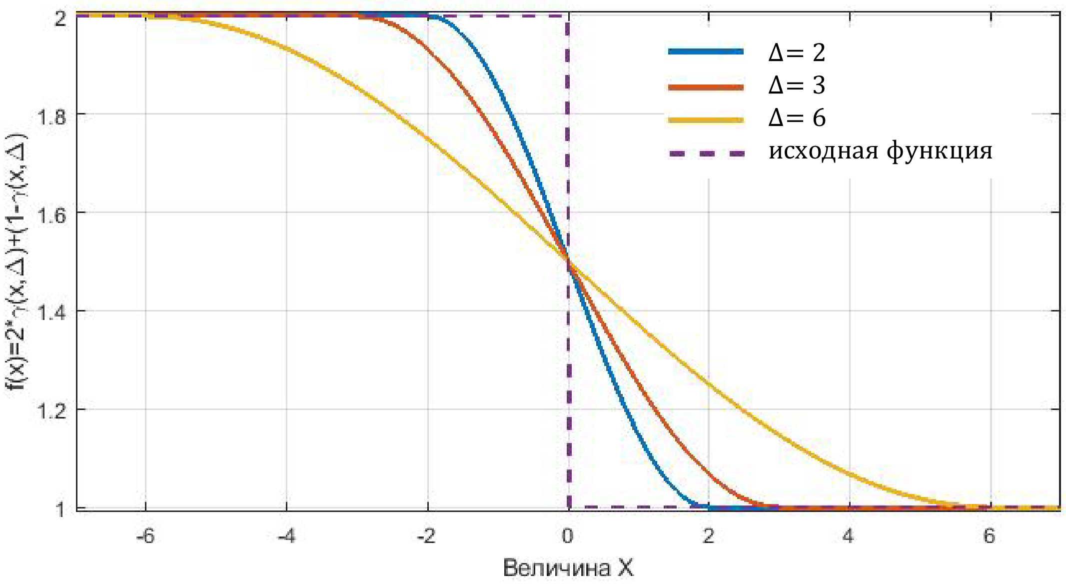


Рисунок 5 – Пример сглаживания γ-функцией характеристики меняющей свое значение с 2 до 1 в точке x=0

Функция сглаживания действует в области δ-функции ($|x| < \Delta$) и определяется как:

$$\gamma(x) = \frac{1}{2}\cos\left(\frac{\pi(x+\Delta)}{2\Delta}\right) + \frac{1}{2}, \qquad (5)$$

где Δ - параметр δ-функции.

Метод конечных разностей

Введем на плоскости (x, y) сетку:

$$\omega_{h_x h_y} = \omega_{h_x} \times \omega_{h_y},$$

$$\omega_{h_x} = \left\{x_j = j \cdot h_x,\ j = 0, 1, 2, \ldots, J\right\},$$

$$\omega_{h_y} = \left\{y_i = i \cdot h_y,\ i = 0, 1, 2, \ldots, I\right\}$$

с шагами h_x (по x) и h_y (по y).

Расширим сетку во временную область, введя шаги по времени τ

$$\omega_{h_x h_y \tau} = \omega_{h_x} \times \omega_{h_y} \times \omega_\tau,$$

$$\omega_\tau = \left\{t_n = n \cdot \tau,\ n = 0, 1, 2, \ldots\right\}.$$

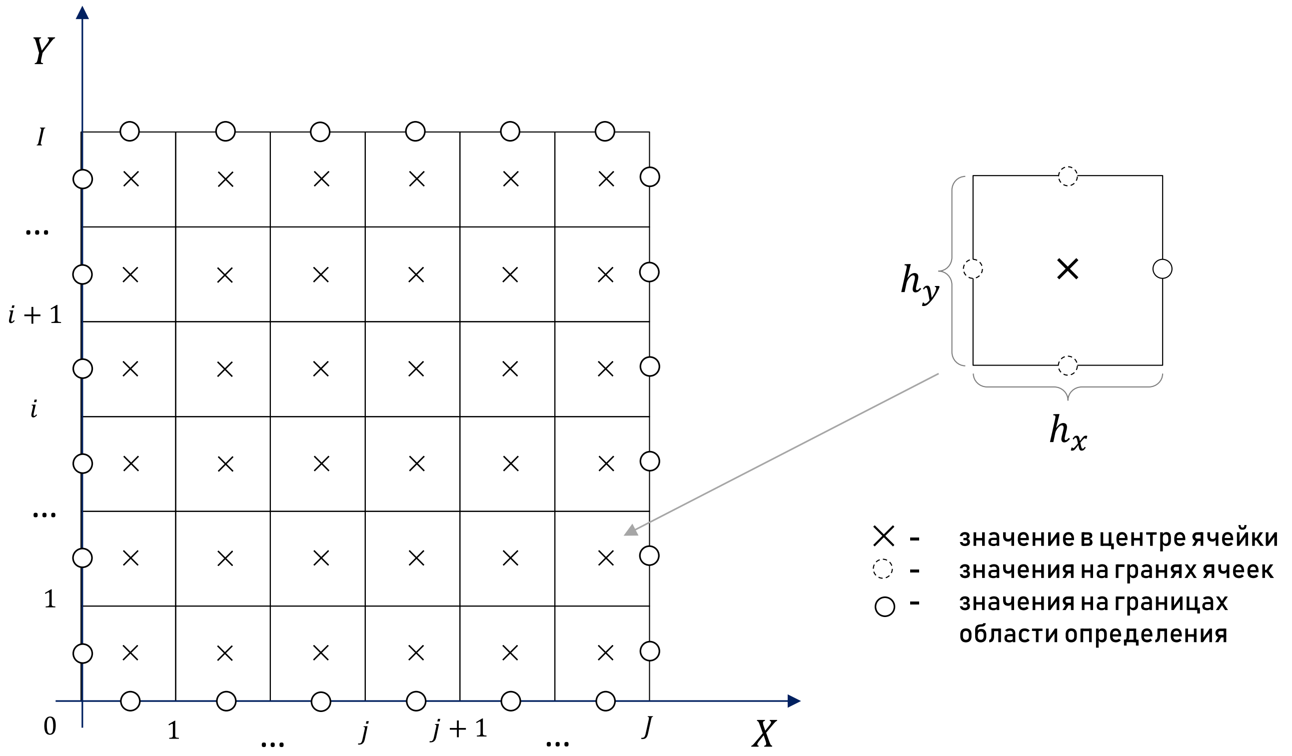


Рисунок 6 – Пространственная разностная сетка

Разностная схема «Ромб»

РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

Схема записывается при помощи двух СЛАУ

$$\begin{cases} T_j^{\mu+1} + T_{j+1}^{\mu+1} + \left[2\delta_{j+1/2} + \dfrac{2\tau}{\tilde{C}m}\right]\Delta_j\left(W_x\right)^{\mu+1} = 2\left(T^n + \dfrac{\tau}{\tilde{C}\rho} f^{n+1} - \dfrac{\tau}{\tilde{C}m}\Delta_i\left(W_y\right)^{\mu+1/2}\right), \\ 2\chi_x^{\mu}\dfrac{h_y^2}{\Delta S}\Delta_j\left(T\right)^{\mu+1} + \left(W_x\right)_j^{\mu+1} + \left(W_x\right)_{j+1}^{\mu+1} = 0, \end{cases}$$

6

$$\begin{cases} T_i^{\mu+1/2} + T_{i+1}^{\mu+1/2} + \left[2\delta_{i+1/2} + \dfrac{2\tau}{\tilde{C}m}\right]\Delta_i\left(W_y\right)^{\mu+1/2} = 2\left(T^n + \dfrac{\tau}{\tilde{C}\rho} f^{n+1} - \dfrac{\tau}{\tilde{C}m}\Delta_j\left(W_x\right)^{\mu}\right), \\ 2\chi_y^{\mu}\dfrac{h_x^2}{\Delta S}\Delta_i\left(T\right)^{\mu+1/2} + \left(W_y\right)_i^{\mu+1/2} + \left(W_y\right)_{i+1}^{\mu+1/2} = 0, \end{cases}$$

7

где δ – параметр схемы «Ромб»,

$\Delta_i(\circ) = (\circ)_{i+1} - (\circ)_i$ - разность величин, заданных на ребрах.

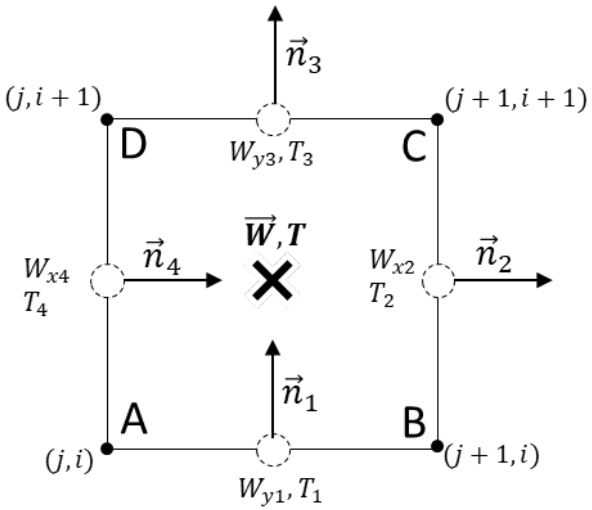


Рисунок 6 – Аппроксимация по пространству схемой «Ромб»

Из соответствующего каждой системе уравнения баланса восстанавливаем температуру в центрах ячеек

$$T_{i+1/2}^{\mu+1/2} = T^n + \frac{\tau}{\tilde{C}\rho} f^{n+1} - \frac{\tau}{\tilde{C}m}\left[\left(W_x\right)_{j+1} - \left(W_x\right)_j\right]^{\mu} - \frac{\tau}{\tilde{C}m}\left[\left(W_y\right)_{i+1} - \left(W_y\right)_i\right]^{\mu+1/2}$$

$$T_{j+1/2}^{\mu+1} = T^n + \frac{\tau}{\tilde{C}\rho} f^{n+1} - \frac{\tau}{\tilde{C}m}\left[\left(W_x\right)_{j+1} - \left(W_x\right)_j\right]^{\mu+1} - \frac{\tau}{\tilde{C}m}\left[\left(W_y\right)_{i+1} - \left(W_y\right)_i\right]^{\mu+1/2}$$

Введение адаптивно-встраиваемой сетки

Адаптация сетки

Измельчение разностной сетки участками ведет к тому, что она теряет регулярную матричную структуру, становится таким образом *нерегулярной*.

Введем обозначения для новой сетки:

$K = I \cdot J + 4P$ - общее число ячеек,

P - число ячеек подвергшихся дроблению,

$k = 0, 1, 2, ..., K-1$ - номер ячейки.

Тогда размеры каждой ячейки определяются следующим образом

$$\left(\tilde{h}_y\right)_k = h_y / 2^{L_k}, \quad \left(\tilde{h}_x\right)_k = h_x / 2^{L_k},$$

где h_x и h_y - пространственные шаги исходной регулярной сетки, L - уровень адаптации k-ой ячейки.

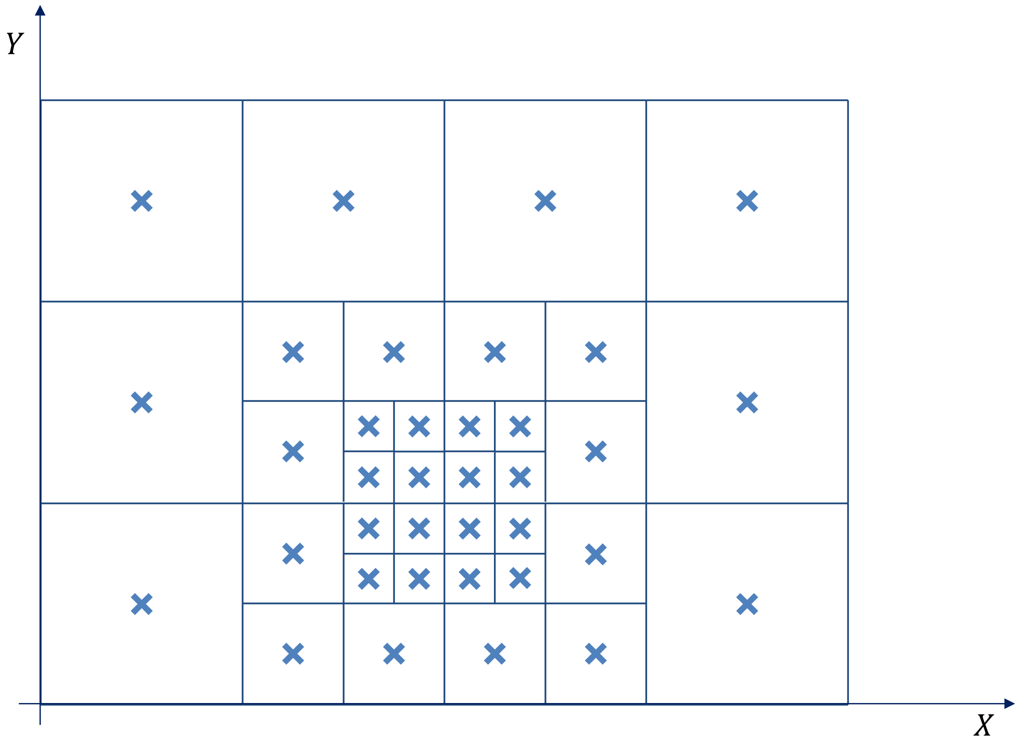
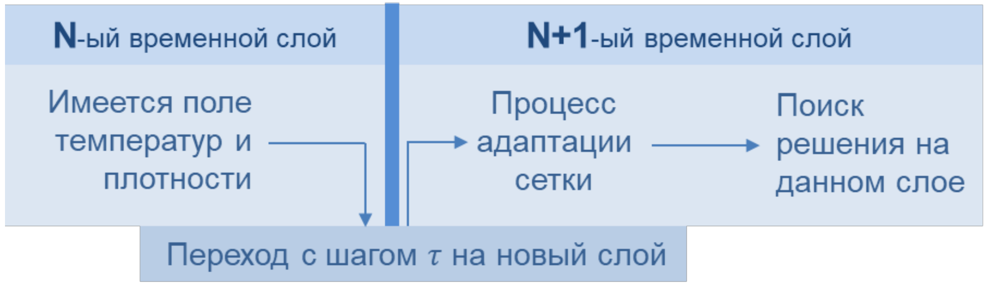


Рисунок 7 – Представление адаптивной сетки

Процесс адаптации



Решение уравнений осуществляется шагами по времени. Перед решением на новом шаге проводится адаптация сетки к решению полученному на предыдущем шаге. Затем температура и плотность отображается на новую сетку.

Рисунок 8 – Пример дробления ячеек в два уровня

- Исходная ячейка на каждом уровне адаптации, при удовлетворении условию адаптации, делится на четыре равные ячейки меньшего размера.
- Не удовлетворяющие условию адаптации, ячейки объединяются. Температура в родительской ячейке восстанавливается через удельную внутреннюю энергию и среднюю теплоемкость:

$$\varepsilon_{(k)_L} = \frac{\sum_{s=0}^{3} \varepsilon_{(k+s)_{L+1}} m_{(k+s)_{L+1}}}{\sum_{s=0}^{3} m_{(k+s)_{L+1}}} \qquad c_{(k)_L} = \frac{\sum_{s=0}^{3} c_{(k+s)_{L+1}} m_{(k+s)_{L+1}}}{\sum_{s=0}^{3} m_{(k+s)_{L+1}}}$$

$$\boxed{T_{(k)_L} = \varepsilon_{(k)_L} / c_{(k)_L}}$$

Процесс адаптации

РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

Условие адаптации:

1 ε-окрестность точек, принадлежащих границе фазового перехода

$$O_\varepsilon(D) = \left\{ (x, y) : \sqrt{(x - x_D)^2 + (y - y_D)^2} < \varepsilon \right\}$$

При переходе на каждый следующий уровень ε-окрестность уменьшается в два раза.

2 минимальное пороговое значение величины градиента температур

$$T_{grad}$$

При переходе на каждый следующий уровень пороговое значение увеличивается в два раза

Максимальный уровень адаптации в данной работе | 2

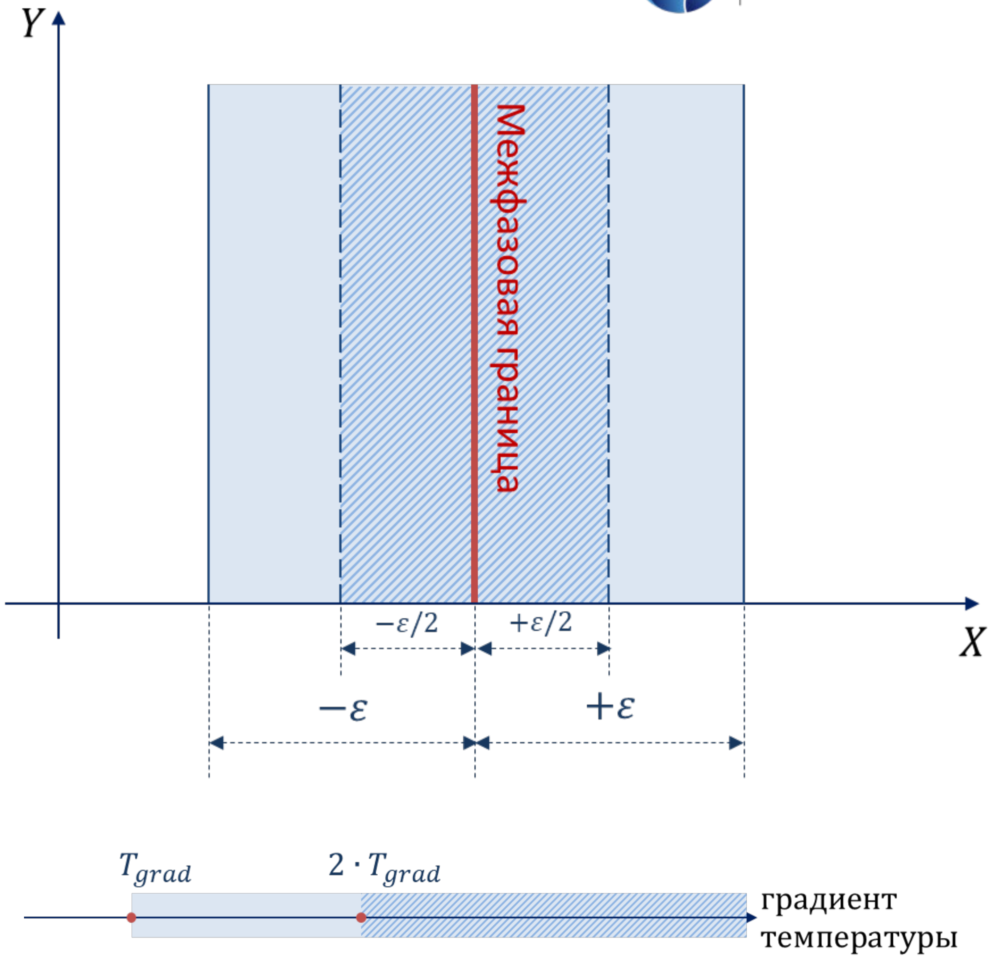


Рисунок 9 – Условия адаптации в графическом виде

Структура данных

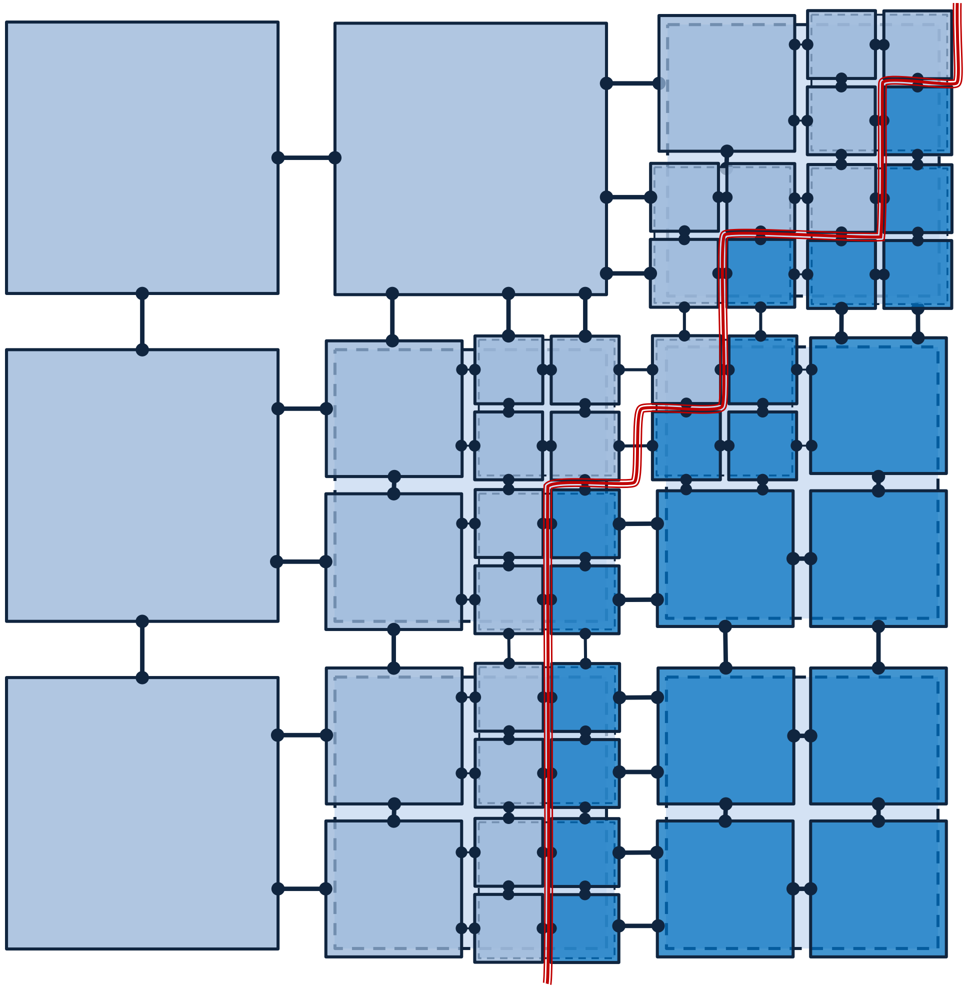


Рисунок 10 – Визуальное представление разностной сетки с двухуровневой адаптацией в виде сложной структуры данных

Элемент сложной структурной сети – ячейка.

ВНУТРЕННЯЯ СТРУКТУРА ЯЧЕЙКИ	
БЛОК ИНФОРМАЦИИ	• Значения ячейки *на разных временных и итерационных слоях* • Характеристики ячейки *уровень адаптации, материал, фазовое состояние*
БЛОК СВЯЗЕЙ (ССЫЛОК)	• Ссылка на потомков *набор из 4-ех ячеек связанных в блок* • Ссылки на соседей *стеки ссылок сгруппированные по граням ячейки*

Данная структура спроектирована на языке программирования С++.

Программный пакет DiffSchematic

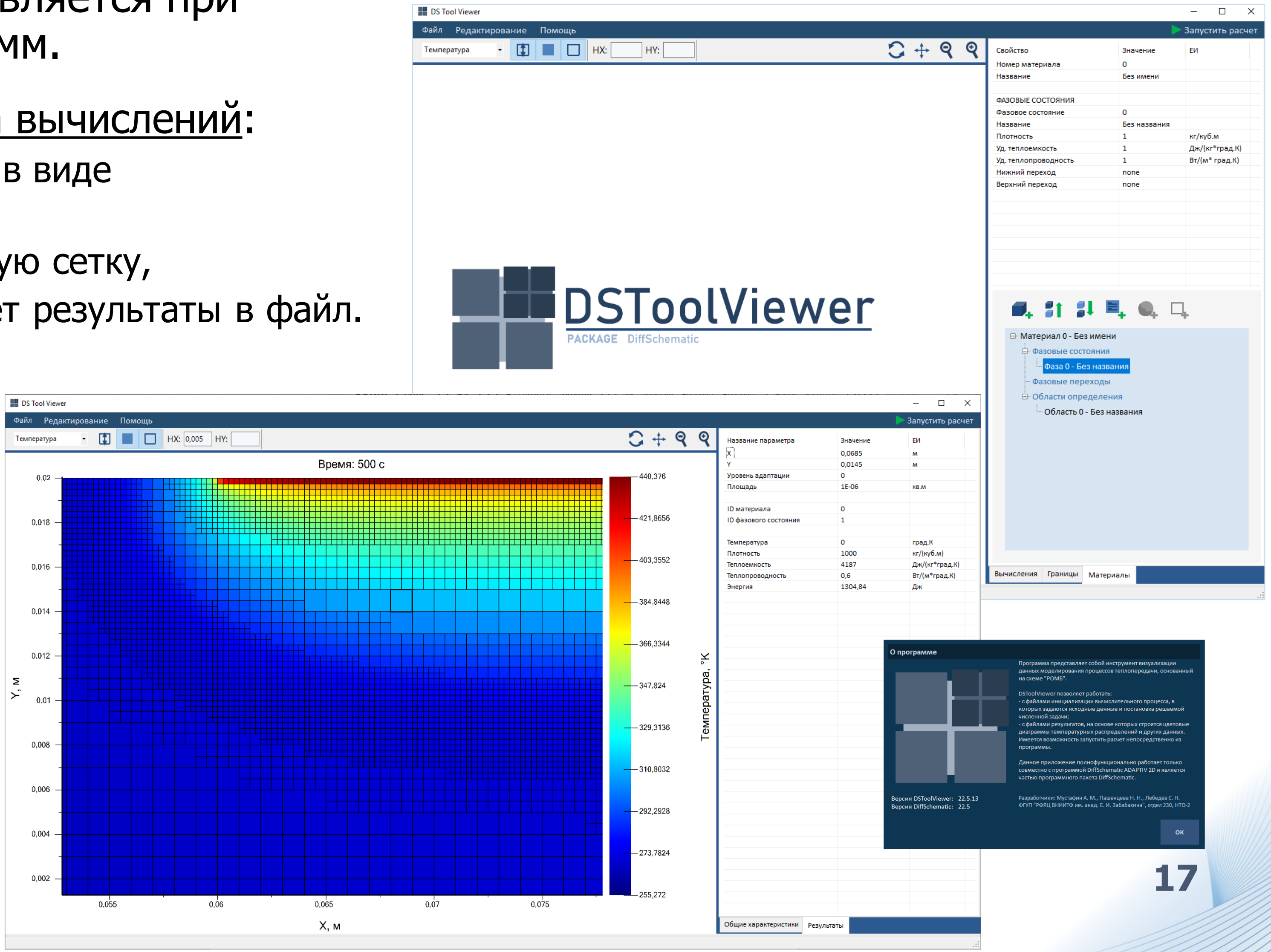
Решение поставленной задачи осуществляется при помощи разработанного пакета программ.

DiffSchematic ADAPTIV 2D - программа вычислений:

- написана на языке программирования C++ в виде консольного приложения,
- основана на классе реализующем адаптивную сетку,
- решает сформированную задачу и сохраняет результаты в файл.

DSToolViewer – пользовательская оболочка:

- написана на языке программирования C++/CLI в виде оконного приложения,
- позволяет сформировать файл исходных данных для вычислений,
- визуализирует результаты вычислений в виде цветовых диаграмм,
- графика реализована при помощи библиотеки Open GL.



Численные результаты

Задача о тепловой волне в неоднородной области

В области $G \in [0,10] \times [0,10]$ находится вещество с характеристиками

$$\rho = 1, \qquad c_v = 1, \qquad \chi(T) = 6T^3.$$

Начальное распределение температуры: $T(x,y,0) = T_0 = 1 \cdot 10^{-5}\ ^\circ K$

Граничные условия:

$$T(0,y,t) = \begin{cases} \left(2(4t - y\sin\alpha)\right)^{1/3}, & (4t - y\sin\alpha) > 0, \\ 0, & (4t - y\sin\alpha) \le 0, \end{cases}$$

$$T(x,0,t) = \begin{cases} \left(2(4t - x\cos\alpha)\right)^{1/3}, & (4t - x\cos\alpha) > 0, \\ 0, & (4t - x\cos\alpha) \le 0, \end{cases} \qquad x < 3,$$

$$W(x,0,t) = 0, \quad x \ge 3, \qquad W(10,y,t) = W(x,10,t) = 0,$$

где $t \in [0, t_{end}]$, а $x, y \in L$, L – граница области G.
Тепловая волна движется под углом $\alpha = 30^\circ$.

Все, представленные в данной задаче величины записаны в безразмерном виде.

Заданная область включает в себя подобласть $C \in [3,6] \times [0,3]$ с веществом, не проводящим тепло. Данное вещество имеет следующие характеристики:

$$\rho = 1 \cdot 10^{-3}, \qquad c_v = 1, \qquad \chi(T) = 1 \cdot 10^{-7}.$$

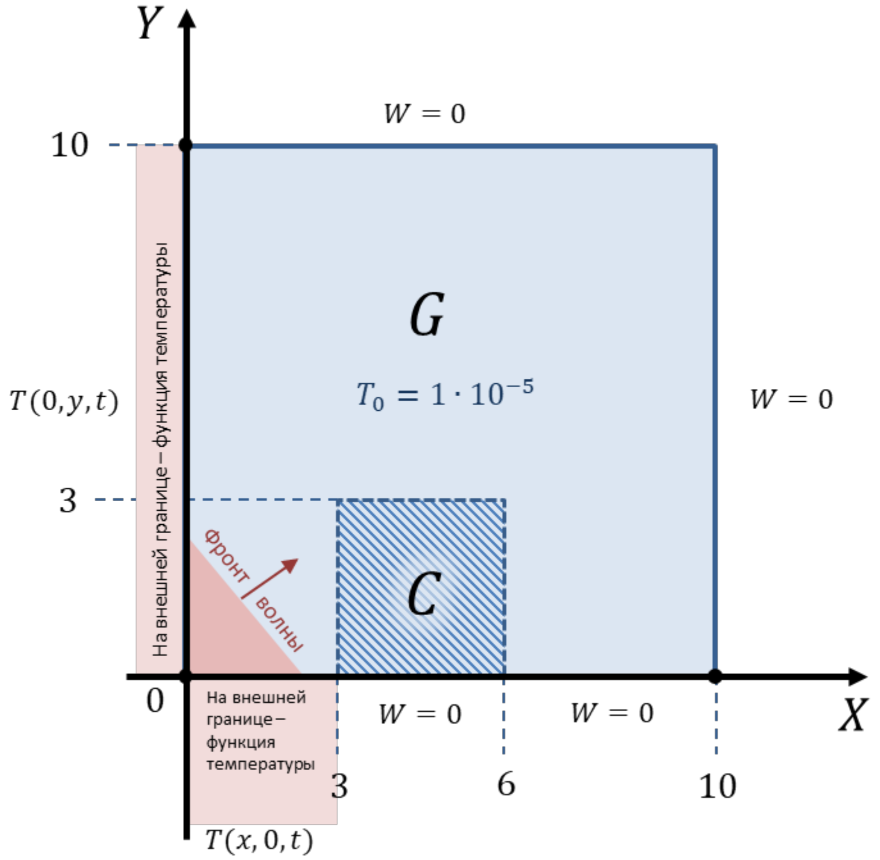


Рисунок 11 – Схематичное изображение задачи о тепловой волне

Сравнение численных решений

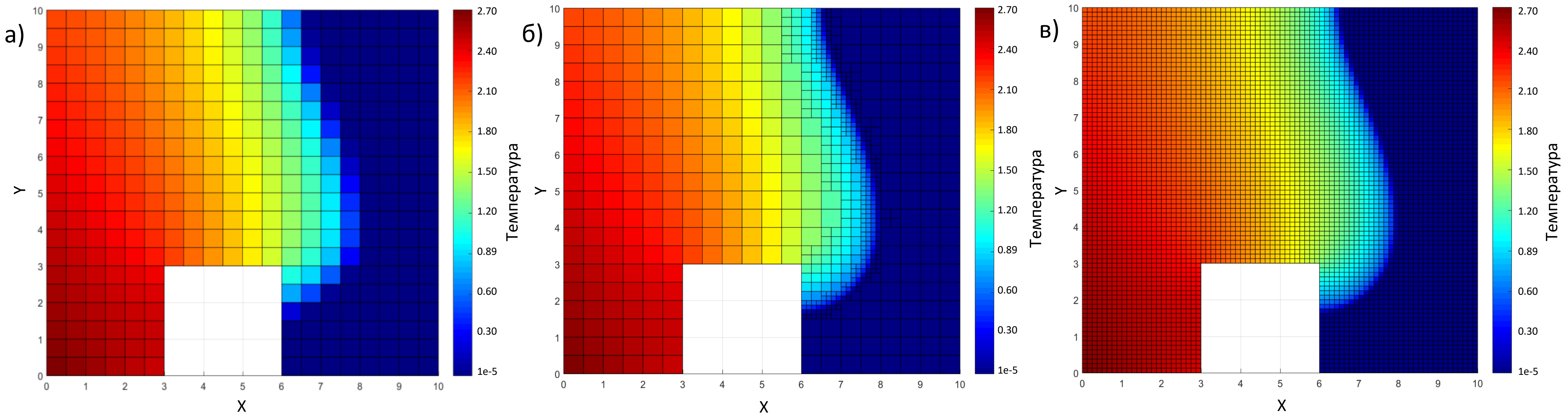
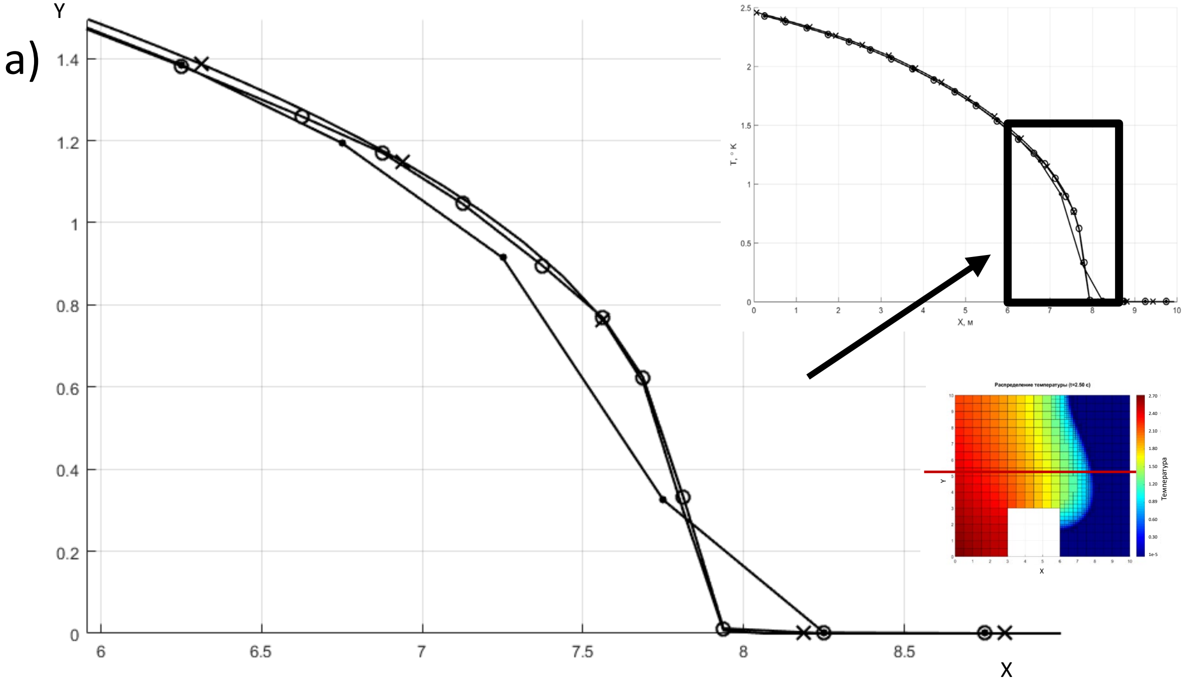


Рисунок 12 – Полученные распределения температур при $t_{end} = 2.5$: на исходной сетке 20х20 без адаптации (а) и с адаптацией по градиенту температуры (б), на исходной сетке 80х80 без адаптации (в).

Полученные температурные распределения показывают, что адаптация сетки позволяет хорошо описывать участки с криволинейными адаптируемыми зонами. Фронт тепловой волны достаточно четко определяется и при использовании даже грубой сетки совместно с алгоритмом адаптации.

Сравнение численных решений



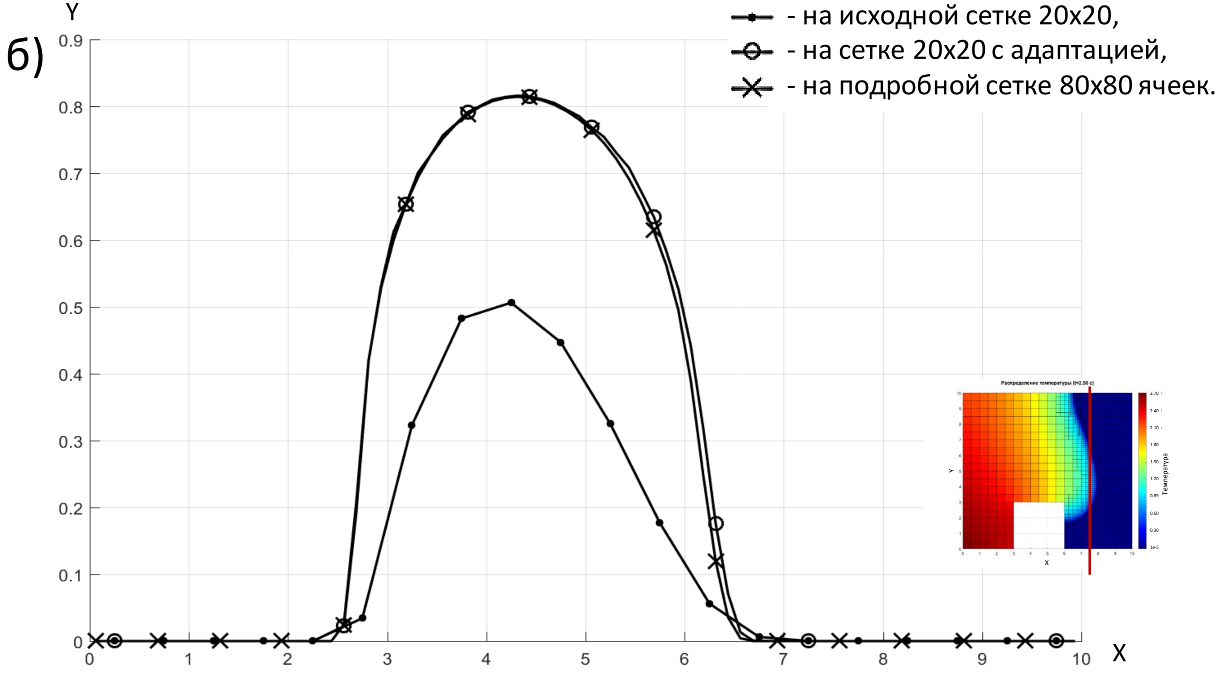


Рисунок 13 – Профили распределения температуры вдоль линий $x = 5.0156$ (а) и $y = 5.0156$ (б) на момент $t_{end} = 2.5$

Решение на адаптивной сетке практически совпадает с решением на подробной сетке в отличии от решения на исходной грубой сетке, значительно уступающего в точности.

Полученные температурные профили показывают, что <u>адаптация грубой сетки в зоне фронта тепловой волны позволяет получить численный результат достаточно близкий к решению на подробных регулярных сетках.</u>

Исследование нормы численного решения

РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

Таблица 1 – Сравнение разностных норм полученных численных решений на различных сетках и затраты по времени

Число ячеек исходной сетки	Исходная сетка			Адаптивная сетка		
	Норма *	Δ, %	Время счета, с	Норма *	Δ, %	Время счета, с
10×10	1.15015	-1.9	30	1.16633	-0.5	67
20×20	1.16421	-0.7	110	1.17130	-0.1	223
40×40	1.17002	-0.3	576	–	–	–
80×80	1.17242	0	2717	–	–	–

* Норма представлена разностным интегралом температурного распределения, нормированным на площадь заданной области

$$\|T\| = \frac{\sum_{k=0}^{K} T_k \cdot \Delta S_k}{S_G}$$

ΔS_k - площадь k-ой ячейки сетки, S_G - площадь области определения, T_k - температура в центре k-ой ячейки.

Численные решения на адаптивных сетках $\approx$ Численным решениям на регулярных сетках в 4 раза подробнее исходных

При этом затраченное на расчет время меньше примерно в **8-12** раз

Задача о воздействии теплового пучка на брусок Fe

РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

В области $G=[0\le x\le 0.1]\times[0\le y\le 0.02]$ при $t\in[0,t_{end}]$ для уравнения (3) решается начально-краевая задача

$$\begin{cases} T(x,y,0)=T_0=300, & x,y\in G,\\ W(0,y,t)=0, & y\in L,\\ W(0.2,y,t)=0, & y\in L,\\ W(x,0,t)=0, & x\in L,\\ W(x,0.02,t)=0, & x\in L,\ x<0.065,\ x>0.035,\\ T(x,0.02,t)=2000, & x\in L,\ 0.035\le x\le 0.065, \end{cases}$$

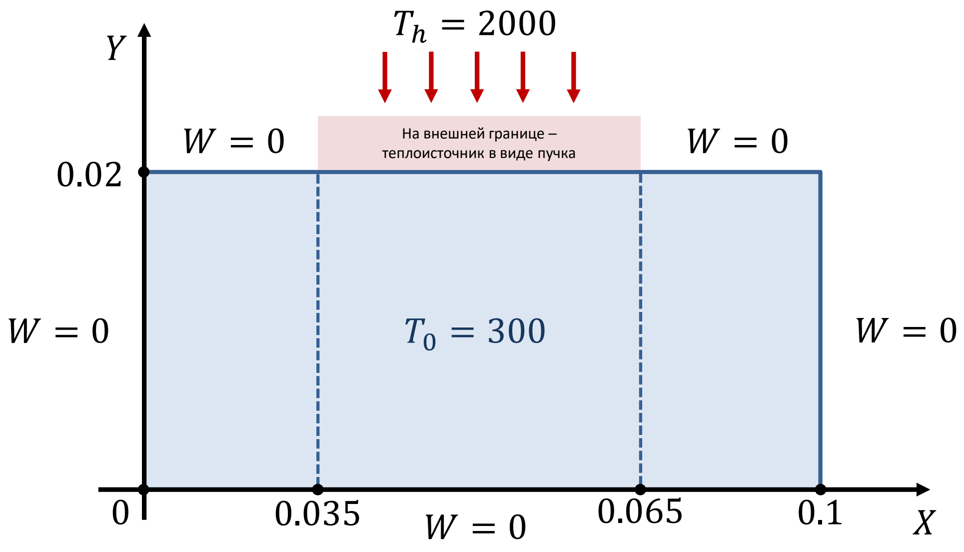


Рисунок 14 – Схематичное изображение задачи о воздействии теплового пучка

Заполняющее область G, вещество имеет характеристики[1]:

- Твердое тело $\chi_s=82\ Вт/(м\cdot K)$, $\rho_s=7870\ кг/м^3$, $c_s=674.7\ Дж/(кг\cdot K)$
- Расплав $\chi_l=39\ Вт/(м\cdot K)$, $\rho_l=7000\ кг/м^3$, $c_l=749.5\ Дж/(кг\cdot K)$

Для δ-функции задаются параметры $\Delta_f=300°K$.

Температура и удельная теплота фазового перехода соответственно

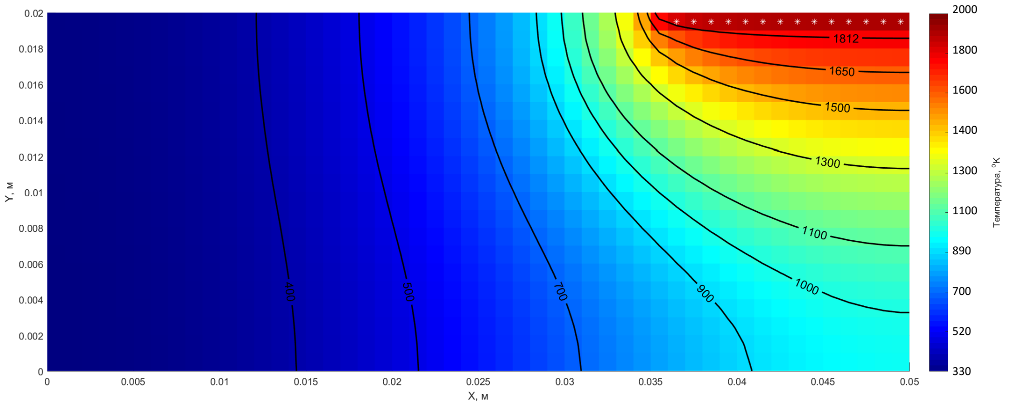
$$T_f=1812°K,\ L_f=2.7\times10^5\ Дж/кг$$

Все, представленные в данной задаче величины записаны в системе единиц СИ.

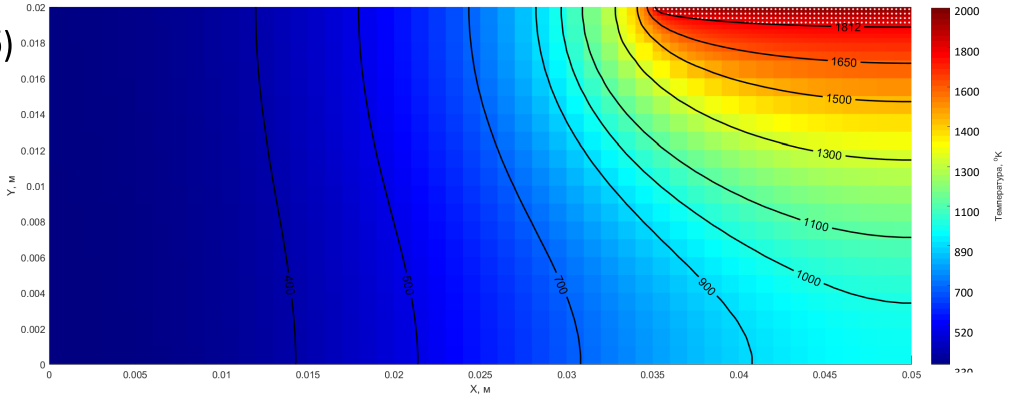
[1] Физические величины: справочник / Бабичев А.П., Бабушкина Н.А., Братковский А.М. и др. / под. ред. Григорьева И.С., Мейлихова Е.З. – М.: Энергоатомиздат, 1991.- 1232 с.

Сравнение решений на адаптивной и исходной сетках

а)



б)



в)

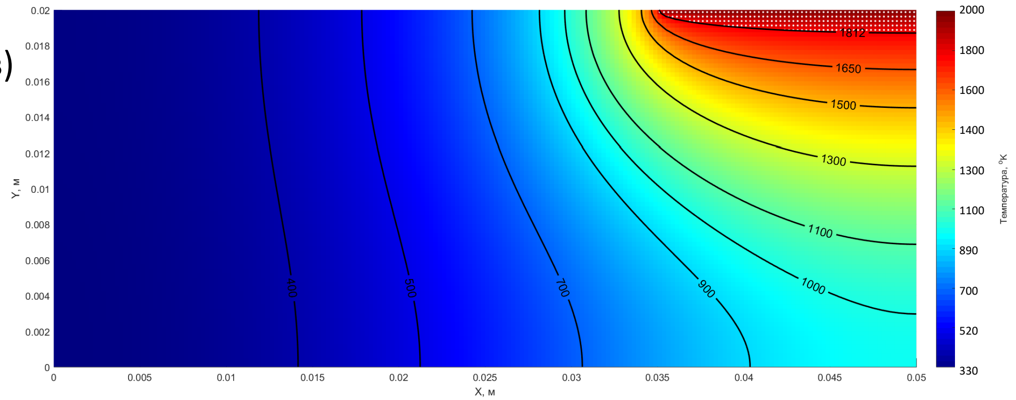


Рисунок 15 – Распределение температуры на участке области G полученные:
(а) - на исходной сетке 100x20;
(б) - на адаптивной сетке с исходным числом ячеек 100x20;
(в) - на подробной сетке 400x80

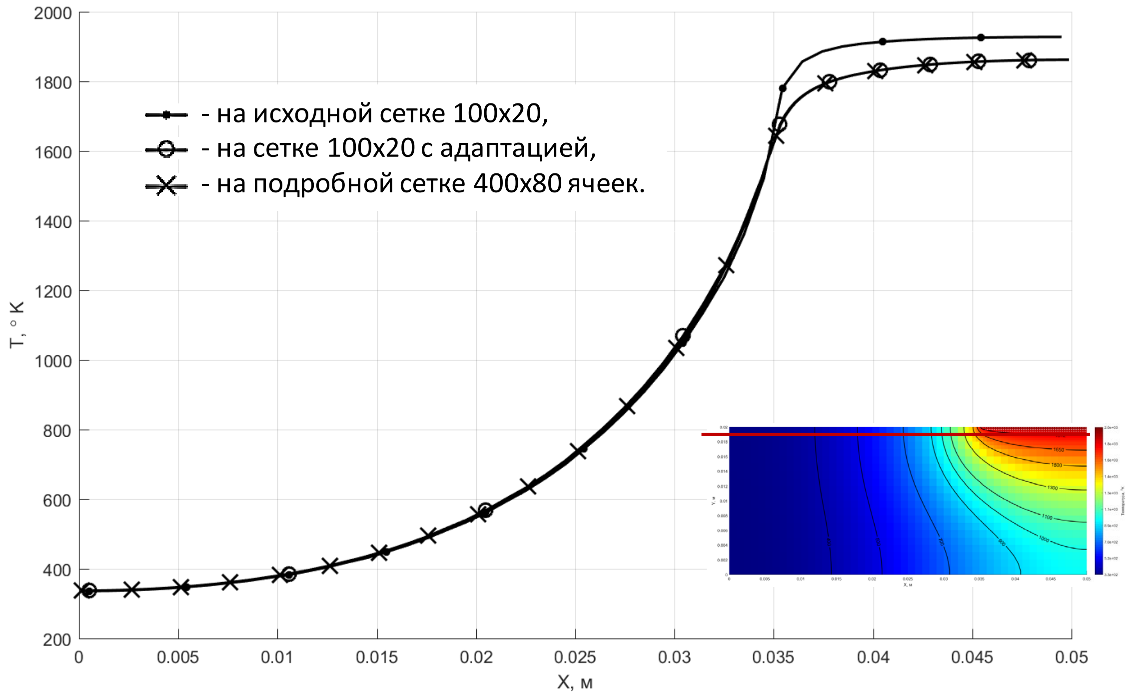


Рисунок 16 – Профили распределения температуры вдоль линий $x = 1.90625 \cdot 10^{-2}$ на момент $t_{end} = 10$

Решение на адаптивной сетке с исходным числом ячеек 100x20 значительно отличается от решения, полученного без адаптации, но при этом достаточно близко к решению, полученному на подробной сетке 400x80 ячеек. Особенно хорошо это видно на температурных профилях сечений вдоль оси X.

Сравнение решений на адаптивной и исходной сетках

РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

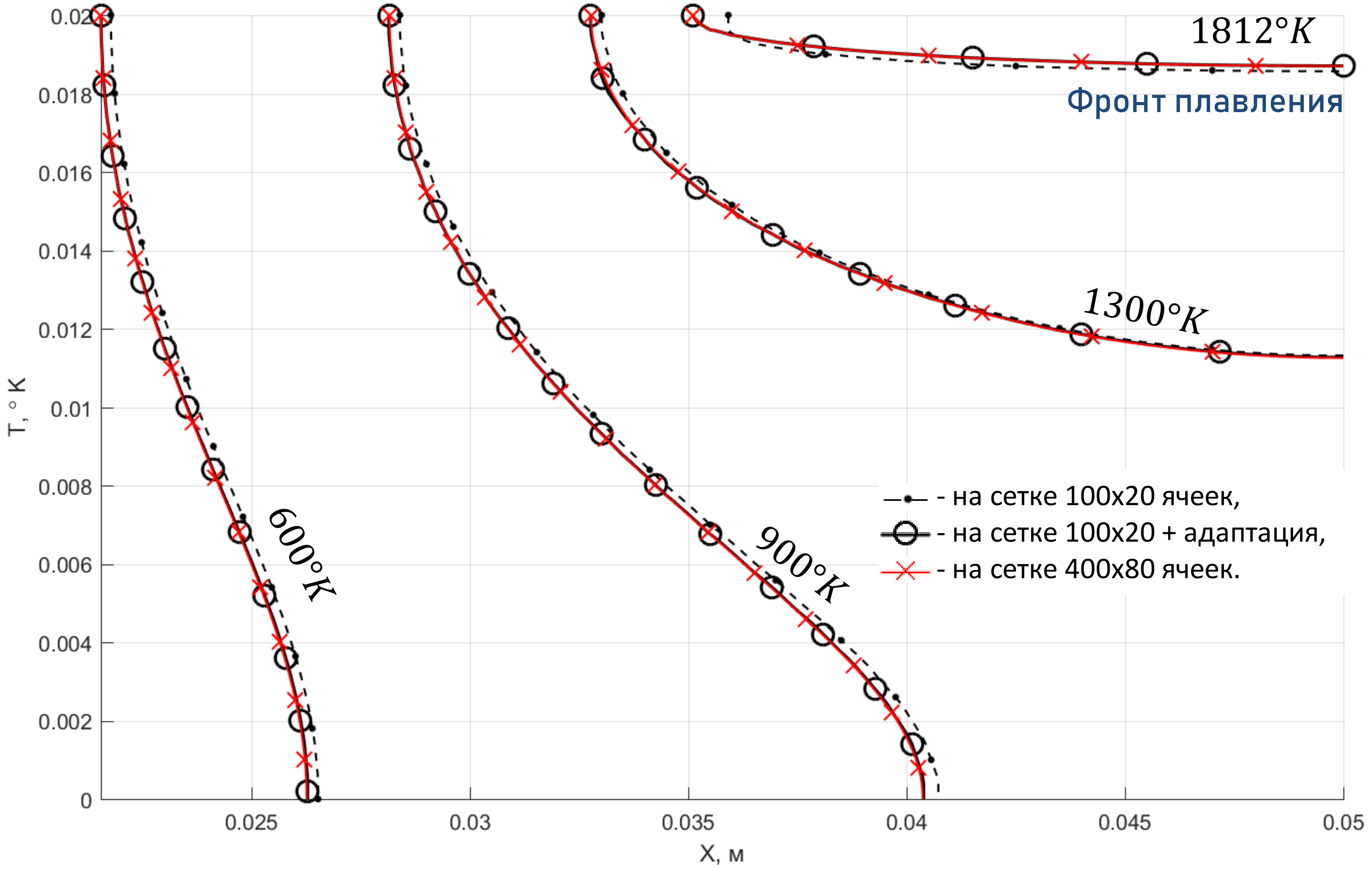


Рисунок 17 – Профили изолиний соответствующие некоторым температурам, включая температуру плавления

Профили изолиний, соответствующих выбранным температурам, для решений на подробной сетке 400x40 и на адаптивной сетке с исходным числом ячеек 100x10, также совпадают друг с другом.

Решение на грубой сетке согласно профилям изолиний значительно отличаются от решений на адаптивной сетке.

Сравнение норм численных решений

РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

Таблица 2 – Сравнение норм численного решения и времени вычисления на различных сетках

Число ячеек исходной сетки	Исходная сетка			Адаптивная сетка		
	Норма *	Δ , %	Время счета, с	Норма *	Δ , %	Время счета, с
100×20	749.161	-0.74	329	753.694	-0.14	1162
200×40	752.717	-0.27	1879	754.852	0.01	10302
400×80	754.174	-0.05	12086	–	–	–
800×160	754.745	0	83925	–	–	–

* Норма представлена разностным интегралом температурного распределения, нормированным на площадь заданной области

$$\|T\| = \frac{\sum_{k=0}^{K} T_k \cdot \Delta S_k}{S_G}$$

ΔS_k - площадь k-ой ячейки сетки,
S_G - площадь области определения,
T_k - температура в центре k-ой ячейки.

- Имеет место сходимость численных решений по мере измельчения разностной сетки.
- Имеется достаточно близкое соответствие норм численных решений, полученных на грубой сетке с алгоритмом адаптации и на подробной сетке в 4 раза мельче.

Такие большие преимущества по временным затратам связаны с тем, что измельчению подвергается лишь малая часть области решения задачи.

При этом затраченное на расчет с алгоритмом адаптации время меньше примерно в **8-10** раз

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

В данной работе:

- Рассмотрен метод сквозного счета, на основе применения разностного аналога δ-функции, для численного решения двумерных задач теплопроводности с фазовыми переходами (задач Стефана).
- Для повышения точности численного решения вводится адаптация разностной сетки по градиенту температур и в зоне границ фазовых переходов.
- Реализована разностная схема «Ромб» для решения рассмотренных задач на адаптивно-встраиваемых сетках.
- Для проведения численных расчетов был разработан пакет программ на языке программирования C++ и C++\CLI, включающий в себя пользовательскую оболочку и программу вычислений.
- Введение адаптивной сетки позволило значительно повысить точность решения при небольших затратах по времени расчета.
- Анализ результатов численного решения задачи о плавлении бруска железа показал, что преимущество применения адаптивных сеток для задач с фазовыми переходами сохранилось и в двумерном случае.