

УДК 519.634

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЛОКАЛИЗОВАННОГО ВОЗМУЩЕНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ В МОДЕЛИ ФАЗОВОГО ПОЛЯ В СЛУЧАЕ СЛИЯНИЯ СВОБОДНЫХ ГРАНИЦ

© 2012 г. В. Г. Данилов, В. Ю. Руднев

(104001 Москва, Большой Трехсвятительский пер., 3, МТИЭМ НИУ ВШЭ;

111024 Москва, ул. Авиамоторная, 8а, МТУСИ)

e-mail: danilov@miem.edu.ru; vrudnev78@mail.ru

Поступила в редакцию 12.02.2012 г.

Переработанный вариант 16.06.2012 г.

Исследуется эффект локализованного в пространстве и времени возмущения температуры, которое возникает в точке контакта свободных границ в задаче Стефана–Гиббса–Томсона в рамках модели фазового поля. Библ. 16. Фиг. 13. Табл. 2.

Ключевые слова: система фазового поля, задача Стефана–Гиббса–Томсона, компьютерное моделирование, численный метод конечных разностей.

1. ВВЕДЕНИЕ. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Целью данной работы является компьютерное исследование эффекта локализованного возмущения температуры, обнаруженного авторами при изучении слияния свободных границ в модели фазового поля для задачи Стефана–Гиббса–Томсона. При помощи численного моделирования проверяются полученные теоретические формулы.

Рассмотрим вещество, которое может находиться в двух фазовых состояниях (двух фазах), например, твердом и жидком. Пусть это вещество занимает область $\Omega \subset \mathbb{R}^3$. Обозначим через $\bar{\theta}$ температуру вещества (относительную к температуре плавления).

В классической задаче Стефана (первой математической модели, описывающей эволюцию вещества при наличии двух фаз) предполагается, что граница раздела фаз (свободная граница) определяется формулой

$$\Gamma(t) = \{x \in \Omega, \bar{\theta}(x, t) = 0\}. \quad (1)$$

Область, занятая жидкой фазой Ω_l , определяется равенством $\Omega_l = \{x \in \Omega, \bar{\theta}(x, t) > 0\}$, а область, занятая твердой фазой — равенством $\Omega_s = \{x \in \Omega, \bar{\theta}(x, t) < 0\}$. Температура должна удовлетворять уравнению теплопроводности

$$\bar{\theta}_t = k \Delta \bar{\theta}, \quad (2)$$

где k — коэффициент температуропроводности. Кроме того, на свободной границе должно выполняться условие Стефана

$$l v = k \left[\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial \mathbf{n}} \right]_{\Gamma}, \quad (3)$$

где

$$\left[\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial \mathbf{n}} \right]_{\Gamma} = \langle \nabla \bar{\theta}_s - \nabla \bar{\theta}_l, \mathbf{n} \rangle, \quad x \in \Gamma(t),$$

$\mathbf{n}$ — единичный вектор нормали к $\Gamma(t)$ в направлении из твердой фазы в жидкую, l — теплота плавления, v — нормальная компонента скорости точки на $\Gamma(t)$ в направлении $\mathbf{n}$.

На внешней границе области Ω и при $t = 0$ задаются обычные для уравнения теплопроводности краевые (Дирихле или Неймана) и начальные условия.

Математическая задача состоит в нахождении функции $\bar{\theta}(x, t)$ и свободной границы $\Gamma(t)$. Таким образом, решением задачи Стефана (1)–(3) с соответствующими краевыми и начальными условиями является пара — функция $\bar{\theta}(x, t)$ и поверхность $\Gamma(t)$. Присутствие неизвестной поверх-

ности делает задачу Стефана сильно нелинейной, несмотря на то, что выражения, содержащие неизвестную температуру $\bar{\theta}(x, t)$, формально (при заданной поверхности $\Gamma(t)$) линейные.

Оказывается, что даже такая сложная с математической точки зрения (хотя и просто формулируемая) задача довольно далека от физической реальности, в особенности если задачу нельзя считать одномерной.

Одной из главных физических характеристик эволюции двухфазной системы является поверхностное натяжение на границе раздела фаз. Как отмечал Гиббс (см. [1]), непосредственным следствием учета поверхностного натяжения как дополнительного фактора устойчивости, является модификация условия (1) на свободной границе, так что оно принимает вид

$$\Delta s \bar{\theta}(x, t) = -\zeta K(x, t), \quad x \in \Gamma(t), \quad (4)$$

где Δs — разность энтропий жидкой и твердой фаз, ζ — поверхностное натяжение, $K(x, t)$ — сумма главных кривизн (средняя кривизна) поверхности в точке $\Gamma(t)$.

Из (4) непосредственно следует, что если граница раздела фаз плоская, то мы возвращаемся к условию (1). В добавление к эффекту, возникающему из-за учета поверхностного натяжения, температура в точках границы $\Gamma(t)$ должна быть еще уменьшена (или увеличена) — это называют эффектом перегрева (или переохлаждения), [2]. Для учета этого эффекта можно использовать разные выражения, но наиболее употребительным является введение в (4) линейной зависимости от скорости:

$$\Delta s \bar{\theta}(x, t) = -\sigma K(x, t) - \alpha \sigma v(x, t), \quad x \in \Gamma(t), \quad (5)$$

где α — некоторый параметр (физически отвечающий за время релаксации системы).

Заметим, что поверхность раздела фаз в задаче Стефана неустойчива (см. [3]). Замена (1) на (4), очевидно, должна улучшать устойчивость, так как кривизна поверхности (с локальных возмущений, имеющих большую кривизну, начинается неустойчивость) этим условием ограничивается.

Легко видеть, что уравнение (2) и условие (3) могут быть объединены в одно уравнение, понимаемое в слабом смысле:

$$\bar{\theta}_t + \frac{l}{2} \bar{u}_t = k \Delta \bar{\theta}, \quad \bar{u} = \begin{cases} 1, & x \in \Omega_s, \\ -1, & x \in \Omega_l. \end{cases} \quad (6)$$

Таким образом, можно сказать, что $\Gamma(t)$ есть поверхность, на которой функция $\bar{u}$, заданная в области $\Omega \times \mathbb{R}^1$, имеет разрыв. Ясно, что определение связано с условием (1), и замена (1) на (5) делает это определение бессмысленным, так как температура на $\Gamma(t)$ теперь не обязательно должна быть равной нулю. Заметим, что введение функции $\bar{u}$ спасает положение, но для ее определения требуется сформулировать задачу и, кроме того, ввести эту функцию в условие (5).

В физической литературе известно довольно много про поведение неравновесных термодинамических систем: модели Гинзбурга-Ландау, Ландау-Халатникова и др. В таких моделях предполагают, что состояние системы определяется не только физическими параметрами — температурой, плотностью и т.д., — но и дополнительным безразмерным параметром $u = u(x, t)$ (или несколькими параметрами, см. модель А в [4]). На этом пути была получена система уравнений (система фазового поля, см. [5])

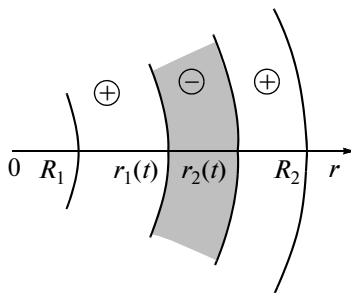
$$\begin{aligned} \theta_t + \frac{l}{2} u_t &= k \Delta \theta, \\ \alpha \xi^2 u_t &= \xi^2 \Delta u + \frac{1}{a} g(u) + 2\theta, \end{aligned} \quad (7)$$

где $g(u)$ — производная симметричного относительно нуля потенциала $W(u)$ с двумя минимумами в точках $u = \pm 1$. В простейшем случае $g(u) = u - u^3$. Параметры l, k, α, ξ и a — безразмерные комбинации физических параметров задачи (см. [6]).

Видно, что первое уравнение в (7) по виду совпадает с уравнением (6), однако решение уравнения из системы (7) не имеет скачка, как функция $\bar{u}^{(s)}$ в (6). Если формально положить

$$a = \Delta s|_{\Gamma(t)}, \quad a \xi^2 = \sigma \varepsilon^2$$

и предположить, что ε — формальный параметр, то в пределе при $\varepsilon \rightarrow 0$ второе уравнение (7) переходит в (4). Такой предельный переход описан и обоснован в [7], [8].



Фиг. 1. Сечение шаровых слоев (области моделирования) плоскостью, проходящей через начало координат.

Мы приводим результаты моделирования для системы фазового поля в сферически симметричном случае. Рассмотрим область $Q = \Omega \times [0, t_1]$, где $\Omega = [R_1, R_2]$ – сферический слой в сферических координатах. Предположим, что область Ω разделена на три слоя $\Omega_{1,2}^+(t)$ и $\Omega^-(t)$ следующим образом:

$$\Omega_1^+(t) = [R_1(t), r_1(t)], \quad \Omega^-(t) = [r_1(t), r_2(t)], \quad \Omega_2^+(t) = [r_2(t), R_2(t)],$$

где $r_i(t) = \Gamma_i(t)$ – свободные границы между фазами + и – ($i = 1, 2$). Положим, что фаза + занимает слой $\Omega_{1,2}^+(t)$, а фаза – занимает слой $\Omega^-(t)$ (см. фиг. 1).

Систему фазового поля (7) в этом случае без ограничения общности запишем в виде

$$\frac{\partial \sigma}{\partial t} - \frac{\partial^2 \sigma}{\partial r^2} = -r \frac{\partial u}{\partial t}, \quad (8)$$

$$\varepsilon Lu = \frac{u - u^3}{\varepsilon} + \lambda \frac{\sigma}{r}. \quad (9)$$

где

$$\lambda = \sqrt{2}/3, \quad L = \frac{\partial}{\partial t} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right], \quad r \in [R_1, R_2], \quad t \in [0, t_1].$$

Здесь функция $u = u(r, t, \varepsilon)$ (так называемая функция порядка) определяет фазовое состояние вещества: значение $u \approx -1$ соответствует фазе – в слое $\Omega^-(t)$, значение $u \approx 1$ соответствует фазе + в слоях $\Omega_{1,2}^+(t)$ и $\theta(r, t) = \frac{\sigma(r, t)}{r}$.

Система (8), (9) дополняется начальными условиями для температуры и функции порядка и краевыми условиями Неймана вида

$$\frac{\partial \sigma}{\partial r} \Big|_{r=R_1} = \frac{\partial \sigma}{\partial r} \Big|_{r=R_2}, \quad \frac{\partial u}{\partial r} \Big|_{r=R_1} = \frac{\partial u}{\partial r} \Big|_{r=R_2}. \quad (10)$$

Переходя к пределу при $\varepsilon \rightarrow 0$ в (8), (9), для каждой из свободных границ $r = \hat{r}_i(t)$, $i = 1, 2$, получаем задачу Стефана–Гиббса–Томсона

$$\frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial t} = \frac{\partial^2 \bar{\sigma}}{\partial r^2}, \quad r \in [R_1, R_2], \quad r \neq \hat{r}_i(t), \quad i = 1, 2, \quad (11)$$

$$\bar{\sigma} \Big|_{r=\hat{r}_i(t)} = (-1)^{i+1} \left(\hat{r}_i'(t) + \frac{2}{\hat{r}_i(t)} \right), \quad (12)$$

$$\left[\frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial r} \right]_{r=\hat{r}_i(t)} = (-1)^{i+1} 2 \hat{r}_i(t) \hat{r}_i'(t), \quad (13)$$

(см. [5], [7], [9]) и задачу (2), (3), (8). Такой предельный переход возможен, если, например, соответствующие предельные задачи имеют классические решения. Тогда слабый предел при $\varepsilon \rightarrow 0$ решений (8), (9) дает такие решения (см. [5], [7], [10]). Существование классического решения $\bar{\sigma}$ задачи (11)–(13) обсуждается в [10].

Обозначим через $t^* \in (0, t_1]$ момент времени, в который происходит взаимодействие свободных границ, и через $r^* = \hat{r}_1(t^*) = \hat{r}_2(t^*)$ – сферу контакта свободных границ.

Слабая аппроксимация (т.е. приближенное решение, удовлетворяющее системе (8), (9) с невязкой, малой в слабом смысле при $\varepsilon \rightarrow 0$, см. [7]) задачи Стефана—Гиббса—Томсона (системы фазового поля), которая существует на интервале времени, включающем момент взаимодействия t^* , в одномерном случае построена (см. [8]) в предположении существования классического решения предельной задачи при $t \leq t^* - \delta$, где $\delta > 0$ — любое число. Эта аппроксимация допускает слабый предельный переход при $\varepsilon \rightarrow 0$.

Можно показать (см. [7]), что асимптотическое в обычном смысле решение системы (8)–(10) при $t \leq t^* - \delta$, $\delta > 0$ имеет вид

$$\sigma_\varepsilon^{as} = \bar{\sigma}^-(r, t) + (\bar{\sigma}^+(r, t) - \bar{\sigma}^-(r, t)) \omega_1 \left(\frac{\hat{r}_2(t) - r}{\varepsilon} \right) \omega_2 \left(\frac{r - \hat{r}_1(t)}{\varepsilon} \right), \quad (14)$$

$$u_\varepsilon^{as} = 1 + \omega_0 \left(\frac{\hat{r}_1(t) - r}{\varepsilon} \right) + \omega_0 \left(\frac{r - \hat{r}_2(t)}{\varepsilon} \right) + \varepsilon \left[\frac{\sigma_\varepsilon^{as}}{2} + \omega \left(t, \frac{r - \hat{r}_1(t)}{\varepsilon}, \frac{r - \hat{r}_2(t)}{\varepsilon} \right) \right], \quad (15)$$

где $\omega_1(z) \rightarrow 0, 1$ при $z \rightarrow \pm\infty$, $\omega_1^{(k)}(z) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}_z^1)$ при $k > 0$, $\hat{r}_i(t)$, $i = 1, 2$ — гладкие функции, $r_1 \leq r_2$, $\omega_0(z) = \text{th}(z)$, и $\omega(t, z_1, z_2) \in C^\infty([0, t^*]; \mathcal{S}(\mathbb{R}_z^2))$, $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ — пространство Шварца гладких быстро убывающих функций.

Если начальные данные для (8), (9) имеют вид (14), (15) при $t = 0$, то для $t \leq t^* - \delta$ имеем оценку

$$\left| u - u_\varepsilon^{as}; \mathbb{C}(0, T; L^2(\mathbb{R}^1)) \right| + \left| \sigma - \sigma_\varepsilon^{as}; L^2(Q) \right| \leq c\varepsilon^\mu, \quad \mu \geq 3/2,$$

где (σ, u) — решение системы (3), (4) (см. [7] и ссылки в ней). Здесь $Q = \Omega \times [0, t^* - \delta]$, постоянная c не зависит от ε .

Основная проблема построения аппроксимации решения в случае слияния свободных границ заключается в том, что вместо обыкновенного дифференциального уравнения, решением которого является функция $\omega_0(z)$ (см. [5], [7]), в случае взаимодействия свободных границ возникает уравнение в частных производных.

В [7], [8] с использованием метода слабых асимптотик построено решение системы фазового поля, описывающее взаимодействие свободных границ. Именно, анзатц для функции порядка имеет вид

$$\hat{u} = \frac{1}{2} \left[1 + \omega_0 \left(\beta \frac{r_1^2 - r^2}{\varepsilon} \right) + \omega_0 \left(\beta \frac{r^2 - r_2^2}{\varepsilon} \right) - \omega_0 \left(\beta \frac{r_1^2 - r^2}{\varepsilon} \right) \omega_0 \left(\beta \frac{r^2 - r_2^2}{\varepsilon} \right) \right]. \quad (16)$$

Температура ищется в следующем виде:

$$\hat{\sigma} = e(r)\hat{T} + q, \quad (17)$$

где $e(r) \in \mathbb{C}_0^\infty([R_1, R_2])$, $e \equiv 1$ для $r \in [\hat{r}_1(0), \hat{r}_2(0)]$, $\hat{T}$ — модель температуры, т.е. функция наиболее простого вида, которая качественно правильно описывает поведение температуры, а q — неизвестная гладкая функция. Модель температуры $\hat{T}$ имеет вид

$$\begin{aligned} \hat{T} = & \gamma_1^+(t)(r_1 - r)H(r_1 - r) + \gamma_2^+(t)(r - r_2)H(r - r_2) + \gamma^-(r, t) \frac{(r_1 - r)(r - r_2)}{r_2 - r_1} H(r - r_1)H(r_2 - r) + \\ & + \hat{\gamma}(r, t) \frac{(r_1 - r)(r - r_2)}{r_2 - r_1} H(r_1 - r)H(r - r_2) + I(r, t). \end{aligned} \quad (18)$$

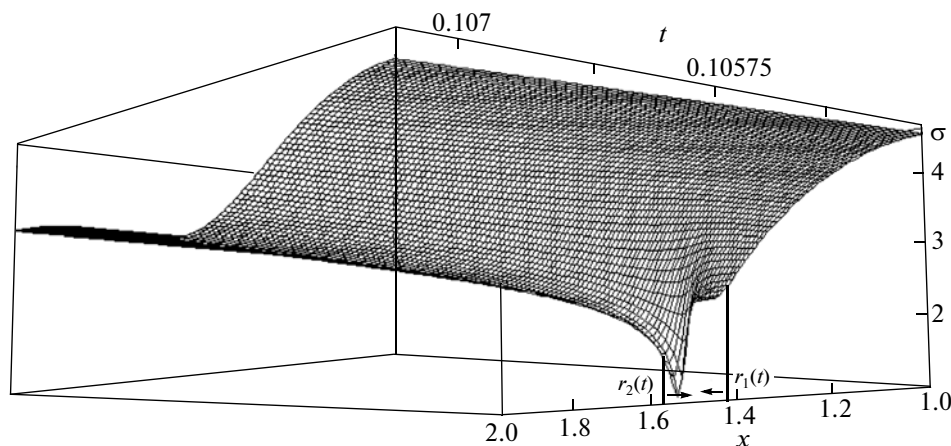
Из приведенных выше формул видно, что модель $\hat{T}$ является линейной по r функцией в областях Ω_i^+ , $i = 1, 2$, и параболической по r в области Ω^- .

В [8] получены формулы для определения функций, входящих в анзатц (18) в одномерном случае.

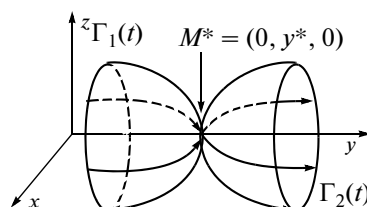
Анализ этих формул показал, что в окрестности точки взаимодействия температура θ , входящая в систему фазового поля, получает возмущение, локализованное по пространственным переменным и по времени. “Ширина” этого возмущения пропорциональна ε (см. фиг. 2). Значение амплитуды этого возмущения в одномерном случае дается формулой

$$[\bar{\theta}]_{x=x^*, t=t^*} = - \lim_{t \rightarrow t^*-0} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{V_1 + V_2}{2},$$

где V_1 и V_2 — скорости сливающихся (одномерных) свободных границ.



Фиг. 2. Эффект возмущения температуры σ в окрестности точки контакта свободных границ.



Фиг. 3. Процесс слияния свободных границ в случае, когда кривизны свободных границ имеют разные знаки.

Аналитическое исследование на основе метода слабых асимптотик показало, что подобный эффект носит общий характер. Например, в точности та же формула верна для случая сливающихся шаровых слоев, изображенных на фиг. 3:

$$[\bar{\theta}]_{r=r^*, t=t^*} = - \lim_{t \rightarrow t^*-0} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{V_{1n} + V_{2n}}{2},$$

где V_{1n} и V_{2n} — нормальные скорости сливающихся трехмерных свободных границ (соответственно, $\Gamma_1(t)$ и $\Gamma_2(t)$). Эффект солитоноподобного (отрицательного) возмущения температуры σ в точке слияния свободных границ в этом случае показан на фиг. 2.

Если свободные границы не симметричны, то в точке контакта их средние кривизны будут иметь одинаковый знак. Тогда амплитуда скачка температуры в момент взаимодействия и в точке контакта определяется формулой

$$[\bar{\theta}]_{(x,y,z)=(x^*,y^*,z^*), t=t^*} = - \lim_{t \rightarrow t^*-0} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\frac{|V_{1n}| + |V_{2n}|}{2} - |K_1 - K_2| \right),$$

где $\bar{\theta} = \bar{\theta}(x, y, z, t)$, $(x, y, z) = (x^*, y^*, z^*)$ — точка контакта свободных границ, K_1, K_2 — кривизны свободных границ в точке контакта.

Рассмотрим другую ситуацию. Предположим, что решение нашей задачи симметрично относительно вращения вокруг оси y (см. фиг. 3). Обозначим через $y_1(t)$ и $y_2(t)$ точки пересечения свободных границ с осью y , находящиеся на кратчайшем расстоянии друг от друга. Предположим, что контакт свободных границ происходит в точке $M^* = (0, y^*, 0)$. Описанная ситуация принципиально отличается от ситуации, изображенной на фиг. 1, тем, что в момент контакта t^* кривизны свободных границ в точке контакта M^* имеют разные знаки. В этом случае амплитуда скачка температуры определяется формулой

$$[\bar{\theta}]_{(x,y,z)=(x^*,y^*,z^*), t=t^*} = - \lim_{t \rightarrow t^*-0} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\frac{|V_{1n}| + |V_{2n}|}{2} + |K_1| + |K_2| \right).$$

Отметим, что помимо собственных работ, авторам известна только одна работа [9], в которой решена задача о слиянии свободных границ в задаче Хеле—Шоу, являющаяся частным случаем задачи Стефана—Гиббса—Томсона. При этом в [9] рассматривалась нерегуляризованная, а предельная задача, в которой эффект возмущения температуры не проявляется. Аналогом здесь является следующая задача. Рассмотрим уравнение теплопроводности на отрезке с начальным условием, отличным от нуля ($=1$) в единственной точке $x = 0$ и нулевыми краевыми условиями Дирихле. Ясно, что решение этой задачи есть нуль. Однако для разностной схемы, аппроксимирующей эту задачу на сетке с узлом в точке $x = 0$, численное решение уже не будет тождественным нулем. Эта аналогия, почти точная для рассматриваемой задачи, возможно, единственное качественное различие между системой фазового поля и задачей Стефана—Гиббса—Томсона. Указанный эффект (в рассматриваемом случае точечный и малозначающий) в общем случае может быть существенным.

2. РАЗНОСТНАЯ СХЕМА

При выборе разностной схемы для системы (8), (9) мы руководствуемся общими принципами для численного решения нелинейных уравнений (см. [11], [12], [13]). Именно, уравнение теплопроводности (8) рассматривается на последующем временном шаге, и тем самым система (8), (9) расщепляется по времени. Функция $F(u) = u - u^3$ в уравнении (9) лианеризуется по формуле

$$F(u_i^{k+1}) \approx F(u_i^k) + F'_u(u_i^k)(u_i^{k+1} - u_i^k), \quad i = 1, \dots, N.$$

Таким образом, система (8), (9) решается согласно следующему алгоритму. На текущем временном шаге k вначале решается система сеточных уравнений, соответствующих уравнению (9):

$$\begin{aligned} \varepsilon \frac{u_i^{k+1} - u_i^k}{\tau} - \varepsilon \frac{u_{i-1}^{k+1} - 2u_i^{k+1} + u_{i+1}^{k+1}}{h^2} - 2\varepsilon \frac{u_{i+1}^{k+1} - u_i^{k+1}}{hr_i} = \\ = \frac{1}{\varepsilon} \left[u_i^{k+1} - \left((u_i^k)^3 + 3(u_i^k)^2(u_i^{k+1} - u_i^k) \right) \right] + \lambda \frac{\sigma_i^k}{r_i}, \quad i = 2, \dots, N-1, \end{aligned} \quad (19)$$

$$u_1^{k+1} = u_2^{k+1}, \quad u_N^{k+1} = u_{N-1}^{k+1}.$$

Из системы (19) определяется сеточная функция u_i^{k+1} . На втором этапе решается система сеточных уравнений, соответствующих уравнению теплопроводности:

$$\begin{aligned} \frac{\sigma_i^{k+1} - \sigma_i^k}{\tau} - \frac{\sigma_{i-1}^{k+1} - 2\sigma_i^{k+1} + \sigma_{i+1}^{k+1}}{h^2} = -r_i \frac{u_i^{k+1} - u_i^k}{\tau}, \quad i = 2, \dots, N-1, \\ \sigma_1^{k+1} = \sigma_2^{k+1}, \quad \sigma_N^{k+1} = \sigma_{N-1}^{k+1}. \end{aligned} \quad (20)$$

Из системы (20) определяется сеточная функция σ_i^{k+1} .

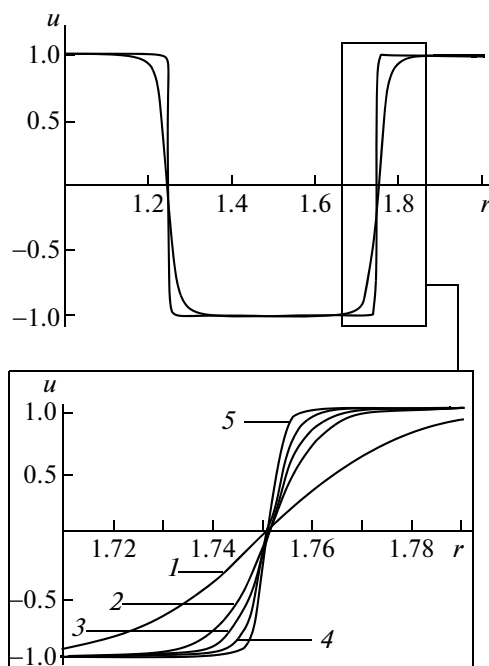
При численном моделировании процесса слияния мы использовали основной отрезок $r \in [1, 2]$ (т.е. $R_1 = 1$, $R_2 = 2$). Начальные данные выбирались в соответствии со структурой слабого асимптотического решения (17). В качестве начальных данных для функции порядка u использовалась функция

$$u^0 = 1 + \operatorname{th} \left(\frac{r_1^0 - r}{\varepsilon} \right) + \operatorname{th} \left(\frac{r - r_2^0}{\varepsilon} \right), \quad (21)$$

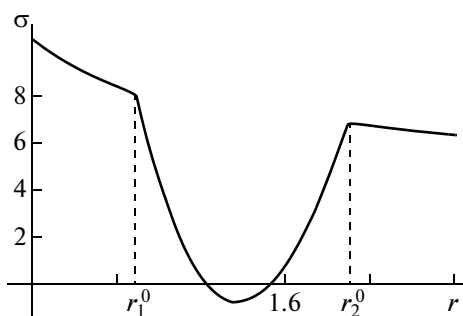
где $r_1^0 = 1.25$, $r_2^0 = 1.75$ — начальное положение свободных границ (см. фиг. 3, 4).

Начальные данные σ^0 для “температуры” берутся в виде, изображенном на фиг. 5 в соответствии с моделью (18). Именно, в области с фазой — (между свободными границами) σ^0 имеет вид параболы, в областях с фазой + функция σ^0 является линейной функцией. При этом в граничных точках r_1^0 , r_2^0 соотношение между начальным положением и начальными скоростями свободных границ и значением σ^0 определяется в соответствии с формулой (12).

Понятно, что начальные данные указанного вида отличаются от точного решения задачи. Тем не менее известно, что при достаточно широких предположениях, решения задачи (8), (9) при



Фиг. 4. Начальные данные для функции порядка u для различных значений параметра ε . Цифрами обозначено: 1 – для $\varepsilon = 0.025$, 2 – для $\varepsilon = 0.01$, 3 – для $\varepsilon = 0.007$, 4 – для $\varepsilon = 0.005$, 5 – для $\varepsilon = 0.003$.



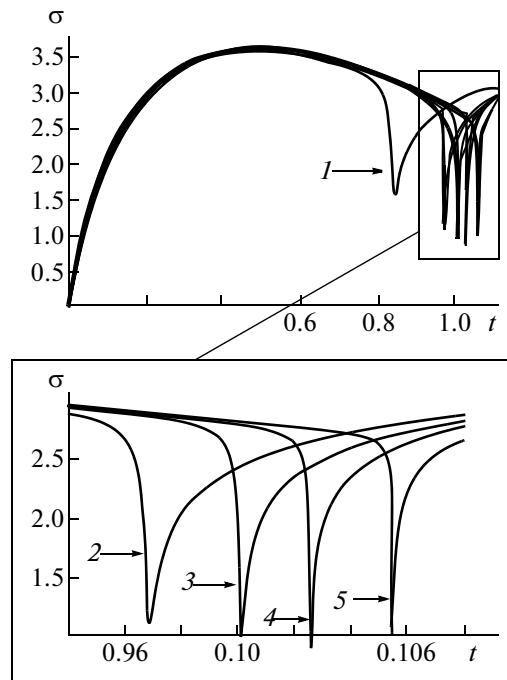
Фиг. 5. Начальные данные для температуры σ . Начальное положение свободных границ $r_1^0 = 1.25$, $r_2^0 = 1.75$.

$\varepsilon \rightarrow 0$ сходятся к решениям предельной задачи Стефана–Гиббса–Томсона. Кроме того, в силу известных свойств полулинейных параболических уравнений решение задачи Коши выходит на автомодельный режим (см. [14]), а формулы для асимптотического решения являются деформациями формул для автомодельных решений.

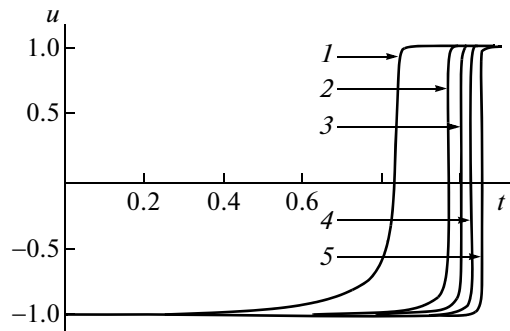
Внутренняя проверка алгоритма проводилась при фиксированных значениях малого параметра ε из интервала $\varepsilon \in [0.02, 0.003]$ и одновременном изменении шагов сетки τ и h ($\tau \in [10^3, 10^6]$, $h \in [10^2, 10^4]$). При этом начальные данные задавались одинаковыми в соответствии с формулами (12) и (21). Численный эксперимент показал практическую идентичность результатов, что подтверждает устойчивость счета.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Часть приведенных ниже графиков иллюстрирует общие свойства решения системы (8), (9) и, тем самым, подтверждает достоверность полученных с помощью численного моделирования результатов. Приведенные ниже расчеты проводились для различных (уменьшающихся) значений



Фиг. 6. Скачок температуры σ в окрестности точки контакта свободных границ ($r^* \approx r = 1.42$). Цифрами обозначено: 1 — для $\varepsilon = 0.025$, 2 — для $\varepsilon = 0.01$, 3 — для $\varepsilon = 0.007$, 4 — для $\varepsilon = 0.005$, 5 — для $\varepsilon = 0.003$.



Фиг. 7. Поведение функции порядка u в окрестности точки контакта свободных границ ($r^* \approx r = 1.42$). Цифрами обозначено: 1 — для $\varepsilon = 0.025$, 2 — для $\varepsilon = 0.01$, 3 — для $\varepsilon = 0.007$, 4 — для $\varepsilon = 0.005$, 5 — $\varepsilon = 0.003$.

параметра ε , $\varepsilon = 0.025$, $\varepsilon = 0.01$, $\varepsilon = 0.007$, $\varepsilon = 0.005$, $\varepsilon = 0.003$. При этом бралось значение шага сетки $h = 10^{-3}$ и значение временного шага $\tau = 10^{-5}$.

На фиг. 6, 7 изображены соответственно профили температуры σ и функции порядка u в окрестности точки контакта свободных границ (при фиксированном $r^* \approx r = 1.42$) для различных значений параметра ε .

Из графиков на фиг. 6, видно, что при уменьшении параметра ε “ширина” окрестности момента времени, в которой происходит скачок температуры, уменьшается (имеет порядок ε). При этом скачок происходит в разные моменты времени для каждого значения параметра ε . Именно, при уменьшении ε последовательность значений момента времени $t_{\min}$, в который скачок достигает минимума, возрастает (см. также табл. 1). Кроме того, из табл. 1 видно, что промежутки между соседними $t_{\min}$ с уменьшением ε сокращаются. Происходит это из-за того, что ширина переходной зоны у функции порядка u для различных значений ε различна (см. формулу (21)). Именно, ширина переходной зоны прямо пропорциональна ε (чем больше ε , тем шире переходная зона, см. фиг. 4 и [5], [7]). Поэтому при движении свободных границ навстречу друг другу сопри-

Таблица 1

ε	$t_{\min}$	$r_{\min}$	$\sigma(r_{\min}, t_{\min}, \varepsilon)$
0.025	0.08432	1.448	1.373699
0.01	0.09690	1.427	1.051388
0.007	0.10016	1.422	0.967825
0.005	0.10260	1.419	0.902497
0.003	0.10549	1.415	0.587919

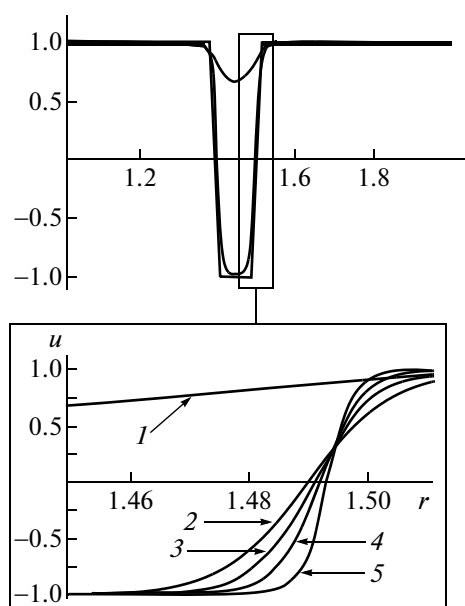
косновение переходных зон (а значит, и начало слияния свободных границ) происходит раньше для моделируемого процесса с большим ε (см. фиг. 8). Понятно, что при этом ширина процесса взаимодействия по r также имеет порядок ε . Из фиг. 8 видно, что при фиксированном моменте времени $t = 0.082$ свободные границы, соответствующие графику 1 ($\varepsilon = 0.025$), уже провзаимодействовали, в то время как для остальных графиков (с меньшими ε) свободные границы находятся только в движении.

Отчасти процесс взаимодействия иллюстрирует фиг. 7. Видно, что чем меньше ε , тем быстрее происходит переход фазы — в фазу +. Очевидно, что $u(r^*, t) \rightarrow \text{sign}(t - t_{\min})$ при $\varepsilon \rightarrow 0$.

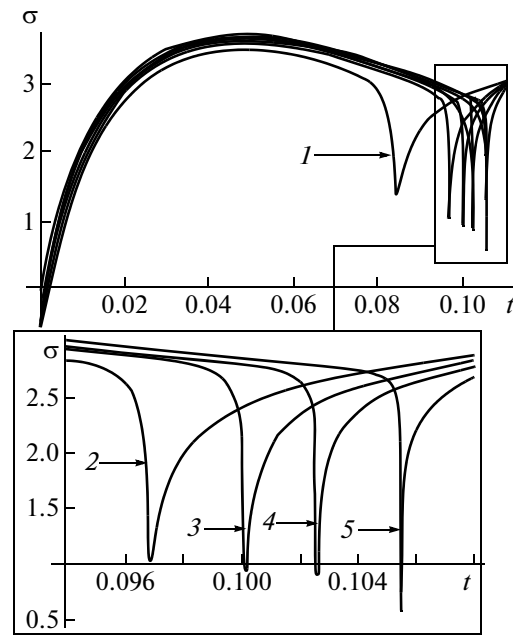
Кроме того, из фиг. 6 видно, что минимум скачка для графика 5 ($\varepsilon = 0.003$) меньше, чем минимум для графика 4 ($\varepsilon = 0.005$), хотя на самом деле это не так, и наблюдается обратная зависимость (см. табл. 1 и фиг. 9), где изображены графики температуры σ при фиксированном $r = r_{\min}$, где $r_{\min}$ — значение координаты r , на котором достигается минимум скачка).

Это означает, что минимум скачка температуры σ сдвигается по координате r в зависимости от ε (см. табл. 1). Видно, что этот сдвиг не превышает разницы в размере переходных зон (разницы между соответствующими значениями параметра ε) для соответствующих графиков (см. фиг. 9).

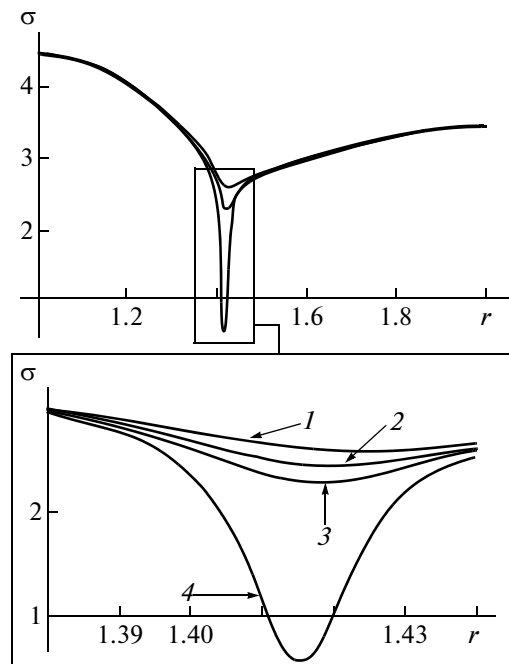
Из табл. 1 видно, что с уменьшением ε промежутки между соседними значениями $t_{\min}$ также уменьшаются, причем эти промежутки имеют порядок ε . Одновременно с этим при уменьшении ε расстояние между соседними $r_{\min}$ сокращается.



Фиг. 8. Функция порядка u при $t = 0.82$. Цифрами обозначено: 1 — для $\varepsilon = 0.025$, 2 — для $\varepsilon = 0.01$, 3 — для $\varepsilon = 0.007$, 4 — для $\varepsilon = 0.005$, 5 — для $\varepsilon = 0.003$.



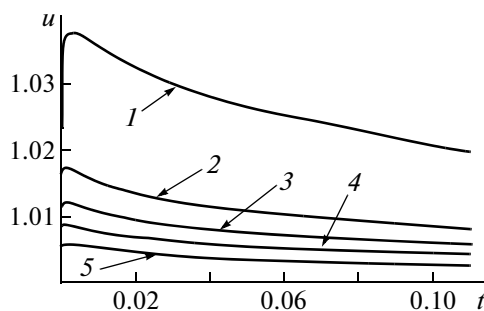
Фиг. 9. Скачок температуры σ . Цифрами обозначено: 1 – для $\varepsilon = 0.025$, $r = 1.448$, 2 – для $\varepsilon = 0.01$, $r = 1.427$, 3 – для $\varepsilon = 0.007$, $r = 1.422$, 4 – для $\varepsilon = 0.005$, $r = 1.419$, 5 – для $\varepsilon = 0.003$, $r = 1.415$.



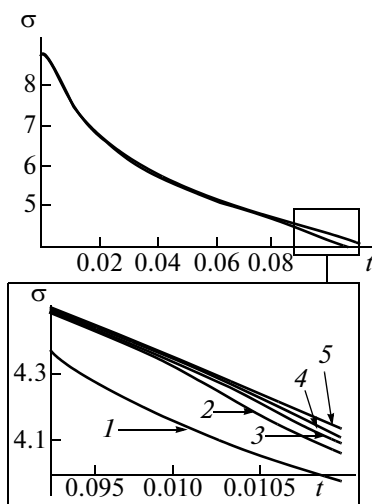
Фиг. 10. Динамика скачка температуры σ при $\varepsilon = 0.003$. Цифрами обозначены моменты времени: 1 – для $t = 0.1052$, 2 – для $t = 0.10539$, 3 – для $t = 0.10544$, 4 – для $t = t_{\min} = 0.10549$.

Динамика скачка температуры во времени для $\varepsilon = 0.003$ изображена на фиг. 10.

Таким образом, из сказанного выше заключаем, что процесс взаимодействия свободных границ локализован по координате и времени, а значит, локализовано по координате и времени солитоннообразное возмущение температуры, возникающее в момент контакта свободных границ (ширина локализации имеет порядок ε).



Фиг. 11. Функция порядка u при $r = 1.15$. Цифрами обозначено: 1 – для $\varepsilon = 0.025$, 2 – для $\varepsilon = 0.01$, 3 – для $\varepsilon = 0.007$, 4 – для $\varepsilon = 0.005$, 5 – для $\varepsilon = 0.003$.

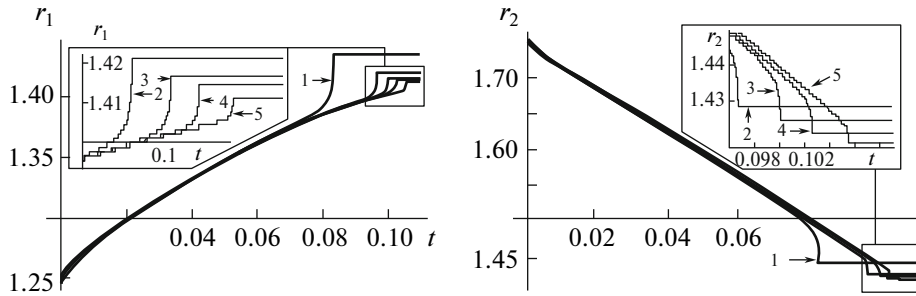


Фиг. 12. Температура σ при $r = 1.15$. Цифрами обозначено: 1 – для $\varepsilon = 0.025$, 2 – для $\varepsilon = 0.01$, 3 – для $\varepsilon = 0.007$, 4 – для $\varepsilon = 0.005$, 5 – для $\varepsilon = 0.003$.

Отметим, что при нашем численном моделировании дальнейшее уменьшение параметра ε невозможно. При значении $\varepsilon = 0.003$ ($h = 10^{-3}$) получаем, что в переходную зону попадают три узла сетки (минимальное количество узлов, необходимое для вычисления второй разностной производной (см. (15), (16))). Компьютерное моделирование показало, что при $\varepsilon = 0.002$ в окрестности взаимодействия свободных границ численное решение становится неустойчивым, а при $\varepsilon = 0.001$ разностная схема не дает решения. Заметим, что если мы хотим проследить поведение численного решения при $\varepsilon \rightarrow 0$, то необходимо уменьшать и шаг h по координате в соответствии с указанным замечанием.

Следующая серия графиков демонстрирует сходимость численного решения системы (3), (4) при уменьшении ε . На фиг. 11, 12 изображены графики зависимости функции порядка u и температуры σ от времени в фиксированной точке $r = 1.15$. Заметим, что аналогичные результаты справедливы и для любого другого значения r вне окрестности точки контакта свободных границ.

Из графиков на фиг. 11 видно, что на начальном этапе ($t \leq 0.01$) решение u претерпевает резкий скачок, после чего стабилизируется (выходит на почти автомодельный режим). При этом стабилизация носит волновой характер. Кроме того, начальный промежуток времени, на котором решение претерпевает наиболее сильное изменение (скачок), сокращается с уменьшением ε . При этом при уменьшении ε расстояние между соседними графиками сокращается и имеет порядок ε .



Фиг. 13. Динамика свободной границы $r_1(t)$ для различных значений параметра ε . Цифрами обозначено: 1 — для $\varepsilon = 0.025$, 2 — для $\varepsilon = 0.01$, 3 — для $\varepsilon = 0.007$, 4 — для $\varepsilon = 0.005$, 5 — для $\varepsilon = 0.003$.

Как видно из графиков на фиг. 12, поведение температуры σ устойчиво относительно изменения ε . Отличие в графиках на временах $t > 0.09$ обусловлено тем, что процесс взаимодействия для графиков с большим ε начинается раньше, чем для графиков с меньшим ε .

Последняя серия численных экспериментов посвящена проверке аналитической формулы для величины скачка температуры. Из [7], [8] следует, что амплитуда скачка равна

$$[\bar{\theta}]_{r=r^*, t=t^*} = -\frac{r'_{10} - r'_{20}}{2},$$

или с учетом (2) имеем

$$[\bar{\sigma}]_{r=r^*, t=t^*} = -\lim_{t \rightarrow t^* - 0} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{2r_1(t, \varepsilon)r'_1(t, \varepsilon) - 2r'_2(t, \varepsilon)r_2(t, \varepsilon)}{4}. \quad (22)$$

На фиг. 13 изображена зависимость положения свободных границ $r_1(t)$ и $r_2(t)$ от времени для различных значений малого параметра ε . Видно, что на начальном этапе движения свободных границ функции $r_1(t)$ и $r_2(t)$ линейные. При приближении к точке контакта на движение свободных границ начинает влиять нелинейность взаимодействия и прямые искажаются. При этом видно, что чем меньше ε , тем меньше окрестность точки t^* , в которой “чувствуется” искажение.

По смыслу асимптотических формул, функции $r_{i0}(t)$, $i = 1, 2$ определяются в виде

$$r_{i0}(t) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} r_i(t, \varepsilon).$$

Из сказанного следует, что в качестве $\frac{d}{dt}r_{i0}(t^*)$ следует принять константу, которая получается при дифференцировании функции $r_i(t, \varepsilon)$ на том участке, где она ближе к линейной.

Заметим, что положение свободных границ при $\varepsilon > 0$ размыто по ε (переходная зона имеет ширину порядка ε). Поэтому, чтобы отследить качественное поведение движения свободных границ, мы рассматривали динамику точки пересечения графика функции порядка $u(r, t)$ с осью координат r , т.е. отслеживали динамику точек $r(t)$, для которых $u(r, t) = 0$ для каждого фиксированного t (см. фиг. 13, 14). При этом моменты времени t^* , в которые графики $r_1(t)$ и $r_2(t)$ становятся горизонтальными прямыми, соответствуют моментам времени, когда функция порядка $u(r, t)$ становится положительной. Эти моменты времени конечно не совпадают с моментами $t_{\min}$, в которые амплитуда скачка температуры достигает максимального значения (см. табл. 1).

Для вычисления амплитуды температурного скачка мы определяем минимальное значение температуры $\sigma_{\min}$, отвечающее значению координаты $r_{\min}$ (см. табл. 1). На фиг. 9, например, оно достигается на кривой 4. Амплитуда равна модулю разности $\sigma_{\min}$ и значения температуры в точке $r_{\min}$ в момент времени, отвечающему началу быстрого изменения температуры в этой точке (на фиг. 10 такое значение температуры дает кривая 3).

Данные для проверки формулы (22), полученные с учетом сказанного, выше содержатся в табл. 2. В графе $[\sigma_{\text{ан}}]$ указаны данные для скачка, вычисленные по формуле (22), а в графе $[\sigma_{\text{cal}}]$

Таблица 2

ε	r_1	r'_1	r_2	r'_2	$[\sigma_{an}]$	$[\sigma_{cal}]$
0.025	1.394	1.4	1.485	−3.2	3.3518	1.5
0.01	1.402	1	1.446	−3.2	3.01448	1.7
0.007	1.403	0.8	1.438	−3.2	2.86	1.9
0.005	1.403	0.6	1.430	−3.2	2.7	2.1
0.003	1.405	0.6	1.422	−3.2	2.69	2.7

данные для скачка, полученные с помощью численного моделирования. Из табл. 2 видно, что при уменьшении ε аналитические данные сходятся с численными расчетами.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Gibbs J.W.* Collected Works. New Haven: Yale University Press, 1948.
2. *Chalmers B.* Principles of solidification (N.Y.: Krieger, 1964).
3. *Elliot C.M., Ockendon J.R.* Weak and variational methods for moving boundary problems. Boston: Pitman, 1982.
4. *Holunbery P.C., Halperin B.I.* Theory of dynamic critical phenomena // Rev. Modern Phys. 1977. V. 49. № 3. P. 435–476.
5. *Caginalp G.* An analysis of a phase field model of a free boundary // Arch. Rat. Mech. Anal. 1986. V. 92. P. 205–245.
6. *Caginalp G.* In applications of field phase theory to statistical mech. Lect. Notes in Physics. Berlin: Springer, V. 216. P. 216.
7. *Данилов В.Г., Омелянов Г.А., Радкевич Е.В.* Асимптотическое решение системы фазового поля и модифицированной задачи стефана // Дифференц. ур-ния. 1995. Т. 31. № 3. С. 483–491.
8. *Danilov V.G.* Weak asymptotic solution of phase-field system in the case of confluence of free boundaries in Stefan problem with undercooling // Euro. J. Appl. Math. 2007. V. 18. P. 537–569.
9. *Meirmanov A., Zaltzman B.* Global in time solution to the Hele-Shaw problem with a change of topology. Euro. J. Appl. Math. 2002. V. 13. P. 431–447.
10. *Plotnikov P.I., Starovoitov V.N.* Stefan problem as the limit of the phase field system // Differential Equations. 1993. V. 29. P. 461–471.
11. *Самарский А.А., Николаев Е.С.* Решение сеточных уравнений. М.: Наука, 1978.
12. *Самарский А.А.* Теория разностных схем. М.: Наука, 1971.
13. *Самарский А.А.* Введение в численные методы. М.: Наука, 1971.
14. *Omel'yanov G.A., Rudnev V.Yu.* Interaction of free boundaries in the modified Stefan problem. Nonlinear Phenomena in Complex Systems. 2004. V. 7/3. P. 227–237.