

УДК 519.63

Спрощення методів чисельного моделювання задачі Стефана з явним виділенням границь розділу фаз

М.Г. Нестеренко, О.І. Нестеренко, В.М. Сахно

Нестеренко Микола Григорович

*к.ф.-м.н., доцент, доцент каф. програмного забезпечення інформаційно-вимірювальної техніки
Український державний хіміко-технологічний університет, пр. Гагаріна 8,
м. Дніпро, Україна, 49005
e-mail: ngn1950@gmail.com
<https://orcid.org/0000-0001-8451-4866>*

Нестеренко Олександр Іванович

*д.ф.-м.н., професор; професор кафедри енергетики
Український державний хіміко-технологічний університет, пр. Гагаріна 8,
м. Дніпро, Україна, 49005
e-mail: nesko@ukr.net;
<https://orcid.org/0000-0003-2880-6471>*

Сахно Вячеслав Миколайович

*к.ф.-м.н., доцент, доцент каф. вищої математики та фізики
Дніпровський державний аграрно-економічний університет, вул. Сергія
Єфремова 25, м. Дніпро, Україна, 49000
e-mail: sakhno1960@gmail.com;
<https://orcid.org/0000-0002-2314-4547>*

З розвитком обчислювальної техніки і прогресом в області моделювання фізико-хімічних процесів особливої актуальності набувають способи підвищення точності та спрощення алгоритмів і методів розрахунку математичних моделей. Дана робота присвячена проблемі Стефана, до якої зводяться завдання теплопереносу з фазовим переходом рідина - тверде тіло і дифузійного масопереносу з фазовими перетвореннями в твердому тілі (розпад твердих розчинів, нанесення дифузійних покриттів). Розглянуто особливості чисельного моделювання задачі Стефана в багатофазних системах. Проаналізовано можливості та недоліки існуючих чисельних методів вирішення цього завдання. Запропоновано три нових методи з виділенням рухливих міжфазних границь, на яких сіткова функція терпить розрив першого роду, що істотно спрощують алгоритм чисельного рішення цієї задачі. Порівняння запропонованих алгоритмів між собою та з існуючими чисельними методами проводилося на модельній задачі реакційної дифузії в твердому тілі, що представляє собою задачу Стефана в багатофазних системах, з використанням граничних і початкових умов, які допускають її аналітичне рішення. Проведене моделювання двох існуючих і трьох запропонованих методів показало, що а) метод рівноважної концентрації призводить до значних помилок на ранніх стадіях дифузійного процесу. Але з часом загальні властивості дифузії приводять до зменшення цих помилок. Тому цей метод пропонується для розрахунку кінцевого стану довготривалих дифузійних процесів.; б) методи лінійної інтерполяції та градієнта, що зберігається, практично не поступаються по точності загальноприйнятим алгоритмам і можуть бути використані для рішення задач Стефана в багатовимірній багатофазній постановці.

Ключові слова: задача Стефана, чисельні методи, межа розділу фаз, різницева схема, явне виділення рухомої границі.

Simplified methods of numerical modeling of Stefan's problem with explicit allocate of phase boundaries

Nesterenko Mykola Grigorovich

*Ph.D. of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Associate Professor software of information and measuring equipment
Ukrainian State University of Chemical Technology, 8 Gagarina Ave., Dnipro, Ukraine, 49005*

Nesterenko Alexander Ivanovich

*Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor; Professor of the Department of Energy
Ukrainian State University of Chemical Technology, 8 Gagarina Ave., Dnipro, Ukraine, 49005*

Sakhno Vyacheslav Mykolayovych

Ph.D. of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Associate Professor.

Dnipro State Agrarian and Economic University, vul. Serhiy Yefremov 25, Dnipro, Ukraine, 49000

With the development of computer technology and progress in the field of modeling physical and chemical processes, methods of increasing the accuracy, as well as simplifying the algorithms and methods for calculating mathematical models, become especially relevant. This work is devoted to the Stefan problem, to which the problems of heat transfer with a liquid-solid phase transition and diffusion mass transfer with phase transformations in a solid (decomposition of solid solutions, deposition of diffusion protective coatings) are reduced. The features of numerical modeling of the Stefan problem in multiphase systems are considered. The possibilities and disadvantages of existing numerical methods for solving this problem are analyzed. Three new methods are proposed with the allocate of moving interphase boundaries, on which the grid function suffers a discontinuity of the first kind, which greatly simplify the algorithm for the numerical solution of this problem. The comparison of the proposed algorithms with each other and with existing numerical methods has been carried out on a model problem of reaction diffusion in a solid, which is the Stefan problem in multiphase systems by using boundary and initial conditions that allow its analytical solution. The simulation of two existing and three proposed methods shows that a) the equilibrium concentration method leads to significant errors in the early stages of the diffusion process. But over time, the general properties of diffusion processes lead to a reduction of these errors. Therefore, this method is proposed to calculate the final state of long-term diffusion processes; b) methods of linear interpolation and conserved gradient in practice are not inferior in accuracy to generally accepted methods and can be used to solve the Stefan problems in a multidimensional multiphase setting.

Keywords: *Stefan problem, numerical methods, phase boundary, difference scheme, explicit selection of a moving border.*

Упрощение методов численного моделирования задачи Стефана с явным выделением границ раздела фаз

Нестеренко Николай Григорьевич

к.ф.-м.н., доцент, доцент каф. программного обеспечения информационно-измерительной техники

Украинский государственный химико-технологический университет, пр. Гагарина 8, г. Днепр, Украина, 49005

Нестеренко Александр Иванович

д.ф.-м.н., профессор; профессор кафедры энергетики

Украинский государственный химико-технологический университет, пр. Гагарина 8, г. Днепр, Украина, 49005

Сахно Вячеслав Николаевич

к.ф.-м.н., доцент, доцент каф.

Днепровський державний аграрно-економічний університет, вул. Сергія Ефремова 25, м. Днепр, Україна, 49000

С развитием вычислительной техники и прогрессом в области моделирования физико-химических процессов особую актуальность приобретают способы повышения точности, а также упрощения алгоритмов и методов расчета математических моделей. Данная работа посвящена проблеме Стефана, к которой сводятся задачи теплопереноса с фазовым переходом жидкость - твердое тело и диффузионного массопереноса с фазовыми превращениями в твердом теле (распад твердых растворов, нанесения диффузионных защитных покрытий). Рассмотрены особенности численного моделирования задачи Стефана в многофазных системах. Проанализированы возможности и недостатки существующих численных методов решения этой задачи. Предложено три новых метода с выделением подвижных межфазных границ, на которых сеточная функция терпит разрыв первого рода, которые существенно упрощают алгоритм численного решения этой задачи. Сравнение предложенных алгоритмов между собой и с существующими численными методами проводилось на модельной задаче реакционной диффузии в твердом теле, представляющей собой задачу Стефана в многофазных системах с использованием граничных и начальных условий, допускающих ее аналитическое решение. Проведенное моделирование двух существующих и трех предложенных методов показало, что а) метод равновесной концентрации приводит к значительным ошибкам на ранних стадиях диффузионного процесса. Но со временем общие свойства диффузионных процессов прозводит к уменьшению этих ошибок. Поэтому этот метод предлагается для расчета конечного состояния длительных диффузных процессов; б) методы линейной интерполяции и сохраняющегося градиента практически не уступают по точности общепринятым методам и могут быть использованы для решения задач Стефана в многомерной многофазной постановке.

Ключевые слова: *задача Стефана, численные методы, граница раздела фаз, разностная схема, явное выделение подвижной границы.*

1. Вступ

Сучасний стан обчислювальної техніки і вдосконалення методів обчислювальної математики відкриває нові можливості використання різних математичних моделей процесів і систем. До переваг моделювання можна віднести простоту зміни параметрів процесів, що протікають, та

відсутність складних умов експеримента і матеріальних витрат на унікальне експериментальне обладнання і матеріали.

Перспективним напрямком в моделюванні можна вважати математичні моделі, що базуються на побудованих відповідних фізичних механізмах процесів, що протікають. Ясно, що будь-яка фізична модель істотно відрізняється від реальної системи і є її деяким спрощенням. Тому, на першому етапі побудови математичної моделі необхідно з усієї сукупності процесів і зв'язків, що існують в даній реальній системі, виділити ті, які визначають її подальшу еволюцію і кінцевий стан. Далі, записати систему рівнянь, що описують виділені процеси і зв'язки, і вибрати методи дослідження отриманої моделі.

Дослідження працездатності в агресивних середовищах жароміцних конструкційних матеріалів з нанесеними різними захисними покриттями - оптимальний об'єкт математичного моделювання. Дороге устаткування, тривалість експериментів і екстремальні умови їх проведення підкреслюють основні переваги математичного моделювання.

З точки зору фізичного моделювання в ланцюжку процесів, що протікають в системі "метал основи - елемент насичення", лімітуючим (найповільнішим) процесом є дифузія елемента насичення в металі основи і у всіх шарах інтерметаллідних фаз системи "метал основи - елемент насичення", що утворилися. Причому, в загальному випадку, в результаті реакційної дифузії всі наявні міжфазні границі рухаються. Рухливість міжфазних границь призводить до еволюції області рішення задачі, що веде до значних математичних труднощів і включає цей клас задач в розділ математичної фізики, який називається - "проблема Стефана".

2. Постановка задачі

Розглянемо одновимірну модельну задачу Стефана для випадку дифузійного насичення матриці металу основи **A** елементом насичення **B** з урахуванням: а) появи в складі дифузійного покриття всіх (або декількох) шарів фаз бінарної діаграми стану системи **A-B**, б) еволюції міжфазних границь в процесі насичення.

Принципова схема розподілу концентрації елемента насичення **B** у матриці металу основи **A** (для трифазної системи $Q = 3$) приведена на рис 2.1.

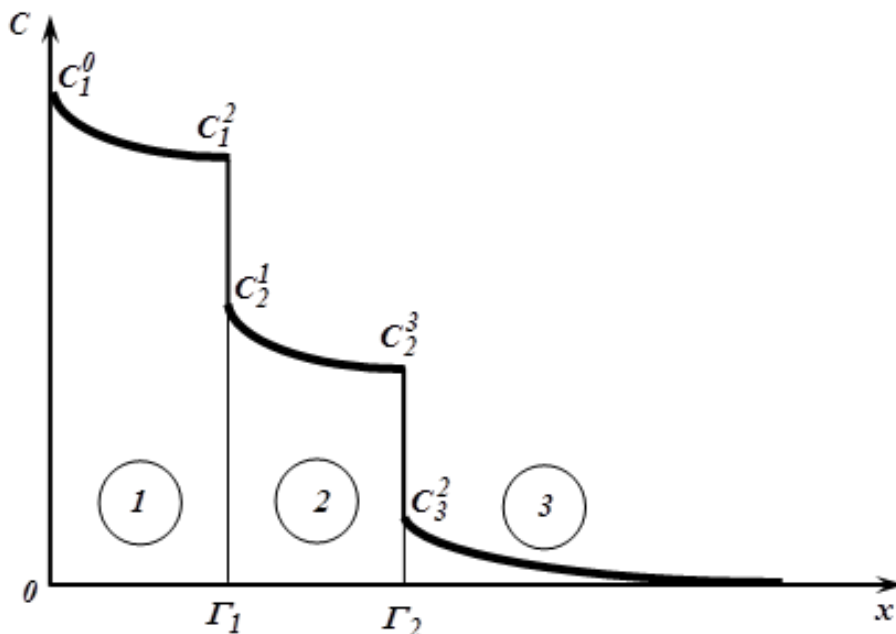


Рис. 2.1. Розподіл концентрації для трифазної системи

Дифузійні процеси в кожній з фаз описуються рівняннями:

$$\frac{\partial C_q}{\partial t} = D_q \frac{\partial^2 C_q}{\partial x^2}; \quad q = 1, 2, \dots, Q; \quad \Gamma_{q-1} \leq x \leq \Gamma_q; \quad (2.1)$$

$$\Gamma_0 \equiv 0; \quad \Gamma_Q \equiv l.$$

Де C_q - концентрація елемента насичення в q фазі;

q - номер фази, (відлік починається від поверхні $x = 0$);

D_q - коефіцієнт дифузії елемента насичення в q фазі;

Γ_q у Γ_{q-1} - координати q і $(q-1)$ міжфазних границь, відповідно;

Кожному конкретному способу дифузійного насичення відповідають конкретні крайові умови (початковий розподіл елемента насичення в металі основи, умови взаємодії на зовнішніх границях, геометрія зразка), які в загальному вигляді запишуться:

$$C(x, 0) = \varphi(x). \quad (2.2)$$

$$C_1(\Gamma_0) = f(t). \quad (2.3)$$

$$C_Q(\Gamma_Q) = \Phi(t). \quad (2.4)$$

На рухомих міжфазних границях q фази, відповідно до діаграми стану бінарної системи **A-B**, підтримуються рівноважні концентрації C_q^{q-1} і C_q^{q+1} , тобто виконуються граничні умови:

$$C_q(\Gamma_{q-1}, t) = C_q^{q-1}; \quad q = 2, 3, \dots, Q. \quad (2.5)$$

$$C_q(\Gamma_q, t) = C_q^{q+1}; \quad q = 1, 2, \dots, Q-1. \quad (2.6)$$

Все дифузійні процеси в багатофазній системі взаємопов'язані, так як на кожній рухомій границі, що розділяє q і $q+1$ фази, має виконуватися умова балансу маси:

$$-D_q \frac{\partial C_q}{\partial x} \Big|_{\Gamma_q} = -D_{q+1} \frac{\partial C_{q+1}}{\partial x} \Big|_{\Gamma_q} + (C_q^{q+1} - C_q^q) \frac{\partial \Gamma_q}{\partial t}, \quad (2.7)$$

Аналитичне рішення задачі (2.1) - (2.7) можна отримати [1] тільки при ідеалізованих умовах: а) напівнескінченної дифузійної зони; б) сталості граничних концентрацій і коефіцієнтів дифузії всередині фаз; в) миттєвого встановлення на поверхні насичення сталого значення концентрації елемента насичення; г) простого початкового розподілу концентрації типу $C(x, 0) = C_0 = const$.

На практиці ці ідеалізовані умови ніколи не виконуються. Відмова ж хоча б від одного з цих обмежень унеможливує отримання аналітичного рішення задачі (2.1) - (2.7). Більш повне урахування реальних крайових умов дифузійного експерименту стає можливим лише шляхом використання чисельних методів.

Чисельні методи для вирішення задачі Стефана з вільною (невідомою) межею [2] пов'язано з використанням двох класів методів. До першого класу відносять методи з виділенням границі розділу фаз (variable domain methods). До другого класу відносять [3] методи наскрізного розрахунку без виділення границі розділу фаз (fixed domain methods).

Кожен з цих методів має свої недоліки і переваги. Тому, в залежності від вимог до точності і простоти рішень, наочності їх подання, можна використовувати ті чи інші методи. Якщо в задачі немає необхідності точно визначити положення міжфазної границі і кінетику її руху, то методи наскрізного розрахунку дадуть можливість спростити алгоритм розрахунку і отримати прийнятний результат (зазвичай цей клас методів застосовується при розрахунку теплофізичних задач зі зміною агрегатного стану речовини: промерзання, кристалізація, плавлення). Однак, в разі реакційної дифузії, «розмазана» по деякому просторовому навколограничному інтервалу сіткова функція, яка на границі розділу фаз має розрив першого роду (на кожній рухомій міжфазній границі існує стрибок рівноважної концентрації дифузанта $\Delta C = C_q^{q+1} - C_q^q$, рис.2.1), не дозволяє точно визначити положення міжфазних границь. Тому неможливо використовувати

подібні методи як інструмент дослідження кінетики дифузійних процесів і фазових перетворень в таких системах.

Використання методів математичного моделювання для дослідження еволюції багатофазних дифузійних систем вимагає знання кінетики руху міжфазних границь, зміни товщини фаз, появи нових фаз і розчинення існуючих, тобто знання точного положення міжфазних границь в кожен момент часу.

Цим вимогам задовольняють лише методи з явним виділенням границі розділу фаз.

Існує думка, що методи з виділенням границі розділу фаз відрізняються складними алгоритмами і вимагають великих обчислювальних витрат. Однак сучасні персональні комп'ютери навіть середнього класу практично усувають проблему обчислювальних витрат. Складнощі ж алгоритму можна розбити на два типи:

а) складність відстеження форми границі розділу фаз (це стосується двох- і тривимірних задач);

б) складність визначення граничної умови крайової задачі всередині окремої фази через рухливості міжфазних границь.

З точки зору висунутих вимог розглянемо методи, які найбільш часто використовуються, До них відносяться: методи лову границі у вузол сітки, методи динамічної сітки (випрямлення фронту), метод подрібненого кроку по часу, метод допоміжної сітки.

Метод лову границі у вузол сітки [4] не має ніяких перерахованих складнощів і дуже економічний, але вимагає змінних за часом кроків, що робить його непридатним до багатовимірних і багатофазних задач, так як неможливо «зловити» в вузли сітки всі межі фаз одночасно.

Метод динамічної сітки [5] в разі багатофазних задач вимагає введення адаптаційної сітки з незмінним числом вузлів в межах однієї фази і подальшої інтерполяції сіткової функції в нові регулярні вузли рівномірної сітки. Це призводить до алгоритмічних складнощів і значним обчислювальним витратам.

Метод подрібненого кроку по часу має такі недоліки. Через подрібнений крок по часу, введення якого потрібно при кожному перетині рухомою границею регулярного вузла, ускладнюється алгоритм [6] обчислення граничної умови на новому часовому шарі, а також втрачається точність розрахунку сіткової функції через різні величини кроків по часу, які використовуються в околиці рухомої границі і внутрішніх вузлів фази. Це призводить до принципових труднощів в багатовимірній постановці задачі.

Комбінація методів подрібненого кроку по часу і динамічної сітки, наведена в [7], відрізняється складним алгоритмом реалізації розрахунків.

Метод допоміжної сітки [8], вирішує перераховані труднощі, але введення допоміжної сітки для точного визначення граничної умови на рухомій міжфазній границі веде до алгоритмічної складності методу.

Розглянемо можливість рішення поставленої задачі (2.1) - (2.7) з використанням більш економічної схеми.

3. Спрощення алгоритма рішення задачі Стефана.

Основні труднощі чисельних методів для вирішення задачі Стефана з явним виділенням границі розділу фаз на фіксованій рівномірної сітці полягає в тому, що при перетині міжфазною границею регулярного вузла ip' сітки в ньому не визначена сіткова функція, як на новому $C_q(ip', n+1)$, так і на старому $C_q(ip', n)$ часовому шарі (рис.3.1.).

Всі перераховані вище методи з явним виділенням границі розділу фаз дають можливість записати граничну умову (2.7) поблизу рухомої границі на новому $(n+1)$ часовому шарі з різним ступенем точності і різною можливістю адаптації до багатовимірних випадків

У даній роботі запропоновано три спрощених способи вирішення цієї проблеми, що дозволяють отримати рішення задачі Стефана в багатовимірній багатофазній постановці і, як буде показано нижче, з достатнім ступенем точності.

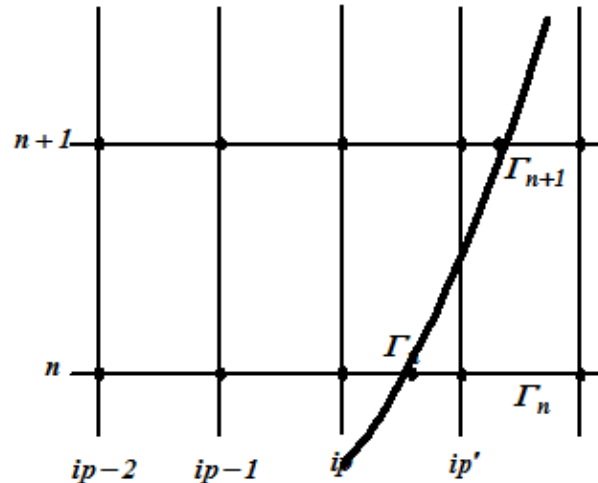


Рис.3.1 Поява нового регулярного вузла сітки у фазі

3.1. Метод рівноважної концентрації.

На протязі одного кроку по часу відбувається незначна зміна величини концентрації в вузлах сітки, то, в разі перетину границею вузла просторової сітки, можна вважати значення концентрації у вузлі, що з'явився, рівним рівноважній концентрації на цій міжфазній границі (рис. 3.1):

$$C^{n+1}(ip') = C_q^{q+1} \quad (3.1)$$

Отже, значення концентрації у вузлі ip' на новому $(n+1)$ часовому шарі виявляється відомим, і ми отримуємо граничну умову першого роду на цій міжфазній границі. Метод прогонки дозволяє знайти в даній фазі всі інші значення концентрацій у вузлах регулярної сітки на новому часовому шарі. Простота граничних умов спрощує алгоритми розрахунків і дозволяє використовувати цей метод для багатофазних багатовимірних задач.

Його недоліком є той факт, що при розрахунку положення границі розділу фаз на новому $(n+1)$ часовому шарі градієнт концентрації на рухомій границі в тій фазі, де з'явився новий регулярний просторовий вузол виявляється рівним нулю і границя буде на $n+2$ часовому шарі зміщуватися в зворотну сторону (зворотний рух). На наступних кроках по часу правильний рух границі відновлюється. Така помилка буде систематично спостерігатися при кожному перетині границею розділу фаз просторового вузла регулярної сітки, що призводить до накопичення помилки обчислення при визначенні положення границі розділу фаз.

3.2. Метод градієнта, що зберігається

Для зменшення помилок при визначенні положення міжфазної границі приймемо значення концентрації у вузлі ip' що з'явився, таким, щоб градієнт концентрації на міжфазній границі $(n+1)$ -го часового шару дорівнював би градієнту концентрації на цій границі n -го часового шару. Це приводить до наступного співвідношення:

$$\frac{C_q^{q+1} - C^{n+1}(ip')}{\Gamma_q(n+1) - ip'} = \frac{C_q^{q+1} - C^n(ip)}{\Gamma_q(n) - ip} \quad (3.2)$$

Елементарні перетворення дозволяють розрахувати значення концентрації у вузлі ip' на новому $(n+1)$ часовому шарі:

$$C^{n+1}(ip') = C_q^{q+1} + [C^n(ip) - C_q^{q+1}] \cdot \frac{\Gamma_q(n+1) - ip'}{\Gamma_q(n) - ip} \quad (3.3)$$

Якщо врахувати, що протягом одного кроку по часу границя не повинна перетинати більше одного просторового вузла: $(\Gamma_q(n+1) < \Gamma_q(n) + 1)$, то, вочевидь, множник $\frac{\Gamma_q(n+1) - ip'}{\Gamma_q(n) - ip}$ завжди буде менше 1.

Таким чином, отримуємо значення концентрації у вузлі ip' на новому часовому шарі, тобто приходимо до граничної умови першого роду на цій міжфазній границі. Даний метод, як і попередній, не вимагає подрібнення просторових і часових кроків і тому також може бути використаний для багатофазних багатовимірних задач.

3.3 Метод лінійної інтерполяції.

Так як на протязі одного кроку по часу зміщення границі розділу фаз не повинно перевищувати величину просторового кроку сітки, то граничну умову методу прогонки можна отримати, якщо записати рівняння лінійної інтерполяції значення концентрації у вузол ip' , що з'явився на новому $(n+1)$ часовому шарі.

$$C^{n+1}(ip') = C_q^{q+1} + [C^{n+1}(ip) - C_q^{q+1}] \cdot \frac{\Gamma_q(n+1) - ip'}{\Gamma_q(n+1) - ip} \quad (3.4)$$

Значення концентрації на границі C_q^{q+1} відоме і рівняння (3.11) буде пов'язувати концентрації в регулярних вузлах ip' , ip на новому часовому шарі, тобто буде граничною умовою методу прогонки. Після нескладних перетворень, приходимо до виразу:

$$C^{n+1}(ip') = \frac{C_q^{q+1}}{\Gamma_q(n+1) - ip} + C^{n+1}(ip) \cdot \frac{\Gamma_q(n+1) - ip'}{\Gamma_q(n+1) - ip}$$

Цей метод позбавлений зворотного руху границі розділу фаз на $n+2$ часовому шарі і, так як ніяких подрібнення просторового або часового кроку не потрібно, може бути використаний для багатофазних багатовимірних задач.

Необхідно відзначити, що лінійна інтерполяція значення концентрації у вузол ip' завжди буде давати невелике завищення значення концентрації в порівнянні з аналітичним рішенням. Це пов'язано з тим, що реальний розподіл концентрацій є увігнутою функцією координат, і будь-яка лінійна інтерполяція в середину відрізка завжди дає трохи завищене значення.

Помилка, пов'язана з такою поведінкою функції розподілу концентрації, виникає і при обчисленні градієнтів концентрації на рухомих границях розділу фаз. Ці системні помилки обчислення градієнтів носять такий характер, що призводять до збільшення швидкості руху границі (рис. 3.2).

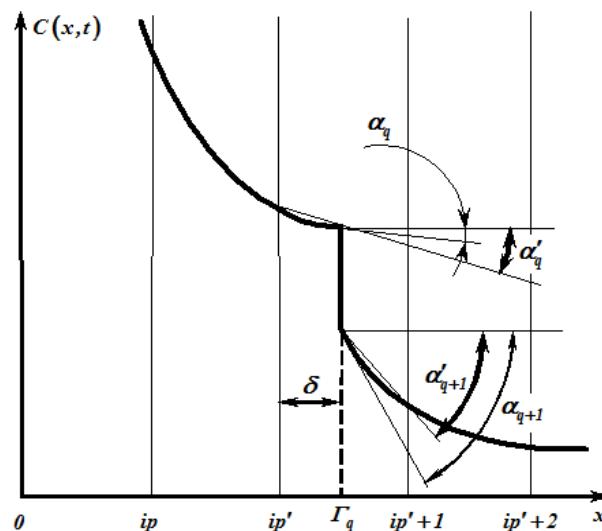


Рис.3.2 Помилки апроксимації градієнту увігнутої функції

На рис. 3.2 α_q, α_{q+1} - це аналітичні значення кутів нахилу дотичних на міжфазній границі в точках $x = \Gamma_{-0}$ і $x = \Gamma_{+0}$, відповідно. А α'_q, α'_{q+1} - значення кутів нахилу відрізків на міжфазній границі, які використовуються в процесі різницевої апроксимації градієнтів. Ясно, що завжди будуть виконуватися нерівності: $\alpha'_q > \alpha_q$ і $\alpha'_{q+1} < \alpha_{q+1}$. Тобто в результаті різницевої апроксимації потік дифузанта до міжфазної границі буде завжди більше істинного. З тієї ж причини потік дифузанта від міжфазної границі буде завжди менше істинного.

Згодом, коли реальний розподіл концентрації дифузанта наближається до лінійного, помилки обчислення градієнтів зменшуються, а швидкість руху границі розділу фаз, буде наближатися до аналітичного значенням.

Останнє зауваження стосується всіх без винятку чисельних методів рішення задачі Стефана з явним виділенням границі розділу фаз. Тому підвищення точності визначення градієнтів концентрації на міжфазній границі (з урахуванням зроблених зауважень) вимагає окремого розгляду

4. Порівняння точності запропонованих спрощених методів

Аналітичні рішення [1] показують, що при постійній концентрації дифузанта на зовнішній поверхні металу основи границя розділу фаз рухаються по параболічному закону ($\Gamma = 2\beta\sqrt{t}$, $\beta = const$ - параметр, що визначає положення рухомої границі) і швидкість руху зменшується обернено пропорційно \sqrt{t} .

В якості тестового прикладу розглядалася дифузійна задача про насичення напівнескінченної матриці **A** деяким елементом **B** з утворенням двох фаз, тобто з однією рухомою границею. Вихідні дані задачі мали такі значення:

$$C_1^0 = 30; C_1^2 = 20; C_2^1 = 10; C_2^3 = 0; C(x, 0) = 0;$$

$$D_1 = 2,3; D_2 = 0,992.$$

Таке формулювання задачі Стефана допускає аналітичне рішення. Згідно аналітичному [1] рішенню задачі (2.1) - (2.7) можна отримати параметр, який визначає положення рухомої границі (в цьому прикладі дорівнює $\beta = 0.61477$). Для того, щоб при чисельних розрахунках уникнути математичних складнощів в початковий $t=0$ момент часу, в якості початкового моменту вибирали момент $t = 25$, для якого за аналітичними формулами розраховували положення границі розділу фаз і розподіл концентрації в фазах. Використовуючи ці розрахунки як початкову умову, було проведено чисельне моделювання. Результати моделювання наведені в табл. 4.1.

Таблиця 4.1 Залежність положення міжфазної границі від часу

Час	Аналітика	Допоміжна сітка	Подрібнений крок по часу	Лінійна інтерполяція	Рівноважна концентрація	Градієнт, що зберігається
27	6,38888	6,41759	6,41759	6,41759	6,41759	6,41759
29	6,62128	6,65574	6,65574	6,65574	6,65574	6,65574
31	6,84579	6,88542	6,88542	6,88542	6,88542	6,88542
35	7,27406	7,32465	7,32469	7,33931	6,76828	7,35341
39	7,67847	7,73577	7,73579	7,74369	6,86492	7,75132
45	8,24801	8,32348	8,32351	8,34180	7,41147	8,35957
53	8,95119	9,03088	9,03091	9,04196	8,03941	9,05272
65	9,91287	10,00612	10,00613	10,01485	9,24215	10,02338
81	11,06586	11,17781	11,17782	11,19121	9,90947	11,19824
105	12,59904	12,71959	12,71960	12,73183	11,52313	12,73947
137	14,39140	14,52808	14,52809	14,53759	13,12185	14,54092
183	16,63291	16,78034	16,78035	16,78779	15,34942	16,79105

247	19,32374	19,48416	19,48417	19,49012	18,39198	19,49290
337	22,57135	22,74002	22,74003	22,74491	21,88442	22,74717
463	26,45655	26,63360	26,63360	26,63757	25,94208	26,63947
639	31,08086	31,26671	31,26671	31,26959	30,69900	31,27118
885	36,57752	36,76691	36,76691	36,76979	36,30402	36,77112
1229	43,10410	43,30026	43,30027	43,30240	42,91206	43,30379
1711	50,85898	51,05921	51,05922	51,06067	50,73288	51,06178
2387	60,07155	60,27497	60,27497	60,27628	60,00147	60,27748

Вочевидь, що всі наведені методи дають близькі результати, які мало відрізняються від аналітичного рішення. Для більш детального аналізу в табл.4. 2 наведені помилки $\Delta\Gamma$ кожного з методів:

$$\Delta\Gamma = \Gamma_p - \Gamma_a ,$$

де Γ_p - розрахункове положення міжфазної границі;

Γ_a -- аналітичне положення міжфазної границі.

Таблиця 4.2 Залежність помилки положення міжфазної границі від часу

Час	Допоміжна сітка ($\Delta\Gamma^1$)	Подрібнений крок по часу ($\Delta\Gamma^2$)	Лінійна інтерполяція ($\Delta\Gamma^3$)	Рівноважна концентрація ($\Delta\Gamma^4$)	Гradient, що зберігається ($\Delta\Gamma^5$)
27	0,02872	0,02872	0,02872	0,02872	0,02872
29	0,03446	0,03446	0,03446	0,03446	0,03446
31	0,03963	0,03963	0,03963	0,03963	0,03963
35	0,05060	0,05064	0,06525	-0,50578	0,07935
39	0,05729	0,05731	0,06522	-0,81355	0,07284
45	0,07547	0,07551	0,09380	-0,83654	0,11156
53	0,07970	0,07972	0,09078	-0,91178	0,10154
65	0,09325	0,09327	0,10198	-0,67072	0,11052
81	0,11195	0,11196	0,12535	-1,15639	0,13238
105	0,12055	0,12056	0,13280	-1,07590	0,14043
137	0,13669	0,13670	0,14619	-1,26955	0,14952
183	0,14743	0,14744	0,15488	-1,28349	0,15814
247	0,16043	0,16043	0,16638	-0,93176	0,16916
337	0,16867	0,16867	0,17355	-0,68694	0,17582
463	0,17705	0,17705	0,18103	-0,51446	0,18293
639	0,18584	0,18584	0,18872	-0,38187	0,19032
885	0,18939	0,18939	0,19227	-0,27350	0,19360
1229	0,19616	0,19616	0,19830	-0,19204	0,19969
1711	0,20023	0,20023	0,20169	-0,12611	0,20280
2387	0,20341	0,20341	0,20473	-0,07008	0,20593

На рис.4.1(а) побудовані графіки залежності помилки визначення положення міжфазної границі від часу (для всіх методів, що були розглянуті), а на рис.4.1(б) приведені ці ж графіки у збільшеному масштабі для деталізації розбіжностей методів на початковому етапі дифузійного насичення матриці.

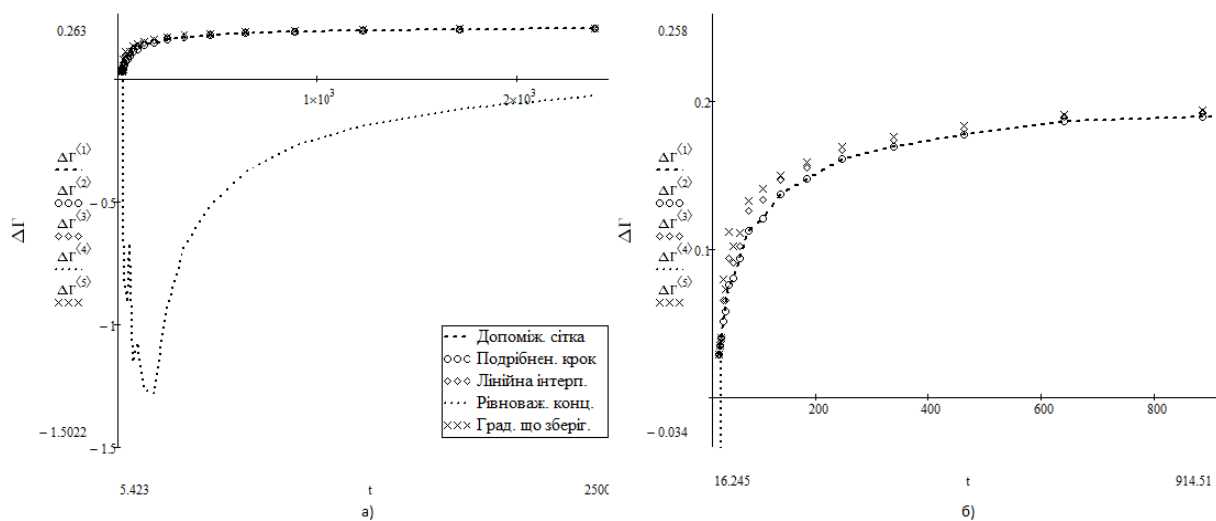


Рис.4.1 Залежність від часу помилок різних методів чисельних розрахунків

Всі методи, крім методу рівноважної концентрації, демонструють (рис.4.1) перевищення розрахованого значення положення границі розділу фаз над аналітичним значенням. На початковому етапі дифузійного насичення, коли увігнутість функції реального розподілу концентрацій значна, швидкість руху міжфазної границі велика, просторові вузли сітки перетинаються цією межею часто, метод рівноважної концентрації дає занижене значення положення міжфазної границі, що узгоджується з наведеними вище міркуваннями.

Решта методів демонструють (рис.4.1) практично однакову поведінку помилки визначення положення границі, що вказує на загальний механізм її виникнення, не пов'язаний зі способом обчислення граничної умови на рухомій границі при перетині нею просторового вузла сітки. Поведінка цих помилок з часом, повністю узгоджується із зауваженнями до рис. 3.2 . Можна припустити, що всі ці відхилення викликані систематичними помилками обчислення градієнтів концентрації на рухомих кордонах.

5. Висновки

1. При чисельному моделюванні довготривалого процесу дифузійного насичення та великих розмірах дифузійної зони положення міжфазних границь визначається якістю моделювання дифузійних процесів у матриці та усуненням систематичних помилок математичної моделі. Методи визначення граничних умов чисельного моделювання на рухомих міжфазних границях за цих умов менше впливають на визначення поля концентрацій та положення цих границь.

2. Метод рівноважної концентрації, особливо спочатку дифузійного насичення (коли швидкості руху міжфазних границь великі), призводить до значних помилок у визначенні положення міжфазних границь, але з часом ці помилки зменшуються і сягають прийнятних значень ($\square 0,3\%$) для моментів часу $t = 1000$ або більше. Тому цей простий метод можна використовувати при вивченні кінцевих станів довготривалих дифузійних процесів.

3. Методи лінійної інтерполяції і градієнта, що зберігається, практично не поступаються по точності загальноприйнятим алгоритмам (помилка при порівнянні з аналітичним розрахунком складає $\square 0,3\%$) і можуть бути використані для рішення задач Стефана в багатовимірній багатофазній постановці.

ЛІТЕРАТУРА

1. Тихонов А.Н., Самарський А.А. Уравнения математической физики. М.: Наука, 1977. 735 с. http://mat.net.ua/mat/Tihonov_Samarskiy-Marfizika.htm
2. Чеблакова Е. А. Моделирование конвекции в областях со свободными границами. *Вычислительные технологии*. 2000. Том 5, № 6. С.87-98. <https://cyberleninka.ru/article/n/modelirovanie-konveksii-v-oblastyah-so-svobodnymi-granitsami>

3. Курбатова Г.И. О расчете оледенения поверхностей в морской воде. *Вестник Санкт-Петербургского университета серия «Прикладная математика. Информатика. Процессы управления»*. 2018. Т. 14, Вып. 3. С. 186–199. [in Russian] http://www.mathnet.ru/php/archive.phtml?wshow=paper&jrnid=vspui&paperid=369&option_lang=us
4. Хасанов М.К., Столповский М.В. Численное решение задачи Стефана с несколькими границами фазовых переходов методом ловли фронта в узел сетки. *Фундаментальные исследования*. 2015. № 11-4. С. 748-752. [in Russian] <https://elibrary.ru/item.asp?id=25098376>
5. Королева О.Н., Мажукин В.И. Математическое моделирование лазерного плавления и испарения многослойных материалов. *ЖВМиМФ*. 2006. т.46, № 5. С. 910-924. [in Russian] <http://www.mathnet.ru/links/3dce284e6656ef1e1aafd2e7b16bcf40/zvmmf472.pdf>
6. Сафронов Д.И., Панов А.И., Самодолов А.В. Решение уравнения теплопроводности на неструктурированных сетках Дирихле с использованием экономичной схемы. *Вопросы атомной науки и техники, серия Математическое моделирование физических процессов*. 2009. вып. 4, С. 3-11. [in Russian] <https://elibrary.ru/item.asp?id=13918457>
7. Окулов Н.А. Об одном численном методе решения одномерных задач типа Стефана. *Вычислительные методы и программирование*, 2011, т. 12. С. 238-246. [in Russian] http://www.mathnet.ru/php/archive.phtml?wshow=paper&jrnid=vmp&paperid=191&option_lang=rus
8. Kulikov S.I., Nesterenko A.I., Nesterenko N.G. The solution of the two-dimensional Stefan problem in a multiply connected domane. *Comput. Maths Math. Phys*, 1993.Vol. 33, No. 3. P. 365-375, http://www.mathnet.ru/php/archive.phtml?wshow=paper&jrnid=zvmmf&paperid=2746&option_lang=eng

REFERENCES

1. A.N. Tikhonov, A.A.Samarskiy. *Equations of mathematical physics*. Moscow: Nauka, 1977,755p. [in Russian] http://mat.net.ua/mat/Tihonov_Samarskiy-Marfizika.htm
2. E.A. Cheblakova. “Simulation of convection in regions with free boundaries”. *Computational technologies*. Vol. 5, no. 6. pp. 87-98, 2000. [in Russian] <https://cyberleninka.ru/article/n/modelirovanie-konveksii-v-oblastyah-so-svobodnymi-granitsami>
3. G.I. Kurbatova. “On the calculation of glaciation of surfaces in sea water”. *Bulletin of St. Petersburg University series “Applied Mathematics. Computer science. Management Processes ”*. Vol. 14, Iss. 3. pp. 186–199, 2018. [in Russian] http://www.mathnet.ru/php/archive.phtml?wshow=paper&jrnid=vspui&paperid=369&option_lang=rus
4. M.K. Khasanov, M.V. Stolpovsky. “Numerical solution of the Stefan problem with several boundaries of phase transitions by the method of catching the front in a grid node”. *Fundamental research*. No. 11-4. pp. 748-752, 2015. [in Russian] <https://elibrary.ru/item.asp?id=25098376>
5. O.N. Koroleva, V. I.Mazhukin. “Mathematical modeling of laser melting and evaporation of multilayer materials”. *Journal of Computational Mathematics and Mathematical Physics*vol. Vol. 46, No. 5. pp. 910-924, 2006. [in Russian] <http://www.mathnet.ru/links/3dce284e6656ef1e1aafd2e7b16bcf40/zvmmf472.pdf>
6. D.I. Safronov, A.I. Panov, A.V. Samodolov. “Solving the heat equation on unstructured Dirichlet grids using an economical scheme”. *Atomic Science and Technology Issues, series Mathematical modeling of physical processes*. No. 4, pp. 3-11, 2009. [in Russian] <https://elibrary.ru/item.asp?id=13918457>
7. N.A. Okulov. “On a numerical method for solving one-dimensional problems of the Stefan type”. *Computational Methods and Programming*, Vol. 12, pp. 238-246, 2011. [in Russian] http://www.mathnet.ru/php/archive.phtml?wshow=paper&jrnid=vmp&paperid=191&option_lang=rus
8. S.I. Kulikov S.I., A.I. Nesterenko, N.G. Nesterenko. “The solution of the two-dimensional Stefan problem in a multiply connected domane”. *Comput. Maths Math. Phys*. Vol. 33, No. 3, pp. 365-375, 1993. http://www.mathnet.ru/php/archive.phtml?wshow=paper&jrnid=zvmmf&paperid=2746&option_lang=eng