

## АЛГОРИТМ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ СТЕФАНА И ЕГО ПРИМЕНЕНИЕ К РАСЧЕТАМ ТЕМПЕРАТУРЫ ВОЛЬФРАМА ПРИ ИМПУЛЬСНОМ ВОЗДЕЙСТВИИ

© 2021 г. Д. Е. АПУШКИНСКАЯ, Г. Г. ЛАЗАРЕВА

Аннотация. В работе представлено численное решение задачи Стефана для расчета температуры образца вольфрама, нагреваемого лазерным импульсом. Математическое моделирование проводится для анализа натуральных экспериментов, где наблюдается мгновенный нагрев пластинки до 9000 К за счет воздействия на её поверхность теплового потока и последующее охлаждение. Задача характеризуется нелинейными коэффициентами и граничными условиями. Важную роль играет учет испарения металла с нагреваемой поверхности. Для реализации выбран метод сплошного счета с использованием формулировки уравнения теплопроводности в единообразной форме во всей области с применением дельта-функции Дирака, основанный на подходе А. А. Самарского. Численный метод имеет второй порядок аппроксимации по пространству, интервал сглаживания коэффициентов составляет 5 К. В результате получены распределения температуры на поверхности и в поперечном сечении образца в процессе охлаждения.

### ОГЛАВЛЕНИЕ

1. Введение . . . . .	442
2. Постановка задачи . . . . .	444
3. Численное моделирование . . . . .	445
4. Результаты численных расчетов . . . . .	449
5. Выводы . . . . .	450
Список литературы . . . . .	451

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Явления плавления и затвердевания имеют место в разнообразных природных и технологических процессах, от таяния айсбергов в полярных морях или застывания вулканической лавы до производства мороженого или стали. Главной особенностью этих процессов являются априорно неизвестные, как правило, движущиеся границы раздела фаз. Такие границы принято называть *свободными*.

Для того, чтобы произошел фазовый переход материала из твердого состояния в жидкое, необходимо подвести к образцу тепловую энергию для разрыва связей, удерживающих ионы в кристаллической решетке. При обратном переходе из жидкого агрегатного состояния в твердое энергия берется из жидкой фазы и направляется на замедление движения ионов и дальнейшей их организации в стабильную решетчатую структуру.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ, проект № 19-01-00422.



Этот интуитивно простой физический процесс описывается математически с помощью классической задачи о фазовых переходах, так называемой задачи Стефана. Решение такой задачи заключается в нахождении поля температур и определении координат границ раздела фаз.

Первые подробные исследования задачи Стефана были проделаны в работах французских ученых Г. Ламе и Б. П. Клапейрона [24] и словенского физика и металлурга Й. Стефана [28], имя которого и получила задача. Обе публикации были посвящены процессу эволюции льда в полярных морях. Качественный скачок в изучении задачи Стефана произошел в середине 70-х годов XX века, когда задачи со свободными границами выделились в отдельный раздел математики (см. [9] и приведенную там библиографию). В 1973 году Г. Дюво [15] осуществил редукцию многомерной однофазной задачи Стефана к параболическому вариационному неравенству. Это позволило значительно упростить доказательство теоремы о существовании и единственности обобщенных решений, а также получить ряд аналитических результатов о качественных свойствах решений и свободных границ [11–13, 18]. Вариационная формулировка также была установлена и для двухфазной задачи Стефана [17], но полученные результаты по свойствам свободных границ в двухфазном случае оказались слабее, чем в однофазном. Отметим также, что псевдопараболические вариационные неравенства облегчили создание численных методов для решения задач Стефана в многомерных случаях [22, 23].

Помимо аналитических методов, при решении однофазной и двухфазной задач Стефана широко используются методы конечных элементов [4], конечных разностей [30] и интегральные методы [1]. Возможно использование конечно-разностных методов на адаптивной *quadtree* сетке, что приводит к значительному повышению точности вблизи границ раздела фаз [26]. Некоторые из указанных численных методов входят в специальные математические пакеты. Вычислительные комплексы ANSYS FLUENT, STAR-CD, PHOENICS, развивающиеся в течение последних 30 лет, основаны на эффективных численных алгоритмах, обладают удобным интерфейсом и мощными графическими средствами для визуализации результатов. В случае существенного вклада не только диффузионного, но и конвекционного переноса тепла определяется поле скоростей в жидкой фазе, получаемое из решения уравнения Навье—Стокса (см., например, [14, 19, 21]).

Сложность решаемых инженерных задач ограничена практически только характеристиками компьютера пользователя. Тем не менее, новые поисковые исследовательские задачи требуют построения алгоритмов и программ для моделирования процессов с новыми наборами коэффициентов и их соотношений. В этом случае используются два подхода к численному решению. Первый подход состоит в явном выделении расположения границ между фазами. Точное определение ячейки или узла, через которые проходит межфазная граница, часто реализуется с использованием неравномерных и/или динамических сеток [2]. Наиболее известны метод ловли границы в узел пространственной сетки (*variable time stepping*) и метод выпрямления фронтов (*front-fixing method*). Второй подход состоит в использовании методов сквозного счета, при использовании которых начально-краевая задача решается во всей расчетной области без выделения области фазового перехода. При решении ряда многомерных задач Стефана исключение детального вычисления координат границ между фазами становится основным преимуществом. Реализация таких методов состоит в изменении формы записи исходного уравнения и сглаживания разрывных коэффициентов [3, 5, 6]. Такой подход предпочтителен в случае решения задач, не требующих высокой точности вычисления координат свободных границ. Дополнительных усилий требует минимизация влияния значений параметров сглаживания на погрешность численного решения. В популярных инженерных пакетах программ, основанных на конечно-объемных методах, часто используются методы сквозного счета функций уровня (*level set method*) и фазового поля (*phase field method*). Выполнение закона сохранения тепла гарантируется использованием консервативных разностных схем.

В настоящей работе представлены метод и результаты моделирования с помощью двухфазной задачи Стефана процесса плавления и испарения вольфрама при облучении его импульсным электронным пучком. Сравнение экспериментально измеренной на установке ВЕТА (см. [29]) зависимости радиуса расплавленной области от времени с расчетными данными, полученными одним из методов сквозного счета, показало хорошее соответствие. Представленная модель позволяет правильно интерпретировать процессы нагрева, испарения и остывания при импульсном тепловом воздействии, что дает необходимые и важные результаты для развития ITER и других экспериментальных термоядерных реакторов.

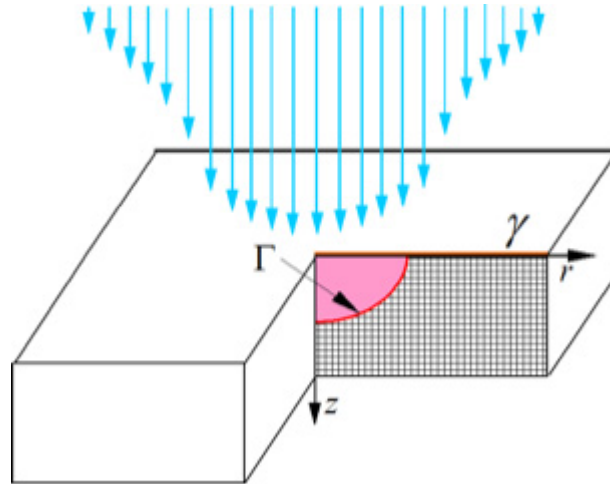


Рис. 1. Схема вольфрамовой мишени с вырезанной четвертью. Голубыми стрелками обозначено направление воздействия импульсного излучения лазера. Область расплава вольфрама выделена розовым цветом,  $\Gamma$  — свободная граница между жидкой и твердой фазами,  $\gamma$  — область теплового воздействия.

## 2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В качестве материала для конструирования диверторных пластин установки ИТЕР предлагается вольфрам, который имеет температуру плавления  $T_m = 3695$  К. На экспериментальном стенде Beam of Electrons for materials Test Applications (ВЕТА), созданного в ИЯФ СО РАН [29], проводилось натурное моделирование нагрева вольфрамовой мишени мощным осесимметричным субмиллисекундным пучком электронов [27]. Образец (прямоугольный параллелепипед) имел размеры  $25 \text{ мм} \times 25 \text{ мм}$  и типичную толщину  $4 \text{ мм}$ . В экспериментах происходил мгновенный нагрев пластинки до  $9000 \text{ К}$  за счет воздействия на её поверхность теплового потока и последующее охлаждение. Распределение плотности мощности нагрева измерялось с помощью рентгеновской визуализации [7]. Именно сочетание высоких плотности мощности воздействия и скорости нагрева привело к необходимости создания новых моделей и программ.

Для расчета распространения температуры с нагреваемой поверхности вглубь образца решается задача Стефана в аксиально-симметричной постановке. Поскольку импульсное воздействие лазера на образец продолжалось несколько десятков микросекунд, то образец нагревался на глубину несколько сотен микрон. Поэтому в качестве области моделирования мы выбираем поперечное сечение образца (см. заштрихованный прямоугольник на рис. 1), т. е. рассматриваем двумерную область

$$\mathcal{D} := \{(r, z) : r \in [r_0, r_{max}], z \in [z_0, z_{max}]\}, \quad (2.1)$$

где  $r_0 = z_0 = 0$ ,  $r_{max} = 12 \text{ мм}$ ,  $z_{max} = 3 \text{ мм}$ . Обозначим через  $\gamma$  часть внешней границы  $\partial\mathcal{D}$  области  $\mathcal{D}$ , которая подвергается тепловому воздействию. Свободную границу между расплавом и твердым вольфрамом обозначим через  $\Gamma$  (см. рис. 1). Тогда задача Стефана принимает вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} c(T)\rho(T)\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\lambda(T)\frac{\partial T}{\partial r}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\lambda(T)\frac{\partial T}{\partial z}\right) \quad \text{в } \mathcal{D}, \\ (\mathbf{n}, \nabla T)|_{\gamma} = \frac{W(t, r) - N(t, r)}{\lambda(T)}, \\ (\mathbf{n}, \nabla T) = 0 \quad \text{на } \partial\mathcal{D} \setminus \gamma, \\ T = T_0 \quad \text{при } t = 0, \end{array} \right. \quad (2.2)$$

где  $T(t, r, z)$  — температура,  $c(T)$  — удельная теплоемкость,  $\rho(T)$  — плотность,  $\lambda(T)$  — теплопроводность,  $W(t, r)$  — мощность теплового потока на  $\gamma$ ,  $N(t, r)$  — мощность испарения на  $\gamma$ ,  $\mathbf{n}$  — вектор внешней нормали к  $\partial\mathcal{D}$ , а  $T_0$  — начальная температура.

Распределение мощности по поверхности теплового потока задается формулой

$$W(t, r) = W_{\max}(t) \exp\{-Ar^2\}, \quad A = 0,03088523 \text{ мм}^{-2}, \quad (2.3)$$

а значение  $W_{\max}$  определено экспериментально. Так как распределение (2.3) близко к нормальному, то вблизи оси симметрии особенностей решения системы (2.2) не возникает, как и в других задачах такого типа.

На границе контакта твердой и жидкой сред температура предполагается непрерывной. Кроме того, поскольку фазовый переход сопровождается выделением/поглощением определенного количества тепла, то тепловой поток на границе фазового перехода будет разрывен и равен произведению энтальпии фазового перехода на нормальную компоненту скорости движения границы раздела фаз. Таким образом, условия на свободной границе  $\Gamma$  имеют вид

$$[T]_{\Gamma} = 0, \quad \left[ \lambda(T) \frac{\partial T}{\partial t} \right]_{\Gamma} = L_m v_n, \quad (2.4)$$

где  $L_m$  — энтальпия фазового перехода, а  $v_n$  — нормальная составляющая скорости движения границы фазового перехода.

### 3. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Напомним, что нагреваемый образец имел размеры 25 мм × 25 мм и толщину 4 мм, а область моделирования представляла собой поперечное сечение образца размером 12 мм × 3 мм (см. рис. 1). Что касается времени, то численное моделирование продолжалось до того момента, когда было произведено последнее измерение температуры поверхности.

Для удобства вычислений, в уравнениях (2.2)–(2.4) был выполнен переход к безразмерным переменным, определенным следующим образом:

$$r^* = \frac{r}{r_0}, \quad \lambda^* = \frac{\lambda}{\lambda_0}, \quad \rho^* = \frac{\rho}{\rho_0}, \quad c^* = \frac{c}{c_0}, \quad t^* = \frac{t}{t_0} = \frac{\lambda_0 t}{\rho_0 c_0 r_0^2}, \quad T^* = \frac{T}{T_0}, \quad W^* = \frac{\lambda_0 T_0 W}{r_0},$$

где  $r_0$ ,  $\lambda_0$ ,  $\rho_0$ ,  $c_0$  и  $T_0$  — это характерные значения параметров, которые приведены в таблице 1.

ТАБЛИЦА 1

Параметр	Типичное значение	Ед. измерения
$r_0$	$10^{-1}$	мм
$t_0$	$10^2$	мкс
$\lambda_0$	$10^{-1}$	Вт/мм · К
$\rho_0$	$10^{-5}$	кг/мм <sup>3</sup>
$c_0$	$10^8$	Вт · мкс/кг · К
$T_0$	$10^3$	К
$W_0$	$10^3$	Вт/мм <sup>2</sup>

Точнее говоря, мы, не меняя обозначений, считаем величины в уравнениях (2.2)–(2.4) безразмерными, а для получения результатов в физических величинах после проведения необходимых вычислений домножаем результаты на соответствующие характерные значения параметров.

Для построения эффективного вычислительного алгоритма чрезвычайно важное значение имеет тот факт, что задача Стефана допускает обобщенную формулировку (см. [5]), при которой условия (2.4) на свободной границе включаются в первое из уравнений (2.2). Затем коэффициенты полученного уравнения сглаживаются (см. [3]). В результате происходит исключение вычисления координат свободных границ и уравнение теплопроводности во всей области формулируется в единообразной форме с применением дельта-функции Дирака. Точнее говоря, в первом из уравнений (2.2) в множителе при производной по времени появляется дополнительное слагаемое, содержащее теплоту плавления

$$L_m = 51,1 \cdot 10^5 \frac{\text{Вт} \cdot \text{мкс}}{\text{мм}^3},$$

действующую на интервале сглаживания, и уравнение теплопроводности принимает вид:

$$(c(T)\rho(T) + L_m\delta(T, \varepsilon)) \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r\lambda(T) \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \lambda(T) \frac{\partial T}{\partial z} \right). \quad (3.1)$$

Здесь множитель  $\delta(T, \varepsilon)$  действует на узком интервале сглаживания  $[T_m - \varepsilon, T_m + \varepsilon]$ ,  $\varepsilon = 5$  К, и вычисляется следующим образом:

$$\delta(T, \varepsilon) = \begin{cases} \frac{1}{2\varepsilon}, & |T - T_m| \leq \varepsilon, \\ 0, & |T - T_m| > \varepsilon. \end{cases}$$

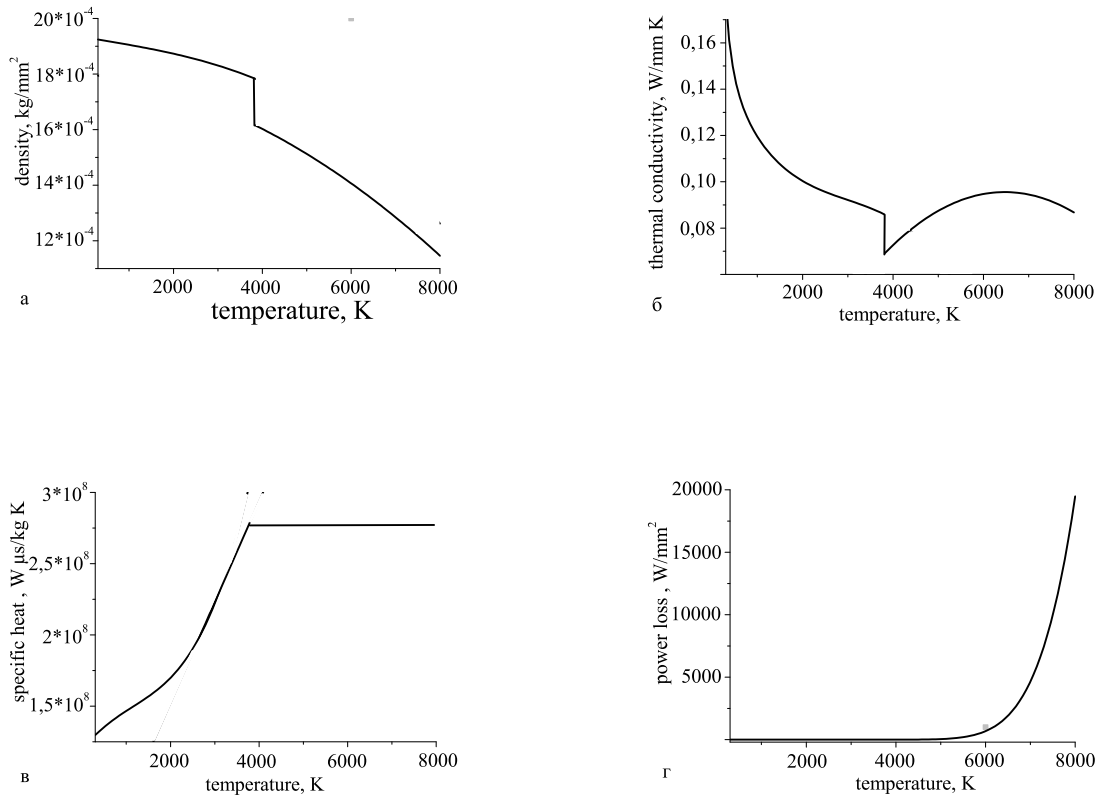


Рис. 2. Графики зависимости от температуры плотности испарения (а), теплопроводности (б), удельной теплоемкости (в), мощности испарения (г), которые использовались при численном моделировании.

Заметим, что измерение теплофизических характеристик тугоплавких металлов является сложной задачей. Многие справочники и статьи дают приблизительные или теоретически предсказанные зависимости с оценкой точности менее 10%. Поэтому плотность  $\rho(T)$  (см. рис. 2а), теплопроводность  $\lambda(T)$  (см. рис. 2б), удельная теплоемкость  $c(T)$  (см. рис. 2в) и мощность поверхностного испарения  $N(t)$  (см. рис. 2г), стоящие в коэффициентах уравнения (3.1), учитывались согласно зависимостям от температуры материала в диапазоне  $300 \text{ K} \leq T \leq 8000 \text{ K}$ . Все эти функции имеют разрывы или теряют гладкость при температуре плавления вольфрама  $T_m = 3695 \text{ K}$ .

Зависимости от температуры для теплопроводности  $\lambda(T)$  и теплоемкости  $c(T)$  твердого вольфрама взяты из [16]. Оценки теплопроводности жидкого вольфрама взяты из работ [20, 27]. Зависимость теплопроводности от температуры была скорректирована в процессе моделирования [25].

В двумерной области  $\mathcal{D}$  (см. определение (2.1)) была введена равномерная прямоугольная сетка. Размер расчетной области соответствует размерам образцов, но постановка задачи в цилиндрической геометрии предполагает рассмотрение пластинки в форме шайбы. Такое предположение не вносит существенного влияния на результат, так как распределение мощности по поверхности теплового потока имеет максимальные значения в центре образца и убывает пропорционально радиусу. Разогрев образца происходит в центре пластинки и не достигает ее краев. Образец прогревается на глубину, не превышающую 1 мм. Таким образом основное внимание при расчете должно быть уделено граничным условиям на нагреваемой поверхности и на оси симметрии.

Граничное условие на нагреваемой поверхности  $\gamma$  (второе из уравнений (2.2)) в цилиндрической геометрии принимает вид

$$\left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{z=0} = \frac{W(t, r) - N(t, r)}{\lambda(T)}.$$

Оно зависит от трех нелинейных коэффициентов.

Напомним, что распределение мощности по поверхности теплового потока задается формулой (2.3), где  $A = 1/a^2 = 0,03088523 \text{ мм}^{-2}$  — постоянная, характеризующая величину радиуса пучка  $a$ , который имеет одно значение для каждой серии экспериментов и используется при расчете граничного условия для задачи (2.2). На каждом временном шаге численного моделирования значение переменной  $W_{\max}(t)$  берется из файла экспериментальных данных, индивидуального для каждого эксперимента.

Потеря мощности на процесс испарения учитывается в виде

$$N(T|_{\gamma}) = L_e \frac{1}{S} \frac{dm}{dt},$$

где  $\frac{1}{S} \frac{dm}{dt}$  — скорость испарения массы  $m$  на единицу площади поверхности  $S$ , а  $L_e$  — энтальпия парообразования. Потеря мощности рассчитывается по следующим формулам:

$$L_e = 4,482 \cdot 10^{12} \frac{\text{Вт} \cdot \text{мкс}}{\text{кг}},$$

$$\frac{1}{S} \frac{dm}{dt} = P(T|_{\gamma}) \sqrt{\frac{M}{2\pi RT|_{\gamma}}} = \exp\left(26,19104 - \frac{83971,3 \text{ K}}{T|_{\gamma}}\right) \sqrt{\frac{0,184 \text{ K}}{2\pi 8,314 T|_{\gamma}}} \cdot 10^{-12} \frac{\text{кг}}{\text{мм}^2 \cdot \text{мкс}}. \quad (3.2)$$

Здесь  $T|_{\gamma}$  — температура на поверхности  $\gamma$ ,  $R$  — универсальная газовая постоянная, а  $P(T|_{\gamma})$  — давление насыщенного пара. Вывод уравнения (3.2) и обоснование пренебрежения излучением температуры поверхностью в энергетическом балансе более подробно представлены в работе [29].

Поскольку уравнение теплопроводности (3.1) традиционно аппроксимируется со вторым порядком точности по пространству, граничное условие на оси  $\left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=0} = 0$  в цилиндрической системе координат целесообразно аппроксимировать с тем же порядком точности следующим образом. Если значение во втором узле по радиусу разложить в ряд Тейлора

$$T_{2k}^{n+1} = T_{1k}^{n+1} + h \left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=0}^{n+1} + \frac{h^2}{2} \left. \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} \right|_{r=0}^{n+1} + O(h^3),$$

то граничное условие на оси можно представить в виде:

$$\left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=0}^{n+1} = \frac{T_{2k}^{n+1} - T_{1k}^{n+1}}{h} - \frac{h}{2} \left. \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} \right|_{r=0}^{n+1} + O(h^2). \quad (3.3)$$

Далее из уравнения (3.1) можно выразить вторую производную по радиусу:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \lambda(T) \frac{\partial T}{\partial r} \right) = (c(T)\rho(T) + L_m \delta(T, \varepsilon)) \frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z} \left( \lambda(T) \frac{\partial T}{\partial z} \right). \quad (3.4)$$

Расписав левую часть уравнения (3.4) в виде

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \lambda(T) \frac{\partial T}{\partial r} \right) = \frac{1}{r} \lambda(T) \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial r} \left( \lambda(T) \frac{\partial T}{\partial r} \right), \quad (3.5)$$

заметим, что вблизи оси симметрии решение практически постоянно, а теплопроводность  $\lambda(T)$  ограничена. Поэтому применив к первому слагаемому в правой части (3.5) правило Лопиталья

$$\lim_{r \rightarrow 0} \left( \frac{1}{r} \lambda(T) \frac{\partial T}{\partial r} \right) = \frac{\partial}{\partial r} \left( \lambda(T) \frac{\partial T}{\partial r} \right),$$

получим

$$2 \frac{\partial}{\partial r} \left( \lambda(T) \frac{\partial T}{\partial r} \right) = (c(T)\rho(T) + L_m \delta(T, \varepsilon)) \frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z} \left( \lambda(T) \frac{\partial T}{\partial z} \right).$$

Из последнего соотношения следует равенство

$$\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} = \frac{1}{2\lambda(T)} \left( (c(T)\rho(T) + L_m \delta(T, \varepsilon)) \frac{\partial T}{\partial t} - 2 \frac{\partial \lambda(T)}{\partial r} \frac{\partial T}{\partial r} - \frac{\partial}{\partial z} \left( \lambda(T) \frac{\partial T}{\partial z} \right) \right),$$

которое после подстановки в граничное условие (3.3) дает выражение

$$\begin{aligned} \left( 1 - 2 \frac{\partial \lambda(T)}{\partial r} \right) \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=0}^{n+1} &= \frac{T_{2k}^{n+1} - T_{1k}^{n+1}}{h} - \frac{h}{4\lambda(T)} (c(T)\rho(T) + L_m \delta(T, \varepsilon)) \frac{\partial T}{\partial t} \Big|_{r=0}^{n+1} + \\ &+ \frac{\partial}{\partial z} \left( \lambda(T) \frac{\partial T}{\partial z} \right) \Big|_{r=0}^{n+1} + O(h^2). \end{aligned}$$

Таким образом, итоговая система уравнений имеет следующий вид:

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{T_{ik}^{n+1} - T_{ik}^n}{\tau} &= \frac{1}{r_i h^2 C_{ik}^n} [r_{i+1/2} L_{ik}^n (T_{i+1k}^{n+1} - T_{ik}^{n+1}) - r_{i-1/2} L_{ik}^n (T_{ik}^{n+1} - T_{i-1k}^{n+1})] + \\ &+ \frac{1}{C_{ik}^n} [L_{ik+1/2}^n (T_{ik+1}^{n+1} - T_{ik}^{n+1}) - L_{ik-1/2}^n (T_{ik}^{n+1} - T_{ik-1}^{n+1})], \\ C_{ik}^n &= c(T_{ik}^n) \rho(T_{ik}^n) + L_m \delta(T_{ik}^n, \varepsilon), \\ L_{ik}^n &= \lambda(T_{ik}^n), \\ \frac{T_{i,3}^{n+1} - 4T_{i,2}^{n+1} + 3T_{i,1}^{n+1}}{2h} &= \frac{W_i^{n+1} - N_i^{n+1}}{L_{i,1}^{n+1}}, \\ W_i^{n+1} &= W_{\max}(t^{n+1}) \exp(-Ar_i^2), \\ \frac{T_{i,N_z-2}^{n+1} - 4T_{i,N_z-1}^{n+1} + 3T_{i,N_z-1}^{n+1}}{2h} &= 0, \\ \frac{T_{2k}^{n+1} - T_{1k}^{n+1}}{h} - \frac{h}{4L_{1k}^n} \left\{ C_{1k}^n \frac{T_{2k}^{n+1} - T_{2k}^n}{\tau} + \frac{1}{h} \left( L_{1k+1/2}^n (T_{ik+1}^{n+1} - T_{ik}^n) - \right. \right. \\ &\left. \left. - L_{1k-1/2}^n (T_{ik}^{n+1} - T_{ik-1}^{n+1}) \right) \right\} = 0, \\ \frac{T_{N_r-2,k}^{n+1} - 4T_{N_r,k}^{n+1} + 3T_{N_r-1,k}^{n+1}}{2h} &= 0, \\ T_{ik}^0 &= T_0. \end{aligned} \right. \quad (3.6)$$

Здесь индексы  $i$  и  $k$  принимают соответственно значения  $i = 2, \dots, N_r - 1$  и  $k = 2, \dots, N_z - 1$ .

Предложенная схема решения (3.6) имеет второй порядок аппроксимации по пространству и позволяет не выделять границу фазовых превращений. Расчет температуры во внутренних точках расчетной области реализуется с использованием схемы, стабилизирующей поправку, и метода прогонки [8], а коэффициенты рассчитываются по значениям температуры с предыдущего слоя. Уравнение теплопроводности (3.1) имеет дивергентный вид, что позволяет использовать консервативные схемы. Решение системы (3.6) с постоянными коэффициентами протестировано на известных аналитических решениях, с переменными коэффициентами протестировано на экспериментальных данных. При тестировании также учитывался известный факт, что разогрев образца вольфрама с плотностью мощности  $10^3$  Вт/мм<sup>2</sup> в течение 1000 мкс приводит к разогреву образца до 2000 К.

Предложенный алгоритм экономичен и прост в реализации, может быть использован для моделирования плавления других тугоплавких металлов.

#### 4. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННЫХ РАСЧЕТОВ

На основе схемы (3.6) производился расчет распределения температуры в поперечном сечении вольфрамовой пластинки. Таким образом учитывался прогрев вглубь материала, что и определяло температуру на поверхности наряду с падающей энергией и испарением, которые задаются граничным условием. Угловая симметрия лазерного импульса определяла угловую симметрию распределения температуры. Мгновенный нагрев пластинки до 9000 К за счет воздействия на её поверхность теплового потока и последующее охлаждение сопровождалось возникновением и исчезновением области расплава (см. рис. 3).

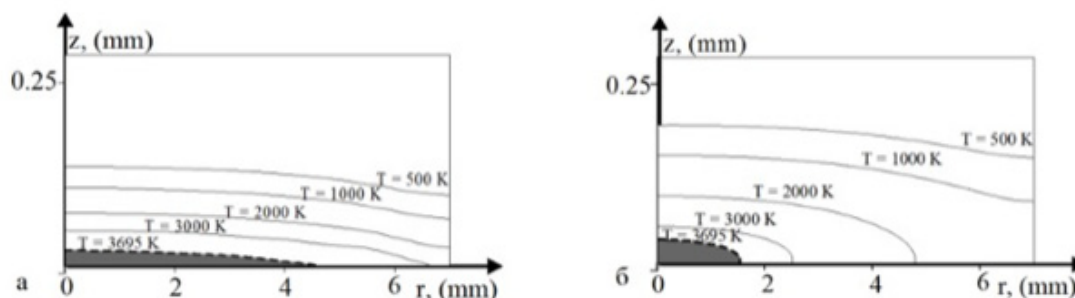


Рис. 3. Изолинии температуры в поперечном сечении образца в процессе охлаждения в моменты времени 80 мкс (а) и 160 мкс (б), изолиния при температуре плавления выделена пунктиром, область расплава серым цветом.

Область расплава в расчетах определяется по изолинии температуры, которая соответствует температуре плавления. На рис. 3 приведены изолинии температуры для типичного эксперимента. Изолиния, соответствующая температуре плавления, на рис. 3 выделена пунктиром, а область расплава отмечена серым цветом. Расчетная область на рисунке сильно растянута в осевом направлении, так как глубина прогрева мала по сравнению с радиусом расплава. На рис. 3а видно, что расплав в процессе нагрева в момент времени 80 мкс от момента начала воздействия имеет радиус около 4,5 мм и глубину около 0,02 мм. В процессе охлаждения (см. рис. 3б) область расплава сужается до 1,5 мм, но прогрев вглубь пластинки продолжается, глубина расплавленной области увеличивается в два раза к моменту времени 160 мкс. Сравнение других изолиний на рис. 3а и 3б показывает, что в два раза увеличивается глубина разогретой области. Можно сделать вывод, что во время поверхностного охлаждения происходит разогрев вглубь пластинки, что означает смену знака скорости разогрева.

Область расплава и температуру поверхности возможно фиксировать в ходе экспериментов. Например, анализ влияния испарения на процесс нагрева был проведен на основе измерений радиуса расплавленной области [10]. Результаты расчетов показали полное совпадение динамики расчетного и экспериментального радиуса расплава в случае учета испарения на границе пластинки вольфрама. Из экспериментальных данных известно, что за счет постоянного процесса испарения образец не разогревается выше 9000 К. Процесс испарения вносит свой вклад в разогрев вещества начиная с 2000 К, то есть при температурах много ниже температуры плавления.

На рис. 4а представлена временная зависимость максимума плотности мощности нагрева электронным пучком, которая является входными данными для расчета выстрелов 679, 680 и 681. На рис. 4б представлены графики температуры поверхности для этих экспериментов. Моменты, для которых выводятся результаты расчета, соответствуют времени измерения. Эти моменты времени на графике 4а обозначены заштрихованными прямоугольниками, ширина основания которых равна времени экспозиции измерительного прибора. Графики используются при анализе измерений и планировании экспериментов.



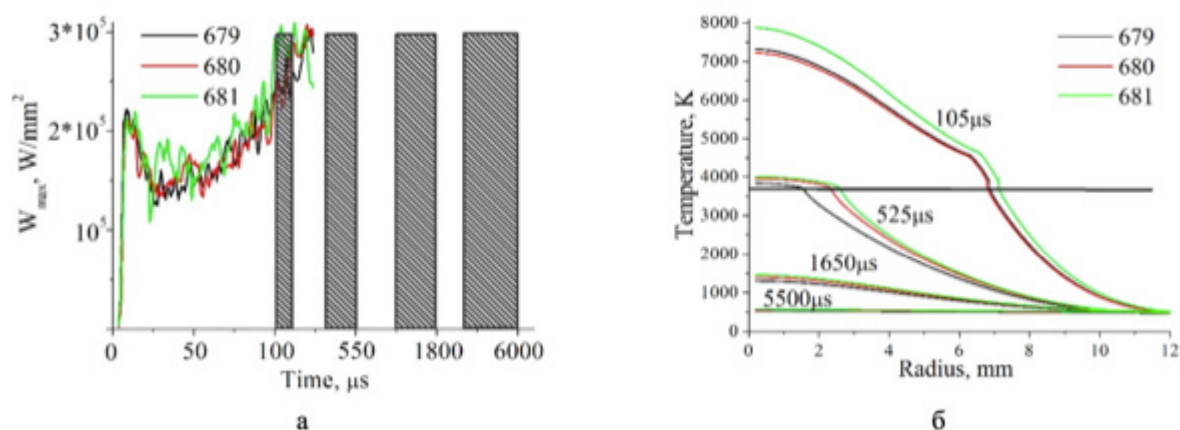


Рис. 4. Динамика плотности мощности в центре зоны воздействия и моменты измерения (а), графики температуры поверхности (б). Данные приведены для выстрелов 679, 680 и 681.

Результаты расчета радиального распределения температуры по поверхности образца (рис. 4) полностью согласуются с экспериментальными данными и аналитическими оценками из работы [10].

Разработка дискретной модели позволяет проводить расчеты для экспериментов с большим временем задержки между измерениями и большим временем экспозиции. На рис. 4а показаны моменты измерения 100–110 мкс, 500–550 мкс, 1500–1800 мкс, 5000–6000 мкс для со временем экспозиции 10, 50, 300 и 1000 мкс. То есть первый калибровочный кадр был сделан в интервале от 100 до 110 мкс со временем экспозиции 10 мкс.

Графики температуры поверхности были рассчитаны для моментов времени 105 мкс, 525 мкс, 1650 мкс и 5500 мкс (рис. 4б). Например, первый калибровочный кадр был сделан в интервале от 100 до 110 мкс со временем экспозиции 10 мкс, соответствующий ему расчет был сделан для момента времени 105 мкс. Продолжительность нагрева составила 124 мкс, 132 мкс и 130 мкс при воздействиях 679, 680 и 681 соответственно. Небольшие отличия результатов обусловлены разной энергией и длительностью воздействия. В результате нагрева температура образцов приближается к 8000 К. После окончания воздействия материал остывает, температура поверхности снижается до 4000 К, глубина распространения тепла в объеме образца составляет менее четверти миллиметра. На графике прямая линия в точке плавления показывает площадь расплава.

Из многочисленных контрпримеров хорошо известно, что вторые производные от температуры  $T$  по пространственным переменным  $r$  и  $z$ , так же как и первая производная от  $T$  по времени, могут иметь скачок на свободной границе. Подчеркнем, что графики на рис. 4б как раз показывают изменение характера температурной кривой в точках раздела расплава и твердой фазы, что является следствием свойств решения задачи Стефана (2.2). Спад ожидаемой кривизны обусловлен в первую очередь потерями энергии на испарение.

## 5. Выводы

Представленное численное решение задачи Стефана для расчета температуры образца вольфрама, нагреваемого импульсным электронным пучком, показывает хорошее соответствие как с результатами натурального эксперимента, так и с аналитическими фактами теории задач со свободными границами.

Разработанный алгоритм решения задачи Стефана в дальнейшем послужит основой для расчета тока в образце, который рассматривается как возможный источник наблюдаемого в эксперименте вращения вещества. Предложенный алгоритм отличается простотой и экономичностью. Он может быть применен к моделированию процесса плавления других тугоплавких металлов.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Арутюнян Р. В. Интегральные уравнения задачи Стефана и их приложение при моделировании оттаивания грунта// В сб.: «Наука и образование: научное издание МГТУ им. Н. Э. Баумана». — М.: МГТУ, 2015. — № 10. — С. 347–419.
2. Бреславский П. В., Мажукин В. И. Алгоритм численного решения гидродинамического варианта задачи Стефана при помощи динамически адаптирующихся сеток// Мат. модел. — 1991. — 3, № 10. — С. 104–115.
3. Будаков Б. М., Соловьева Е. Н., Успенский А. Б. Разностный метод со сглаживанием коэффициентов для решения задач Стефана// Журн. выч. мат. и мат. физ. — 1965. — 5, № 5. — С. 828–840.
4. Лаевский М. Ю., Калинин А. А. Двухтемпературная модель гидратосодержащей породы// Мат. модел. — 2010. — 22, № 4. — С. 23–31.
5. Самарский А. А., Вабищевич П. Н. Вычислительная теплопередача. — М.: Едиториал УРСС, 2003.
6. Самарский А. А., Моисеенко Б. Д. Экономичная схема сквозного счета для многомерной задачи Стефана// Журн. выч. мат. и мат. физ. — 1965. — 5, № 5. — С. 816–827.
7. Талуц С. Г. Экспериментальное исследование теплофизических свойств переходных металлов и сплавов на основе железа при высоких температурах// Дисс. д.ф.-м.н. — Екатеринбург, 2001.
8. Яненко Н. Н. Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики. — Новосибирск: Наука, 1967.
9. *Apushkinskaya D.* Free boundary problems. Regularity properties near the fixed boundary. — Cham: Springer, 2018.
10. *Arakcheev A. S., Apushkinskaya D. E., Kandaurov I. V., Kasatov A. A., Kurkuchekov V. V., Lazareva G. G., Maksimova A. G., Popov V. A., Snytnikov A. V., Trunev Yu. A., Vasilyev A. A., Vyacheslavov L. N.* Two-dimensional numerical simulation of tungsten melting under pulsed electron beam// Fusion Eng. Design. — 2018. — 132. — С. 13–17.
11. *Caffarelli L. A.* The smoothness of the free surface in a filtration problem// Arch. Ration. Mech. Anal. — 1976. — 63. — С. 77–86.
12. *Caffarelli L. A.* The regularity of elliptic and parabolic free boundaries// Bull. Am. Math. Soc. — 1976. — 82. — С. 616–618.
13. *Caffarelli L. A.* The regularity of free boundaries in higher dimensions// Acta Math. — 1977. — 139, № 3–4. — С. 155–184.
14. *Chen H., Min C., Gibou F.* A numerical scheme for the Stefan problem on adaptive Cartesian grids with supralinear convergence rate// J. Comp. Phys. — 2009. — 228. — С. 5803–5818.
15. *Duvaut G.* Résolution d'un problème de Stefan (fusion d'un bloc de glace à zéro degré)// C. R. Math. Acad. Sci. Paris. — 1973. — 276. — С. 1461–1463.
16. *Davis J. W., Smith P. D.* ITER material properties handbook// J. Nucl. Mater. — 1996. — 233. — С. 1593–1596.
17. *Duvaut G.* Two phases Stefan problem with varying specific heat coefficients// An. Acad. Brasil. Ciênc. — 1975. — 47. — С. 377–380.
18. *Friedman A., Kinderlehrer D.* A one phase Stefan problem// Indiana Univ. Math. J. — 1975. — 25, № 11. — С. 1005–1035.
19. *Groot R.* Second order front tracking algorithm for Stefan problem on a regular grid// J. Comp. Phys. — 2018. — 372. — С. 956–971.
20. *Ho C. Y., Powell R. W., Liley P. E.* Thermal conductivity of elements// J. Phys. Chem. Ref. Data. — 1972. — 1. — С. 279.
21. *Huang J. M., Shelley M., Stein D.* A stable and accurate scheme for solving the Stefan problem coupled with natural convection using the immersed boundary smooth extension method// J. Comp. Phys. — 2021. — 432. — 110162.
22. *Ichikawa Y., Kikuchi N.* A one-phase multi-dimensional Stefan problem by the method of variational inequalities// Internat. J. Numer. Methods Engrg. — 1979. — sl 14. — С. 1197–1220.
23. *Ichikawa Y., Kikuchi N.* Numerical methods for a two-phase Stefan problem by variational inequalities// Internat. J. Numer. Methods Engrg. — 1979. — sl 14. — С. 1221–1239.
24. *Lamé G., Clapeyron B. P.* Mémoire sur la solidification parrefroidissement d'un globe solide// Ann. Chem. Phys. — 1831. — 47. — С. 250–256.
25. *Lazareva G. G., Arakcheev A. S., Kandaurov I. V., Kasatov A. A., Kurkuchekov V. V., Maksimova A. G., Popov V. A., Shoshin A. A., Snytnikov A. V., Trunev Yu. A., Vasilyev A. A., Vyacheslavov L. N.* Calculation of heat sink around cracks formed under pulsed heat load// J. Phys. Conf. Ser. — 2017. — 894. — 012120.
26. *Oberman A. M., Zwiars I.* Adaptive finite difference methods for nonlinear elliptic and parabolic partial differential equations with free boundaries// J. Sci. Comput. — 2012. — 68. — С. 231–251.

27. *Pottlacher G.* Thermal conductivity of pulse-heated liquid metals at melting and in the liquid phase// *J. Non-Crystal. Solids.* — 1999. — 250. — С. 177–181.
28. *Stefan J.* Über die Theorie der Eisbildung, insbesondere über die Eisbildung im Polarmeere// *Sitzungsber. Österreich. Akad. Wiss. Math. Naturwiss. Kl. Abt. 2, Math. Astron. Phys. Meteorol. Tech.* — 1889. — 98. — С. 965–983.
29. *Vyacheslavov L., Arakcheev A., Burdakov A., Kandaurov I., Kasatov A., Kurkuchekov V., Mekler K., Popov V., Shoshin A., Skovorodin D., Trunev Y., Vasilyev A.* Novel electron beam based test facility for observation of dynamics of tungsten erosion under intense ELM-like heat loads// *AIP Conf. Proc.* — 2016. — 1771. — 060004.
30. *Wu Z.-C., Wang Q.-C.* Numerical approach to Stefan problem in a two-region and limited space// *Thermal Sci.* — 2012. — 16, № 5. — С. 1325–1330.

Д. Е. Апушкинская

Российский университет дружбы народов, Москва, Россия

E-mail: apushkinskaya\_de@pfur.ru

Г. Г. Лазарева

Российский университет дружбы народов, Москва, Россия

E-mail: lazareva\_gg@pfur.ru

DOI: 10.22363/2413-3639-2021-67-3-442-454

UDC 519.63

## Algorithm for the Numerical Solution of the Stefan Problem and Its Application to Calculations of the Temperature of Tungsten under Impulse Action

© 2021 **D. E. Apushkinskaya, G. G. Lazareva**

**Abstract.** In this paper, we present the numerical solution of the Stefan problem to calculate the temperature of the tungsten sample heated by the laser pulse. Mathematical modeling is carried out to analyze field experiments, where an instantaneous heating of the plate to 9000 K is observed due to the effect of a heat flow on its surface and subsequent cooling. The problem is characterized by nonlinear coefficients and boundary conditions. An important role is played by the evaporation of the metal from the heated surface. Basing on Samarskii's approach, we choose to implement the method of continuous counting considering the heat conductivity equation in a uniform form in the entire domain using the Dirac delta function. The numerical method has the second order of approximation with respect to space, the interval of smoothing of the coefficients is 5 K. As a result, we obtain the temperature distributions on the surface and in the cross section of the sample during cooling.

### REFERENCES

1. R. V. Arutyunyan, “Integral’nye uravneniya zadachi Stefana i ikh prilozhenie pri modelirovanii ottaivaniya grunta” [Integral equations of the Stefan problem and their application in modeling of soil thawing], In: *Nauka i obrazovanie* [Science and Education], MGTU, Moscow, 2015, No. 10, 347–419 (in Russian).
2. P. V. Breslavskiy and V. I. Mazhukin, “Algoritm chislennogo resheniya gidrodinamicheskogo varianta zadachi Stefana pri pomoshchi dinamicheskii adaptiruyushchikh setok” [Algorithm for numerical solution of the hydrodynamic version of the Stefan problem using dynamically adapting grids], *Mat. model.* [Math. Model.], 1991, **3**, No. 10, 104–115 (in Russian).



3. B. M. Budak, E. N. Solov'eva, and A. B. Uspenskiy, "Raznostnyy metod so sglazhivaniem koeffitsientov dlya resheniya zadach Stefana" [Difference method with smoothing of coefficients for solving Stefan's problems], *Zhurn. vych. mat. i mat. fiz.* [J. Comput. Math. Math. Phys.], 1965, **5**, No. 5, 828–840 (in Russian).
4. M. Yu. Laevskiy and A. A. Kalinkin, "Dvukhtemperaturnaya model' gidratosoderzhashchey porody" [Two-temperature model of a hydrate-bearing rock], *Mat. model.* [Math. Model.], 2010, **22**, No. 4, 23–31 (in Russian).
5. A. A. Samarskii and P. N. Vabishchevich, *Vychislitel'naya teploperedacha* [Computational Heat Transfer], URSS, Moscow, 2003 (in Russian).
6. A. A. Samarskii and B. D. Moiseenko, "Ekonomichnaya skhema skvoznogo scheta dlya mnogomernoy zadachi Stefana" [Economical pass-through numerical scheme for multidimensional Stefan problem], *Zhurn. vych. mat. i mat. fiz.* [J. Comput. Math. Math. Phys.], 1965, **5**, No. 5, 816–827 (in Russian).
7. S. G. Taluts, "Eksperimental'noe issledovanie teplofizicheskikh svoystv perekhodnykh metallov i splavov na osnove zheleza pri vysokikh temperaturakh" [Experimental study of thermophysical properties of transition metals and iron-based alloys at high temperatures], *Doctoral Thesis*, Ekaterinburg, 2001 (in Russian).
8. N. N. Yanenko, *Metod drobnykh shagov resheniya mnogomernykh zadach matematicheskoy fiziki* [Fractional Steps Method for Solving Multidimensional Problems of Mathematical Physics], Nauka, Novosibirsk, 1967 (in Russian).
9. D. Apushkinskaya, *Free Boundary Problems. Regularity Properties Near the Fixed Boundary*, Springer, Cham, 2018.
10. A. S. Arakcheev, D. E. Apushkinskaya, I. V. Kandaurov, A. A. Kasatov, V. V. Kurkuchekov, G. G. Lazareva, A. G. Maksimova, V. A. Popov, A. V. Snytnikov, Yu. A. Trunev, A. A. Vasilyev, and L. N. Vyacheslavov, "Two-dimensional numerical simulation of tungsten melting under pulsed electron beam," *Fusion Eng. Design*, 2018, **132**, 13–17.
11. L. A. Caffarelli, "The smoothness of the free surface in a filtration problem," *Arch. Ration. Mech. Anal.*, 1976, **63**, 77–86.
12. L. A. Caffarelli, "The regularity of elliptic and parabolic free boundaries," *Bull. Am. Math. Soc.*, 1976, **82**, 616–618.
13. L. A. Caffarelli, "The regularity of free boundaries in higher dimensions," *Acta Math.*, 1977, **139**, No. 3-4, 155–184.
14. H. Chen, C. Min, and F. Gibou, "A numerical scheme for the Stefan problem on adaptive Cartesian grids with supralinear convergence rate," *J. Comp. Phys.*, 2009, **228**, 5803–5818.
15. G. Duvaut, "Résolution d'un problème de Stefan (fusion d'un bloc de glace à zéro degré)," *C. R. Math. Acad. Sci. Paris*, 1973, **276**, 1461–1463.
16. J. W. Davis and P. D. Smith, "ITER material properties handbook," *J. Nucl. Mater.*, 1996, **233**, 1593–1596.
17. G. Duvaut, "Two phases Stefan problem with varying specific heat coefficients," *An. Acad. Brasil. Ciênc.*, 1975, **47**, 377–380.
18. A. Friedman and D. Kinderlehrer, "A one phase Stefan problem," *Indiana Univ. Math. J.*, 1975, **25**, No. 11, 1005–1035.
19. R. Groot, "Second order front tracking algorithm for Stefan problem on a regular grid," *J. Comp. Phys.*, 2018, **372**, 956–971.
20. C. Y. Ho, R. W. Powell, and P. E. Liley, "Thermal conductivity of elements," *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 1972, **1**, 279.
21. J. M. Huang, M. Shelley, and D. Stein, "A stable and accurate scheme for solving the Stefan problem coupled with natural convection using the immersed boundary smooth extension method," *J. Comp. Phys.*, 2021, **432**, 110162.
22. Y. Ichikawa and N. Kikuchi, "A one-phase multi-dimensional Stefan problem by the method of variational inequalities," *Internat. J. Numer. Methods Engrg.*, 1979, sl 14, 1197–1220.
23. Y. Ichikawa and N. Kikuchi, "Numerical methods for a two-phase Stefan problem by variational inequalities," *Internat. J. Numer. Methods Engrg.*, 1979, sl 14, 1221–1239.
24. G. Lamé and B. P. Clapeyron, "Mémoire sur la solidification parrefroidissement d'un globe solide," *Ann. Chem. Phys.*, 1831, **47**, 250–256.
25. G. G. Lazareva, A. S. Arakcheev, I. V. Kandaurov, A. A. Kasatov, V. V. Kurkuchekov, A. G. Maksimova, V. A. Popov, A. A. Shoshin, A. V. Snytnikov, Yu. A. Trunev, A. A. Vasilyev, and L. N. Vyacheslavov, "Calculation of heat sink around cracks formed under pulsed heat load," *J. Phys. Conf. Ser.*, 2017, **894**, 012120.
26. A. M. Oberman and I. Zwiers, "Adaptive finite difference methods for nonlinear elliptic and parabolic partial differential equations with free boundaries," *J. Sci. Comput.*, 2012, **68**, 231–251.

27. G. Pottlacher, “Thermal conductivity of pulse-heated liquid metals at melting and in the liquid phase,” *J. Non-Crystal. Solids*, 1999, **250**, 177–181.
28. J. Stefan, “Über die Theorie der Eisbildung, insbesondere über die Eisbildung im Polarmeere,” *Sitzungsber. Österreich. Akad. Wiss. Math. Naturwiss. Kl. Abt. 2, Math. Astron. Phys. Meteorol. Tech.*, 1889, **98**, 965–983.
29. L. Vyacheslavov, A. Arakcheev, A. Burdakov, I. Kandaurov, A. Kasatov, V. Kurkuchekov, K. Mekler, V. Popov, A. Shoshin, D. Skovorodin, Y. Trunev, and A. Vasilyev, “Novel electron beam based test facility for observation of dynamics of tungsten erosion under intense ELM-like heat loads,” *AIP Conf. Proc.*, 2016, **1771**, 060004.
30. Z.-C. Wu and Q.-C. Wang, “Numerical approach to Stefan problem in a two-region and limited space,” *Thermal Sci.*, 2012, **16**, No. 5, 1325–1330.

D. E. Apushkinskaya

Peoples' Friendship University of Russia (RUDN University), Moscow, Russia

E-mail: apushkinskaya\_de@pfur.ru

G. G. Lazareva

Peoples' Friendship University of Russia (RUDN University), Moscow, Russia

E-mail: lazareva\_gg@pfur.ru