

УДК 519.63 + 004.8

**Подходы к решению трехмерных задач теплопроводности с учетом фазовых
переходов в дисперсных средах**

Д.А. Крылов

*Аспирант, кафедра «Высшая математика» МГТУ им. Н.Э. Баумана,
г. Москва, Россия*

*Научный руководитель: Сидняев Н.И., д.т.н., профессор, заведующий кафедрой «Высшая
математика» МГТУ им. Н.Э. Баумана, г. Москва, Россия*

МГТУ им. Н.Э. Баумана
dmitrykrylov@rambler.ru

Введение. Теория переноса энергии является одним из важнейших разделов современной науки. Изучение распределения температурных полей имеет большое значение для энергетической, металлургической, химической, строительной и многих других отраслей промышленности. Подобные задачи встречаются при анализе и прогнозировании температур, при выращивании монокристаллов, в ряде современных металлургических технологий, при образовании и эволюции внутреннего строения Земли и полярных льдов, а также в ряде других областей науки и практики.

Процессы теплопереноса описываются нелинейными дифференциальными уравнениями, дополненными рядом слагаемых и соответствующими краевыми условиями. В классической задаче Стефана рассматриваются фазовые превращения с участием твердой фазы: твердое тело – жидкость. Примером таких превращений являются процессы затвердевания и плавления в металлургии или промерзание и оттаивание грунтов в геологии. Под задачей Стефана в широком смысле слова понимают в настоящее время класс математических моделей, описывающих тепловые, диффузионные или даже термодиффузионные процессы, сопровождающиеся фазовыми превращениями среды и поглощением или выделением скрытой теплоты. Соответствующие математические

<http://sntbul.bmstu.ru/doc/562218.html>

модели характеризуются наличием подвижных заранее неизвестных границ фазового перехода – задач со свободными (неизвестными) границами. Основная предпосылка при моделировании фазовых превращений твердое тело – жидкость состоит в том, что фазовый переход происходит при заданной постоянной температуре фазового перехода u^* .

Постановка задачи. Общая постановка решаемой задачи сводится к следующему. Предполагается, что требуется найти температурное поле в ограниченной области (например, прямоугольном параллелепипеде) D , удовлетворяющее начальному и граничным условиям (любого типа). Причем область D может состоять из подобластей с различными теплофизическими характеристиками, а также обладать свойствами дисперсной среды, т.е. быть образованной из двух или более компонент, которые совершенно или практически не смешиваются и не реагируют друг с другом химически (первое из веществ - дисперсная фаза - мелко распределено во втором - дисперсионная среда). Под температурным полем области исследований D в какой-либо момент времени понимается совокупность значений температур (распределение температур) в различных точках области D в этот момент времени.

Для дисперсной среды подход к решению задачи путем выделением фронта фазового перехода не возможен из-за ее структуры. Рассматриваемая двухфазная задача Стефана может быть записана и без явного выделения фронта фазового перехода с помощью введения эффективной объемной теплоемкости среды [1].

Теплоту фазового перехода, выделяющуюся на фронте, можно учесть, считая внутреннюю энергию среды разрывной функцией температуры и вводя сосредоточенную теплоемкость среды. При этом внутренняя энергия единицы объема среды ε , как функция температуры, при $u = u^* = 0$ скачком меняется на величину теплоты фазового перехода, т.е.

$$\varepsilon = \int_0^u c(u) \rho(u) du + Q \eta(u),$$

где $\eta(u) = \begin{cases} 1, & u > 0, \\ 0, & u < 0 \end{cases}$ - функция Хэвисайда, производная которой $d\eta/du$ есть дельта-функция $\delta(u)$.

Дифференцируя внутреннюю энергию ε по температуре, получится выражение для эффективной объемной теплоемкости среды с учетом теплоты фазового перехода

$$c_{eff} = c(u) \rho(u) + Q \delta(u).$$

Второе слагаемое, записанное через δ -функцию, представляет собой сосредоточенную теплоемкость, которую следует понимать как обобщенную функцию температуры.

При таком подходе тепловое состояние дисперсной среды с учетом фазового перехода описывается уравнением теплопроводности вида

$$(c(\xi, u)\rho(\xi, u) + Q\delta(u - u^*))\frac{\partial u}{\partial t} = \operatorname{div}(\lambda(\xi, u) \operatorname{grad} u) + s(\xi, t), \quad (1)$$

где $\xi = (\xi_1, \xi_2, \xi_3)$ – вектор пространственных координат, c – удельная теплоемкость; ρ – плотность; λ – коэффициент теплопроводности; $u(\xi, t)$ – температура среды; u^* – температура фазового перехода; Q – теплота фазового перехода; s – мощность внутренних источников тепла; $\delta(u - u^*)$ – дельта-функция.

Аналитические методы. Для исследования процессов распространения тепла на практике применяется несколько подходов. Классическим является аналитический метод, заключающийся в получении явной формулы, выражающей решение через элементарные или некоторые специальные функции. Однако приемлемые аналитические методы позволяют решить лишь частные случаи [1, 2], не позволяют учесть все многообразие теплофизических характеристик, краевых условий, т.е. не соответствуют критериям, предъявляемым к итоговой модели. В частности, аналитического решения уравнения (1) с различными краевыми условиями на текущий момент не существует. Тем не менее, аналитический метод остается достаточно мощным средством для качественного анализа решений и исследования относительно простых модельных задач.

Численные методы. В последние годы в связи с быстрым развитием вычислительной техники наибольшее распространение получили численные методы решения задач. Из численных методов, применяющихся для решения рассматриваемой задачи, следует выделить метод контрольного объема (КО) [2-4].

С помощью метода контрольного объема (интегро-интерполяционного метода) была получена дискретная постановка задачи Стефана, сводящаяся к задаче нахождения решения системы линейных алгебраических уравнений с трех-, пяти- или семидиагональной матрицей в зависимости от размерности задачи (1D, 2D или 3D соответственно). Решение такой системы было получено с помощью метода прогонки (для одномерного случая) и метода переменных направлений (для двух- и трехмерного случаев).

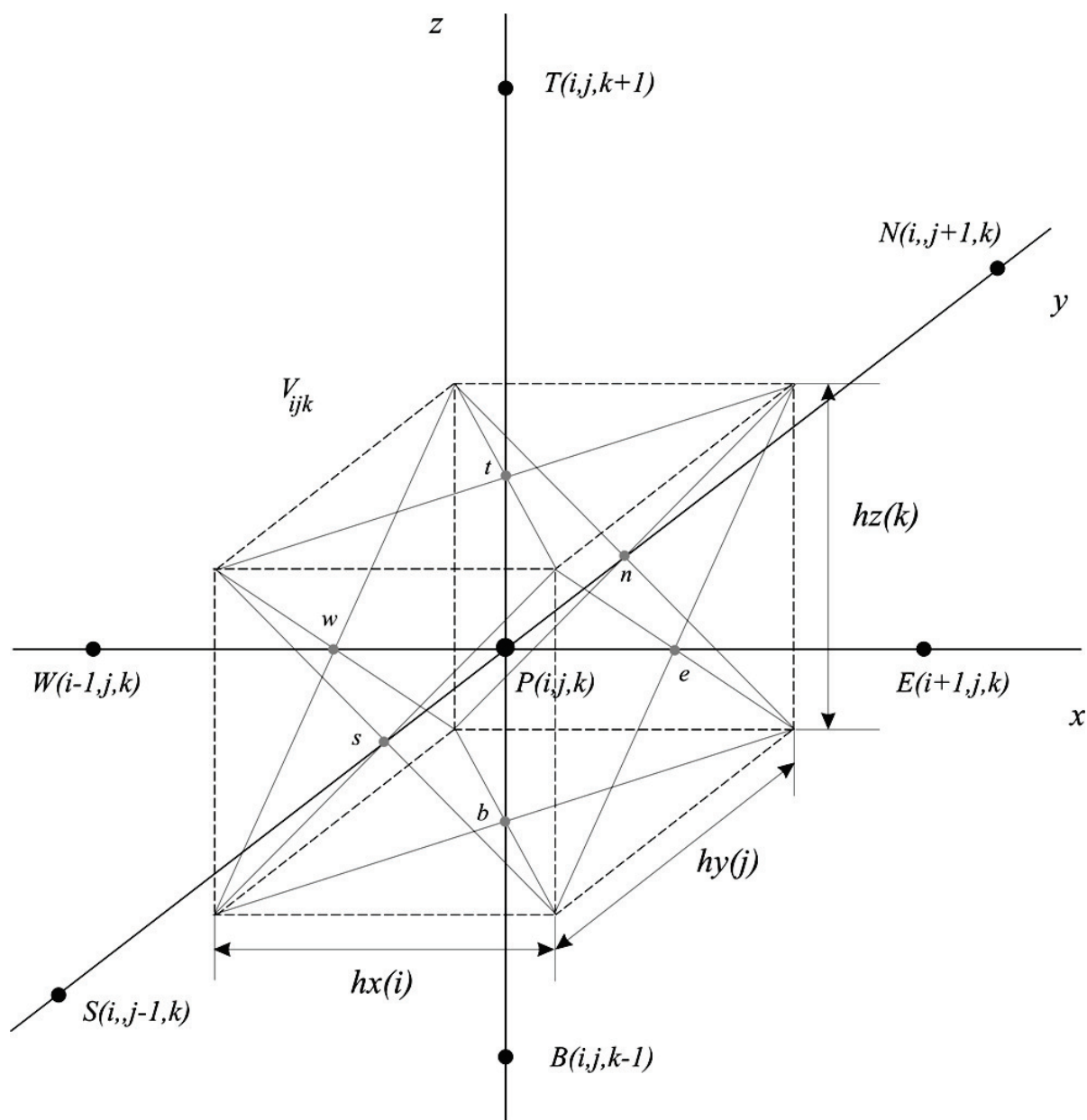


Рис.1. Типичный контрольный объем

В методе контрольного объема расчетная область D делится на параллелепипеды (контрольные объемы), которые характеризуются своим центром. Все теплофизические характеристики материала для каждого КО усредняются по нему. Типичный контрольный объем представлен на рис.1. Буквами W, P, E, S, N, B, T обозначены точки сетки: P — рассматриваемая точка (Point), а W, E, S, N, B и T — соответственно, «западная» (West), «восточная» (East), «южная» (South), «северная» (North), «нижняя» (Bottom) и «верхняя» (Top) соседние точки. В скобках указаны индексы расчетных точек. Штриховыми линиями показаны грани контрольных объемов. Для обозначения граней КО, содержащего точку P, используются соответствующие прописные буквы w, e, s, n, b и t .

Уравнение теплопроводности (1) согласно закону Фурье можно представить в виде

$$c\rho \frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial J_x}{\partial x} - \frac{\partial J_y}{\partial y} - \frac{\partial J_z}{\partial z} + s, \quad (2)$$

где $J_x = -\lambda \frac{\partial u}{\partial x}$, $J_y = -\lambda \frac{\partial u}{\partial y}$, $J_z = -\lambda \frac{\partial u}{\partial z}$ – плотности теплового потока в направлении осей x , y и z соответственно.

Проинтегрировав уравнение (2) по КО, можно легко получить

$$(c\rho)_P \frac{\Delta V}{\Delta t} (u_P - u_P^0) = J_w A_w - J_e A_e + J_s A_s - J_n A_n + J_b A_b - J_t A_t + \bar{s} \Delta V. \quad (3)$$

Здесь верхний индекс «0» обозначает известное значение температуры в начале шага по времени Δt , J – плотность теплового потока через грань КО, на которую указывает нижний индекс; A – площадь соответствующей грани, например, $A_e = h_j^y \cdot h_k^z$; $\bar{s}$ – усредненный по объему источниковый член, $\Delta V = h_i^x \cdot h_j^y \cdot h_k^z$ – объем КО, h_i^x , h_j^y , h_k^z – шаги сетки по соответственно по осям x , y , z .

Потоки тепла через грани КО e и w могут быть рассчитаны следующим образом

$$J_e A_e = D_e (u_P - u_E), \quad J_w A_w = D_w (u_W - u_P), \quad (4)$$

где D_e – проводимость между точками P и E, которая вычисляется по значениям λ в этих точках. Проводимость D_e можно рассчитать по формуле

$$D_e = A_e \frac{2\lambda_E \lambda_P}{\lambda_E h_x(i) + \lambda_P h_x(i+1)}. \quad (5)$$

Формулы, аналогичные (4) и (5), используются и для вычисления соответствующих величин на других гранях. Источниковый член $\bar{s}$ линеаризуется по температуре: $\bar{s} = s_C + s_P u_P$. Если $\bar{s}$ не зависит от температуры, то $s_P = 0$, $\bar{s} = s_C$. Подставляя выражения для J и $\bar{s}$ в (3), можно получить дискретный аналог уравнения (1)

$$a_P u_P = a_w u_w + a_e u_e + a_n u_n + a_s u_s + a_t u_t + a_b u_b + b, \quad (6)$$

где $a_e = D_e$, $a_w = D_w$, $a_n = D_n$, $a_s = D_s$, $a_t = D_t$, $a_b = D_b$, $b = s_C \Delta V + a_P^0 u_P^0$,

$$a_P^0 = \frac{(c\rho)_P \Delta V}{\Delta t}, \quad a_P = a_w + a_e + a_n + a_s + a_t + a_b + a_P^0 - s_P \Delta V.$$

Для каждого КО, содержащего внутреннюю расчетную точку, записывается дискретный аналог вида (6). С помощью граничных условий в приграничных КО

делаются преобразования, после которых значения u на границе явным образом не будут входить в систему уравнений. В результате получается замкнутая система линейных алгебраических уравнений, которая может быть решена с помощью любого приемлемого алгоритма. Для решения системы в работах [3, 6-7] используется основанный на методе прогонки метод переменных направлений [5].

Метод не требует использования разностных схем и основан на вычислении потоков через грани КО. Подробнее с методом можно ознакомиться в [3-5]. С результатами применения метода контрольного объема можно ознакомиться в [3, 5-7].

В вычислительной практике получили распространение различные аппроксимационные формулы для $\delta(u, \Delta)$, которые строятся из условия сохранения баланса тепла на интервале $[-\Delta, \Delta]$. Простейшая из них связана с заданием

$$\delta(u, \Delta) = \begin{cases} \frac{1}{2\Delta}, & |u| \leq \Delta, \\ 0, & |u| > \Delta. \end{cases}$$

В качестве второго примера можно привести параболическую аппроксимацию, когда

$$\delta(u, \Delta) = \begin{cases} \frac{3}{4\Delta} \left(1 - \frac{u^2}{\Delta^2} \right), & |u| \leq \Delta, \\ 0, & |u| > \Delta, \end{cases}$$

для которой следующее условие также, очевидно, выполнено.

$$\int_{-\Delta}^{\Delta} \delta(u, \Delta) du = 1.$$

Другие варианты приближения δ -функции представлены в [8]. Как показывают численные эксперименты [1], точность разностного решения слабо зависит от выбора той или иной аппроксимационной формулы для δ -функции. Более существенное влияние оказывает величина параметра сглаживания Δ , который естественно зависит от используемой сетки и определяется, чаще всего, эмпирически в результате методических расчетов.

Энтальпийный переход. Другим подходом к решению задачи о фазовых переходах (задачи Стефана) является переход к энтальпийной формулировке [9-11], получаемый из предположения эргодической гипотезы, что эффективные свойства гетерогенного материала не зависят от исследуемого образца, т.к. все образцы материала имеют одинаковую в статистическом отношении структуру.

Эргодическая гипотеза утверждает, что для определения эффективных характеристик материала не нужно проводить усреднение по ансамблю, а достаточно

провести усреднение по объему образца V . Поэтому под эффективными свойствами неоднородных сред в данном случае подразумеваются материальные характеристики, усредненные по объему V

Угловые скобки $\langle \dots \rangle$ означают усреднение по объему V :

$$\langle f \rangle = \frac{1}{V} \iiint f(\xi) d\xi.$$

Предполагается [9], что коэффициент теплопроводности имеет структуру

$$\lambda(u, \xi, t) = \lambda_0(u, \xi, t) + \sum_{j=1}^m \lambda_j(u, \xi, t) \eta(u - u_j),$$

где $\xi = (\xi_1, \xi_2, \xi_3)$ — пространственные координаты, t — временная координата, u — температура, λ_j , $j = \overline{0:m}$ определены и имеют некоторую гладкость на замыкании множества $\square \times D \times (0, t_0)$, где D — исследуемая область, $t_0 \in (0, +\infty)$ задано, u_j , $j = \overline{1:m}$ — температуры фазовых переходов, η — функция Хэвисайда. Аналогичные представления допускают теплоемкость c и плотность ρ .

Пусть

$$\begin{aligned} H(u, \xi, t) &= \int_{u_{m+1}}^u (\rho \cdot c)(s, \xi, t) ds + \sum_{j=1}^m Q_j \eta(u - u_j), \quad u \neq u_i, \quad i = \overline{1:m} \\ \Lambda(u, \xi, t) &= \int_{u_{m+1}}^u \lambda(s, \xi, t) ds, \quad \Lambda_j(u, \xi, t) = \int_{u_{m+1}}^u \lambda_{\xi_j}(s, \xi, t) ds \\ f_0(u, \xi, t) &= f(u, \xi, t) + \int_{u_{m+1}}^u (\rho \cdot c)_t(s, \xi, t) ds \end{aligned} \quad (7)$$

где Q_j — скрытая теплота фазового перехода, отнесенная к единице объема, $f(u, \xi, t)$ — всевозможные источники тепла.

Первая функция (7) равна энтальпии (теплосодержанию), отнесенной к единице объема, и претерпевает скачок Q_j при переходе через поверхность раздела фаз.

Общее уравнение переноса энергии [9] имеет вид:

$$c_v \rho \frac{du}{dt} - A p \frac{d}{dt} \ln \rho = \operatorname{div}(\lambda \operatorname{grad} u) + f, \quad (8)$$

где c_v — теплоемкость при постоянном объеме, A — термический эквивалент тепла, f — всевозможные источники тепла.

Если предположить, что ρ – известная функция от u то (8) примет вид конвективного уравнения теплопроводности

$$c\rho \frac{dT}{d\tau} = \operatorname{div}_{\xi} (\lambda \operatorname{grad}_{\xi} T) + f, \quad (9)$$

где $c = c_v - A\rho \frac{\rho'}{\rho^2}$.

При отсутствии конвекции и источников тепла, то для постоянных c , ρ и A получается обычное однородное уравнение теплопроводности $\frac{\partial u}{\partial t} = a^2 \Delta u$, $a^2 = \lambda / \rho c$.

Несложно видеть, что функция энтальпии, с учетом (7), (9) удовлетворяет уравнению следующего вида:

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \operatorname{div} (\lambda \cdot \operatorname{grad} u) + f, \quad (10)$$

где $u(\xi, t)$ — температура грунта в точке (ξ_1, ξ_2, ξ_3) в момент t , $H(\xi, u, t)$ — энтальпия (теплосодержание), отнесенная к единице объема вещества, $\lambda(\xi, u)$ — коэффициент теплопроводности вещества, $f(\xi, t)$ — мощность тепловых источников.

Известно, что задача Стефана в энтальпийной формулировке имеет единственное решение, которое может быть записано в аналитическом виде, при некоторых ограничениях [9]. В такой формулировке задачу можно решить с помощью большого набора численных методов, одним из которых является конечно-разностный метод.

Нейронные сети. На сегодняшний день при решении задач теплопроводности широко распространены численные методы, позволяющие восстановить значение температурных полей в любой момент времени и в любой точке рассматриваемого пространства. Однако на эти точки накладывается серьезное ограничение – они должны быть расчетными, т.е. принадлежать расчетной сетке. Другой сложностью является отсутствие непрерывности и гладкости такого решения.

Одним из способов преодоления таких трудностей может служить предложенное Васильевым А.Н. и Тарховым Д.А. и описанное в [12-14] решение с помощью нейронных сетей RBF (радиальных базисных функций).

Нейронная сеть представляет собой высокопараллельную динамическую систему с топологией направленного графа, которая может получать выходную информацию посредством реакции ее состояния на входные воздействия. Нейронные сети как математические модели часто являются частным случаем нелинейной регрессии и для подбора коэффициентов можно использовать методы регрессионного анализа.

Для решения задачи теплопроводности в работах [12-14] предполагается использовать RBF-сети (или персептрон) для аппроксимации температурного поля, удовлетворяющего уравнению (1).

В общем случае под радиальной базисной нейронной сетью (Radial Basis Function Network, сеть RBF) понимается двухслойная сеть без обратных связей, которая содержит скрытый слой радиально симметричных нейронов. Радиальные базисные нейронные сети состоят из большего количества нейронов, чем стандартные сети с прямой передачей сигналов и обучением методом обратного распространения ошибки, но на их создание требуется значительно меньше времени. Эти сети наиболее эффективны, когда доступно большое количество обучающих векторов.

Аппроксимацию функции температуры можно представить в следующем виде

$$u(x, y, z, t) = \sum_{i=1}^n w_i f(x, y, z, t, A_i),$$

где $A_i = \{a_i, b_i, c_i, d_i, x_i, y_i, z_i, t_i\}$ - набор коэффициентов, зависящий от выбора вида радиальной базисной функции. В качестве такой функции можно выбрать, например, гауссиан

$$u(x, y, z, t) = \sum_{i=1}^n w_i \exp(-a_i(x - x_i)^2 - b_i(y - y_i)^2 - c_i(z - z_i)^2 - d_i(t - t_i)^2),$$

где x_i, y_i, z_i, t_i обычно называют центрами, вокруг которых происходит аппроксимация. В ходе обучения нейронной сети эти центры либо фиксируются, либо, что чаще, генерируются случайным образом по определенному правилу, однако они тоже являются такими же параметрами при многомерной оптимизации [13].

Подбор коэффициентов (параметров нейросети) происходит в ходе минимизации функционала $J \rightarrow \min$, получаемого из уравнения теплопроводности (1) и граничных и начальных условий, следующим образом

$$\begin{aligned} J = & \int_D \left((c\rho + Q\delta(u - u^*)) \frac{\partial u}{\partial t} - \operatorname{div}(\lambda \operatorname{grad} u) - s \right)^2 dx dy dz + \\ & + \delta_1 \int_{\square^3} (u(x, y, z, 0) - \phi(x, y, z))^2 dx dy dz + \\ & + \delta_2 \int_{\square^3} (u(0, y, z, t) - \psi(y, z, t))^2 dt dy dz + \dots \end{aligned}$$

Первое слагаемое функционала J следует из самого уравнения теплопроводности, второе – из начального условия, третье – из граничного (для $x = 0$) и т.д. Положительные коэффициенты $\delta_1, \delta_2, \dots$ являются поправочными или штрафными.

Минимизацию функционала можно проводить любым удобным методом, например, методом градиентного или покоординатного спуска, методом Рунге-Кутты и др.

Заключение. Следует отметить, что большая часть работ, связанных с температурными полями в таких средах носит экспериментальный характер, поэтому численное моделирование прогноза физических характеристик является особенно актуальным. Рассмотренные подходы и модели может найти применение в таких отраслях как строительство в зоне вечной мерзлоты, геология, космонавтика и др.

Список литературы

1. Самарский А.А., Вабищевич П.Н. Вычислительная теплопередача. М.: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2009, 784 с.
2. Синай Я.Г. Теория фазовых переходов. Строгие результаты. М.: Наука, 1980. 208 с.
3. Крылов Д.А., Сидняев Н.И., Федотов А.А. Математическое моделирование распределения температурных полей // Математическое моделирование, 2013. Том 25 (в печати).
4. Патанкар С.В. Численное решение задач теплопроводности и конвективного теплообмена при течении в каналах. М.: Издательство МЭИ, 2003, 312 с.
5. Фундаментальные основы управления нестационарным температурным режимом в криолито зоне: Отчет о НИР (заключительный) по теме ТП №5/10 / МГТУ им. Н.Э. Баумана; Рук. НИР Н.И. Сидняев; № Госрегистрации 01201151171, инв. №02201157901. - М., 2010, 306 с.
6. Крылов Д.А. Математическое моделирование температурных полей с учетом фазовых переходов в криолитозоне // Наука и образование, 2012. № 04, апрель. URL: <http://technomag.edu.ru/doc/354740.html> (дата обращения 28.07.2012).
7. Krylov D.A., Ilina Y.S. Mathematical modeling of temperature fields distribution in low-temperature medium // Science and Education: materials of the II international research and practice conference, Vol. I, Munich, December 18th-19th, 2012 / publishing office Vela Verlag Waldkraiburg – Munich, Germany, 2012. P. 30-37
8. Кеч В., Теодореску П. Введение в теорию обобщенных функций с приложениями в технике. М. Мир, 1978, 519 с.
9. Данилюк И.И. О задаче Стефана // Успехи математических наук, т. 40, выпуск 5(245), 1985. С. 133-171.

10. Лионс Ж.-Л. Некоторые методы решения нелинейных краевых задач. М.: Мир, 1972, 588 с.
11. Самарский А.А., Моисеенко Б.Д. Экономичная схема сквозного счета для многомерной задачи Стефана // ЖВМ и МФ, 1965, т. 5, № 5. С. 816 – 827.
12. Васильев А.Н., Тархов Д.А. Применение искусственных нейронных сетей к задаче Стефана // Искусственный интеллект. Донецк, 2005. №1. С.37-47.
13. Тархов Д.А. Нейронные сети: модели и алгоритмы. М.: Радиотехника, 2005, 256 с.
14. А.Н. Васильев, Д.А. Тархов. Построение приближённых нейросетевых моделей по разнородным данным // Математическое моделирование, Т.19, №12, 2007. С.43–51.