

УДК 536.24 + 536.42

А.И. Цаплин, С.С. Гусман

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СОПРЯЖЕННОЙ ЗАДАЧИ
КРИСТАЛЛИЗАЦИИ И ГИДРОДИНАМИКИ НА АДАПТИВНОЙ СЕТКЕ

ABSTRACT

A mathematical formulation of conjugate problem for the crystallization and hydrodynamics in coordinates relative to the curved moving boundary of phase transition is observed. The algorithm of numerical realization is presented. The computer results of a case at rectangular area on the grid with minimized divisions are compared with the experimental data on water crystallization under the conditions of liquid phase free convection.

Необходимость постановки сопряженной задачи кристаллизации и гидродинамики возникает при прогнозировании технологии внешних воздействий на жидкую фазу металла, например, при электромагнитном перемешивании жидкого ядра кристаллизующегося слитка, при плавлении металла концентрированным пучком энергии и т.п. При этом математическая модель процесса включает в себя систему дифференциальных уравнений переноса энергии в твердой и жидкой фазах, а также уравнения гидродинамики в жидкой фазе, которые требуется решать совместно. Задача усложняется также тем, что на границе фазового перехода, положение которой заранее неизвестно и подлежит определению, теплофизические свойства среды изменяются скачкообразно, а в жидкой фазе максимальные градиенты скорости и температуры отмечаются в узких пограничных у твердых границ.

Для решения указанной задачи в работе [1] применен метод сквозного счета с использованием регулярной сетки без явного выделения подвижной границы в расчетной области. Однако такой подход не учитывает сингулярность решения на границе фазового перехода. Поэтому экспериментальные данные удается описать удовлетворительно лишь на достаточно густой сетке, что снижает эффективность метода. В работе [2] предложен более эффективный метод решения задачи теплопроводности с подвижной границей, основанный на адаптивной сетке, координаты узлов которой заранее не известны и определяются в процессе движения границы. Применение адаптивной сетки известно и для задачи плавления с учетом гидродинамики жидкого металла [3].

В настоящей работе дана постановка сопряженной задачи кристаллизации и гидродинамики в прямоугольной области с произвольной конфигурацией границы фазового перехода. Основная идея состоит в том, что исходные уравнения формулируются в новой системе координат, связанной с подвижной границей фазового перехода. При этом сложные по конфигурации области жидкой и твердой фаз отображаются в прямоугольные, в которых применяются сетки с

фиксированным числом ячеек. Эти сетки автоматически пересчитываются в ходе счета при движении границы и могут сгущаться, учитывая сингулярность решения.

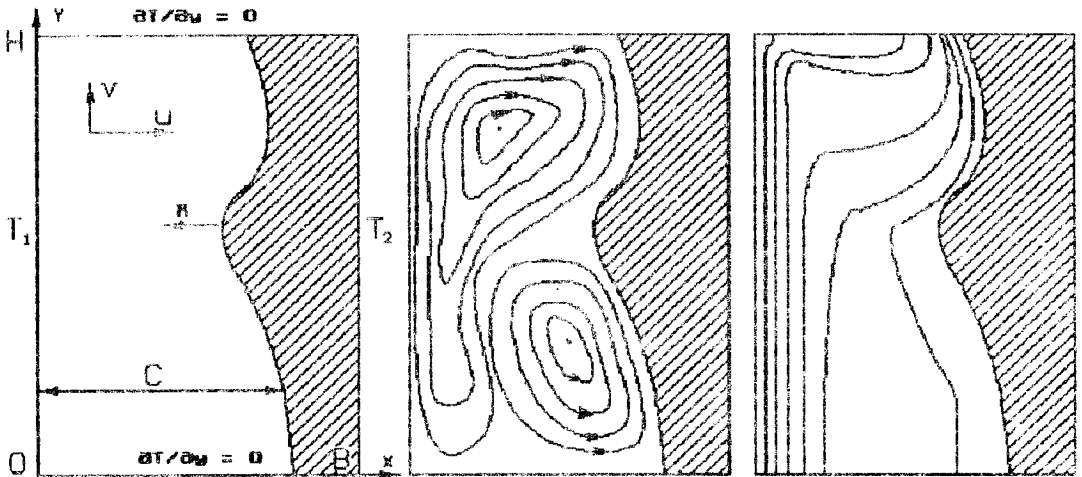


Рис. 1. Расчетная схема (слева), линии тока (в центре) и изотермы (справа), построенные через равные интервалы в жидкой фазе при замерзании воды.

Рассмотрим затвердевание вязкой жидкости в прямоугольной области размерами $B \times H$ с двумя изотермическими и двумя адиабативными границами (рис.1). При охлаждении правой границы до температуры T_2 ниже температуры фазового перехода T_f происходит затвердевание. В жидкой фазе перепад температур $\Delta T = T_1 - T_2$ создаст тепловую конвекцию, искривляющую границу затвердевания. Ширина жидкой фазы C изменяется по высоте области. На этом же рисунке представлены экспериментальные данные по кристаллизации воды - линии тока и изотермы в температурном интервале, включающем инверсию плотности [4] ($T_1 = 14,5^\circ C$, $T_2 = -6,7^\circ C$).

Процесс затвердевания и циркуляции жидкой фазы описывается системой уравнений, включающих уравнения гидродинамики в жидкой фазе в переменных завихренность - функция тока:

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (u\omega) + \frac{\partial}{\partial y} (v\omega) = \nu \nabla^2 \omega - g\beta \frac{\partial T}{\partial x}, \quad (1)$$

$$\nabla^2 \psi = \omega, \quad (2)$$

уравнения переноса энергии в жидкой фазе:

$$\frac{\partial T_L}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\psi T_L) + \frac{\partial}{\partial y} (\varphi T_L) = \alpha_L \nabla^2 T_L \quad (3)$$

и теплопроводности твердой фазы:

$$\frac{\partial T_S}{\partial t} = \alpha_S \nabla^2 T_S \quad (4)$$

а также условия баланса энергии на границе фазового перехода:

$$\lambda_S \frac{\partial T_S}{\partial n} - \lambda_L \frac{\partial T_L}{\partial n} = Q \rho \frac{\partial n}{\partial t} \quad (5)$$

где индексы L и S относятся соответственно к жидкой и твердой фазам; $\nabla^2 = \partial^2 / \partial x^2 + \partial^2 / \partial y^2$ - оператор Лапласа; $\alpha = \lambda / (\rho c) \lambda, \rho, c$ - коэффициенты теплопроводности, теплоемкости, плотности, теплоемкость; $u = \partial \psi / \partial y, v = \partial \varphi / \partial x$ - компоненты скорости в проекциях на оси x и y ; β - коэффициент объемного расширения; ν - коэффициент кинематической вязкости; g - ускорение свободного падения; Q - удельная теплота плавления; n - нормаль к границе затвердевания.

Краевые условия включают начальное распределение переменных $T = T_1, \psi = \omega = 0$, граничные условия по температуре показаны на рис.1. В жидкой фазе приняты условия прилипания на твердых границах.

Перейдем к новой системе координат в соответствии с преобразованиями:

$$\left. \begin{aligned} X_L &= X/C, \\ X_S &= (B-X)/(B-C), \end{aligned} \right\} Y_L = Y, \quad Y_S = Y \quad (6)$$

где $C(y, t)$ - ширина жидкой фазы.

Тогда исходная система уравнений (1-5) преобразуется с учетом (6), например, производная по вертикальной координате в жидкой фазе принимает следующий вид:

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial Y_L} - \frac{X_L}{C} \frac{\partial C}{\partial Y} \frac{\partial}{\partial X_L} \quad (7)$$

Для записи системы уравнений в безразмерном виде выберем в качестве масштабов следующие величины: характерный линейный размер $l=H$; время $t_0=l^2/\nu$; скорость $v_0=\nu/l$; функцию тока $\psi_0=\nu$; завихренность $\omega_0=\nu/l^2$; температуру в жидкой $\Delta T_L=T_1-T_f$ и твердой $\Delta T_S=T_f-T_2$ фазах. Эти параметры образуют критериальные комплексы Прандтля $Pr=\nu/\alpha$, Грасгофа $Gr=g\beta l^3 \Delta T_L/\nu^2$, Стефана $Ste=C_L \Delta T_L/Q$. Вводятся также обозначения для отношений масштабов температур $\theta^*=\Delta T_S/\Delta T_L$, теплопроводностей $\lambda^*=\lambda_S/\lambda_L$, плотностей $\rho^*=\rho_S/\rho_L$ и теплопроводностей $a^*=a_S/a_L$.

Опуская промежуточные преобразования и сохраняя для безразмерных переменных те же обозначения, запишем окончательный вид уравнений гидродинамики:

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} - \frac{X_L}{C} \frac{\partial C}{\partial t} - \frac{\partial \omega}{\partial X_L} + \frac{1}{C} \frac{\partial}{\partial X_L} (\omega \omega) -$$

$$- \frac{X_L}{C} \frac{\partial C}{\partial Y} - \frac{\partial}{\partial X_L} (v \omega) + \frac{\partial}{\partial Y} (v \omega) = \nabla_L^2 \omega - \frac{Gr}{C} \frac{\partial T_L}{\partial X_L},$$

$$\nabla_L^2 \psi = \omega, \tag{8}$$

переноса энергии в жидкой:

$$\frac{\partial T_L}{\partial t} - \frac{X_L}{C} \frac{\partial C}{\partial t} - \frac{\partial T_L}{\partial X_L} + \frac{1}{C} \frac{\partial}{\partial X_L} (u T_L) -$$

$$- \frac{X_L}{C} \frac{\partial C}{\partial Y} - \frac{\partial}{\partial X_L} (v T_L) + \frac{\partial}{\partial Y} (v T_L) = \frac{\nabla_L^2 T_L}{Pr}$$

и твердой фазах:

$$\frac{\partial T_S}{\partial t} - \frac{X_S}{B-C} \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{a^*}{Pr} \nabla_S^2 T_S. \tag{11}$$

Условие баланса энергии в проекции на ось x :

$$\lambda^* S^* \left(\frac{1}{B-C} \frac{\partial T_S}{\partial X_L} + \frac{1}{C} \frac{\partial T_L}{\partial X_L} \right) = \rho^* \frac{Pr}{Ste} \frac{\partial C}{\partial t} \quad (12)$$

В соответствии с преобразованиями (6) изменяется и оператор Лапласа, который принимает следующий вид для жидкой:

$$\begin{aligned} \nabla_L^2 = & \left[\frac{H}{BC} \right]^2 \frac{\partial^2}{\partial X_L^2} + \frac{X_L^2}{C^2} \left[\frac{\partial C}{\partial Y} \right]^2 \frac{\partial^2}{\partial X_L^2} - \frac{2X_L}{C} \frac{\partial C}{\partial Y} \frac{\partial^2}{\partial X_L \partial Y} + \\ & + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \left[\frac{2X_L}{C^2} \left[\frac{\partial C}{\partial Y} \right]^2 - \frac{X_L}{C} \frac{\partial^2 C}{\partial Y^2} \right] \frac{\partial}{\partial X_L} \end{aligned} \quad (13)$$

и твердой фаз:

$$\begin{aligned} \nabla_S^2 = & \frac{H^2}{B^2(B-C)^2} \frac{\partial^2}{\partial X_S^2} + \frac{X_S^2}{(B-C)^2} \left[\frac{\partial C}{\partial Y} \right]^2 \frac{\partial^2}{\partial X_S^2} + \frac{2X_S}{B-C} \frac{\partial C}{\partial Y} \frac{\partial^2}{\partial X_S \partial Y} + \\ & + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \left[\frac{2X_S}{(B-C)^2} \left[\frac{\partial C}{\partial Y} \right]^2 - \frac{X_S}{B-C} \frac{\partial^2 C}{\partial Y^2} \right] \frac{\partial}{\partial X_S} \end{aligned} \quad (14)$$

Компоненты вектора скорости определяются из соотношений:

$$u = \frac{\partial \psi}{\partial Y} - \frac{X_L}{C} \frac{\partial C}{\partial Y} \frac{\partial \psi}{\partial X_L}, \quad v = -\frac{H}{BC} \frac{\partial \psi}{\partial X_L} \quad (15)$$

Для численного решения задачи применяли метод установления с продольно-поперечной прогонкой. В преобразованных координатах использовали конечно-разностную сетку:

$$\left. \begin{aligned} X_{Li} &= (i-1)h_{Lx}; & i=1, 2, \dots, N_L+1; & h_{Lx} = C/N_L \\ X_{Sj} &= (j-1)h_{Sx}; & j=1, 2, \dots, N_S+1; & h_{Sx} = (B-C)/N_S \\ Y_k &= (k-1)h_y; & k=1, 2, \dots, M+1; & h_y = H/M \end{aligned} \right\}, \quad (16)$$

где N_L, N_S, M - числа разбиений сетки в направлениях координат x_L, x_S, y . В жидкой фазе у твердой границы сетка может сгущаться, например:

$$X_{Li} = \frac{B}{2} \frac{\exp(iBp/N_L) - 1}{\exp(Bp/2) - 1}, \quad i=1, 2, \dots, N_L/2, \quad (17)$$

где p - параметр сгущения, при стремлении которого к нулю сетка (17) приближается к регулярной (16).

Примеры дискретизации исходных уравнений даны в работе [4]. Алгоритм решения задачи включает задание начального положения границы затвердевания, например, с использованием модели чистой теплопроводности. Далее решаются совместно уравнения гидродинамики и переноса энергии (8-10) в жидкой фазе с фиксированными размерами. Затем совместно решаются уравнения теплопроводности в твердой фазе (11) и баланса энергии (12) для нахождения нового положения границы затвердевания. Указанная процедура повторяется для следующего шага установления и заканчивается при достижении наперед заданной точности.

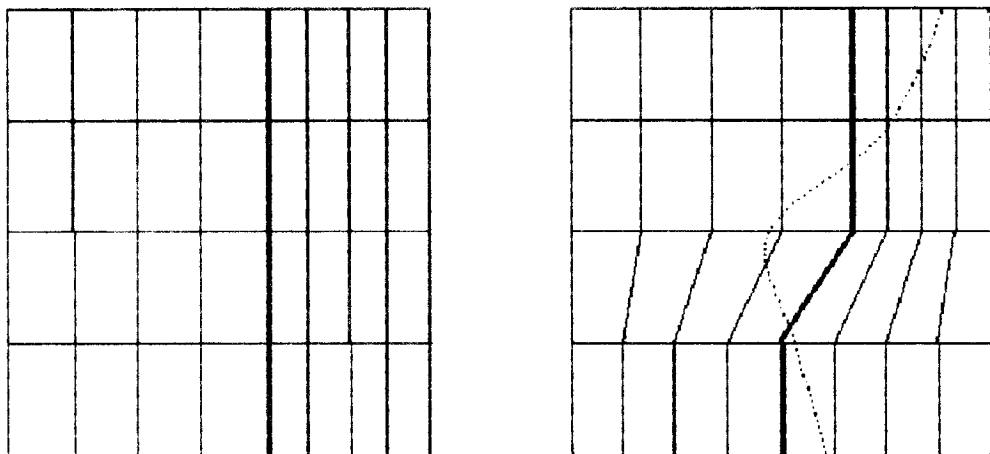


Рис. 2. Сетки в прямоугольной (слева) и исходной системах координат. Штриховая линия - экспериментальная конфигурация границы кристаллизации.

На рис.2 показаны некоторые результаты вычислительного эксперимента, проведенного на ПЭМ типа *IBM*. В преобразованной системе координат области жидкой и твердой фаз - прямоугольные. На этом же рисунке представлены результаты расчета на сетке с минимальными числами разбиений ($N_L = N_S = M = 4$). Видно, что расчетная граница затвердевания отклоняется от вертикальной, что объясняется конвективным теплопереносом в жидкой фазе. Результаты расчета качественно описывают экспериментально наблюдаемую конфигурацию границы затвердевания даже на редкой сетке, что подтверждает эффективность вычислительного эксперимента с применением адаптивных сеток.

Литература

1. Цаплин А.И. Гидромеханика и теплообмен при кристаллизации непрерывных стальных слитков в условиях внешних воздействии на жидкую фазу // Гидродинамика и теплообмен при получении материалов. М: Наука, 1990. С. 169-178.
2. Дарьин Н.А., Мажукин В.И. Математическое моделирование задачи Стефана на адаптивной сетке // Дифференциальные уравнения. 1987. Т.23, № 7. С. 1154-1160.
3. Benard C., Gobin D., Zanoli A. *Moving Boundary problem: heat conduction in the solid phase of a phase-change material during melting driven by natural convection in the liquing* // *Int.J.Heat Mass Transfer*. 1986. V.29. N 11. P. 1669-1681.
4. Цаплин А.И. Тепло- и массоперенос при затвердевании вязкой жидкости в прямоугольной области // Процессы тепло- и массопереноса вязкой жидкости. Свердловск: УНЦ АН СССР, 1986. С. 58-67.

Пермский политехнический институт