УДК 519.63

МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ НА ОСНОВЕ МЕТОДА ИСКУССТВЕННОЙ ГИПЕРБОЛИЗАЦИИ ОДНОМЕРНОЙ ЗАДАЧИ СТЕФАНА

Джураев Хайрулло Шарофович, Салмони Абдурахим

Таджикский национальный университет, г.Душанбе, Таджикистан

Дангаринский государственный университет, г. Дангара, Таджикистан

Аннотация: В работе рассматривается задача расчета температурного поля в стержне при наличии фазовых превращений одномерной задача Стефана на основе метода искусственной гиперболизации. На основании метода Галеркина для нестационарных задач строится численный аналитический метод решения задачи Стефана. Эффективность численного метода иллюстрируется серией вычислительных экспериментов.

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

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

Введение. Математическое моделирование как метод познания реальной действительности получило в последнее время широкое распространение в связи с исследованием сложных объектов, изучаемых в химии, биологии, физике и других науках, а также благодаря стремительному развитию вычислительной техники, позволяющей осуществлять собственно моделирование и получать необходимые практические результаты. В частности, развитием вычислительной техники появилась возможность получать при помощи вычислительного эксперимента достаточно достоверные данные о тепловых процессах, изучение которых в лабораторных или натурных условиях очень сложно, иногда просто невозможно и всегда требует значительных затрат средств и времени. Суть метода вычислительного эксперимента выражается триадой ≪модель - алгоритм - программа≫, что предполагает решение трех взаимосвязанных задач: построение математической модели, разработка алгоритма решения и составление компьютерной программы для его численной реализации [1].

В связи с этим представляется актуальным исследование реальных задач теплообмена при помощи вычислительного эксперимента, включая построение качественных и приближенных математических моделей изучаемых объектов, позволяющих прогнозировать, регулировать и управлять температурными режимами инженерных сооружений. В данной работе разработанные вычислительные алгоритмы используются для решения задач тепловой защиты автодорожного полотна, искусственного замораживания грунта и аккумулирования теплоты с использованием фазовых превращений ≪плавление - затвердевание≫. Общим в этих задачах является тепловая инерционность отдельных элементов рассматриваемых систем, использование которой позволяет управлять теплообменными процессами [2, 3].

В работе [4] рассматривается моделирование процессов тепломассопереноса, которые сопровождаются изменением агрегатного состояния среды (например, её плавлением или затвердеванием), вызывает необходимость 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.

Особенностью данной задачи является переменный размер области, в которой исследуется температурное поле. Это следствие того, что имеется подвижная граница раздела фаз. 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 [4-7].

В работах [8-10] исследовано математическая модель задачи включающие волновое уравнение нестационарного распространения тепла с учетом фазового превращения. Это уравнение дополняется краевыми условиями, определяемыми характером сопряжения тепловых потоков. Поэтому 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 на основе метода искусственном гиперболизации. Для решения задачи предлагается приближенный аналитический метод с использование метода Галёркина, с помощью которого были получены численные значения волнового температурного поля и приближенное уравнение границы фазового перехода.

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

Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие задачи:

- сформулировать задачу компьютерного моделирования и численного анализа процесса фазовых превращений;

- разработать метод решения задачи расчета волнового температурного поля при фазовых превращениях;

- разработать программный продукт, автоматизирующий решение расчета волнового температурного поля при фазовых превращениях;

- провести вычислительные эксперименты для различных параметров модели;

- провести анализ адекватности полученного решения.

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, отделена от других фаз поверхностью раздела [4, 11, 12]. Основной характеристикой фазовых превращений является температура, при которой фазы находятся в состоянии термодинамического равновесия (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 те, которые характеризуются 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 процессам 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 т.д. [11, 12].

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. [11,12].

Рассмотрим одномерную однофазную задачу Стефана [4, 6]. Возьмем отрезок $\Omega = [0,L]$, который точкой $x = \xi(t)$ (граница фазового перехода), $\xi(0) > 0$ разбивается на две подобласти:

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

Здесь часть Ω^{+} могут быть равно $\frac{2}{\sqrt{5}+1} * L$, а Ω^{-} равно $\frac{\sqrt{5}-1}{\sqrt{5}+1} * L$, и наоборот.

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

$$\alpha \frac{\partial^2 T_1}{\partial t^2} + \frac{\partial T_1}{\partial t} = \beta \frac{\partial^2 T_1}{\partial x^2}, \quad x \in \Omega^{+}(t), \tag{1}$$

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

$$\alpha \frac{\partial^2 T_2}{\partial t^2} + \frac{\partial T_2}{\partial t} = \beta \frac{\partial^2 T_2}{\partial x^2}, \quad x \in \Omega^{-}(t). \tag{2}$$

Дополним уравнение (1) начальным условием:

$$T_1\big|_{t=0} = T_0 < 0, \tag{3}$$

Пусть левый и правый концы поддерживаются при заданной температуре:

$$T_1\big|_{x=0} = T_c, \quad T_2\big|_{x=L} = T_0. \tag{4}$$

На границе фазового перехода выполнены следующие условия:

$$T_1\big|_{x=\xi-0} = T_2\big|_{x=\xi+0}, \tag{5}$$

$$\left.\frac{\partial T_2}{\partial x}\right|_{x=\xi+0} - \left.\frac{\partial T_1}{\partial x}\right|_{x=\xi-0} = \gamma\frac{d\xi}{dt}. \qquad (6)$$

Постоянная γ связана с энтальпией фазового перехода [6].

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 ξ(t) следует из принципа максимума для гиперболических уравнений.

Применение метода Галёркина. Для решения задачи (1) – (6) применим метод Галёркина [13]. Сделаем в задаче (1) – (6) замену

$$T(x,t) = \varphi(x) + u(x,t), \qquad (7)$$

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

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

Можно, например, взять

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

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

$$\alpha\frac{\partial^2 u_1}{\partial t^2} + \frac{\partial u_1}{\partial t} = \beta\frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2}, \quad t>0, \quad x\in\Omega^+(t), \qquad (8)$$

$$\alpha\frac{\partial^2 u_2}{\partial t^2} + \frac{\partial u_2}{\partial t} = \beta\frac{\partial^2 u_2}{\partial x^2}, \quad t>0, \quad x\in\Omega^-(t). \qquad (9)$$

$$\left.u_1\right|_{x=0} = 0, \quad \left.u_2\right|_{x=L} = 0, \qquad (10)$$

$$\left.u\right|_{t=0} = u_0 - \varphi, \qquad (11)$$

$$\left.u_1\right|_{x=\xi-0} = \left.u_2\right|_{x=\xi+0}, \qquad (12)$$

$$\left.\frac{\partial u_2}{\partial x}\right|_{x=\xi+0} - \left.\frac{\partial u_1}{\partial x}\right|_{x=\xi-0} = \gamma\frac{d\xi}{dt} - (\delta - 1)\frac{u_0 - u_c}{L}. \qquad (13)$$

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

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

где $c_k(t), k = 1,2,\cdots,n-$ неизвестные функции; $\varphi_k(x), k = 1,2,\cdots,n-$ координатные функции.

В качестве координатных функций можно взять, например,

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

где $P_m(z)-$ полиномы Лежандра.

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

$$R_n(x,t,c_1,c_2,\cdots,c_n) = \begin{cases} \sum\limits_{k=1}^{n}(\alpha c_k''(t) + c_k'(t))\varphi_k(x) - \sum\limits_{k=1}^{n} \beta c_k(t)\dfrac{d^2\varphi_k(x)}{dx^2}, x \in \Omega^+ \\ \sum\limits_{k=1}^{n}(\alpha c_k''(t) + c_k'(t))\varphi_k(x) - \sum\limits_{k=1}^{n} \beta c_k(t)\dfrac{d^2\varphi_k(x)}{dx^2}, x \in \Omega^- \end{cases} \qquad (15)$$

Функции $c_1(t), c_2(t), \cdots, c_n(t)$ найдем из условия ортогональности невязки (15) функциям $\varphi_1(x), \varphi_2(x), \cdots, \varphi_n(x)$:

$$\left.\left(R_n(x,t,c_1,c_2,\cdots,c_n), \quad \varphi_j(x)\right)\right|_{L_2(0,L)} = 0, \quad j = 1,2,\cdots,n. \qquad (16)$$

После преобразований (16) примет вид

$$\sum_{k=1}^{n}(\alpha c_k''(t) + c_k'(t))a_{kj} + \sum_{k=1}^{n}\beta c_k b_{kj} = 0, \quad j = 1,2,\cdots,n, \qquad (17)$$

где обозначено

$$a_{kj} = \int_0^{\xi(t)} \varphi_k\varphi_j dx + \int_{\xi(t)}^{L} \varphi_k\varphi_j dx, \; b_{kj} = -\beta\int_0^L \frac{d^2\varphi_k}{dx^2}\varphi_j dx, \quad k,j = 1,2,\cdots,n.$$

Подставив (14) в начальное условие, получим невязку

$$r(x,c_1(0),c_2(0),\cdots,c_n(0)) = \sum_{k=1}^{n} c_k(0)\varphi_k(x) - (u_0 - \varphi). \qquad (18)$$

Числа $c_1(0), c_2(0), \cdots, c_n(0)$ найдем из условия ортогональности невязки (18) функциям $\varphi_1(x), \varphi_2(x), \cdots, \varphi_n(x)$:

$$\left(r_n(x, c_1(0), c_2(0), \cdots, c_n(0)), \quad \varphi_j(x)\right)\Big|_{L_2(0,L)} = 0, \quad j = 1, 2, \cdots, n. \tag{19}$$

Итак, начальные условия $c_k(0), k = 1, 2, \cdots, n$, для (17) получим, решив систему линейных алгебраических уравнений, которая получается из условий (19):

$$\sum_{k=1}^{n} c_k(0) g_{kj} = h_j, \quad j = 1, 2, \cdots, n, \tag{20}$$

где обозначено $g_{kj} = \int_0^L \varphi_k \varphi_j dx, \quad h_j = \int_0^L (u_0 - \varphi)\varphi_j dx, \quad k, j = 1, 2, \cdots, n.$

Известно, что для задачи Стефана на полупрямой фронт фазового перехода распространяется по закону $\xi(t) = d\sqrt{t}$ [6]. В нашей задаче зависимость ξ(t) будем искать именно в таком виде (можно выбрать параметра $d = \dfrac{2}{\sqrt{5}+1}$ или $d = \dfrac{\sqrt{5}-1}{\sqrt{5}+1}$). Для нахождения параметра α была использована аппроксимация методом наименьших квадратов на основании условий (12), (13) и полученного приближенного по методу Галёркина решения.

Выводы. Впервые предложен метод расчета волнового 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 Matlab, с помощью которого проведен ряд вычислительных экспериментов.

Литература

1. Самарский А.А. Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры. 2.-е изд. исп. /А.А. Самарский, А.П. Михайлов// -М.: Физ-матлит. -2001. -320 с.

2. Попов, Ф.С. Влияние теплоизоляции на тепловой режим автодороги. / Ф.С. Попов, С.П. Шкулев, И.И. Рожин // Физико-технические проблемы Севера: Труды международной конференции. Ч. I. -Якутск: ГУП ≪Полиграфист≫ ЯНЦ СО РАН. -2000. –С.297-309.

3. Попов, Ф.С. Алгоритм численного решения инженерных задач теплопроводности. / Ф.С. Попов, И.И. Рожин // Ресурсы строительного комплекса Республики Саха (Якутия): Сборник научных трудов. - Якутск: Якутский гос. инж.-технич. Институт. -2001. –С.137-142.

4. Прусаков, Г.М. Математические модели и методы в расчетах на ЭВМ. / Г.М. Прусаков// -М.: Наука. -1993. -144 с.

5. Левин, В.И. Уравнения математической физики. / В.И. Левин, И.Г. Араманович // -М.: Наука. -1969. -288 с.

6. Самарский, А.А. Вычислительная теплопередача. / А.А. Самарский, П.Н. Вабищевич // -М.: Едиториал УРСС. -2003. -784 с.

7. Мартинсон, Л.К. Дифференциальные уравнения математической физики. 2-е изд. / Л.К. Мартинсон, Ю.И. Малов / -М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана. -2002. -368 с.

8. Джураев, Х.Ш. Явления переноса энергии и массы в конденсированных средах: математическое моделирование, оптимизация, практические приложения. /Х.Ш. Джураев// -Душанбе: ЭР-граф. -2021.-236с.

9. Джураев, Х.Ш. Математическое моделирование нелинейных явлений стационарной теплопроводности. /Х.Ш. Джураев, А.М. Наджмиддинов // -Душанбе: Ирфон. -2017. -120 с.

10. Джураев, Х.Ш. Исследование процессов тепло и массопереноса в конденсированных средах методом искусственной гиперболизации /Х.Ш. Джураев, К. Комилов, З.С. Норматов // -Душанбе: Сино. -2019. -101с.

11. Подгорный, А.Р. Численный анализ одной задачи фазовых превращений /А.Р. Подгорный// 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.

12. Подгорный, А.Р. Об одной проблеме математического моделирования фазовых превращений /А.Р. Подгорный// Материалы XVIII Международного молодежного форума «Радиоэлектроника и молодежь в XXI веке» (Харьков, ХНУРЭ, 14 – 16 апреля 2014). Т. 7. -С. 130 – 131.

13. Михлин, С.Г. Численная реализация вариационных методов./ Михлин С.Г.// -М.: Наука. -1966. -432 с.

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

Маълумот дар бораи муаллифон: **Љўраев Хайрулло Шарофович** – доктори илмњои физикаю математика, профессори кафедраи мошинњои њисоббарор, системањо ва шабакањои Донишгоњи миллии Тољикистон. **Суроға:** 734025, Тољикистон, ш. Душанбе, хиёбони Рўдакї, 17. **Телефон:** (+992) 917-30-70-60. **E-mail:** hayrullo_58@mail.ru.

Салмони Абдурањим- саромузгори кафедраи информатика ва телекоммуникатсияи Донишгоњи давлатии Данғара. **Суроға:** 735360, Љумњурии Тољикистон, ш. Данғара, кўчаи Марказї, 16. **Телефон:** (+992)988-16-11-12. **E-mail:** @mail.ru.

Сведение об авторах: **Джураев Хайрулло Шарофович** – доктор физико-математических наук, профессор кафедры вычислительных машин, систем и сетей Таджикского национального университета. **Адрес:** 734025, Республика Таджикистан, г. Душанбе, проспект Рудаки, 17. **Телефон:** (+992) 917-30-70-60.**E-mail**: hayrullo_58@mail.ru.

Салмони Абдурахим – старший преподаватель кафедры информатики и телекоммуникации Дангаринского государственного университета **Адрес:** 735360, Республика Таджикистан, г. Дангара, улица Центральный, 16. **Телефон**: (+992) 988-16-11-12. **E-mail:**.

Information about the authors: **Juraev Khayrullo Sharofovich** – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Head of the Department of Computing Machines, Systems and Networks of Tajik National University. **Address:** 734025, Republic of Tajikistan, Dushanbe, Rudaki Avenue, 17. **Phone:** (+992) 917-30-70-60. **E-mail:** hayrullo_58@mail.ru.

Salmoni Abdurahim – Assistant of the Department of Mathematical Analysis and Theory of Functions of Faculty of Physical and Mathematical of Dangara State University. **Address:** 735360, Republic of Tajikistan, Daygara, Central Street, 16. **Phone:** (+992) 988-16-11-12. **E-mail:**.