

УДК 519.633+517.962.2+517.958

О СВОЙСТВАХ ОДНОГО РАЗНОСТНОГО МЕТОДА РЕШЕНИЯ ДВУХФАЗНОЙ ЗАДАЧИ СТЕФАНА

© 2022 г. А. О. Гусев, О. В. Щерица, О. С. Мажорова

Исследуются свойства разностного метода решения двухфазной задачи Стефана на сетке, согласованной с формой границы раздела фаз. Математическая модель учитывает конвективное движение, возникающее в жидкости, теплоперенос в твёрдой и жидкой фазах, на границе раздела фаз – условие баланса внутренней энергии. Фазовый переход происходит при постоянной температуре. Положение межфазной границы определяется с помощью метода выпрямления фронта. Показано, что предложенная вычислительная схема является консервативной и энергетически нейтральной.

DOI: 10.31857/S0374064122070068, EDN: CEIGQC

Введение. Накопленный опыт применения метода конечных разностей для решения сложных прикладных задач показывает, что при конструировании вычислительного алгоритма недостаточно опираться только на такие свойства разностных схем как аппроксимация, устойчивость и сходимость. Необходимо также учитывать конкретные физические свойства исследуемого явления. Одним из основных критериев качества вычислительной процедуры является выполнение разностных аналогов законов сохранения, т.е. консервативность. Для построения консервативных разностных схем используется интегро-интерполяционный метод [1–3]. Применение неконсервативных разностных схем может существенно понизить точность результатов расчётов, а в ряде случаев привести к неверным результатам. А.Н. Тихонов и А.А. Самарский, изучив способы аппроксимации уравнений с разрывными коэффициентами, показали, что разностная схема, обеспечивающая второй порядок точности в классе достаточно гладких коэффициентов, не сходится в классе разрывных коэффициентов [1, 4–7].

В работе А.А. Самарского и Ю.П. Попова [3] сформулирован принцип полной консервативности разностных схем. Он состоит в выполнении на разностном уровне не только аналогов основных законов сохранения, присущих тому или иному явлению, но и дополнительных соотношений, свойственных дифференциальной задаче (наличие дивергентной и недивергентной формы записи законов сохранения, выполнение балансов отдельных видов энергии и т.п.). Таким образом, в надёжной дискретной модели различные формы записи законов сохранения должны переходить друг в друга с помощью тождественных преобразований, аналогичных тем, которые имеют место в дифференциальном случае.

Принцип полной консервативности был первоначально сформулирован для уравнений газовой динамики и магнитной гидродинамики, а затем применён к другим классам задач математической физики. В работе [8] в одномерном приближении были рассмотрены некоторые особенности применения принципа полной консервативности при решении эволюционных задач с подвижными границами. Для задачи о кристаллизации многокомпонентного раствора на подвижной и фиксированной сетках были построены дивергентные и недивергентные разностные схемы, гарантирующие выполнение балансов внутренней энергии и массы. Как и в дифференциальном случае, разностные уравнения переходят друг в друга с помощью замены переменных.

В статье [9] рассмотрена задача Стефана в цилиндрической системе координат в осесимметричном приближении. Основу математической модели составляют уравнения Навье–Стокса в переменных функции тока–вихрь, уравнения тепло- и массопереноса в твёрдой и жидкой фазах, условия термодинамического равновесия на границе раздела фаз. Для определения положения границы раздела фаз используется метод выпрямления фронта [10]. Задача решается в системе координат, полученной в результате замены переменных специального вида. В этой системе координат положение границы раздела фиксировано. Разностная схема построена в

новой системе координат на неподвижной сетке. Получены дивергентная и недивергентная формы записи, аппроксимирующие соответствующие формы записи исходной дифференциальной задачи, при этом на разностном уровне выполняются законы сохранения кинетической и внутренней энергии, балансы масс для компонентов. В работе [11] показано, что в разностной схеме, построенной с помощью метода выпрямления фронта, можно выполнить дискретный аналог преобразования системы координат и получить алгебраически эквивалентную вычислительную схему на подвижной сетке, согласованной с формой границы раздела фаз.

В данной работе продолжены исследования свойств разностной схемы, предложенной в статьях [9, 11]. Доказано, что разностный оператор, аппроксимирующий диссипативные члены в уравнениях движения жидкости и теплопереноса в расчётной системе координат, самосопряжён и отрицательно определён. Показано, что вычислительная схема, полученная с помощью метода выпрямления фронта, является энергетически нейтральной. Рассмотрены граничные условия для вихря, обеспечивающие выполнение закона сохранения завихрённости на разностном уровне. Результаты, полученные ниже и в работах [9, 11], позволяют утверждать, что построенный класс схем наследует основные свойства исходной дифференциальной задачи о фазовом переходе.

1. Постановка задачи. Задача о фазовом переходе рассматривается в рамках следующих предположений. Твёрдая и жидкая фазы имеют одинаковые плотности $\rho^s = \rho^{lq}$ и удельные теплоёмкости $c_p^s = c_p^{lq}$, но различные коэффициенты теплопроводности – k^s и k^{lq} соответственно. Жидкая фаза является вязкой несжимаемой жидкостью с кинематической вязкостью ν . Поля температуры $T(t, r, z)$ и скоростей $\mathbf{V}(t, r, z)$ жидкости предполагаются осесимметричными. Моделирование осуществляется в цилиндрической системе координат Orz в области $\Omega(r, z) = [0, R] \times [0, Z]$. В подобласти $\Omega^s(t, r, z) = \{(r, z) : r \in [0, R], z \in [0, \zeta(t, r)]\}$ находится твёрдая фаза, жидкая фаза располагается в подобласти $\Omega^{lq}(t, r, z) = \{(r, z) : r \in [0, R], z \in [\zeta(t, r), Z]\}$. Здесь $z = \zeta(t, r)$ – граница раздела фаз, положение которой изменяется в ходе процесса.

Движение жидкости описывается уравнениями Навье–Стокса в переменных функции тока–завихрённости. Компоненты вектора скорости $\mathbf{V} = (V^r, 0, V^z)$ записаны в виде

$$V^r = \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial z}, \quad V^z = -\frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r}, \quad (1)$$

где ψ – функция тока. Завихрённость $\boldsymbol{\omega} = \text{rot } \mathbf{V}$ определяется следующим образом:

$$\boldsymbol{\omega} = (0, \omega_\varphi, 0), \quad \omega_\varphi = \partial_z V^r - \partial_r V^z,$$

где $\partial_r = \partial/\partial r$, $\partial_z = \partial/\partial z$. Для удобства в качестве неизвестной функции в уравнениях движения будем использовать $\omega = -\omega_\varphi/r$. Конвективный перенос в жидкости описывается с помощью уравнения переноса завихрённости

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \frac{1}{r} \mathcal{K}^{(r,z)}(\omega, \psi) = \frac{1}{r} \mathcal{D}^{(r,z)}(r^2 \omega) + \beta_T g \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r},$$

уравнения, связывающего завихрённость и функцию тока

$$-\omega = \frac{1}{r} \mathcal{D}^{(r,z)}(\psi),$$

и уравнения конвективного теплопереноса

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{1}{r} \mathcal{K}^{(r,z)}(T, \psi) = \frac{1}{r} \mathcal{D}^{(r,z)}(T).$$

Здесь β_T – коэффициент температурного расширения, g – ускорение свободного падения, $\mathcal{K}^{(r,z)}/r$ – оператор, описывающий конвективный перенос

$$\mathcal{K}^{(r,z)}(f, \psi) = \partial_r \mathcal{H}^r + \partial_z \mathcal{H}^z, \quad f = \omega, T, \quad (2)$$

где компоненты конвективного потока $\mathcal{H}^{(r,z)} = (\mathcal{H}^r, \mathcal{H}^z)$ имеют вид

$$\mathcal{H}^r(f) = rV^r f = [\partial_z \psi]f, \quad \mathcal{H}^z(f) = rV^z f = -[\partial_r \psi]f,$$

$\mathcal{D}^{(r,z)}/r$ – эллиптический оператор, описывающий диссипативные процессы в уравнениях переноса завихрённости и конвективной теплопроводности:

$$\mathcal{D}^{(r,z)}(r^\beta f) = \partial_r \mathcal{W}^r + \partial_z \mathcal{W}^z, \quad f = \omega, \psi, T, \tag{3}$$

Таблица. Параметры диссипативного потока

f	\varkappa	α	β
ω	ν	-1	2
ψ	1	-1	0
T	$k/(c_p \rho)$	1	0

компоненты потока $\mathcal{W}^{(r,z)} = (\mathcal{W}^r, \mathcal{W}^z)$ вычисляются следующим образом:

$$\mathcal{W}^r(r^\beta f) = \varkappa r^\alpha \partial_r(r^\beta f), \quad \mathcal{W}^z(r^\beta f) = \varkappa r^\alpha \partial_z(r^\beta f),$$

значения параметров \varkappa, α, β приведены в таблице.

Распределение температуры в твёрдой фазе описывается уравнением теплопроводности

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r} \mathcal{D}^{(r,z)}(T).$$

На межфазной границе температура равна температуре фазового перехода

$$T|_{z=\zeta(t,r)} = T_{\text{ph}}$$

и выполняется закон сохранения энергии (условие Стефана):

$$[[k \nabla T \cdot \mathbf{N}]] = \lambda \rho v_n. \tag{4}$$

Здесь $[[q]] = q^s - q^l$ – скачок величины q на фронте кристаллизации, $\nabla = (\partial_r, \partial_z)$, λ – скрытая теплота плавления, $v_n = v_{\text{ph}}(\mathbf{e}_z \cdot \mathbf{N})$, $v_{\text{ph}} = v_{\text{ph}}(t, r) = d\zeta/dt$ – скорость движения границы раздела фаз, \mathbf{N} – единичная нормаль к межфазной границе, направленная в жидкую фазу, \mathbf{e}_z – единичный вектор в направлении оси z .

Граничные условия для температуры имеют вид

$$T|_{z=0} = T_{\text{bot}}(t, r), \quad T|_{z=Z} = T_{\text{top}}(t, r), \quad T|_{r=R} = T_{\text{wall}}(t, z).$$

Условия для функции тока и температуры на оси ампулы вытекают из условий симметрии

$$\psi = 0, \quad \omega_\varphi = 0, \quad \partial_r T = 0.$$

Краевые условия для функции тока на фронте кристаллизации, верхней и боковой границах жидкой фазы:

$$\psi = 0, \quad \partial_n \psi = 0.$$

Здесь ∂_n – производная по направлению внешней нормали к соответствующей границе.

2. Метод выпрямления фронта. Для решения задачи с внутренней подвижной границей, положение которой необходимо определять в ходе решения задачи, применяется метод выпрямления фронта (см. [10]). Физическая область $\Omega(r, z)$ отображается в расчётную область $S(\xi, \eta)$ так, что в новой системе координат положение границы раздела фаз фиксировано и совпадает с координатной линией $\eta = \text{const}$.

2.1. Преобразование системы координат. В данной работе используется замена переменных, при которой области Ω^s, Ω^l в новой системе координат становятся прямоугольниками S^s и S^l (рис. 1), а границы областей $z = 0, z = \zeta(t, r), z = Z$ переходят в прямые $\eta = 0, \eta = 1, \eta = 2$ соответственно. Связь между системами координат имеет вид

$$\tilde{t} = t, \quad \xi = r, \quad \eta = \begin{cases} z/l^s, & z \in [0, \zeta(t, r)], \\ 1 + (z - \zeta)/l^l, & z \in [\zeta(t, r), Z], \end{cases} \tag{5}$$

где $l^s = l^s(t, \xi) = \zeta(t, \xi)$, $l^{lq} = l^{lq}(t, \xi) = Z - \zeta(t, \xi)$ – толщины зон Ω^s и Ω^{lq} соответственно. Якобиан преобразования (5): $J_m = \partial(\tilde{t}, \xi, \eta) / \partial(t, r, z) = 1/l^m$, $m = s, lq$.

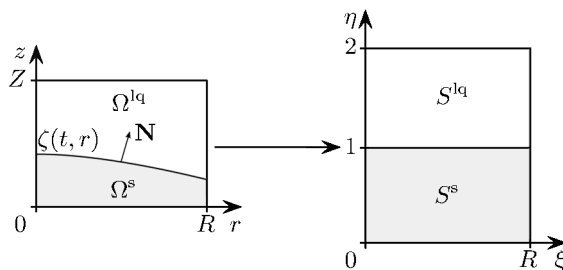


Рис. 1. Преобразование системы координат.

Запишем задачу в новой системе координат (\tilde{t}, ξ, η) . Частные производные неизвестных функций $f = T, \omega, \psi$ преобразуются следующим образом:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial f}{\partial \tilde{t}} + \frac{\partial \eta}{\partial t} \frac{\partial f}{\partial \eta}, \quad \frac{\partial f}{\partial r} = \frac{\partial f}{\partial \xi} + \frac{\partial \eta}{\partial r} \frac{\partial f}{\partial \eta}, \quad \frac{\partial f}{\partial z} = \frac{\partial \eta}{\partial z} \frac{\partial f}{\partial \eta}.$$

Для вычисления производных $\partial \eta / \partial t$, $\partial \eta / \partial r$, $\partial \eta / \partial z$ воспользуемся обратным для (5) преобразованием координат

$$t = \tilde{t}, \quad r = \xi, \quad z = \begin{cases} \varphi^s(\tilde{t}, \xi, \eta) = Z_1 + l^s(\eta - 1), & \eta \in [0, 1], \\ \varphi^{lq}(\tilde{t}, \xi, \eta) = Z_2 + l^{lq}(\eta - 2), & \eta \in [1, 2]. \end{cases} \quad (6)$$

Якобиан этого преобразования равен $J_m^{-1} = \partial(t, r, z) / \partial(\tilde{t}, \xi, \eta) = l^m$. Нетрудно показать, что элементы матрицы Якоби вычисляются по формулам [12, 13]

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = -\frac{1}{J_m^{-1}} \frac{\partial z}{\partial \tilde{t}} = -\frac{1}{l^m} \frac{\partial \varphi^m}{\partial \tilde{t}}, \quad \frac{\partial \eta}{\partial r} = -\frac{1}{J_m^{-1}} \frac{\partial z}{\partial \xi} = -\frac{1}{l^m} \frac{\partial \varphi^m}{\partial \xi}, \quad \frac{\partial \eta}{\partial z} = \frac{1}{J_m^{-1}} \frac{\partial r}{\partial \xi} = \frac{1}{l^m}.$$

Для производной по времени получим

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{1}{\xi l^m} \left[\frac{\partial}{\partial \tilde{t}} (\xi l^m f) - \frac{\partial}{\partial \eta} (\xi \varphi_t^m f) \right] = \frac{1}{\xi l^m} \mathcal{T}^{(\xi, \eta)}(f).$$

В дальнейшем для краткости будем опускать волну над \tilde{t} и верхний индекс m у функций l^m , φ^m , $\varphi_t^m = \partial \varphi^m / \partial \tilde{t}$, $\varphi_\xi^m = \partial \varphi^m / \partial \xi$.

Формулы для вычисления скорости движения жидкости (1) преобразуются следующим образом:

$$V^r = \frac{1}{\xi l} \frac{\partial \psi}{\partial \eta}, \quad V^z = -\frac{1}{\xi l} \left[l \frac{\partial \psi}{\partial \xi} - \varphi_\xi \frac{\partial \psi}{\partial \eta} \right]. \quad (7)$$

Тогда для конвективных членов (2) имеем

$$\frac{1}{r} \mathcal{K}^{(r, z)}(f, \psi) = \frac{1}{\xi l} \mathcal{K}^{(\xi, \eta)}(f, \psi), \quad \mathcal{K}^{(\xi, \eta)}(f, \psi) = \partial_\xi \mathcal{H}^\xi + \partial_\eta \mathcal{H}^\eta. \quad (8)$$

Компоненты конвективного потока $\mathcal{H}^{(\xi, \eta)} = (\mathcal{H}^\xi, \mathcal{H}^\eta)$ в расчётной области имеют вид

$$\mathcal{H}^\xi = \xi U^\xi f = [\partial_\eta \psi] f, \quad \mathcal{H}^\eta = \xi U^\eta f = -[\partial_\xi \psi] f. \quad (9)$$

Здесь величины U^ξ и U^η равны скоростям переноса f вдоль соответствующих координатных направлений и вычисляются по формулам

$$U^\xi = \partial_\eta \psi / (\xi l), \quad U^\eta = -\partial_\xi \psi / (\xi l).$$

Важно отметить, что выражения (8), (9), полученные в расчётной системе координат (\tilde{t}, ξ, η) для конвективных членов, с точностью до якобиана совпадают с записью соответствующего оператора в физической области $\Omega^{lq}(t, r, z)$.

Оператор (3) преобразуется следующим образом:

$$\frac{1}{r} \mathcal{D}^{(r,z)}(r^\beta f) = \frac{1}{\xi l} \mathcal{D}^{(\xi,\eta)}(\xi^\beta f), \quad \mathcal{D}^{(\xi,\eta)}(\xi^\beta f) = \partial_\xi \mathcal{W}^\xi + \partial_\eta \mathcal{W}^\eta,$$

где компоненты потока $\mathcal{W}^{(\xi,\eta)} = (\mathcal{W}^\xi, \mathcal{W}^\eta)$ в расчётной системе координат имеют вид

$$\mathcal{W}^\xi(\xi^\beta f) = \varkappa \xi^\alpha [L^{\xi\xi} \partial_\xi(\xi^\beta f) + L^{\xi\eta} \partial_\eta(\xi^\beta f)], \tag{10}$$

$$\mathcal{W}^\eta(\xi^\beta f) = \varkappa \xi^\alpha [L^{\eta\xi} \partial_\xi(\xi^\beta f) + L^{\eta\eta} \partial_\eta(\xi^\beta f)]. \tag{11}$$

Коэффициенты $L^{\xi\xi}$, $L^{\xi\eta}$, $L^{\eta\xi}$, $L^{\eta\eta}$ вычисляются по формулам

$$L^{\xi\xi} = l, \quad L^{\xi\eta} = L^{\eta\xi} = -\varphi_\xi, \quad L^{\eta\eta} = (1 + \varphi_\xi^2)/l.$$

Таким образом, уравнения Навье–Стокса в расчётной системе координат имеют вид

$$\frac{1}{\xi l} \mathcal{T}^{(\xi,\eta)}(\omega) + \frac{1}{\xi l} \mathcal{K}^{(\xi,\eta)}(\omega, \psi) = \frac{1}{\xi l} \mathcal{D}^{(\xi,\eta)}(\xi^2 \omega) + \beta_T g \frac{1}{\xi l} \left[\frac{\partial}{\partial \xi}(\xi l T) - \frac{\partial}{\partial \eta}(\xi \varphi_\xi T) \right], \tag{12}$$

$$-\omega = \frac{1}{\xi l} \mathcal{D}^{(\xi,\eta)}(\psi). \tag{13}$$

Для уравнения теплопереноса получим

$$\frac{1}{\xi l} \mathcal{T}^{(\xi,\eta)}(T) + \frac{1}{\xi l} \mathcal{K}^{(\xi,\eta)}(T, \psi) = \frac{1}{\xi l} \mathcal{D}^{(\xi,\eta)}(T). \tag{14}$$

Здесь и далее предполагается, что в твёрдой фазе конвективные члены тождественно равны нулю.

Граничные условия и условия на фронте преобразуются аналогично. Для условия Стефана (4) имеем (см. [9])

$$\left[\left[k \left(L^{\eta\xi} \frac{\partial T}{\partial \xi} + L^{\eta\eta} \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) \right] \right] = \lambda \rho v_{ph}. \tag{15}$$

Определим скалярное произведение функций f , g , интегрируемых с квадратом в области $S(\xi, \eta)$, следующим образом:

$$(f, g)_S = \int_S f g \xi l dS.$$

Здесь и далее $dS = d\xi d\eta$.

2.2. Свойства модели в расчётной системе координат. Система уравнений (12)–(15) обладает следующими свойствами.

Закон сохранения завихрённости. Запишем уравнение (13), связывающее функцию тока и завихрённость в неподвижной системе координат:

$$-\omega = [\partial_\xi(lV^z) - \partial_\eta(V^r + \varphi_\xi V^z)]/(\xi l). \tag{16}$$

Здесь мы воспользовались выражением (7) для скорости жидкости и равенством $l_\xi = \varphi_\xi \eta$. Применив теорему Остроградского–Гаусса, из уравнения (16) в силу условий прилипания получим закон сохранения завихрённости

$$-\int_{S^{lq}} \omega \xi l dS = \int_{S^{lq}} [\partial_\xi(lV^z) - \partial_\eta(V^r + \varphi_\xi V^z)] dS = \int_1^2 (lV^z)|_{\xi=0} d\eta. \tag{17}$$

Закон сохранения кинетической энергии. Конвективные члены в уравнении переноса завихренности (12) не вносят вклад в баланс кинетической энергии [14], т.е.

$$\left(\frac{\mathcal{K}^{(\xi,\eta)}(\omega, \psi)}{\xi l}, \psi \right)_{S^{1q}} = \int_{S^{1q}} \mathcal{K}^{(\xi,\eta)}(\omega, \psi) \psi \, dS = 0. \quad (18)$$

Закон сохранения внутренней энергии. В рассматриваемой системе выполняется закон сохранения теплоты. При этом для конвективных членов в уравнениях теплопереноса (14) имеем

$$\left(\frac{\mathcal{K}^{(\xi,\eta)}(T, \psi)}{\xi l}, 1 \right)_{S^{1q}} = 0, \quad \left(\frac{\mathcal{K}^{(\xi,\eta)}(T, \psi)}{\xi l}, T \right)_{S^{1q}} = 0. \quad (19)$$

Свойства эллиптического оператора. Оператор $\frac{\mathcal{D}^{(\xi,\eta)}(f)}{\xi l}$, $f = \xi^2 \omega, \psi, T$, является самосопряжённым и отрицательно определённым в пространстве функций $D(S') = \{f \in C^2(S') : f|_{\partial S'} = 0\}$.

Покажем самосопряжённость оператора. Воспользуемся тем, что на границе области функции f и g обращаются в нуль; проинтегрировав дважды, получим

$$\begin{aligned} \left(\frac{\mathcal{D}^{(\xi,\eta)}(f)}{\xi l}, g \right)_{S'} &= \int_{S'} [\partial_\xi (\varkappa \xi^\alpha L^{\xi\xi} \partial_\xi f + \varkappa \xi^\alpha L^{\xi\eta} \partial_\eta f) + \partial_\eta (\varkappa \xi^\alpha L^{\eta\eta} \partial_\eta f + \varkappa \xi^\alpha L^{\eta\xi} \partial_\xi f)] g \, dS = \\ &= \int_{S'} [\partial_\xi (\varkappa \xi^\alpha L^{\xi\xi} \partial_\xi g + \varkappa \xi^\alpha L^{\eta\xi} \partial_\eta g) + \partial_\eta (\varkappa \xi^\alpha L^{\eta\eta} \partial_\eta g + \varkappa \xi^\alpha L^{\xi\eta} \partial_\xi g)] f \, dS = \left(f, \frac{\mathcal{D}^{(\xi,\eta)}(g)}{\xi l} \right)_{S'}. \end{aligned} \quad (20)$$

Самосопряжённость оператора имеет место в силу того, что $L^{\xi\eta} = L^{\eta\xi}$.

Покажем отрицательную определённость оператора:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\mathcal{D}^{(\xi,\eta)}(f)}{\xi l}, f \right)_{S'} &= \int_{S'} \mathcal{D}^{(\xi,\eta)}(f) f \, dS = \\ &= - \int_{S'} [\varkappa \xi^\alpha L^{\xi\xi} (\partial_\xi f)^2 + 2\varkappa \xi^\alpha L^{\xi\eta} \partial_\xi f \partial_\eta f + \varkappa \xi^\alpha L^{\eta\eta} (\partial_\eta f)^2] \, dS. \end{aligned} \quad (21)$$

В силу критерия Сильвестра подынтегральное выражение является положительно определённой квадратичной формой, поэтому оператор $\frac{\mathcal{D}^{(\xi,\eta)}(f)}{\xi l}$ – отрицательно определённый.

Численный метод решения задачи будем строить таким образом, чтобы на разностном уровне выполнялись дискретные аналоги свойств (17)–(21).

3. Разностная задача.

3.1. Сетка и сеточные функции. В расчётной области $S(\xi, \eta)$ введём прямоугольную сетку $\omega_h^{(\xi,\eta)} = \omega_h^\xi \times \omega_h^\eta$: $\omega_h^\xi = \{\xi_i, i = \overline{0, M}, \xi_0 = 0, \xi_M = R\}$, $\omega_h^\eta = \{\eta_j, j = \overline{0, N}, \eta_0 = 0, \eta_{j^*} = 1, \eta_N = 2\}$ таким образом, чтобы фронт кристаллизации располагался в узлах сетки с координатами (ξ_i, η_{j^*}) , $i = \overline{0, M}$; шаги сетки $\omega_h^{(\xi,\eta)}$: $h_{i+1/2}^\xi = \xi_{i+1} - \xi_i$, $h_{j+1/2}^\eta = \eta_{j+1} - \eta_j$. Введём также потоковые узлы: $\xi_{i+1/2} = (\xi_{i+1} + \xi_i)/2$, $\eta_{j+1/2} = (\eta_{j+1} + \eta_j)/2$. Расчётную область $S(\xi, \eta)$ разобьём на прямоугольные ячейки $S_{ij}^{(\xi,\eta)} = [\xi_{i-1/2}, \xi_{i+1/2}] \times [\eta_{j-1/2}, \eta_{j+1/2}]$ с границами $\partial S_{i+1/2,j}^{(\xi,\eta)}$, $\partial S_{i,j-1/2}^{(\xi,\eta)}$, $\partial S_{i-1/2,j}^{(\xi,\eta)}$, $\partial S_{i,j+1/2}^{(\xi,\eta)}$; длины границ ячейки $S_{ij}^{(\xi,\eta)}$ равны $\tilde{h}_i^\xi = 0.5(h_{i+1/2}^\xi + h_{i-1/2}^\xi)$ и $\tilde{h}_j^\eta = 0.5(h_{j+1/2}^\eta + h_{j-1/2}^\eta)$, её площадь $dS_{ij}^{(\xi,\eta)} = \tilde{h}_i^\xi \tilde{h}_j^\eta$. Также рассмотрим ячейки

$S_{i+1/2 j+1/2}^{(\xi,\eta)}$ с центрами в точках $(\xi_{i+1/2}, \eta_{j+1/2})$ (рис. 2). Сетка по времени $\omega_\tau = \{t_0 = 0, t_{k+1} = t_k + \tau, k = 0, 1, \dots\}$, где τ – шаг по времени.

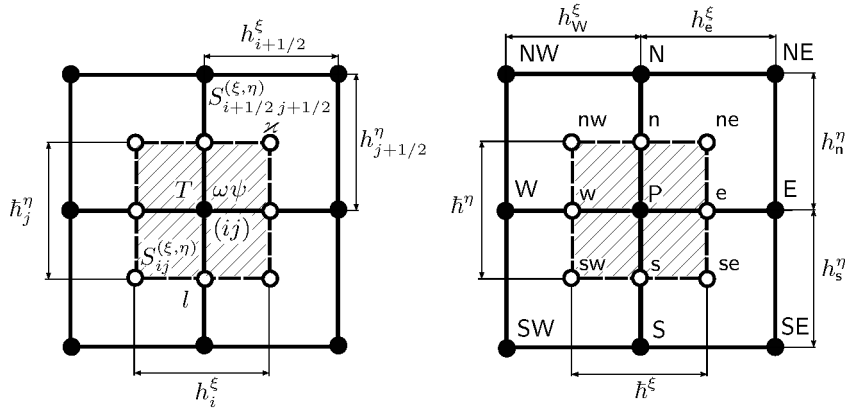


Рис. 2. Сетка и сеточные функции.

Сеточные функции $f_{ij}^k = f(t_k, \xi_i, \eta_j)$, $f = T, \psi, \omega$, будем относить к узлам сетки. Определим эти функции внутри расчётных ячеек: $f(t_k, \xi, \eta) = f_{ij}^k$ при $(\xi, \eta) \in S_{ij}^{(\xi,\eta)}$. Длины фаз $l_{ij+1/2}$ задаются в серединах горизонтальных границ ячеек $S_{ij}^{(\xi,\eta)}$. Длина фазы в центре ячейки вычисляется с помощью линейной интерполяции

$$l_{ij} = (l_{ij+1/2} h_{j+1/2}^\eta + l_{ij-1/2} h_{j-1/2}^\eta) / (2h_j^\eta).$$

Таким образом, $l_{ij} = l_i^s$ в твёрдой фазе, $l_{ij} = l_i^{lq}$ в жидкой фазе,

$$l_{ij}^* = (l_i^{lq} h_{j^*+1/2}^\eta + l_i^s h_{j^*-1/2}^\eta) / (2h_{j^*}^\eta)$$

на фронте кристаллизации. Физические параметры областей \varkappa и метрические коэффициенты $L^{\xi\xi}, L^{\xi\eta}, L^{\eta\eta}$ относятся к центрам ячеек $S_{i+1/2 j+1/2}^{(\xi,\eta)}$ (см. рис. 2).

Подмножество узлов сетки $\omega_h^{(\xi,\eta)}$, принадлежащих жидкой фазе, обозначим через $\omega_{lq}^{(\xi,\eta)}$. Введём множество индексов узлов сетки $\omega_\gamma^{(\xi,\eta)} : (\overline{I}_\gamma \times \overline{J}_\gamma)$, $\gamma = h, lq$, а также множество индексов внутренних узлов сетки $\omega_\gamma^{(\xi,\eta)} : (I_\gamma \times J_\gamma)$. Для проверки выполнения интегральных свойств сеточного решения определим скалярное произведение для сеточных функций, заданных в центрах ячеек $S_{ij}^{(\xi,\eta)}$, следующим образом:

$$(f, g)_\gamma = \sum_{(i,j) \in (\overline{I}_\gamma \times \overline{J}_\gamma)} f_{ij} g_{ij} \xi_i l_{ij} dS_{ij}^{(\xi,\eta)}, \quad \gamma = h, lq. \tag{22}$$

Для обозначения узлов сетки введём также локальную географическую нотацию [2] (см. рис. 2). Определим сеточные операторы разностного дифференцирования. Для пространственных производных в направлении оси ξ имеем $f_{P,\xi} = (f_E - f_P) / h_e^\xi$, $f_{P,\bar{\xi}} = f_{W,\xi}$; разностные аппроксимации пространственных производных в направлении оси η : $f_{P,\eta} = (f_N - f_P) / h_n^\eta$, $f_{P,\bar{\eta}} = f_{S,\eta}$, $f_{P,\bar{\eta}} = (f_n - f_P) / (0.5h_n^\eta)$, $f_{P,\bar{\eta}} = f_{s,\bar{\eta}}$. Разностную производную по времени обозначим через $f_t = (\hat{f}_P - f_P) / \tau$, где $\hat{f}_P = f(t_k + \tau, \xi_P, \eta_P)$.

3.2. Разностная схема. С помощью интегро-интерполяционного метода построим консервативную разностную схему. Проинтегрируем уравнения (12)–(14) по ячейке $S_P^{(\xi,\eta)}$. В ре-

гулярных точках сетки для эволюционных уравнений (12), (14) получим

$$\int_{S_p^{(\xi,\eta)}} \mathcal{T}^{(\xi,\eta)}(f) dS + \int_{S_p^{(\xi,\eta)}} \mathcal{K}^{(\xi,\eta)}(f, \psi) dS - \int_{S_p^{(\xi,\eta)}} \mathcal{D}^{(\xi,\eta)}(\xi^\beta f) dS = 0. \quad (23)$$

(Аппроксимация подъемной силы в уравнении переноса завихрённости строится стандартным образом.)

Построим сначала аппроксимации для второго и третьего интегралов в уравнении (23). Перейдём с помощью теоремы Остроградского–Гаусса к интегралам по границе ячейки и получим

$$\int_{S_p^{(\xi,\eta)}} \mathcal{K}^{(\xi,\eta)}(f, \psi) dS \approx \mathcal{K}_h^{(\xi,\eta)}(f, \psi) \bar{h}^\xi \bar{h}^\eta = \int_{\partial S^{(\xi,\eta)}} [\mathcal{H}^\xi N^\xi + \mathcal{H}^\eta N^\eta] d\gamma, \quad (24)$$

$$\int_{S_p^{(\xi,\eta)}} \mathcal{D}^{(\xi,\eta)}(\xi^\beta f) dS \approx \mathcal{D}_h^{(\xi,\eta)}(\xi^\beta f) \bar{h}^\xi \bar{h}^\eta = \int_{\partial S^{(\xi,\eta)}} [\mathcal{W}^\xi N^\xi + \mathcal{W}^\eta N^\eta] d\gamma. \quad (25)$$

Здесь N^ξ , N^η – компоненты вектора внешней нормали к границе ячейки $S_p^{(\xi,\eta)}$.

Процесс построения аппроксимаций для операторов $\mathcal{K}^{(\xi,\eta)}$ и $\mathcal{D}^{(\xi,\eta)}$ сводится к вычислению значений соответствующих потоков в центрах границ ячейки $S_p^{(\xi,\eta)}$. При этом требуется вычислять значения сеточных функций, а также их производных в узлах, в которых они не определены. Переинтерполяцию соответствующих величин можно осуществлять различными способами, однако предпочтение следует отдавать аппроксимациям, обеспечивающим на разностном уровне выполнение дискретных аналогов свойств (17)–(21) дифференциальной задачи (12)–(15). В дальнейшем при выборе интерполяционных формул будем руководствоваться данным принципом.

3.2.1. Аппроксимация конвективных членов. Для конвективных членов имеем

$$\int_{\partial S^{(\xi,\eta)}} [\mathcal{H}^\xi N^\xi + \mathcal{H}^\eta N^\eta] d\gamma = \int_{\partial S_e^{(\xi,\eta)}} \mathcal{H}^\xi d\eta - \int_{\partial S_w^{(\xi,\eta)}} \mathcal{H}^\xi d\eta + \int_{\partial S_n^{(\xi,\eta)}} \mathcal{H}^\eta d\xi - \int_{\partial S_s^{(\xi,\eta)}} \mathcal{H}^\eta d\xi.$$

Отсюда следует, что выражение (24) можно представить в виде

$$\mathcal{K}_h^{(\xi,\eta)}(f, \psi) \bar{h}^\xi \bar{h}^\eta = (\mathcal{H}_e^\xi - \mathcal{H}_w^\xi) \bar{h}^\eta + (\mathcal{H}_n^\eta - \mathcal{H}_s^\eta) \bar{h}^\xi.$$

В уравнении переноса завихрённости (12) конвективный поток в центрах границ ячейки будем аппроксимировать следующим образом:

$$\mathcal{H}_e^\xi = 0.5[\psi_{E,\eta} \circ \omega_E + \psi_{P,\eta} \circ \omega_P], \quad \mathcal{H}_n^\eta = 0.5[\psi_{N,\xi} \circ \omega_N + \psi_{P,\xi} \circ \omega_P].$$

Потоки через “западную” и “южную” границы вычисляются аналогично. Таким образом, аппроксимация конвективных членов в уравнениях Навье–Стокса имеет вид

$$\mathcal{K}_h^{(\xi,\eta)}(\omega, \psi) = (\psi_{P,\eta} \circ \omega_P)_\xi - (\psi_{P,\xi} \circ \omega_P)_\eta. \quad (26)$$

Выражение (26) совпадает с соотношением, предложенным А. Аракавой в работе [14], для аппроксимации конвективных членов в уравнении Навье–Стокса в декартовой системе координат. В работе [14] доказано следующее утверждение.

Утверждение 1. *Конвективные члены, записанные в форме (26), не вносят вклад в баланс кинетической энергии, т.е.*

$$\left(\frac{\mathcal{K}_h^{(\xi,\eta)}(\omega, \psi)}{\xi l}, \psi \right)_{\text{iq}} = 0.$$

В уравнении теплопереноса (14) компоненты конвективного потока в центрах границ ячеек вычисляются следующим образом:

$$\mathcal{H}_e^\xi(T) = \psi_{e,\eta} \circ T_e, \quad \mathcal{H}_n^\eta(T) = \psi_{n,\xi} \circ T_n,$$

а конвективные члены записываются в виде

$$\mathcal{K}_h^{(\xi,\eta)}(T, \psi) = (\psi_{e,\eta} \circ T_e)_\xi - (\psi_{n,\xi} \circ T_n)_\eta. \tag{27}$$

Выражение (27) также предложено в работе [14] для аппроксимации конвективных членов в уравнении теплопереноса в декартовой системе координат. Там же доказано ещё одно утверждение.

Утверждение 2. *Конвективные члены, записанные в форме (27), не влияют на баланс теплоты, а также на среднее по области значение квадрата температуры, т.е.*

$$\left(\frac{\mathcal{K}_h^{(\xi,\eta)}(T, \psi)}{\xi l}, 1 \right)_{lq} = 0, \quad \left(\frac{\mathcal{K}_h^{(\xi,\eta)}(T, \psi)}{\xi l}, T \right)_{lq} = 0.$$

Таким образом, использование выражений (26), (27) для аппроксимации конвективных членов в уравнениях переноса завихрённости и теплопереноса позволяет построить энергетически нейтральную вычислительную схему.

3.2.2. Аппроксимация эллиптического оператора. Для оператора $\mathcal{D}^{(\xi,\eta)}$ из соотношения (25) получим

$$\mathcal{D}_h^{(\xi,\eta)}(\xi^\beta f) \hbar^\xi \hbar^\eta = (\mathcal{W}_e^\xi - \mathcal{W}_w^\xi) \hbar^\eta + (\mathcal{W}_n^\eta - \mathcal{W}_s^\eta) \hbar^\xi. \tag{28}$$

Аппроксимируем потоки в выражении (28) на границе ячейки $S_p^{(\xi,\eta)}$. Рассмотрим для определённости “восточную” границу

$$\mathcal{W}_e^\xi \hbar^\eta = \int_{\partial S_e^{(\xi,\eta)}} \mathcal{W}^\xi(\xi^\beta f) d\eta = \int_{\partial S_e^{(\xi,\eta)}} [\mathcal{L}^{\xi\xi} \partial_\xi(\xi^\beta f) + \mathcal{L}^{\xi\eta} \partial_\eta(\xi^\beta f)] d\eta. \tag{29}$$

Здесь $\mathcal{L}^{\xi\xi} = \xi^\alpha \varkappa L^{\xi\xi}$, $\mathcal{L}^{\xi\eta} = \xi^\alpha \varkappa L^{\xi\eta}$ и $\mathcal{L}^{\eta\eta} = \xi^\alpha \varkappa L^{\eta\eta}$, $\mathcal{L}^{\eta\xi} = \xi^\alpha \varkappa L^{\eta\xi}$. Для интегралов по границе ячейки в (29) имеем

$$\begin{aligned} \int_{\partial S_e^{(\xi,\eta)}} \mathcal{L}^{\xi\xi} \partial_\xi(\xi^\beta f) d\eta &\approx \mathcal{L}_e^{\xi\xi}(\xi^\beta f)_\xi \hbar^\eta, \\ \int_{\partial S_e^{(\xi,\eta)}} \mathcal{L}^{\xi\eta} \partial_\eta(\xi^\beta f) d\eta &\approx 0.5[h_n^\eta \mathcal{L}_{ne}^{\xi\eta}(\xi^\beta f)_{e,\eta} + h_s^\eta \mathcal{L}_{se}^{\xi\eta}(\xi^\beta f)_{e,\bar{\eta}}]. \end{aligned} \tag{30}$$

Для вычисления метрических коэффициентов и разностных производных в центре границы $\partial S_e^{(\xi,\eta)}$ будем использовать следующие интерполяционные формулы:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_e^{\xi\xi} &= [h_n^\eta \mathcal{L}_{ne}^{\xi\xi} + h_s^\eta \mathcal{L}_{se}^{\xi\xi}] / (2\hbar^\eta), \quad (\xi^\beta f)_{e,\eta} = 0.5[(\xi^\beta f)_{P,\eta} + (\xi^\beta f)_{E,\eta}], \\ (\xi^\beta f)_{e,\bar{\eta}} &= 0.5[(\xi^\beta f)_{P,\bar{\eta}} + (\xi^\beta f)_{E,\bar{\eta}}]. \end{aligned}$$

Поток через “северную” границу $\partial S_n^{(\xi,\eta)}$ вычисляется по формуле

$$\mathcal{W}_n^\eta \hbar^\xi = \int_{\partial S_n^{(\xi,\eta)}} \mathcal{W}^\eta(\xi^\beta f) d\xi \approx \mathcal{L}_n^{\eta\eta}(\xi^\beta f)_\eta \hbar^\xi + 0.5[h_e^\xi \mathcal{L}_{ne}^{\eta\xi}(\xi^\beta f)_{n,\xi} + h_w^\xi \mathcal{L}_{nw}^{\eta\xi}(\xi^\beta f)_{n,\bar{\xi}}],$$

а в центре границы имеем

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_n^{\eta\eta} &= [h_e^\xi \mathcal{L}_{ne}^{\eta\eta} + h_w^\xi \mathcal{L}_{nw}^{\eta\eta}] / (2h^\xi), \quad (\xi^\beta f)_{n,\xi} = 0.5[(\xi^\beta f)_{P,\xi} + (\xi^\beta f)_{N,\xi}], \\ (\xi^\beta f)_{n,\bar{\xi}} &= 0.5[(\xi^\beta f)_{P,\bar{\xi}} + (\xi^\beta f)_{N,\bar{\xi}}]. \end{aligned}$$

Выражения для потоков через “западную” и “южную” границы вычисляются аналогичным образом.

Рассмотрим пространство сеточных функций $D_h(\omega_\gamma^{(\xi,\eta)}) = \{f_{ij}, (i, j) \in (\bar{I}_\gamma \times \bar{J}_\gamma) : f_{ij} = 0, (i, j) \in (\bar{I}_\gamma \times \bar{J}_\gamma) \setminus (I_\gamma \times J_\gamma)\}$. Докажем следующие утверждения.

Утверждение 3. Для сеточных функций из пространства $D_h(\omega_\gamma^{(\xi,\eta)})$ разностный оператор $\mathcal{D}_h^{(\xi,\eta)}(f_{ij}) / (\xi_i l_{ij})$ является отрицательно определённым относительно сеточного скалярного произведения (22):

$$\left(\frac{\mathcal{D}_h^{(\xi,\eta)}(f)}{\xi l}, f \right)_\gamma < 0, \quad \gamma = h, lq. \tag{31}$$

Доказательство. Левую часть неравенства (31) запишем в виде

$$\left(\frac{\mathcal{D}_h^{(\xi,\eta)}(f)}{\xi l}, f \right)_\gamma = \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} (\mathcal{W}_{i+j/2}^\xi - \mathcal{W}_{i-j/2}^\xi) f_{ij} h_j^\eta + \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} (\mathcal{W}_{ij+1/2}^\eta - \mathcal{W}_{ij-1/2}^\eta) f_{ij} h_i^\xi. \tag{32}$$

Рассмотрим первую сумму в правой части (32). Преобразуем в ней члены, содержащие коэффициент $\mathcal{L}^{\xi\xi}$. Представим эти члены в виде полусуммы разностных производных назад и вперед в направлении ξ :

$$\begin{aligned} &\sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} [\mathcal{L}_{i+j/2}^{\xi\xi} f_\xi - \mathcal{L}_{i-j/2}^{\xi\xi} f_{\bar{\xi}}] f_{ij} h_j^\eta = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} [h_{i-1/2}^\xi (\mathcal{L}_{i+j/2}^{\xi\xi} f_\xi)_{\bar{\xi}} + h_{i+1/2}^\xi (\mathcal{L}_{i-j/2}^{\xi\xi} f_{\bar{\xi}})_\xi] f_{ij} h_j^\eta. \end{aligned} \tag{33}$$

Используем в правой части равенства (33) формулу суммирования по частям [15, с. 46] по индексу i . С учётом условий на границе области имеем

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2} \sum_{j \in J_\gamma} \sum_{i \in I_\gamma} [h_{i-1/2}^\xi (\mathcal{L}_{i+j/2}^{\xi\xi} f_\xi)_{\bar{\xi}} + h_{i+1/2}^\xi (\mathcal{L}_{i-j/2}^{\xi\xi} f_{\bar{\xi}})_\xi] f_{ij} h_j^\eta = \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{j \in J_\gamma} \sum_{i \in I_\gamma} [h_{i+1/2}^\xi \mathcal{L}_{i+j/2}^{\xi\xi} (f_\xi)^2 + h_{i-1/2}^\xi \mathcal{L}_{i-j/2}^{\xi\xi} (f_{\bar{\xi}})^2] h_j^\eta. \end{aligned} \tag{34}$$

Запишем члены, содержащие смешанные производные, в виде

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_1 &= \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i-1/2}^\xi h_{j+1/2}^\eta (\mathcal{L}_{i+j/2+1/2}^{\xi\eta} f_\eta)_{\bar{\xi}} f_{ij} + \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i+1/2}^\xi h_{j+1/2}^\eta (\mathcal{L}_{i-j/2+1/2}^{\xi\eta} f_\eta)_\xi f_{ij} + \\ &+ \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i-1/2}^\xi h_{j-1/2}^\eta (\mathcal{L}_{i+j/2-1/2}^{\xi\eta} f_\eta)_{\bar{\xi}} f_{ij} + \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i+1/2}^\xi h_{j-1/2}^\eta (\mathcal{L}_{i-j/2-1/2}^{\xi\eta} f_\eta)_\xi f_{ij}. \end{aligned} \tag{35}$$

Применим к первому слагаемому в (35) формулу суммирования по частям по индексу i :

$$\frac{1}{4} \sum_{j \in J_\gamma} \sum_{i \in I_\gamma} h_{i-1/2}^\xi h_{j+1/2}^\eta (\mathcal{L}_{i+j/2+1/2}^{\xi\eta} f_\eta)_{\bar{\xi}} f_{ij} = -\frac{1}{4} \sum_{j \in J_\gamma} \sum_{i \in I_\gamma} h_{i+1/2}^\xi h_{j+1/2}^\eta \mathcal{L}_{i+j/2+1/2}^{\xi\eta} f_\xi f_\eta.$$

Преобразуем второе, третье и четвертое слагаемые в (35) аналогичным образом и получим

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_1 = & -\frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} [h_{i+1/2}^\xi h_{j+1/2}^\eta \mathcal{L}_{i+j/2+1/2}^{\xi\eta} f_\xi f_\eta + h_{i-1/2}^\xi h_{j+1/2}^\eta \mathcal{L}_{i-j/2+1/2}^{\xi\eta} f_{\bar{\xi}} f_\eta] - \\ & -\frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} [h_{i-1/2}^\xi h_{j-1/2}^\eta \mathcal{L}_{i-j/2-1/2}^{\xi\eta} f_{\bar{\xi}} f_{\bar{\eta}} + h_{i+1/2}^\xi h_{j-1/2}^\eta \mathcal{L}_{i+j/2-1/2}^{\xi\eta} f_\xi f_{\bar{\eta}}]. \end{aligned} \quad (36)$$

Рассмотрим вторую сумму в правой части выражения (32). Для членов, содержащих коэффициент $\mathcal{L}^{\eta\eta}$, имеем

$$\begin{aligned} & \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} [\mathcal{L}_{ij+1/2}^{\eta\eta} f_\eta - \mathcal{L}_{ij-1/2}^{\eta\eta} f_{\bar{\eta}}] f_{ij} h_i^\xi = \\ & = -\frac{1}{2} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} [h_{j+1/2}^\eta \mathcal{L}_{ij+1/2}^{\eta\eta} (f_\eta)^2 + h_{j-1/2}^\eta \mathcal{L}_{ij-1/2}^{\eta\eta} (f_{\bar{\eta}})^2] h_i^\xi. \end{aligned} \quad (37)$$

Члены, содержащие смешанные производные, запишем в виде

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_2 = & -\frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} [h_{i+1/2}^\xi h_{j+1/2}^\eta \mathcal{L}_{i+j/2+1/2}^{\xi\eta} f_\xi f_\eta + h_{i+1/2}^\xi h_{j-1/2}^\eta \mathcal{L}_{i+j/2-1/2}^{\xi\eta} f_\xi f_{\bar{\eta}}] - \\ & -\frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} [h_{i-1/2}^\xi h_{j+1/2}^\eta \mathcal{L}_{i-j/2+1/2}^{\xi\eta} f_{\bar{\xi}} f_\eta + h_{i-1/2}^\xi h_{j-1/2}^\eta \mathcal{L}_{i-j/2-1/2}^{\xi\eta} f_{\bar{\xi}} f_{\bar{\eta}}]. \end{aligned} \quad (38)$$

В силу того, что $\mathcal{L}^{\xi\eta} = \mathcal{L}^{\eta\xi}$, выражение (38) совпадает с (36), т.е. $\mathcal{S}_1 = \mathcal{S}_2$.

Заменив в правой части соотношения (32) потоки их представлениями (34), (36)–(38), получим

$$\begin{aligned} \left(\frac{\mathcal{D}_h^{(\xi,\eta)}(f)}{\xi l}, f \right)_\gamma = & -\frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i+1/2}^\xi h_{j+1/2}^\eta [\mathcal{L}_{i+j/2+1/2}^{\xi\xi} (f_\xi)^2 + 2\mathcal{L}_{i+j/2+1/2}^{\xi\eta} f_\xi f_\eta + \mathcal{L}_{i+j/2+1/2}^{\eta\eta} (f_\eta)^2] - \\ & -\frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i-1/2}^\xi h_{j+1/2}^\eta [\mathcal{L}_{i-j/2+1/2}^{\xi\xi} (f_{\bar{\xi}})^2 + 2\mathcal{L}_{i-j/2+1/2}^{\xi\eta} f_{\bar{\xi}} f_\eta + \mathcal{L}_{i-j/2+1/2}^{\eta\eta} (f_\eta)^2] - \\ & -\frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i+1/2}^\xi h_{j-1/2}^\eta [\mathcal{L}_{i+j/2-1/2}^{\xi\xi} (f_\xi)^2 + 2\mathcal{L}_{i+j/2-1/2}^{\xi\eta} f_\xi f_{\bar{\eta}} + \mathcal{L}_{i+j/2+1/2}^{\eta\eta} (f_{\bar{\eta}})^2] - \\ & -\frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i-1/2}^\xi h_{j-1/2}^\eta [\mathcal{L}_{i-j/2-1/2}^{\xi\xi} (f_{\bar{\xi}})^2 + 2\mathcal{L}_{i-j/2-1/2}^{\xi\eta} f_{\bar{\xi}} f_{\bar{\eta}} + \mathcal{L}_{i-j/2-1/2}^{\eta\eta} (f_{\bar{\eta}})^2]. \end{aligned}$$

В силу критерия Сильвестра квадратичные формы, находящиеся под знаками сумм, являются положительно определёнными:

$$\mathcal{L}_{pq}^{\xi\xi} = l_{pq} > 0, \quad \mathcal{L}_{pq}^{\xi\xi} \mathcal{L}_{pq}^{\eta\eta} - (\mathcal{L}_{pq}^{\xi\eta})^2 = 1 > 0, \quad p = i \pm 1/2, \quad q = j \pm 1/2,$$

откуда

$$\left(\frac{\mathcal{D}_h^{(\xi,\eta)}(f)}{\xi l}, f \right)_\gamma < 0, \quad \gamma = h, lq.$$

Утверждение доказано.

Утверждение 4. Для сеточных функций из пространства $D_h(\omega_\gamma^{(\xi,\eta)})$ разностный оператор $\mathcal{D}_h^{(\xi,\eta)}(f_{ij})/(\xi_i l_{ij})$ является самосопряжённым относительно сеточного скалярного произведения (22):

$$\left(\frac{\mathcal{D}_h^{(\xi,\eta)}(f)}{\xi l}, g\right)_\gamma = \left(f, \frac{\mathcal{D}_h^{(\xi,\eta)}(g)}{\xi l}\right)_\gamma, \quad \gamma = h, lq. \tag{39}$$

Доказательство. Запишем левую часть равенства (39) следующим образом:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\mathcal{D}_h^{(\xi,\eta)}(f)}{\xi l}, g\right)_\gamma &= \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} \mathcal{D}_h^{(\xi,\eta)}(f_{ij}) g_{ij} \bar{h}_i^\xi \bar{h}_j^\eta = \\ &= \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} (\mathcal{W}_{i+j/2}^\xi - \mathcal{W}_{i-j/2}^\xi) g_{ij} \bar{h}_j^\eta + \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} (\mathcal{W}_{ij+1/2}^\eta - \mathcal{W}_{ij-1/2}^\eta) g_{ij} \bar{h}_i^\xi. \end{aligned} \tag{40}$$

Рассмотрим первую сумму в правой части (40). Преобразуем в ней члены, содержащие коэффициент $\mathcal{L}^{\xi\xi}$. Для этого дважды воспользуемся формулой суммирования по частям по индексу i :

$$\begin{aligned} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i-1/2}^\xi (\mathcal{L}_{i+j/2}^{\xi\xi} f_\xi)_{\bar{\xi}} g_{ij} \bar{h}_j^\eta &= - \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i+1/2}^\xi \mathcal{L}_{i+j/2}^{\xi\xi} f_\xi g_\xi \bar{h}_j^\eta = \\ &= \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i-1/2}^\xi (\mathcal{L}_{i+j/2}^{\xi\xi} g_\xi)_{\bar{\xi}} f_{ij} \bar{h}_j^\eta. \end{aligned} \tag{41}$$

Применив последовательно формулу суммирования по частям по индексам i и j , запишем члены, содержащие смешанные производные, в виде

$$\begin{aligned} &\frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i-1/2}^\xi h_{j+1/2}^\eta (\mathcal{L}_{i+j/2+1/2}^{\xi\eta} f_\eta)_{\bar{\xi}} g_{ij} + \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i+1/2}^\xi h_{j+1/2}^\eta (\mathcal{L}_{i-j/2+1/2}^{\xi\eta} f_\eta)_\xi g_{ij} + \\ &+ \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i-1/2}^\xi h_{j-1/2}^\eta (\mathcal{L}_{i+j/2-1/2}^{\xi\eta} f_\eta)_{\bar{\xi}} g_{ij} + \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i+1/2}^\xi h_{j-1/2}^\eta (\mathcal{L}_{i-j/2-1/2}^{\xi\eta} f_\eta)_\xi g_{ij} = \\ &= \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i+1/2}^\xi h_{j-1/2}^\eta (\mathcal{L}_{i+j/2+1/2}^{\xi\eta} g_\xi)_{\bar{\eta}} f_{ij} + \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i-1/2}^\xi h_{j-1/2}^\eta (\mathcal{L}_{i-j/2+1/2}^{\xi\eta} g_\xi)_{\bar{\eta}} f_{ij} + \\ &+ \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i+1/2}^\xi h_{j+1/2}^\eta (\mathcal{L}_{i+j/2-1/2}^{\xi\eta} g_\xi)_\eta f_{ij} + \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i-1/2}^\xi h_{j+1/2}^\eta (\mathcal{L}_{i-j/2-1/2}^{\xi\eta} g_\xi)_\eta f_{ij}. \end{aligned} \tag{42}$$

Здесь воспользовались тем, что

$$\begin{aligned} &\frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i-1/2}^\xi h_{j+1/2}^\eta (\mathcal{L}_{i+j/2+1/2}^{\xi\eta} f_\eta)_{\bar{\xi}} g_{ij} = \\ &= -\frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i+1/2}^\xi h_{j+1/2}^\eta \mathcal{L}_{i+j/2+1/2}^{\xi\eta} f_\eta g_\xi = \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i+1/2}^\xi h_{j-1/2}^\eta (\mathcal{L}_{i+j/2+1/2}^{\xi\eta} g_\xi)_{\bar{\eta}} f_{ij}, \end{aligned}$$

оставшиеся слагаемые в левой части равенства (42) преобразованы аналогично.

Рассмотрим вторую сумму в правой части (40). Для членов, содержащих коэффициент $\mathcal{L}^{\eta\eta}$, получим

$$\sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{j-1/2}^\eta (\mathcal{L}_{j+1/2}^{\eta\eta} f_\eta)_{\bar{\eta}} g_{ij} \bar{h}_i^\xi = \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{j-1/2}^\eta (\mathcal{L}_{ij+1/2}^{\eta\eta} g_\eta)_{\bar{\eta}} f_{ij} \bar{h}_i^\xi. \tag{43}$$

Аналогично (42) запишем

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i+1/2}^\xi h_{j-1/2}^\eta (\mathcal{L}_{i+j/2+1/2}^{\eta\xi} f_\xi)_{\bar{\eta}} g_{ij} + \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i+1/2}^\xi h_{j+1/2}^\eta (\mathcal{L}_{i+j/2-1/2}^{\eta\xi} f_\xi)_\eta g_{ij} + \\
 & + \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i-1/2}^\xi h_{j-1/2}^\eta (\mathcal{L}_{i-j/2+1/2}^{\eta\xi} f_\xi)_{\bar{\eta}} g_{ij} + \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i-1/2}^\xi h_{j+1/2}^\eta (\mathcal{L}_{i-j/2-1/2}^{\eta\xi} f_\xi)_\eta g_{ij} = \\
 & = \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i-1/2}^\xi h_{j+1/2}^\eta (\mathcal{L}_{i+j/2+1/2}^{\eta\xi} g_\eta)_{\bar{\xi}} f_{ij} + \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i-1/2}^\xi h_{j-1/2}^\eta (\mathcal{L}_{i+j/2-1/2}^{\eta\xi} g_\eta)_{\bar{\xi}} f_{ij} + \\
 & + \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i+1/2}^\xi h_{j+1/2}^\eta (\mathcal{L}_{i-j/2+1/2}^{\eta\xi} g_\eta)_\xi f_{ij} + \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i+1/2}^\xi h_{j-1/2}^\eta (\mathcal{L}_{i-j/2-1/2}^{\eta\xi} g_\eta)_\xi f_{ij}. \quad (44)
 \end{aligned}$$

Подставим правые части выражений (41)–(44) в правую часть равенства (40). В силу того, что $\mathcal{L}^{\xi\eta} = \mathcal{L}^{\eta\xi}$, имеем

$$\left(\frac{\mathcal{D}_h^{(\xi,\eta)}(f)}{\xi l}, g \right)_\gamma = \left(f, \frac{\mathcal{D}_h^{(\xi,\eta)}(g)}{\xi l} \right)_\gamma, \quad \gamma = h, lq.$$

Утверждение доказано.

Возможны и другие способы переинтерполяции искомых функций в потоковые точки. Соответствующие разностные выражения могут иметь тот же порядок аппроксимации, что и операторы (26)–(28). Однако построенные на их основе разностные уравнения не будут обладать свойствами, аналогичными свойствам исходной дифференциальной задачи. В работе [16] предложена следующая аппроксимация оператора $\mathcal{D}^{(\xi,\eta)}$:

$$\widetilde{\mathcal{D}}_h^{(\xi,\eta)}(\xi^\beta f) \hbar^\xi \hbar^\eta = (\widetilde{\mathcal{W}}_e^\xi - \widetilde{\mathcal{W}}_w^\xi) \hbar^\eta + (\widetilde{\mathcal{W}}_n^\eta - \widetilde{\mathcal{W}}_s^\eta) \hbar^\xi,$$

$$\widetilde{\mathcal{W}}_e^\xi = \mathcal{L}_e^{\xi\xi}(\xi^\beta f)_\xi + \mathcal{L}_e^{\xi\eta}[(\xi^\beta f)_{ne} - (\xi^\beta f)_{se}]/\hbar^\eta, \quad \widetilde{\mathcal{W}}_n^\eta = \mathcal{L}_n^{\eta\eta}(\xi^\beta f)_\eta + \mathcal{L}_n^{\eta\xi}[(\xi^\beta f)_{ne} - (\xi^\beta f)_{nw}]/\hbar^\xi.$$

Нетрудно показать, что разностный оператор $\widetilde{\mathcal{D}}_h^{(\xi,\eta)}(f_{ij})/(\xi_i l_{ij})$ не является самосопряжённым относительно сеточного скалярного произведения (22). При этом выражения, используемые в статье [16] для аппроксимации конвективных членов, не обеспечивают выполнение разностных аналогов законов сохранения кинетической энергии, массы и теплоты.

3.2.3. Аппроксимация производной по времени. Для оператора $\mathcal{T}^{(\xi,\eta)}(f)$ получим

$$\int_{S_P^{(\xi,\eta)}} \mathcal{T}^{(\xi,\eta)}(f) d\xi d\eta \approx \mathcal{T}_h^{(\xi,\eta)}(f) \hbar^\xi \hbar^\eta = \partial_t(l_P f_P)_{\xi_P} \hbar^\xi \hbar^\eta - [(\varphi_t f)_n - (\varphi_t f)_s]_{\xi_P} \hbar^\xi. \quad (45)$$

Здесь $(\varphi_t f)_n = \varphi_{n,t} f_n$, $(\varphi_t f)_s = \varphi_{s,t} f_s$. Значения функции f в центрах горизонтальных граней ячейки вычисляется по формулам $f_n = (f_P + f_N)/2$, $f_s = (f_P + f_S)/2$. Проинтегрируем (45) по отрезку $[t_k, t_{k+1}]$, полученное выражение разделим на шаг τ и площадь ячейки $dS_P^{(\xi,\eta)}$:

$$\frac{1}{\xi_P} \mathcal{T}_{h,\tau}^{(\xi,\eta)}(f) = (l_P f_P)_t - [(\varphi_t \widehat{f})_n - (\varphi_t \widehat{f})_s]/\hbar^\eta. \quad (46)$$

Аппроксимация (46) содержит нелинейный член $\widehat{l_P f_P}$, для удобства запишем её в недивергентной форме:

$$\frac{1}{\xi_P} \mathcal{T}_{h,\tau}^{(\xi,\eta)}(f) = (l_P f_P)_t - [(\varphi_t \widehat{f})_{\bar{\eta}} h_n^\eta + (\varphi_t \widehat{f})_{\bar{\eta}} h_s^\eta]/(2\hbar^\eta).$$

Воспользуемся формулами разностного дифференцирования произведения [15, с. 51]:

$$(l_P f_P)_t = l_{P,t} \widehat{f}_P + l_P f_{P,t} = [l_{n,t} h_n^\eta + l_{s,t} h_s^\eta] / (2\hbar^\eta) \widehat{f}_P + [l_n h_n^\eta + l_s h_s^\eta] / (2\hbar^\eta) f_{P,t},$$

$$[(\varphi_t \widehat{f})_{\bar{\eta}} h_n^\eta + (\varphi_t \widehat{f})_{\bar{\eta}} h_s^\eta] / (2\hbar^\eta) = [(\varphi_{t\bar{\eta}} \widehat{f}_P + \varphi_{t,n} \widehat{f}_{\bar{\eta}}) h_n^\eta + (\varphi_{t\bar{\eta}} \widehat{f}_P + \varphi_{t,s} \widehat{f}_{\bar{\eta}}) h_s^\eta] / (2\hbar^\eta).$$

Отсюда с учётом того, что $l_{n,t} = \varphi_{t\bar{\eta}}$, $l_{s,t} = \varphi_{t\bar{\eta}}$, получаем недивергентную форму записи производной по времени:

$$\frac{1}{\xi_P} \mathcal{T}_{h,\tau}^{(\xi,\eta)}(f) = l_P f_{P,t} - [\varphi_{t,n} \widehat{f}_{\bar{\eta}} h_n^\eta + \varphi_{t,s} \widehat{f}_{\bar{\eta}} h_s^\eta] / (2\hbar^\eta). \tag{47}$$

3.2.4. Аппроксимация уравнения, связывающего значения функции тока и завихрённости. Аппроксимация уравнения (13) во внутренних точках области имеет вид

$$-\omega_P l_P \xi_P dS_P^{(\xi,\eta)} = \mathcal{D}_h^{(\xi,\eta)}(\psi) dS_P^{(\xi,\eta)}. \tag{48}$$

Граничные условия для завихрённости строятся следующим образом: уравнение (13) интегрируется по приграничным ячейкам с учётом условий прилипания и непротекания. Рассмотрим для определённости ячейку на вертикальной границе области. Получим

$$-\omega_P r_P l_P \frac{h_W^\xi}{2} \hbar^\eta = [\mathcal{W}_P^\xi(\psi) - \mathcal{W}_W^\xi(\psi)] \hbar^\eta + [\mathcal{W}_n^\eta(\psi) - \mathcal{W}_s^\eta(\psi)] \frac{h_W^\xi}{2}.$$

В силу условия прилипания на границе жидкой фазы имеем $\psi = 0$, $\mathcal{W}_P^\xi(\psi) = 0$, $\psi_{P,\xi} = \psi_{N,\xi} = \psi_{S,\xi} = 0$, откуда

$$-\omega_P r_P l_P \frac{h_W^\xi}{2} \hbar^\eta = \frac{\mathcal{L}_{nW}^{\xi\xi} h_n^\eta + \mathcal{L}_{sW}^{\xi\xi} h_s^\eta}{2h_W^\xi} \psi_W - \frac{\mathcal{L}_{nW}^{\xi\eta}}{2} \psi_{NW} + \frac{\mathcal{L}_{sW}^{\xi\eta}}{2} \psi_{SW}. \tag{49}$$

В декартовой системе координат $\mathcal{L}^{\xi\xi} = 1$, $\mathcal{L}^{\xi\eta} = \mathcal{L}^{\eta\xi} = 0$ и условие (49) преобразуется в известное условие А. Тома [17]. Уравнения для завихрённости на других участках границы жидкой фазы аппроксимируются аналогичным образом.

Утверждение 5. Пусть сеточная функция ω_{ij} удовлетворяет уравнению (48). Тогда выполнен разностный аналог закона сохранения завихрённости в форме

$$-\sum_{(i,j) \in (\bar{I}_{1q} \times \bar{J}_{1q})} \omega_{ij} l_{ij} \xi_i dS_{ij}^{(\xi,\eta)} = \sum_{j \in \bar{J}_{1q}} (V^z l)_{1/2j} \hbar_j^\eta.$$

Доказательство. Из уравнения (48) следует, что

$$-\sum_{(i,j) \in (\bar{I}_{1q} \times \bar{J}_{1q})} \omega_{ij} l_{ij} \xi_i dS_{ij}^{(\xi,\eta)} = \sum_{(i,j) \in (I_{1q} \times J_{1q})} [(\mathcal{W}_{i+j/2}^\xi - \mathcal{W}_{i-j/2}^\xi) \hbar_j^\eta + (\mathcal{W}_{ij+1/2}^\eta - \mathcal{W}_{ij-1/2}^\eta) \hbar_i^\xi] - \sum_{j \in J_{1q}} [\omega_{0j} l_{0j} \xi_0 dS_{0j}^{(\xi,\eta)} + \omega_{Nj} l_{Nj} \xi_N dS_{Nj}^{(\xi,\eta)}] - \sum_{i \in I_{1q}} [\omega_{ij^*} l_{0j^*+0} \xi_i dS_{ij^*}^{(\xi,\eta)} + \omega_{iM} l_{iM} \xi_i dS_{iM}^{(\xi,\eta)}]. \tag{50}$$

Сумму потоков, протекающих через грани внутренних ячеек сетки, можно свести к следующей сумме по граничным контрольным объёмам:

$$\sum_{(i,j) \in (I_{1q} \times J_{1q})} [(\mathcal{W}_{i+j/2}^\xi - \mathcal{W}_{i-j/2}^\xi) \hbar_j^\eta + (\mathcal{W}_{ij+1/2}^\eta - \mathcal{W}_{ij-1/2}^\eta) \hbar_i^\xi] =$$

$$= \sum_{j \in J_{1q}} [\mathcal{W}_{N-j/2}^\xi - \mathcal{W}_{j/2}^\xi] \hbar_j^\eta + \sum_{i \in I_{1q}} [\mathcal{W}_{iM-1/2}^\eta - \mathcal{W}_{ij^*+1/2}^\eta] \hbar_i^\xi. \quad (51)$$

Подставив (50) в (51), получим

$$\begin{aligned} - \sum_{(i,j) \in (\bar{I}_{1q} \times \bar{J}_{1q})} \omega_{ij} l_{ij} \xi_i dS_{ij}^{(\xi,\eta)} &= - \sum_{j \in J_{1q}} [\omega_{0j} l_{0j} \xi_0 dS_{0j}^{(\xi,\eta)} + \mathcal{W}_{j/2}^\xi \hbar_j^\eta] - \sum_{j \in J_{1q}} [\omega_{Nj} l_{Nj} \xi_N dS_{Nj}^{(\xi,\eta)} - \mathcal{W}_{N-j/2}^\xi \hbar_j^\eta] - \\ &- \sum_{i \in I_{1q}} [\omega_{ij^*} l_{ij^*+0} \xi_i dS_{ij^*}^{(\xi,\eta)} + \mathcal{W}_{ij^*+1/2}^\eta \hbar_i^\xi] - \sum_{i \in I_{1q}} [\omega_{iM} l_{iM} \xi_i dS_{iM}^{(\xi,\eta)} - \mathcal{W}_{iM-1/2}^\eta \hbar_i^\xi]. \end{aligned} \quad (52)$$

Завихрённость на оси $\omega_{0j} = 0$, и в силу граничных условий (49) вторая, третья и четвёртая суммы в правой части (52) также обращаются в нуль. Тогда

$$- \sum_{(i,j) \in (\bar{I}_{1q} \times \bar{J}_{1q})} \omega_{ij} l_{ij} \xi_i dS_{ij}^{(\xi,\eta)} = \sum_{j \in \bar{J}_{1q}} -\mathcal{W}_{1/2j}^\xi \hbar_j^\eta.$$

Сравнив выражение (7) для скорости V^z и соотношение (10) для потока \mathcal{W}^ξ , получим, что $V^z l = -\mathcal{W}^\xi(\psi)$, откуда

$$- \sum_{(i,j) \in (\bar{I}_{1q} \times \bar{J}_{1q})} \omega_{ij} l_{ij} \xi_i dS_{ij}^{(\xi,\eta)} = \sum_{j \in \bar{J}_{1q}} (V^z l)_{1/2j} \hbar_j^\eta.$$

Утверждение доказано.

Заменим в уравнениях (12), (13) дифференциальные операторы их разностными аппроксимациями (26)–(28) и (47). Таким образом, неявная разностная схема для уравнений Навье–Стокса имеет вид

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_{h,\tau}^{(\xi,\eta)}(\omega) dS_P^{(\xi,\eta)} + \mathcal{K}_h^{(\xi,\eta)}(\hat{\omega}, \hat{\psi}) dS_P^{(\xi,\eta)} &= \mathcal{D}_h^{(\xi,\eta)}(\hat{\omega}) dS_P^{(\xi,\eta)} - \mathcal{F}_h^{(\xi,\eta)}(T) dS_P^{(\xi,\eta)}, \\ - \hat{\omega}_{\bar{l}_P} \xi_P dS_P^{(\xi,\eta)} &= \mathcal{D}_h^{(\xi,\eta)}(\hat{\psi}) dS_P^{(\xi,\eta)}. \end{aligned}$$

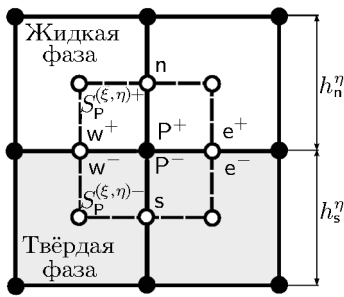


Рис. 3. Ячейка на фронте кристаллизации.

Функция тока и завихрённость в граничных условиях (49) также отнесены к верхнему временному слою.

3.2.5. Аппроксимация условия Стефана. Для аппроксимации условия Стефана (15) проинтегрируем уравнение теплопереноса (14) по ячейке $S_P^{(\xi,\eta)}$, содержащей границу раздела фаз. Область интегрирования разобьём на две подобласти: $S_P^{(\xi,\eta)+}$ – расположенную в жидкости и $S_P^{(\xi,\eta)-}$ – лежащую в твёрдой фазе (рис. 3). Аппроксимация $\mathcal{T}^{(\xi,\eta)}(T)$ на межфазной границе задаётся формулой (45). Однако стоит помнить, что l_n , $\varphi_{t,n}$ и l_s , $\varphi_{t,s}$ относятся к жидкой и твёрдой фазам соответственно. Проинтегрировав конвективные члены по области $S_P^{(\xi,\eta)+}$, получим

$$\mathcal{K}_h^{(\xi,\eta)}(f, \psi) \hbar^\xi \frac{h_n^\eta}{2} = [\mathcal{H}_e^\xi(T) - \mathcal{H}_w^\xi(T)] \frac{h_n^\eta}{2} + [\mathcal{H}_n^\eta(T) - \mathcal{H}_p^\eta(T)] \hbar^\xi.$$

Для вычисления $\mathcal{H}_w^\xi(T)$, $\mathcal{H}_e^\xi(T)$ используются следующие выражения: $\mathcal{H}_w^\xi(T) = \psi_{w,\eta} T_w$, $\mathcal{H}_e^\xi(T) = \psi_{e,\eta} T_e$; при этом компонента $\mathcal{H}_p^\eta(T) = 0$, так как $\psi_{p,\xi} = 0$. Проинтегрировав диссипативные члены по областям $S_P^{(\xi,\eta)+}$ и $S_P^{(\xi,\eta)-}$, имеем

$$\mathcal{D}_h^{(\xi,\eta)+}(T) \hbar^\xi \frac{h_n^\eta}{2} \approx \int_{S_P^{(\xi,\eta)+}} \mathcal{D}^{(\xi,\eta)}(T) d\Omega = [\mathcal{W}_{e^+}^\xi - \mathcal{W}_{w^+}^\xi] \frac{h_n^\eta}{2} + [\mathcal{W}_n^\eta - \mathcal{W}_{p^+}^\eta] \hbar^\xi, \quad (53)$$

$$\mathcal{D}_h^{(\xi, \eta)-}(T) \hbar^\xi \frac{h_s^\eta}{2} \approx \int_{S_P^{(\xi, \eta)-}} \mathcal{D}^{(\xi, \eta)}(T) d\Omega = [\mathcal{W}_{e^-}^\xi - \mathcal{W}_{w^-}^\xi] \frac{h_s^\eta}{2} + [\mathcal{W}_{P^-}^\eta - \mathcal{W}_s^\eta] \hbar^\xi. \quad (54)$$

Здесь величины с индексами P^+ , e^+ , w^+ принадлежат $S_P^{(\xi, \eta)+}$, а с индексами P^- , e^- , w^- располагаются в $S_P^{(\xi, \eta)-}$. Просуммировав (53) и (54), получим следующую аппроксимацию:

$$\mathcal{D}_h^{(\xi, \eta)}(T) \hbar^\xi \hbar^\eta = [\mathcal{W}_e^\xi - \mathcal{W}_w^\xi] \hbar^\eta + [\mathcal{W}_n^\eta - \mathcal{W}_s^\eta] \hbar^\xi + [\mathcal{W}_{P^-}^\eta - \mathcal{W}_{P^+}^\eta] \hbar^\xi.$$

Из условия Стефана (15) следует, что

$$\mathcal{W}_{P^-}^\eta - \mathcal{W}_{P^+}^\eta = \lambda \rho \xi_P v_{ph}.$$

Таким образом на границе раздела фаз аппроксимация диссипативных членов (28) дополняется слагаемым, описывающим выделение/поглощение теплоты при смене агрегатного состояния вещества.

Во внутренних точках сетки неявная разностная схема для уравнений теплопереноса имеет вид

$$\mathcal{T}_{h, \tau}^{(\xi, \eta)}(T) dS_P^{(\xi, \eta)} + \mathcal{K}_h^{(\xi, \eta)}(\widehat{\psi}, \widehat{T}) dS_P^{(\xi, \eta)} = \mathcal{D}_h^{(\xi, \eta)}(\widehat{T}) dS_P^{(\xi, \eta)}.$$

Благодаря тому, что аппроксимации условий на границе раздела фаз и границах областей согласованы с аппроксимациями соответствующих уравнений во внутренних узлах сетки, на разностном уровне выполнен закон сохранения энергии. Из выполнения дискретного аналога закона сохранения для квадрата искомой величины следует, что температура на протяжении всего расчёта ограничена в любой точке сетки. Данное обстоятельство исключает возможность возникновения в расчёте нелинейной вычислительной неустойчивости (nonlinear computational instability [14, 18]).

Заключение. Для двухфазной задачи Стефана в цилиндрической системе координат построена энергетически нейтральная консервативная разностная схема, в которой на разностном уровне выполняются дискретные аналоги законов сохранения завихрённости, кинетической и внутренней энергии. Показано, что разностный оператор, аппроксимирующий диссипативные члены в уравнениях Навье–Стокса и теплопереноса, является самосопряжённым и отрицательно определённым. В работе [11] показано, что преобразование системы координат, выполненное на дискретном уровне в построенной разностной схеме, позволяет получить консервативную разностную схему для задачи Стефана на подвижной сетке, согласованной с формой фронта кристаллизации. Таким образом, предложенная разностная схема наследует основные свойства исходной дифференциальной задачи как в неподвижной, так и в физической системе координат. Важно отметить, что рассмотренная разностная схема естественным образом обобщается на случай численного моделирования процесса кристаллизации многокомпонентного соединения [9].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Самарский А.А. Введение в теорию разностных схем. М., 1971.
2. Patankar S. Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. London, 1981.
3. Самарский А.А., Попов Ю.П. Разностные методы решения задач газовой динамики. М., 1971.
4. Тихонов А.Н., Самарский А.А. О разностных схемах для уравнений с разрывными коэффициентами // Докл. АН СССР. 1956. Т. 108. № 3. С. 393–396.
5. Тихонов А.Н., Самарский А.А. О сходимости разностных схем в классе разрывных коэффициентов // Докл. АН СССР. 1959. Т. 124. № 3. С. 529–532.
6. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Об однородных разностных схемах // Журн. вычислит. математики и мат. физики. 1961. Т. 1. № 1. С. 5–63.
7. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Об однородных разностных схемах // Докл. АН СССР. 1958. Т. 122. № 4. С. 562–566.

8. *Мажорова О.С., Попов Ю.П., Щерица О.В.* Консервативные разностные схемы для термодиффузионной задачи Стефана // Дифференц. уравнения. 2013. Т. 49. № 7. С. 897–905.
9. *Gusev A.O., Shcheritsa O.V., Mazhorova O.S.* Conservative finite volume strategy for investigation of solution crystal growth techniques // Computers & Fluids. 2020. V. 202. P. 104501.
10. *Landau H.G.* Heat conduction in a melting solid // J. of Appl. Math. 1950. V. 8. P. 81–94.
11. *Гусев А.О., Щерица О.В., Мажорова О.С.* К вопросу об эквивалентности разностных методов решения задачи Стефана на подвижных и фиксированных сетках // Дифференц. уравнения. 2021. Т. 57. № 7. С. 907–921.
12. *Флетчер К.* Вычислительные методы в динамике жидкости. Т. 2. М., 1991.
13. *Steger J.* Implicit finite-difference simulation of flow about arbitrary two-dimensional geometries // Amer. Inst. of Aeronaut. Astronaut. J. 1978. V. 16. № 7. P. 679–686.
14. *Arakawa A.* Computational design for long-term numerical integration of the equation of fluid motion: two dimensional incompressible flow // J. Comput. Phys. 1966. V. 1. P. 119–143.
15. *Самарский А.А.* Теория разностных схем. М., 1989.
16. *Lan C.W.* Newton's method for solving heat transfer, fluid flow and interface shapes in a floating molten zone // Int. J. Numer. Methods Fluids. 1994. V. 19. P. 41–65.
17. *Thom A.* The flow past circular cylinders at low speeds // Proc. Roy. Soc. London. Ser. A. 1933. V. 141. № 4. P. 651–669.
18. *Phillips N.* An Example of Non-linear Computational Instability. The Atmosphere and the Sea in Motion. New York, 1959. P. 501–504.

Институт прикладной математики
имени М.В. Келдыша РАН, г. Москва,

Поступила в редакцию 10.03.2022 г.
После доработки 10.03.2022 г.
Принята к публикации 25.05.2022 г.