

## ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ФИКТИВНЫХ ОБЛАСТЕЙ ДЛЯ ЗАДАЧ ТЕПЛОВОЙ КОНВЕКЦИИ

Ж. Л. КОРОБИЦЫНА

*Институт вычислительных технологий СО РАН, Новосибирск, Россия*

e-mail: juk@lchd.nsc.ru

А. С. ОВЧАРОВА

*Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, Новосибирск, Россия*

e-mail: ovcharova@hydro.nsc.ru

The method of fictitious domains is used for the solutions of Navie—Stoks equations in Oberbeck—Boussinesq approximation. The concret problems and numerical results are presented.

Численное моделирование термоконвективных процессов, происходящих в многослойной среде, включающей твердую и жидкую фазы, требует специальных подходов. Одной из основных трудностей является моделирование границы перехода фаз. При математическом описании процесса на этой границе формулируются условия типа условий Стефана. Возможны два типа методов при численном решении таких задач: методы с явным выделением линии фазового перехода и методы сквозного счета. В [1–3] содержится обзор литературы с анализом различных подходов к решению задачи Стефана.

Один из методов с явным выделением линии фазового перехода — метод декомпозиции области (МДО) — представлен в работе [4]. В [5] приводится описание метода сквозного счета с применением метода фиктивных областей для численного решения задачи Стефана (МФО). В первом методе решение задачи сводится к решению частных задач в каждой подобласти с краевыми условиями, являющимися либо условиями согласования решений в подобластях, либо краевыми условиями исходной задачи. Решение задач в подобластях унифицируется отображением каждой из них на единичный квадрат и введением общего расчетного модуля. Метод позволяет с высокой степенью точности отслеживать границу фазового перехода.

Во втором методе отыскание искомым функций в подобластях сводится к решению вспомогательной задачи во всей области. Сквозной расчет уравнения теплопроводности основан на идее сглаживания по температуре коэффициентов уравнения, способы реализации которой обсуждаются в [2, 6, 7]. Для уравнений движения жидкой фазы, формулируемых в нерегулярной области, методика сквозного счета основана на методе фиктивных областей. Он позволяет свести решение исходной задачи в нерегулярной области, соответствующей жидкой фазе, к решению вспомогательной задачи в регулярной области. Построение разностных схем на основе МФО приводит к схемам сквозного счета в регулярных областях. Метод прост в реализации и эффективен, когда допустима невысокая точность аппроксимации границы перехода фаз.

Описание МФО, основных результатов по его применению и обоснованию, а также наиболее полная библиография имеются в [3]. Среди работ, посвященных вопросам обоснования метода для уравнений Навье—Стокса, реализации его для численного решения задач вязкой несжимаемой жидкости выделим работы [8–10]. Применение МФО для двухфазной задачи Стефана с учетом конвекции в жидкой фазе при боковом прогреве рассмотрено в работах [11–12], в которых система уравнений второго порядка для функции тока  $\Psi$  и вихря скорости  $\omega$  преобразуется к уравнению четвертого порядка для функции  $\Psi$ .

В данной работе применение МФО к задачам тепловой конвекции с фазовым переходом иллюстрируется на примере двух задач тепловой конвекции с фазовым переходом. Для математического описания их привлекаются уравнения Навье—Стокса в приближении Обербека—Буссинеска. Область решения состоит из твердой и жидкой фаз. Уравнения для  $\Psi$  и  $\omega$ , описывающие движение жидкой фазы, в соответствии с идеологией МФО продолжают на всю область решения. Граница фазового перехода определяется по значению температуры.

В первой задаче моделируется взаимодействие твердой (сверху) и жидкой (снизу) фаз в прямоугольной области при подогреве снизу. Боковые границы теплоизолированы. Содержательно — это задача о взаимодействии тепловых конвективных течений в мантии Земли (жидкая фаза) и континентальной литосферы (твердая фаза) с учетом фазового перехода. Постановка задачи, метод ее решения достаточно подробно описаны в [5]. Постановка задачи, все вопросы, связанные с геофизикой исследуемого процесса,

\*Работа поддержана Советом поддержки ведущих научных школ (грант № 00–15–96162).

© Ж. Л. Коробицына, А. С. Овчарова, 2001.

рассматривались при активном участии д.г.-м.н. С. А. Тычкова. Авторы выражают сердечную благодарность Г. Г. Черных за действенную помощь в работе.

Во второй задаче исследуются конвективные течения, вызванные эффектами плавучести и термокапиллярности. Они возникают, например, при производстве кристаллов путем бестигельной зонной плавки. В этом случае решается задача о фазовом переходе ( граница жидкость — твердое тело) в области, имеющей свободную поверхность (граница жидкость — газ). Для решения задачи в [13] предложен метод расчета конвективных течений вязкой жидкости со свободной границей в переменных вихрь — функция тока и на основании этого метода в сочетании с МФО предложен метод решения задачи Стефана в области со свободной границей в переменных  $\Psi$  и  $\omega$ .

В работе приведено краткое описание методики решения каждой задачи и результатов численных расчетов, на основании которых можно сделать вывод об эффективности применения МФО в задачах тепловой конвекции с фазовым переходом.

## Задача I

### Постановка задачи

Исследуется взаимодействие тепловых процессов, происходящих в верхней мантии Земли и литосфере, в результате которого происходит прожигание литосферы. Верхняя мантия рассматривается как вязкая несжимаемая жидкость, литосфера — как твердое вещество. Прожигание литосферы моделируется как фазовый переход, то есть переход вещества из твердого состояния в жидкое под влиянием тепловых процессов.

Пусть подобласть  $\Omega$  соответствует жидкой фазе — мантии Земли, а подобласть  $\Omega_1$  соответствует твердой фазе — литосфере. Тогда область  $\Omega_0 = \Omega \cup \Omega_1$  — область решения задачи,  $\Omega \cap \Omega_1 = S(t)$  — граница фазового перехода (мантия Земли-литосфера) (см. рис. 1). Для описания процессов тепло- и массопереноса в жидкой фазе привлекается система безразмерных уравнений Навье — Стокса в приближении Обербека — Буссинеска при больших числа Прандтля. Эта система включает уравнения

$$\Delta\omega + \text{Ra} \frac{\partial T}{\partial x} = 0, \quad \Delta\Psi = -\omega, \quad (x, y) \in \Omega, \quad (1)$$

с начальными условиями и краевыми условиями скольжения

$$\omega|_{t=0} = \omega_0(x, y), \quad \Psi|_{t=0} = \Psi_0(x, y), \quad \omega|_{\partial\Omega} = 0; \quad \Psi|_{\partial\Omega} = 0. \quad (2)$$

Здесь  $\Psi(x, y)$  — функция тока,  $\omega(x, y) = \partial u/\partial y - \partial v/\partial x$  — вихрь скорости;  $u = \partial\Psi/\partial y$ ,  $v = -\partial\Psi/\partial x$  — компоненты вектора скорости  $\mathbf{U} = (u, v)$ ,  $\Delta$  — оператор Лапласа,  $T$  — температура,  $\text{Ra} = g\beta\sigma_T d^3/(K\nu)$  — число Рэлея,  $g$  — ускорение силы тяжести,  $\beta$  — коэффициент теплового расширения,  $\sigma_T = T_1 - T_2$  — перепад температуры,  $d$  — глубина ячейки,  $K = k/(\rho c)$  — коэффициент температуропроводности,  $k$  — коэффициент теплопроводности,  $c$  — коэффициент теплоемкости,  $\nu$  — коэффициент кинематической вязкости,  $\rho$  — плотность. *Обезразмеривание* вводится заданием характерных параметров:  $t_x = d^2/K$  — времени,  $U_x = K/d$  — скорости,  $P_x = \rho\nu K/d^2$  — давления,  $T_x = \sigma_T$  — температуры.

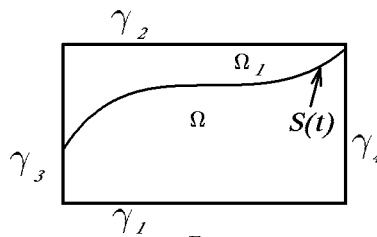


Рис. 1.

Следуя методике сквозного счета, основанной на результатах работы [6], температурное поле во всей области  $\Omega_0$  будем описывать уравнением

$$c_0(T) \left[ \frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{U}\nabla)T \right] = \text{div}(k \text{grad } T), \quad (x, y) \in \Omega_0, \quad t \in (0, \tilde{t});$$

здесь  $c_0(T) = c(T) + \lambda \cdot \delta(T - T^*)$  — обобщенный коэффициент теплоемкости, моделирующий фазовый переход на  $S(t)$ , член  $\lambda \cdot \delta(T - T^*)$  интерпретируется как сосредоточенная теплоемкость на поверхности  $T = T^*$ ;  $T^*$  — критическая температура или температура фазового перехода;  $k$ ,  $c$  — соответствующие

коэффициенты, которые здесь принимаются равными для твердой и жидкой фаз;  $\lambda$  — удельная теплота плавления;  $\delta(T - T^*)$  — дельта-функция. Свободная граница раздела фаз  $S(t)$  определяется значением температуры на этой границе:  $S(t) = \{(x, y) : (x, y) \in \Omega_0, T = T^*\}$ . После обезразмеривания уравнение преобразуется к виду

$$\bar{c}_0(T) \left[ \frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{U} \nabla) T \right] = \operatorname{div}(\bar{k} \operatorname{grad} T), \quad (x, y) \in \Omega_0, \quad t \in (0, \tilde{t}), \quad (3)$$

к которому добавим условия

$$T|_{t=0} = T_0(x, y), \quad T|_{\gamma_1} = T_1, \quad T|_{\gamma_2} = T_2, \quad \frac{\partial T}{\partial n}|_{\gamma_3 \cup \gamma_4} = 0, \quad (4)$$

где  $\bar{c}_0(T) = 1 + \lambda \cdot \delta(T - T^*)/c$ ;  $\bar{k}$ ,  $\bar{c}$  — безразмерные коэффициенты; для безразмерных величин  $T, T^*, \mathbf{U}$  используются те же обозначения. В [6] дано обоснование возможности применения такой постановки при решении задачи Стефана, а также необходимости замены дельта-функции  $\delta(T - T^*)$  “размазанной” функцией  $\delta(T - T^*, E_T)$ , равной нулю вне интервала температур  $[T^* - E_T, T^* + E_T]$ , а на нем задаваемой как  $\delta(T - T^*, E_T) = 1/(2E_T)$ . При численном решении эта функция сглаживается. Некоторые способы сглаживания указаны в [2, 6], в [2] дан их краткий обзор.

В области  $\Omega_1$  в соответствии с постановкой задачи (1)–(2)  $\mathbf{U} = \mathbf{0}$ , поэтому в  $\Omega_1$  уравнение (3) вырождается в уравнение

$$\bar{c} \frac{\partial T}{\partial t} = \operatorname{div}(\bar{k} \operatorname{grad} T), \quad (x, y) \in \Omega_1,$$

но расчет температурного поля в постановке задачи (3)–(4) позволяет использовать схемы сквозного счета.

#### Метод фиктивных областей

Задача (1)–(4) является задачей типа Стефана и относится к классу задач со свободной границей, так как граница фазового перехода подлежит определению. Численное решение задачи осуществим с применением МФО для системы (1)–(2) и метода сглаживания обобщенного коэффициента теплоемкости в (3), аналогично описанному в [2, с. 159]. Это позволит использовать разностные схемы сквозного счета без явного выделения линии фазового перехода.

В соответствии с МФО задачу (1)–(2) продолжим в область  $\Omega_1$ , не изменяя обозначений:

$$\Delta \omega = 0, \quad \Delta \Psi - \frac{1}{\varepsilon} \Psi = -\omega, \quad (x, y) \in \Omega_1. \quad (5)$$

Здесь  $0 < \varepsilon \ll 1$  — малый параметр МФО. Добавим условия согласования

$$[\Psi]|_{S(t)} = \left[ \frac{\partial \Psi}{\partial n} \right] |_{S(t)} = 0, \quad [\omega]|_{S(t)} = \left[ \frac{\partial \omega}{\partial n} \right] |_{S(t)} = 0 \quad (6)$$

и краевые условия

$$\omega|_{\partial \Omega_0} = 0, \quad \Psi|_{\partial \Omega_0} = 0. \quad (7)$$

Таким образом, решение исходной задачи (1)–(4) сводится к решению задачи, включающей уравнение (3) с условиями (4) и уравнения

$$\Delta \omega = f^\varepsilon, \quad \Delta \Psi - a^\varepsilon \Psi = -\omega, \quad (x, y) \in \Omega_0 \quad (8)$$

с условиями (6)–(7) и начальными условиями  $\omega(x, y, 0) = \Psi(x, y, 0) = 0$  в  $\Omega_0$ . Здесь  $a^\varepsilon = \{0, \text{если } (x, y) \in \Omega; 1/\varepsilon, \text{если } (x, y) \in \Omega_1\}$ ,  $f^\varepsilon = \{-\operatorname{Ra} \cdot \partial T / \partial x, \text{если } (x, y) \in \Omega; 0, \text{если } (x, y) \in \Omega_1\}$  в соответствии с (1) и (5).

#### Конечно-разностная аппроксимация

На интервале  $[0, \tilde{t}]$  изменения времени вводится равномерная сетка с шагом  $\tau$ . На  $\Omega_0$  строится равномерная разностная сетка. Здесь и в дальнейшем используются обозначения из [14].

При построении разностных схем для задач тепловой конвекции используются рекомендации работ [2, 16, 17]. Для уравнения (3) с условиями (4) используется схема продольно-поперечной прогонки (п.п.п.); схема реализуется скалярными прогонками. Апробировалась также схема стабилизирующей поправки, результаты применения этих схем аналогичны. Краевые условия (4) на  $\gamma_3 \cup \gamma_4$  аппроксимируются со вторым порядком точности по  $x$  на равномерной вблизи границы сетке. Правая часть  $f^\varepsilon = -\operatorname{Ra} \cdot \partial T / \partial x$

для функции  $\omega$  в (8) аппроксимируется центральной разностью. Таким образом, разностные схемы аппроксимируют дифференциальные задачи со вторым порядком точности по  $x, y$  и с первым порядком по временной переменной. Начальные условия задавались аналогично условиям, приведенным в работе [18]

$$\Psi_0(x, y) = 0, \quad \omega_0(x, y) = 0, \quad T_0(x, y) = (1 - y) + q \sin(\pi y) \cos(\pi x \mu),$$

$q = 0.01 \div 0.1$  — множитель,  $\mu = l/d$ ,  $l$  — горизонтальный размер ячейки,  $d$  — вертикальный.

При реализации численного алгоритма одним из факторов, существенно влияющих на решение исследуемой задачи, является способ вычисления в (3) обобщенного коэффициента теплоемкости  $\bar{c}_0(T)$  в области фазового перехода. Он сводится к выбору величины интервала температуры  $E_T$  для “размазывания” дельта-функции  $\delta(T - T^*, E_T)$  и способу сглаживания этой разрывной функции. Нами используется модификация одного из вариантов сглаживания, описанного в работе [2]. Он реализован сглаживанием по одной ячейке с введением весовых множителей, позволяющих учитывать температуру в соседних узлах. Функции  $a^\varepsilon$ ,  $f^\varepsilon$  сглаживаются в области, соответствующей интервалу температур  $[T^* - E_T, T^* + E_T]$ . В ней они задаются равными полусумме их значений в подобластях  $\Omega$  и  $\Omega_1$ .

Аппроксимация уравнений для функций  $\Psi$  и  $\omega$  приводит к системам линейных алгебраических уравнений с пятидиагональной матрицей  $A$ . Для решения этих систем применяется модифицированный попеременно-треугольный метод (м.п.т.м.) [17] с чебышевским набором параметров.

*Алгоритм решения задачи в целом состоит в следующем.* На каждом временном слое вводятся глобальные итерации. На каждой из них сначала определяется температура по схеме п.п.п. с функцией  $\Psi$  с предыдущей глобальной итерации. Затем по м.п.т.м. определяется функция  $\omega$ . Значения температуры берутся с предыдущего временного слоя. Далее вычисляется функция  $\Psi$  также по м.п.т. методу, но с матрицей и правой частью, соответствующими аппроксимации уравнения для функции  $\Psi$ . Значения функции  $\omega$  в правой части берутся с предыдущей глобальной итерации. Глобальные итерации оканчиваются либо по достижении требуемой точности, либо по ограничению числа итераций.

#### *Численные расчеты*

Каждая разностная схема тестировалась на аналитических решениях. Отклонения численного и аналитического решений на последовательности сеток находились в пределах погрешности аппроксимации.

**Задача тепловой конвекции в постановке (1)–(4) в однородной области (без фазового перехода)** при  $T_1 = 1$ ,  $T_2 = 0$  тестировалась на данных, опубликованных в работе [19], где объединены результаты двенадцати работ четырнадцати авторов по расчету задачи тепловой конвекции в квадратной ячейке ( $d = 1$ ,  $l = 1$ ) с вертикальным прогревом с применением различных методов и методик расчета.

В данной работе проведено сравнение по следующим характеристикам: число Нуссельта, безразмерная среднеквадратичная скорость, безразмерные значения температурных градиентов в угловых точках ячейки, глубина и значение локального экстремума температуры на средней линии  $x = 0.5$ . Результаты сравнения полученных характеристик с приведенными в [19] свидетельствуют о вполне приемлемой точности предлагаемого алгоритма. Не отвлекаясь на описание результатов, отметим, что на задаче о вертикальном прогреве анализировалось также **влияние горизонтальных размеров расчетной области на структуру тепловой конвекции** при  $Ra = 10^5$  и отношении размеров ячейки  $l/d = \{1, 2, 3, 5, 7\}$ . При этом, в частности, меняется структура течения — формируется несколько конвективных ячеек. Характер течения определяется и начальными условиями. Результаты расчетов удовлетворительно согласуются с результатами аналогичных расчетов, приведенных в литературе.

#### *Расчеты реального варианта задачи*

В качестве варианта реальной геодинамической задачи численно моделировалось развитие мелкомасштабной моды тепловой конвекции с учетом фазового перехода в прямоугольной области в постановке (8), (6)–(7), (3)–(4) — модельная задача прожигания литосферы. Нижняя граница литосферы  $S(t)$  в начале процесса задавалась линией  $y = y^0$ . При  $t > 0$  она определялась как линия фазового перехода, если  $T(x, y^0) \geq T^*$ , и как линия  $y = y^0$ , если  $T(x, y^0) < T^*$ .

Входная информация соответствовала следующим реальным данным:  $d = 700$  км,  $l/d = \{1, 2, 3, 5\}$ ,  $T_1 = 1800^\circ\text{C}$ ,  $T^* = 1200^\circ\text{C}$ ,  $T_2 = 0^\circ\text{C}$ ; первоначальная толщина литосферы  $y^0 = 210$  км,  $\nu = 10^{26}$  м<sup>2</sup>/с, удельная теплота плавления  $\lambda = 10$  кал/г. Прочие данные таковы, что  $t_x = 15.5 \cdot 10^9$  лет,  $Ra = 10^5$ ,  $K = 0.01$  см<sup>2</sup>/с,  $k = 0.008$  кал/(см·с·град). Начальные условия для температуры задавались по формуле

$$T_0(x, y) = (1 - y) + 0.01 \sin(\pi y) \cos(\pi x \mu).$$

Все варианты рассчитывались на последовательности сеток для пространственных и временной переменных. Конечное время расчета обеспечивало не только выход на установившийся стационарный режим, но и значительное пребывание в этом режиме. Данные расчетов таковы:

$l/d$	1 : 1	3 : 1	5 : 1
сетка	21 × 41	61 × 41	81 × 41
max $ \Psi $	28.3 – 28.5	29.4 – 29.6	30.2 – 30.4
$H$ , км	105	98	90
$Q$ , е.т.п.	0.562	0.558	0.557

Приведенные значения среднего теплового потока  $Q$  е.т.п. удовлетворительно согласуются со значением  $Q = 0.62$  е.т.п., полученным по приближенной формуле, используемой в геодинамике,  $Q \approx 2(Ra/Ra_{cr})^{1/3}k\sigma_T/d$ ,  $Ra_{cr} \approx 10^3$  — критическое число Рэлея. Величина  $H$  — минимальная толщина литосферы — близка к реальным значениям: средняя толщина континентальной литосферы принимается равной 70–100 км. Таблица иллюстрирует также, что увеличение горизонтального размера ячейки  $l$  не приводит к значительным изменениям основных характеристик процесса.

Результаты расчетов изображены на рис. 2 для варианта с  $l/d = 3$ . Приведены изотермы, изолинии функции тока  $\Psi$ , линия фазового перехода для установившегося стационарного режима, изображены динамика прожигания литосферы и динамика поведения среднего теплового потока на линии фазового перехода.

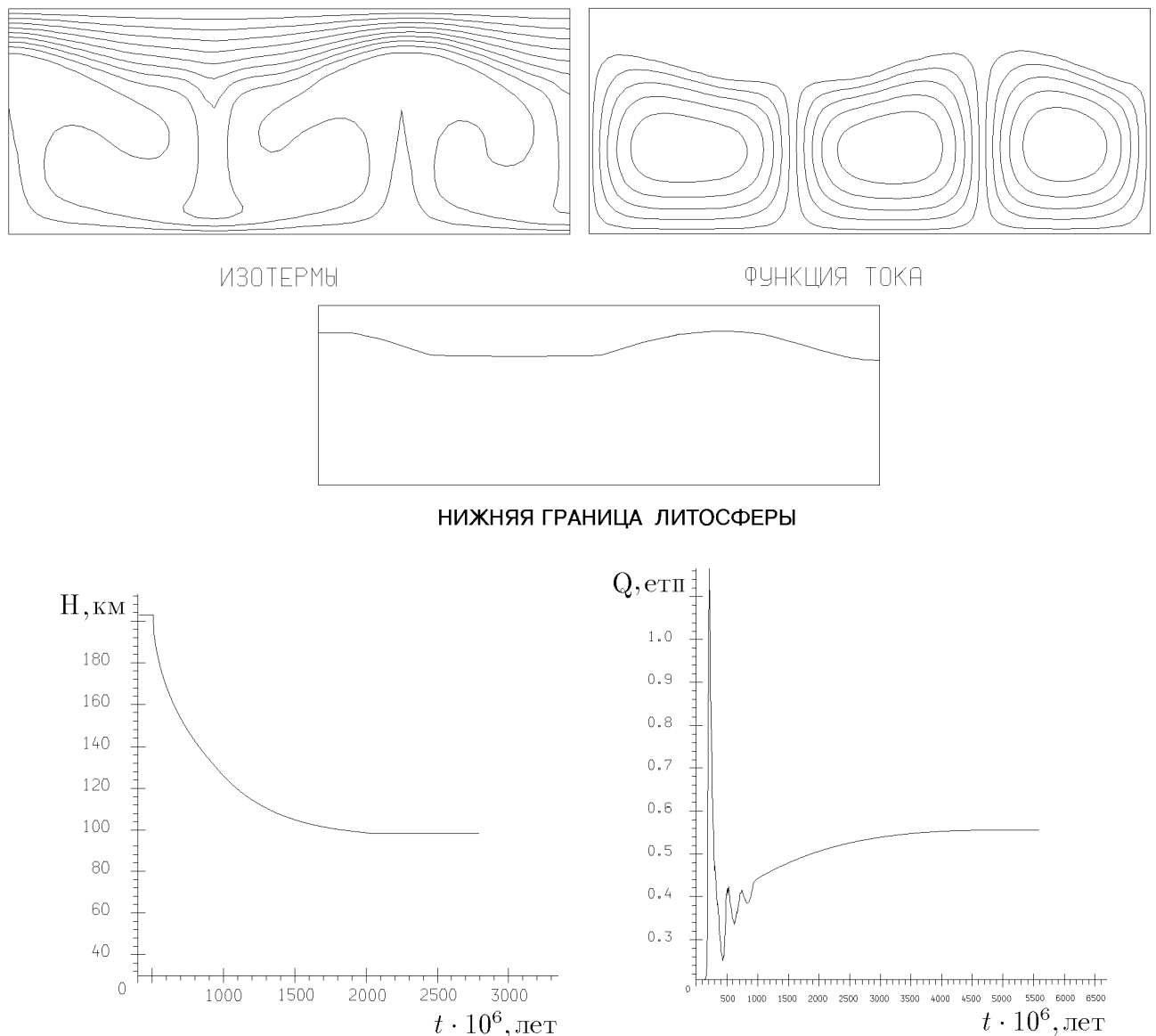


Рис. 2.

Таким образом, рассматриваемая методика численного моделирования исследуемого процесса позволяет достаточно точно определить основные характеристики процесса термоэрозии континентальной литосферы — толщину литосферы и величину теплового потока на поверхности Земли.

## Задача 2

Рассматриваются конвективные течения, вызванные эффектами плавучести (конвекция Грасгофа) и термокапиллярности (конвекция Марангони), возникающие, в частности, в производстве кристаллов путем бестигельной зонной плавки. Теплообмен и происходящие при этом конвективные течения в расплаве не только влияют на процессы кристаллизации (плавления), но и сами испытывают влияние этих процессов. Таким образом, при расчете жидкого моста решается задача Стефана о фазовом переходе (граница жидкость — твердое тело) в области, имеющей свободную поверхность (граница жидкость — газ).

В [13] для решения подобных задач была построена математическая модель и предложен метод расчета конвективных течений вязкой жидкости со свободной границей в переменных вихрь — функция тока, а также разработан алгоритм, позволяющий получить в явном виде граничные условия для  $\omega$  и  $\psi$  на свободной поверхности. Эти исследования позволили разработать математическую модель для численного решения плоской задачи Стефана о фазовом переходе в области, имеющей свободную границу. Модель основана на уравнениях Навье — Стокса в приближении Обербека — Буссинеска. Для численного решения этой задачи разработан алгоритм, основанный на сочетании двух методов: граница раздела жидкость — твердое тело находится с помощью метода сквозного счета с применением МФО, описанного выше для Задачи 1, а свободная поверхность жидкость — газ — с помощью метода, описанного в [13].

### Постановка задачи

Пусть  $GB = \{0 \leq x \leq L; 0 \leq y \leq f(x)\}$  — область решения задачи Стефана о фазовом переходе и  $\theta^*$  — температура фазового перехода. Граница раздела фаз  $S(t) = \{(x, y) : (x, y) \in GB, \theta = \theta^*\}$  разделяет область  $GB$  на две подобласти  $GB_1$  и  $GB_2$ , занятые жидкой и твердой фазами вещества соответственно, причем  $GB_1 = \{(x, y) : (x, y) \in GB, \theta \geq \theta^*\}$ ,  $GB_2 = \{(x, y) : (x, y) \in GB, \theta < \theta^*\}$ .  $f(x)$  — верхняя граница области  $GB$  (рис. 3). Процессы тепло- и массопереноса в жидкой фазе вещества описываются системой уравнений

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left( \omega \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( \omega \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) = \frac{1}{\text{Re}} \Delta \omega + \frac{\text{Gr}}{\text{Re}^2} \frac{\partial \theta}{\partial x}; \quad (2.1)$$

$$\Delta \psi + \omega = 0; \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left( \theta \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( \theta \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) = \frac{1}{\text{RePr}} \Delta \theta. \quad (2.3)$$

Здесь  $\text{Re}$ ,  $\text{Gr}$ ,  $\text{Pr}$  — числа Рейнольдса, Грасгофа и Прандтля, в качестве масштаба давления выбрана величина  $\rho v_0^2$ ,  $v_0$  — характерный масштаб скорости.  $\theta = (T - T_0)/\Delta T$ , где  $T_0$  — характерное значение температуры,  $\Delta T$  — перепад температур. Вектор силы тяжести  $\mathbf{g}$  параллелен оси  $y$  и направлен вниз.

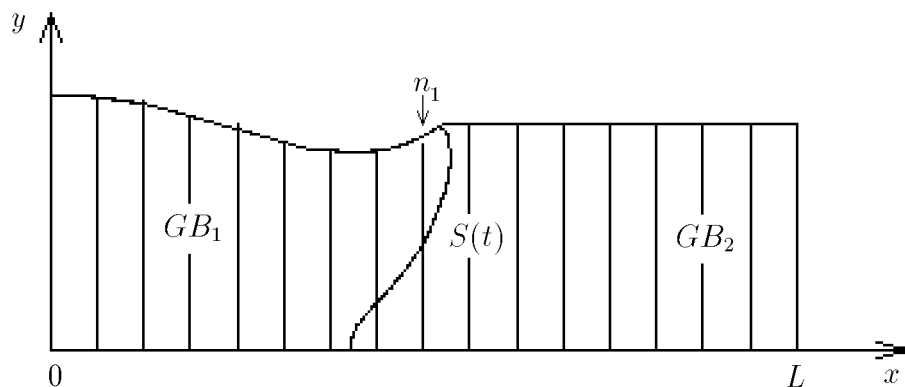


Рис. 3.

Для простоты изложения метода предположим, что теплофизические свойства вещества в каждой фазе постоянны; скачком плотности при фазовом переходе можно пренебречь. Функция тока введена соотношениями

$$u = \frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad v = -\frac{\partial \psi}{\partial x}.$$

Будем считать, что граничные условия, необходимые для решения системы (2.1)–(2.3), на боковых и нижней границах области  $GB$  заданы. На свободной границе ставятся кинематическое и динамическое условия.

Кинематическое условие имеет вид

$$f_t = v - f_x u. \quad (2.4)$$

Из динамического условия можно получить в явном виде граничные условия для  $\omega$  и  $\psi$  на свободной поверхности. Определим векторы нормали и касательной к свободной поверхности  $f(x)$  в каждой ее точке как

$$\mathbf{n} = \left\{ \frac{-f_x}{\sqrt{1+f_x^2}}, \frac{1}{\sqrt{1+f_x^2}} \right\}, \quad \mathbf{s} = \left\{ \frac{1}{\sqrt{1+f_x^2}}, \frac{f_x}{\sqrt{1+f_x^2}} \right\}$$

и предположим, что коэффициент поверхностного натяжения  $\sigma(T)$  зависит от температуры линейно

$$\sigma(T) = \sigma_0(1 - \sigma_T(T - T_0)), \quad \sigma_0 = \sigma(T_0), \quad \sigma_T = \frac{1}{\sigma_0} \frac{d\sigma}{dT} \Big|_{T=T_0}, \quad \sigma_0, \sigma_T > 0.$$

Далее введем обозначение. Пусть

$$v_s = \frac{\partial \psi}{\partial n} \Big|_{y=f(x)} \quad (2.5)$$

скорость жидкости в направлении касательной на свободной поверхности. Будем искать стационарное решение задачи (2.1)–(2.3). Тогда для точек, лежащих на свободной поверхности, будет выполняться соотношение

$$\frac{\partial v_s}{\partial t} + v_s \frac{\partial v_s}{\partial s} = -\frac{\partial P}{\partial s} - \frac{1}{\text{Re}} \frac{\partial \omega}{\partial n} + \frac{f_x}{\sqrt{1+f_x^2}} (\text{Gr}\theta - \text{G}). \quad (2.6)$$

Здесь и далее время  $t$  рассматривается как параметр.  $\text{G} = g_0 h_0 / v_0^2$  — число Галилея,  $g_0$  — ускорение свободного падения,  $h_0$  — характерная глубина жидкости.

Условие непрерывности нормальной компоненты вектора напряжений, следуя [20], можно представить в виде

$$P - P_0 = -\frac{\text{Ca}^{-1}}{\text{Re}} \frac{1}{R} \left( 1 - \frac{\sigma_T \Delta T}{\sigma_0} \theta \right) - \frac{2}{\text{Re}} \frac{\partial v_s}{\partial s}, \quad \frac{1}{R} = \frac{f_{xx}}{\sqrt{(1+f_x^2)^3}}. \quad (2.7)$$

Здесь  $P$  — давление жидкости на свободной поверхности;  $P_0$  — внешнее давление (например, атмосферное);  $R$  — радиус кривизны  $f(x)$ ;  $\text{Ca} = \rho_0 v_0 \nu / \sigma_0$  — капиллярное число.

Дифференцируя (2.7) по  $s$  и подставляя результат в (2.6), получим

$$\frac{\partial v_s}{\partial t} + v_s \frac{\partial v_s}{\partial s} = \frac{2}{\text{Re}} \frac{\partial^2 v_s}{\partial s^2} + D, \quad (2.8)$$

где

$$D = -\frac{1}{\text{Re}} \frac{\partial \omega}{\partial n} - \frac{\partial P_0}{\partial s} + \frac{\text{Ca}^{-1}}{\text{Re}} \frac{\partial}{\partial s} \left[ \frac{1}{R} \left( 1 - \frac{\sigma_T \Delta T}{\sigma_0} \theta \right) \right] + \frac{f_x}{\sqrt{1+f_x^2}} (\text{Gr}\theta - \text{G}).$$

Из условия непрерывности касательной компоненты вектора напряжений, используя прием, описанный в [20], можно получить явное выражение для вихря на свободной поверхности:

$$\omega = \frac{2}{R} v_s + \frac{\text{Mn}}{\text{Re}} \frac{\partial \theta}{\partial s}, \quad (2.9)$$

$\text{Mn} = \sigma_T \Delta T / \rho_0 v_0 \nu$  — число Марангони.

Граничное условие для функции тока следует из (2.5), где  $v_s$  — решение уравнения (2.8). Уравнение (2.8) имеет дивергентный вид. Особенности поведения границы в зависимости от действующих на нее сил учтены в правой части. Для определения самой свободной поверхности служит уравнение (2.4), которое можно записать в виде

$$f_t + \sqrt{1+f_x^2} \frac{\partial \psi}{\partial s} = 0. \quad (2.10)$$

*Метод фиктивных областей*

В соответствии с методом фиктивных областей, изложенным выше, продолжим задачу (2.1)–(2.3) из области  $GB_1$  в область  $GB_2$ , не меняя обозначений:

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} = \frac{1}{\text{Re}} \Delta \omega, \quad (2.11)$$

$$\Delta\psi - \frac{1}{\varepsilon}\psi = 0, \quad (2.12)$$

$$\frac{\partial\theta}{\partial t} = \frac{1}{\text{RePr}}\Delta\theta, \quad (2.13)$$

где  $0 < \varepsilon \ll 1$  — малый параметр МФО. Условия согласования примут вид

$$[\psi]_{S(t)} = \left[ \frac{\partial\psi}{\partial n} \right]_{S(t)} = 0, \quad [\omega]_{S(t)} = \left[ \frac{\partial\omega}{\partial n} \right]_{S(t)} = 0,$$

условие согласования для температуры есть не что иное, как условие Стефана

$$k_{ж} \frac{\partial\theta}{\partial n} \Big|_{S-\varepsilon_0} - k_{тв} \frac{\partial\theta}{\partial n} \Big|_{S+\varepsilon_0} = \frac{dS}{dt},$$

которое при сквозном счете уравнения теплопроводности выполняется автоматически.

*Метод решения задачи*

Для решения задачи использован алгоритм, описанный в [13]. Отобразим область  $GB$  на прямоугольник со сторонами  $0 \leq \xi \leq L$ ;  $0 \leq \eta \leq 1$ , а каждое из уравнений (2.1)–(2.3), представим в виде

$$\frac{\partial\Phi}{\partial t} = \frac{1}{Bf} [U_\xi(\Phi) + V_\eta(\Phi)] + F, \quad (2.14).$$

где

$$U(\Phi) = B_{11} \frac{\partial\Phi}{\partial\xi} + B_{12} \frac{\partial\Phi}{\partial\eta} - A\Phi \frac{\partial\psi}{\partial\eta},$$

$$V(\Phi) = B_{12} \frac{\partial\Phi}{\partial\xi} + B_{22} \frac{\partial\Phi}{\partial\eta} + A\Phi \frac{\partial\psi}{\partial\xi},$$

$$B_{11} = f(\xi), \quad B_{12} = -f_\xi\eta, \quad B_{22} = (1 + B_{12}^2)/f(\xi). \quad (2.15)$$

Для  $\Phi = \omega$ :

$$B = \text{Re}, \quad A = \text{Re}, \quad F = \frac{\text{Gr}}{\text{Re}^2 f} \left( B_{11} \frac{\partial\theta}{\partial\xi} + B_{12} \frac{\partial\theta}{\partial\eta} \right).$$

Для  $\Phi = \Psi$ :

$$B = 1/\lambda, \quad A = 0, \quad F = \lambda\omega,$$

$\lambda$  — итерационный параметр, который вводится при решении уравнения Пуассона для  $\psi$ .

Для  $\Phi = \theta$ :

$$B = \text{Pr}, \quad A = \text{Pr}, \quad F = 0.$$

Граничные условия на линии ( $\eta = 1$ ) для жидкой фазы вещества примут вид

$$\frac{\partial\psi}{\partial\eta} = \frac{v_s \sqrt{1 + f_\xi^2}}{B_{22}}; \quad (2.16)$$

$$\omega = \frac{2}{R} v_s + \frac{\text{Mn}}{\text{Re} \sqrt{1 + f_\xi^2}} \frac{\partial\theta}{\partial\xi}; \quad (2.17)$$

и

$$\psi = \omega = 0$$

— для твердой фазы. Для определения самой свободной поверхности служит уравнение

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial\psi}{\partial\xi} = 0. \quad (2.18)$$

Здесь стоит отметить, что кинематическое условие (2.18) теперь выражает закон сохранения массы, что автоматически решает проблему с сохранением объема.

При сквозном счете уравнения (2.14) с применением МФО для всех функций  $\theta, \omega, \psi$  в области  $GB$  нет различия между жидким и твердым состояниями вещества. Граница фазового перехода  $S(t)$  определяется



автоматически, по значениям температуры  $\theta = \theta^*$ . В случае, когда жидкая фаза вещества имеет свободную деформируемую поверхность (жидкость — газ), ситуация усложняется еще тем, что точка контакта твердой и жидкой фаз, как и свободная поверхность, заранее не известна, а вычисляется в процессе решения задачи. Одним из способов для устранения возникшей неопределенности может служить задание угла подхода свободной границы к точке контакта с твердой фазой вещества или (как его еще называют) угла кристаллизации. Поскольку расчет свободной границы (жидкость — газ) вместе с определением границы фазового перехода (см. рис. 3) — наиболее важный момент в решении общей задачи, опишем его более подробно.

Пусть в момент времени  $t_k = k\tau$  известны поля функции тока, вихря и температуры, а также положение свободной поверхности и границы фазового перехода, при котором они были найдены (см. рис. 3). Граница фазового перехода четко отделяет жидкую фазу вещества от твердой вплоть до свободной поверхности.

Этап I. Из уравнения (2.18) определим новое положение свободной поверхности, соответствующее моменту  $t_{k+1} = (k+1)\tau$ , отдельно для жидкой фазы (подробно описано в [13]) и для твердой фазы  $f = \text{const}$ , так как  $\psi = 0$  на линии  $\eta = 1$ . При этом функция  $f(x)$  считается всюду непрерывной. По формулам (2.15) находим матрицу коэффициентов  $B_{11}, B_{12}, B_{22}$ .

Угол кристаллизации удобнее всего задать именно на этом этапе при определении матрицы коэффициентов  $B_{11}, B_{12}, B_{22}$ . Все остальные коэффициенты матрицы  $B_{ij}$  для всей области  $GB$  вычисляются по формулам (2.15). Находим граничные условия для  $\psi$  и  $\omega$  на свободной поверхности для жидкой фазы по формулам (2.16) и (2.17) соответственно. Для твердой фазы, как уже упоминалось выше,  $\psi = \omega = 0$ .

После того, как будет определена матрица коэффициентов  $B_{11}, B_{12}, B_{22}$ , для следующего этапа вводится понятие глобальных итераций.

Этап II. На каждой из глобальных итераций уравнение (2.14) решается последовательно для температуры, вихря и функции тока во всей области  $GB$  сквозным счетом по схеме стабилизирующей поправки [16], взятой в форме

$$\frac{\Phi^{k+1/2} - \Phi^k}{\tau} = \frac{1}{Bf} [U_\xi^{k+1/2}(\Phi) + V_\eta^k(\Phi)] + F,$$

$$\frac{\Phi^{k+1} - \Phi^{k+1/2}}{\tau} = \frac{1}{Bf} [V_\eta^{k+1}(\Phi) - V_\eta^k(\Phi)].$$

Здесь

$$U^{k+1/2}(\Phi) = B_{11}\Phi_\xi^{k+1/2} + B_{12}\Phi_\eta^k - A\Phi^{k+1/2}\frac{\partial\psi}{\partial\eta},$$

$$V^{k+1}(\Phi) = B_{12}\Phi_\xi^{k+1/2} + B_{22}\Phi_\eta^{k+1} + A\Phi^{k+1}\frac{\partial\psi}{\partial\xi}.$$

- 1) Определяется температурное поле, где функция тока  $\psi$  берется с предыдущей глобальной итерации;
- 2) решается уравнение для вихря  $\omega$  со значениями температуры, взятыми с предыдущего временного шага и значениями  $\psi$  с предыдущей глобальной итерации;
- 3) определяется значение функции тока.

После этого пункты 1–3 повторяются до тех пор, пока не будет достигнута заданная точность для всех функций  $\theta, \omega, \psi$ .

На этом переход на новый временной слой завершен. Далее процесс повторяется, пока не будет получено стационарное решение, которое считается найденным, если выполняется условие

$$\max_k |f_n^{k+K} - f_n^k| < \varepsilon_1,$$

где  $K$  — заданное число шагов,  $\varepsilon_1$  — заданная точность.

**Результаты расчетов.** Пусть в начальный момент времени подобласть  $GB_1\{0 \leq x \leq x_0; 0 \leq y \leq 1\}$  заполнена жидкой фазой вещества, подобласть  $GB_2\{x_0 \leq x \leq 2; 0 \leq y \leq 1\}$  — твердой фазой,  $x_0$  — граница раздела фаз (на рис. 4, 5 она обозначена вертикальной штриховой линией). Жидкость, заполняющая подобласть  $GB_1$ , находится в состоянии покоя. Начальные условия для температуры заданы по линейному закону

$$\text{в жидкой фазе } 0 \leq y \leq 1: \quad \theta = (\theta^* - \theta_1)x/x_0 + \theta_1,$$

в твердой фазе  $0 \leq y \leq 1: \quad \theta = (\theta_2 - \theta^*)(x - x_0)/(2 - x_0) + \theta^*, \quad \theta_1 > \theta_2, \quad \theta^* — температура фазового перехода.$

Рассматриваются граничные условия

$$x = 0: \quad \psi = 0, \quad \frac{\partial \psi}{\partial n} = 0, \quad \theta = \theta_1,$$

$$x = 2: \quad \psi = 0, \quad \omega = 0, \quad \theta = \theta_2,$$

$$y = 0: \quad \psi = 0, \quad \omega = 0, \quad \frac{\partial \theta}{\partial n} = 0.$$

Для связи функции тока и вихря на твердой стенке  $x = 0$  использовано условие Тома. На поверхности  $f(x)$  граничные условия задаются в зависимости от того, к какой фазе вещества (жидкой или твердой) принадлежит эта граница. Для температуры на границе  $f(x)$  задается условие  $\partial \theta / \partial n = 0$ . Угол кристаллизации полагался равным нулю. Все расчеты проводились на сетке  $41 \times 21$ .

На рис. 4 изображен процесс плавления ( $a$  — изолинии функции тока,  $b$  — изотермы). Расчет проведен для параметров

$$\text{Re} = 1, \quad \text{Gr} = 1200, \quad G = 100, \quad \text{Ca}^{-1} = 100, \quad \text{Pr} = 1, \quad \text{Mn} = 10,$$

$$x_0 = 0,7; \quad \theta_1 = 1; \quad \theta_2 = -1,65.$$

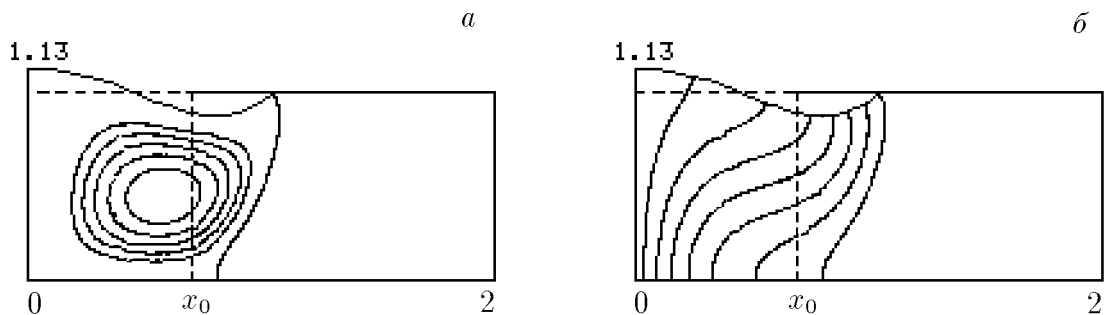


Рис. 4.

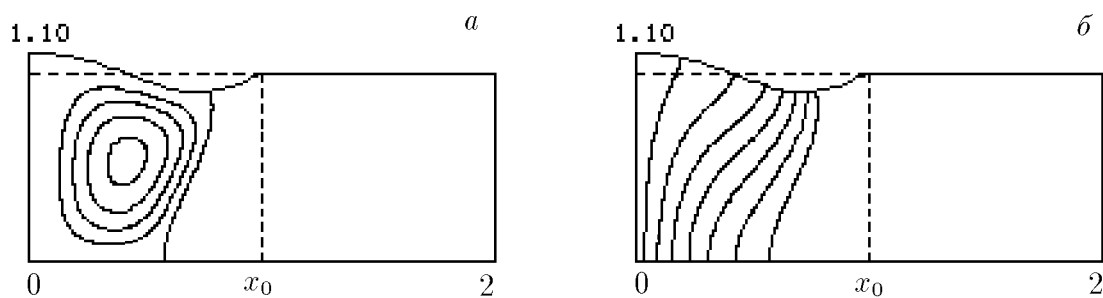


Рис. 5.

На рис. 5 представлены результаты расчета, характеризующие процесс кристаллизации. Здесь также изображены изолинии функции тока ( $a$ ) и изотермы ( $b$ ) для течения, рассчитанного при значениях параметров

$$\text{Re} = 1, \quad \text{Gr} = 1200, \quad G = 100, \quad \text{Ca}^{-1} = 100, \quad \text{Pr} = 1, \quad \text{Mn} = 10,$$

$$x_0 = 1; \quad \theta_1 = 1; \quad \theta_2 = -2,25.$$

Анализируя результаты расчетов приведенных в работе задач, можно сделать вывод о целесообразности применения рассматриваемого варианта метода фиктивных областей для численного решения задач тепловой конвекции с фазовым переходом. В частности, в задаче Стефана в области со свободной границей использование МФО позволило разработать достаточно эффективный экономичный численный алгоритм.

## Список литературы

- [1] ДАРЬИН Н. А., МАЖУКИН В. И. Математическое моделирование задачи Стефана на адаптивной сетке // Дифференц. ур-ния. 1987. Т. 23, № 7. С. 1154–1160.
- [2] ТАРУНИН Е. Л. Вычислительный эксперимент в задачах свободной конвекции. Иркутск: Изд-во Иркут. ун-та, 1990.
- [3] ВАБИЩЕВИЧ П. Н. Метод фиктивных областей в задачах математической физики. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1991.
- [4] ОВЧАРОВА А. С. Метод решения двумерной многофронтной задачи Стефана // ПМТФ. 1995. Т. 36, № 4. С. 110–119.
- [5] КОРОВИЦЫНА Ж. Л., ТЫЧКОВ С. А. Численное моделирование процессов тепло- и массопереноса с учетом фазового перехода в геодинамике // ЖВМиМФ. 1997. Т. 37, № 6. С. 733–741.
- [6] САМАРСКИЙ А. А., МОИСЕЕНКО Б. Д. Экономичная схема сквозного счета для многомерной задачи Стефана // ЖВМиМФ. Т. 5, № 5. С. 816–827.
- [7] БУДАК Б. М., СОЛОВЬЕВА Е. Н., УСПЕНСКИЙ А. Б. Разностный метод со сглаживанием коэффициентов для решения задач Стефана // ЖВМиМФ. Т. 5, № 5. С. 828–840.
- [8] БУГРОВ А. Н., СМАГУЛОВ Ш. Метод фиктивных областей в краевых задачах для уравнений Навье — Стокса // Матем. модели течений жидкости. Новосибирск: ИТПМ СО АН СССР, 1978. С. 79–90.
- [9] СМАГУЛОВ Ш. Метод фиктивных областей для краевой задачи уравнений Навье — Стокса: Препринт № 68. Новосибирск: ВЦ СО АН СССР, 1979.
- [10] МЫЗНИКОВА Б. И., ТАРУНИН Е. Л. Применение метода фиктивных областей для решения уравнений Навье — Стокса в переменных функции тока и вихря скорости. Исследование тепловой конвекции и теплопередачи. Свердловск: изд-во УНЦ АН СССР, 1981. С. 45–57.
- [11] ВАБИЩЕВИЧ П. Н., ИЛИЕВ О. П. Численное решение сопряженных задач тепло- и массопереноса с учетом фазового перехода // Дифференц. ур-ния. 1987. Т. 23, № 7. С. 1127–1132.
- [12] ИЗТЕЛЕУОВ М. И., СМАГУЛОВ Ш. Приближенный метод решения стационарной сопряженной задачи тепло- и массопереноса // Дифференц. ур-ния. 1989. Т. 25, № 7. С. 1227–1232.
- [13] ОВЧАРОВА А. С. Метод решения двумерной многофронтной задачи Стефана // Вычислит. технологии. 1999. Т. 4, №1. С. 88–101.
- [14] САМАРСКИЙ А. А., НИКОЛАЕВ Е. С. Методы решения сеточных уравнений. М.: Наука, 1978.
- [15] ПАСКОНОВ В. М., ПОЛЕЖАЕВ В. И., ЧУДОВ Л. А. Численное моделирование процессов тепло- и массопереноса. М.: Наука, 1984.
- [16] ЯНЕНКО Н. Н. Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики. Наука, Новосибирск, 1967.
- [17] САМАРСКИЙ А. А., НИКОЛАЕВ Е. С. Методы решения сеточных уравнений. М.: Наука, 1978.
- [18] ТРУБИЦЫН В. П., БЕЛАВИНА Ю. Ф., РЫКОВ В. В. Тепловое и механическое взаимодействие мантии с континентальной литосферой // Физика Земли. 1993. № 11. С. 3–15.
- [19] BLANKENWASH В. ET AL. A benchmark comparison for mantle convection codes // Geophys. J. Int. 1989. Т. 98. С. 23–38.
- [20] ПУХНАЧЕВ В. В. Движение вязкой жидкости со свободными границами. Учеб. пособие. Новосибирск: НГУ. 1989.