

一維 Stefan 問題之有限差分解

邱靖宏* 黃皇男*

摘要

本文以有限差分法計算一維二相 Stefan 問題的數值解，文中分別採用顯式、Crank-Nicolson 與隱式差分法來進行，除推導數值計算的穩定條件外，並討論這三種方法對於此類移動邊界問題數值解的精確度以及計算效率等。由於隱式差分算法為無條件穩定，本文進一步採用此法，以模擬邊界是固定熱源之 Stefan 問題，而此熱源分別為單邊或雙邊週期時，週期與振幅對於冰水交界面移動的影響。

一、前言

隨著科學技術和工業快速發展，許多領域中不斷出現具有移動邊界 (moving boundary) 的問題，如物質結晶的成長控制、冰川的溶解 - 凝固，化學反應的氣體擴散... 等等。由於這類問題中都包含有待定的移動介面，而且介面形狀與位置的決定就是所求解的一部分，使此問題的求解比解一般的偏微分方程更難。這類移動邊界問題通常稱為 Stefan 問題，最早由 J. Stefan 在 1890 年提出 [1]，主要是探討冰在水中融解或是水固化結冰的問題。在一些文獻當中，Stefan 指出在一個半無窮 (semi-infinite) 的液體固化的過程中，其固化的邊界的速率是一固定速率，其溫度 u 可以表示成下列形式

$$u = A (e^{at-mx} - 1) / a$$

其中 A 、 a 與 m 均為常數，固化的速率 x/t 等於 a/m 。Stefan 在 1889 年提出了此問題的通解，1959 年 Carslaw 和 Jaeger 根據 Stefan 的結果提出了此問題的 Neumann 的解 [1, 2, 3]。

現在我們考慮 Stefan 問題中比較常見的例子 - 冰融解成水的例子。它是一個邊界會隨時間移動的熱傳導方程 (heat equation)，其邊界就是冰與水的交界面。我們的目的就是要觀察當冰融解成水時，水之溫度 $u_1(x, t)$ 隨著位置 x 和時間 t 的變化，並令 $u(x, t) = u_1(x, t)$ 。在時間 $t = 0$ ，溫度 $u_1(x, 0) = 0$ ， $x \in [0, \infty)$ 也就是整個區域都是攝氏零度的冰；而當 $t > 0$ 時，在 $x = 0$ 處有一個

*東海大學應用數學系

穩定熱源開始加熱，即 $u_1(0, t) = T_1$ ，則冰吸熱之後會開始融解成水，其中溶解成水的區域之溫度必須滿足熱傳導方程式。假設 $x = s(t)$ 是表示冰與水的交界面之方程式，此交界面（邊界）的移動（融化）必會滿足 $L\rho \frac{ds}{dt} = -K_1 u_{1x}$ ，且交界面溫度條件為 $u_1(s(t), t) = 0$ ，此條件稱為 *Stefan* 條件，其中係數 $\frac{K_1}{L\rho}$ 稱為 *Stefan* 數。

如果冰的初始溫度在融點以下，則熱傳導現象除了在水的區域會發生外，冰的區域也會發生，此類問題稱為兩相 (two phase) 問題。其中水的溫度為 $u_1(x, t)$ ，冰的溫度為 $u_2(x, t)$ ，並設

$$u(x, t) = \begin{cases} u_1(x, t), & x \in [0, s(t)], \\ u_2(x, t), & x \in [s(t), \infty). \end{cases}$$

在時間 $t = 0$ 時，還未加熱，溫度為冰的初始溫度 $u(x, 0) = T_2 < 0, \forall x \in [0, \infty)$ ，當在 $x = 0$ 處以一穩定熱源加熱時，即 $u_1(0, t) = T_1 > 0$ 。冰及水均會開始發生熱傳導現象，假設 $x = s(t)$ 是代表冰與水的交介面方程式，它會滿足 $L\rho \frac{ds}{dt} = -K_1 \frac{\partial u_1}{\partial x} + K_2 \frac{\partial u_2}{\partial x}$ ，同時介面溫度條件為 $u_1(s(t), t) = u_2(s(t), t) = 0$ ，此條件稱為 *Stefan* 條件，其中係數 $\frac{K_1}{L\rho}$ 與 $\frac{K_2}{L\rho}$ 并稱為 *Stefan* 數。對應之數學模型如下：

$$\begin{cases} \frac{\partial u_1}{\partial t} = k_1 \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2}, & 0 < x < s(t), \\ -K_1 \frac{\partial u_1}{\partial x} + K_2 \frac{\partial u_2}{\partial x} = L\rho \frac{ds}{dt}, & x = s(t), \\ \frac{\partial u_2}{\partial t} = k_2 \frac{\partial^2 u_2}{\partial x^2}, & x > s(t), \\ u_1(0, t) = T_1, & t \geq 0, \\ u_1(s(t), t) = u_2(s(t), t) = 0, & t \geq 0, \\ u_2(\infty, t) = T_\infty, & t \geq 0, \\ u_1(x, 0) = T_{1\text{initial}}(x), \\ u_2(x, 0) = T_{\infty\text{initial}}(x), \end{cases}$$

其解析解為

$$\begin{cases} u_1 = T_1 \left(1 - \frac{\operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{k_1 t}}\right)}{\operatorname{erf}\left(\frac{\gamma}{2\sqrt{k_1}}\right)} \right), \\ u_2 = T_\infty \left(1 - \frac{\operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{k_2 t}}\right)}{\operatorname{erfc}\left(\frac{\gamma}{2\sqrt{k_2}}\right)} \right), \\ s(t) = \gamma\sqrt{t}, \end{cases}$$

其中 γ 為下列方程式的根

$$\frac{T_1 K_1 e^{-\frac{\gamma^2}{4k_1}}}{\sqrt{\pi k_1} \operatorname{erf}\left(\frac{\gamma}{2\sqrt{k_1}}\right)} + \frac{T_\infty K_2 e^{-\frac{\gamma^2}{4k_2}}}{\sqrt{\pi k_2} \operatorname{erfc}\left(\frac{\gamma}{2\sqrt{k_2}}\right)} = \frac{L\rho\gamma}{2}$$

若 $T_\infty = 0$ 即可簡化此二相問題成為單相 (one phase) 問題，其數學模型亦對應簡化如下：

$$\begin{cases} \frac{\partial u_1}{\partial t} = k_1 \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2}, & 0 < x < s(t), \\ -K_1 \frac{\partial u_1}{\partial x} = L\rho \frac{ds}{dt}, & x = s(t), \\ u_1(0, t) = T_1, & t \geq 0, \\ u_1(x, 0) = T_{1\text{initial}}(x), \\ u_1(s(t), t) = 0, & t \geq 0, \end{cases}$$

其解析解為

$$u_1 = T_1 - \frac{T_1}{\operatorname{erf}\left(\frac{\gamma}{2\sqrt{k_1}}\right)} \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{k_1 t}}\right),$$

其中 γ 為下列方程式的根

$$\frac{T_1 K_1 e^{-\frac{\gamma^2}{4k_1}}}{\sqrt{\pi k_1} \operatorname{erf}\left(\frac{\gamma}{2\sqrt{k_1}}\right)} = \frac{L\rho\gamma}{2}$$

其中 K_1 與 K_2 分別為水與冰的熱傳導係數 (heat conductivity)， ρ 為水的密度 (density)， L 為潛熱 (latent heat)，以及 $k_1 = \frac{K_1}{\rho c_1}$ 與 $k_2 = \frac{K_2}{\rho c_2}$ ，其中 c_1 與 c_2 分別為水與冰的比熱 (specific heat)。

針對此問題目前已有利用許多數值方法求解，例如有限差分法 (the finite difference method)，變時間步長有限差分法 (finite difference method with variable time step)[4]，可變網格有限差分法 (finite difference method with variable space grid)[5]，有限元素法 (finite element method)，坐標變換 (coordinate transformation)[3]，enthalpy (fixed domain) method[3, 6]，method of lines (in time) with invariant imbedding[3] ... 等。此問題求解的難度在於邊界部分，故如何有效解決邊界部分的問題，是一個重要的課題 [7, 8]。一般常見的 Stefan 問題以單邊固定熱源為主 [9]，本文主要探討在有限空間內，當兩端固定熱源或週期熱源 [10] 時，對交界面 $s(t)$ 的影響。

二、數值方法

本節回顧本文所需的數值方法。

2.1 有限差分法

假設 f 是一個可微分實數值函數，令 $x \in \mathbb{R}$ 且 $\Delta x > 0$ ，則我們可以得到 f 一階導數的差分近似公式：

$$f'(x) = \begin{cases} \frac{f(x+\Delta x)-f(x)}{\Delta x} + O(\Delta x) & : \text{前項差分} \\ \frac{f(x)-f(x-\Delta x)}{\Delta x} + O(\Delta x) & : \text{後項差分} \\ \frac{f(x+\Delta x)-f(x-\Delta x)}{2\Delta x} + O((\Delta x)^2) & : \text{中央差分} \end{cases} \quad (2.1)$$

然而在使用數值方法時，我們必須確保最低誤差階數，若要求 $O((\Delta x)^2)$ 以上，且 f 的三階導數存在，則一階導數近似的前項與後項差分公式必須修正如下：

$$f'(x) = \begin{cases} \frac{-f(x+2\Delta x)+4f(x+\Delta x)-3f(x)}{2\Delta x} + O((\Delta x)^2) & : \text{前項差分} \\ \frac{3f(x)-4f(x-\Delta x)+f(x-2\Delta x)}{2\Delta x} + O((\Delta x)^2) & : \text{後項差分} \end{cases}$$

接下來我們也可使用 Taylor Series 來推導出函數 f 的二階導數近似公式：

$$f''(x) = \begin{cases} \frac{-f(x+3\Delta x)+4f(x+2\Delta x)-5f(x+\Delta x)+2f(x)}{(\Delta x)^2} + O((\Delta x)^2) & : \text{前項差分} \\ \frac{-2f(x)+5f(x-\Delta x)-4f(x-2\Delta x)+f(x-3\Delta x)}{(\Delta x)^2} + O((\Delta x)^2) & : \text{後項差分} \\ \frac{f(x+\Delta x)-2f(x)+f(x-\Delta x)}{(\Delta x)^2} + O((\Delta x)^2) & : \text{中央差分} \end{cases} \quad (2.2)$$

當 f 的四階導數存在時，我們可以很容易驗證近似誤差均為 $O((\Delta x)^2)$ 。

2.2 Lagrange 插值公式

假設 $f(x)$ 定義在區間 $I = [a, b]$ 是一個實數值函數，且令 x_0, x_1, \dots, x_n 為區間 I 上 $(n+1)$ 個相異的點：

$$a < x_i < b, \quad x_i \neq x_j, \quad 0 \leq i, j \leq n, \quad i \neq j,$$

且令區間長為 $\Delta x = \max_{1 \leq i \leq n} \{ |x_{i+1} - x_i| \}$ ，則我們可以建構一個多項式函數 $P_n(x)$ 通過 $f(x_i)$, $0 \leq i \leq n$ ，即 $P_n(x_i) = f(x_i)$, $0 \leq i \leq n$ ，並估算其誤差。定義一個 n 階多項式：

$$l_i(x) = \prod_{j=1, j \neq i}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$$

則 $\ell(x)$ 滿足下列性質: $\ell_i(x_j) = \delta_{ij}$, 其中當 $i = j$ 時 $\delta_{ij} = 1$, 而當 $i \neq j$ 時 $\delta_{ij} = 0$ 。如此可以定義多項式如下:

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^n f(x_i) \cdot \ell_i(x)$$

則 P_n 即為通過 $f(x_i)$, $0 \leq i \leq n$ 的 n 階多項式。

定理 1. [Lagrange 插值多項式誤差估計] 令 $f(x) \in C^{n+1}[a, b]$, 且 $P_n(x)$ 為通過 $\{(x_i, f(x_i)) : 0 \leq i \leq n\}$ 的插值多項式, 則在任意給定的點 $x \in [a, b]$, 存在一個 c_x 在包含於 x, x_0, x_1, \dots, x_n 的最小區間內, 使得

$$f(x) - P_n(x) = \frac{1}{(n+1)!} \ell(x) f^{(n+1)}(c_x) \quad (2.3)$$

其中 $\ell(x) = (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n)$ 。

由此定理可知 $|f(x) - P_n(x)| \leq O((\Delta x)^n)$ 。接下來我們考慮通過三個點與四個點的插值函數。當 $n = 3$ 的情形下, 三個插值點為 $(x_0, f(x_0))$ 、 $(x_1, f(x_1))$ 、 $(x_2, f(x_2))$, 則

$$\begin{aligned} P_3(x) &= \ell_0(x) \cdot f(x_0) + \ell_1(x) \cdot f(x_1) + \ell_2(x) \cdot f(x_2), \\ \frac{d}{dx} P_3(x) &= \ell'_0(x) \cdot f(x_0) + \ell'_1(x) \cdot f(x_1) + \ell'_2(x) \cdot f(x_2), \\ \frac{d^2}{dx^2} P_3(x) &= \ell''_0(x) \cdot f(x_0) + \ell''_1(x) \cdot f(x_1) + \ell''_2(x) \cdot f(x_2), \end{aligned} \quad (2.4)$$

其中

$$\begin{aligned} \ell_0(x) &= \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)}, & \ell_1(x) &= \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)}, & \ell_2(x) &= \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}, \\ \ell'_0(x) &= \frac{2x - (x_1 + x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)}, & \ell'_1(x) &= \frac{2x - (x_0 + x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)}, & \ell'_2(x) &= \frac{2x - (x_0 + x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}, \\ \ell''_0(x) &= \frac{2}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)}, & \ell''_1(x) &= \frac{2}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)}, & \ell''_2(x) &= \frac{2}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}, \end{aligned}$$

所以

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} P_3(x) &\approx \frac{2x - (x_1 + x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} f(x_0) + \frac{2x - (x_0 + x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} f(x_1) + \frac{2x - (x_0 + x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} f(x_2) \\ \frac{d^2}{dx^2} P_3(x) &\approx 2 \left(\frac{f(x_0)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} + \frac{f(x_1)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} + \frac{f(x_2)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} \right) \end{aligned}$$

且誤差為 $|f'(x) - P_3'(x)| \leq O((\Delta x)^2)$ 與 $|f''(x) - P_3''(x)| \leq O(\Delta x)$ 。

當 $n = 4$ 的情形下，四個插值點為 $(x_0, f(x_0))$, $(x_1, f(x_1))$, $(x_2, f(x_2))$, $(x_3, f(x_3))$ 。則

$$\begin{aligned} P_4(x) &= \ell_0(x) \cdot f(x_0) + \ell_1(x) \cdot f(x_1) + \ell_2(x) \cdot f(x_2) + \ell_3(x) \cdot f(x_3) \\ \frac{d}{dx} P_4(x) &= \ell'_0(x) \cdot f(x_0) + \ell'_1(x) \cdot f(x_1) + \ell'_2(x) \cdot f(x_2) + \ell'_3(x) \cdot f(x_3) \\ \frac{d^2}{dx^2} P_4(x) &= \ell''_0(x) \cdot f(x_0) + \ell''_1(x) \cdot f(x_1) + \ell''_2(x) \cdot f(x_2) + \ell''_3(x) \cdot f(x_3) \end{aligned} \quad (2.5)$$

其中

$$\begin{aligned} \ell_0(x) &= \frac{(x-x_1)(x-x_2)(x-x_3)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)(x_0-x_3)}, \ell_1(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)(x_1-x_3)} \\ \ell_2(x) &= \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)(x_2-x_3)}, \ell_3(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_0)(x_3-x_1)(x_3-x_2)} \\ \ell'_0(x) &= \frac{(x-x_2)(x-x_3) + (x-x_1)(x-x_3) + (x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)(x_0-x_3)} \\ \ell'_1(x) &= \frac{(x-x_2)(x-x_3) + (x-x_0)(x-x_3) + (x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)(x_1-x_3)} \\ \ell'_2(x) &= \frac{(x-x_1)(x-x_3) + (x-x_0)(x-x_3) + (x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)(x_2-x_3)} \\ \ell'_3(x) &= \frac{(x-x_1)(x-x_2) + (x-x_0)(x-x_2) + (x-x_0)(x-x_1)}{(x_3-x_0)(x_3-x_1)(x_3-x_2)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \ell''_0(x) &= \frac{2[(x-x_1) + (x-x_2) + (x-x_3)]}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)(x_0-x_3)}, \ell''_1(x) = \frac{2[(x-x_0) + (x-x_2) + (x-x_3)]}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)(x_1-x_3)} \\ \ell''_2(x) &= \frac{2[(x-x_0) + (x-x_1) + (x-x_3)]}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)(x_2-x_3)}, \ell''_3(x) = \frac{2[(x-x_0) + (x-x_1) + (x-x_2)]}{(x_3-x_0)(x_3-x_1)(x_3-x_2)} \end{aligned}$$

誤差為 $|f'(x) - P_4'(x)| \leq O((\Delta x)^3)$ 與 $|f''(x) - P_4''(x)| \leq O((\Delta x)^2)$ 。

三、Stefan 問題的離散化

接下來我們考慮在有限區間 $[0, x_f]$ 內，使用有限差分法來求解此數學模型的數值解，並個別討論單相及兩相問題的離散化。

3.1 一維單相的 Stefan 問題

圖1 表示某個時間點下，冰跟水融解的狀態。圖2 為將空間時間均勻分割後，網格點的狀態其交界面 $s(t)$ 的位置。在遠離 $s(t)$ 時，其溫度 u_m^n 可以由熱傳導方程式經離散化後得到近似，在靠近 $s(t)$ 時，因為網格非均勻，故需另外討論之。

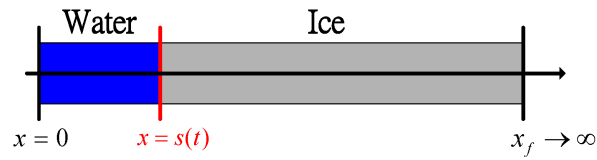


圖 1: 冰水融解示意

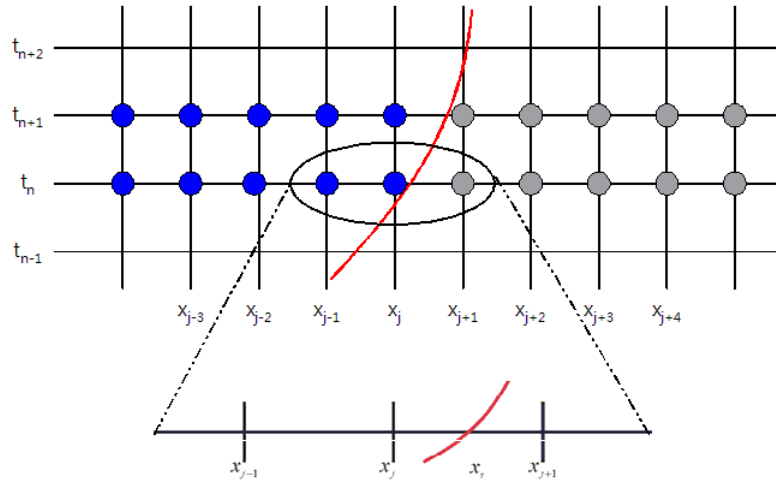


圖 2: 冰水融解網格示意圖

3.1.1 熱傳導方程

對於 Stefan 問題中水的部份，即熱傳導方程

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} = k_1 \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} \quad (3.1)$$

我們使用有限差分法來求解。因為此 PDE 會隨著空間變數 x 和時間變數 t 而改變，所以我們對於時間 t 使用 (2.1) 中之前項差分，對空間 x 使用 (2.2) 之中央差分，並將空間 $[0, x_f]$ 和時間 $[0, t_f]$ 作均勻分割 N_x 及 N_t 等份，即 $0 = x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_{N_x} = x_f$ ， $x_1 - x_0 = x_2 - x_1 = \cdots = x_{N_x} - x_{N_x-1} = \Delta x$ 且 $0 = t_0 < t_1 < \cdots < t_{N_t} = t_f$ ， $t_1 - t_0 = t_2 - t_1 = \cdots = t_{N_t} - t_{N_t-1} = \Delta t$ 。並在此網格上溫度函數的近似值記為 u_m^n 。在任何時間 $n\Delta t$ 時，交界面將會落在兩個相鄰的網格點之間，不失一般性，假設落在 $j_n\Delta x$ 和 $(j_n + 1)\Delta x$ 之間，所以我們必須討論邊界的兩種情況，並將交界面 $x = s(t_n)$ 近似值記為 x_s^n 或 s_n 。

當 $0 < x < s_n$ ，其方程式為熱傳導方程。由有限差分法，我們可以得到

$$\begin{aligned}(u_t)_m^n &= \frac{u_m^{n+1} - u_m^n}{\Delta t} + O(\Delta t) \\ (u_{xx})_m^n &= (1 - \theta) \frac{u_{m+1}^n - 2u_m^n + u_{m-1}^n}{(\Delta x)^2} + \theta \frac{u_{m+1}^{n+1} - 2u_m^{n+1} + u_{m-1}^{n+1}}{(\Delta x)^2} + O(\Delta x^2)\end{aligned}$$

其中 $1 \leq m \leq N_x - 1$ ， $1 \leq n \leq N_t - 1$ 。

如果 $\theta = 0$ ，為顯式有限差分， $\theta = 1$ ，為隱式有限差分， $\theta = \frac{1}{2}$ ，則為 *Crank-Nicolson* 法。將上式的結果代入方程式 (3.1)，當 $t > 0$ 時，令 $\lambda_1 = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} k_1$

$$\frac{u_m^{n+1} - u_m^n}{\Delta t} = k_1 \cdot \left\{ (1 - \theta) \frac{u_{m+1}^n - 2u_m^n + u_{m-1}^n}{(\Delta x)^2} + \theta \frac{u_{m+1}^{n+1} - 2u_m^{n+1} + u_{m-1}^{n+1}}{(\Delta x)^2} \right\}$$

即

$$u_m^{n+1} - u_m^n = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} k_1 \cdot [(1 - \theta)(u_{m+1}^n - 2u_m^n + u_{m-1}^n) + \theta(u_{m+1}^{n+1} - 2u_m^{n+1} + u_{m-1}^{n+1})]$$

所以

$$-\lambda_1 \theta u_{m-1}^{n+1} + (2\lambda_1 \theta + 1) u_m^{n+1} - \lambda_1 \theta u_{m+1}^{n+1} = \lambda_1 (1 - \theta) u_{m-1}^n + (1 - 2\lambda_1 (1 - \theta)) u_m^n + \lambda_1 (1 - \theta) u_{m+1}^n \quad (3.2)$$

假設 x_s^n 落在 x_{j_n} 與 x_{j_n+1} 之間，即 $x_{j_n} < x_s^n < x_{j_n+1}$ ，在此情況下，當 $m < j_n$ ，我們可以使用中央差分，但是當 $m = j_n$ ，因為其網格非均勻網格，所以利用 x_{j_n-1} ， x_{j_n} 與 x_s^n 三點做 *Lagrange* 插值 (2.4) 來近似 $(u_{xx})_{j_n}^n$ 和 $(u_{xx})_{j_n}^{n+1}$ ，假設 $x_s^n - x_{j_n} = p_n \Delta x$ ，如圖 2，且已知

$u_s^n = 0, \forall n$, 則

$$\begin{aligned}(u_{xx})_{j_n}^n &= \frac{1}{(\Delta x)^2} \left[\frac{2}{1+p_n} u_{j_n-1}^n - \frac{2}{p_n} u_{j_n}^n \right] \\ (u_{xx})_{j_n}^{n+1} &= \frac{1}{(\Delta x)^2} \left[\frac{2}{1+p_{n+1}} u_{j_n-1}^{n+1} - \frac{2}{p_{n+1}} u_{j_n}^{n+1} \right]\end{aligned}$$

將上式代入熱傳導方程

$$\begin{aligned}\frac{u_{j_n}^{n+1} - u_{j_n}^n}{\Delta t} &= k \left\{ (1-\theta) \frac{1}{(\Delta x)^2} \left[\frac{2}{1+p_n} u_{j_n-1}^n - \frac{2}{p_n} u_{j_n}^n \right] \right. \\ &\quad \left. + \theta \frac{1}{(\Delta x)^2} \left[\frac{2}{1+p_{n+1}} u_{j_n-1}^{n+1} - \frac{2}{p_{n+1}} u_{j_n}^{n+1} \right] \right\}\end{aligned}$$

經移項整理後

$$\frac{-2\lambda\theta}{1+p_{n+1}} u_{j_n-1}^{n+1} + \left(1 + \frac{2\lambda\theta}{p_{n+1}} \right) u_{j_n}^{n+1} = \frac{2\lambda(1-\theta)}{1+p_n} u_{j_n-1}^n + \left(1 - \frac{2\lambda(1-\theta)}{p_n} \right) u_{j_n}^n \quad (3.3)$$

3.1.2 移動邊界

考慮 Stefan 條件, $L\rho \frac{ds(t)}{dt} = -K_1 u_x(x, t)$, $x = s(t)$, 對 $\frac{ds(t)}{dt}$ 使用 (2.1) 之前項差分公式, 則

$$L\rho \frac{s_{n+1} - s_n}{\Delta t} = -K_1 \cdot (u_x)_s^n$$

因爲 x_s^n 落在 x_{j_n} 與 $x_{j_{n+1}}$ 之間, 即 $x_{j_n} < x_s^n < x_{j_{n+1}}$, 由 (2.4), 得

$$\frac{d}{dx} P_3(x) = \frac{2x - (x_{j_n} + x_s^n)}{(x_{j_n-1} - x_{j_n})(x_{j_n-1} - x_s^n)} f(x_0) + \frac{2x - (x_{j_{n-1}} + x_s^n)}{(x_{j_n} - x_{j_{n-1}})(x_{j_n} - x_s^n)} f(x_1) + \frac{2x - (x_{j_{n-1}} + x_{j_n})}{(x_s^n - x_{j_{n-1}})(x_s^n - x_{j_n})} f(x_2)$$

且 $x_{j_n} - x_{j_{n-1}} = \Delta x$, $x_s^n - x_{j_n} = p_n \Delta x$, 則

$$\begin{aligned}(u_x)_s^n &= \frac{x_s^n - x_{j_n}}{(x_{j_{n-1}} - x_{j_n})(x_{j_{n-1}} - x_s^n)} u_{j_{n-1}}^n + \frac{x_s^n - x_{j_{n-1}}}{(x_{j_n} - x_{j_{n-1}})(x_{j_n} - x_s^n)} u_{j_n}^n + \frac{2x_s^n - (x_{j_{n-1}} + x_{j_n})}{(x_s^n - x_{j_{n-1}})(x_s^n - x_{j_n})} u_s^n \\ &= \frac{1}{\Delta x} \left[\frac{p_n}{1+p_n} u_{j_{n-1}}^n - \frac{1+p_n}{p_n} u_{j_n}^n + \frac{1+2p_n}{p_n(1+p_n)} u_s^n \right]\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(u_x)_s^{n+1} &= \frac{x_s^{n+1} - x_{j_n}}{(x_{j_n-1} - x_{j_n})(x_{j_n-1} - x_s^{n+1})} u_{j_n-1}^{n+1} + \frac{x_s^{n+1} - x_{j_n-1}}{(x_{j_n} - x_{j_n-1})(x_{j_n} - x_s^{n+1})} u_{j_n}^{n+1} + \frac{2x_s^{n+1} - (x_{j_n-1} + x_{j_n})}{(x_s^{n+1} - x_{j_n-1})(x_s^{n+1} - x_{j_n})} u_s^{n+1} \\
&= \frac{1}{\Delta x} \left[\frac{p_{n+1}}{1+p_{n+1}} u_{j_n-1}^{n+1} - \frac{1+p_{n+1}}{p_{n+1}} u_{j_n}^{n+1} + \frac{1+2p_{n+1}}{p_{n+1}(1+p_{n+1})} u_s^{n+1} \right]
\end{aligned}$$

所以

$$L\rho \frac{s_{n+1} - s_n}{\Delta t} = -K_1 \frac{1}{\Delta x} \left\{ (1-\theta) \left[\frac{p_n}{1+p_n} u_{j_n-1}^n - \frac{1+p_n}{p_n} u_{j_n}^n \right] + \theta \left[\frac{p_{n+1}}{1+p_{n+1}} u_{j_n-1}^{n+1} - \frac{1+p_{n+1}}{p_{n+1}} u_{j_n}^{n+1} \right] \right\}$$

藉由 Stefan 條件，若我們能夠計算出 p_n ，則冰水的交界面就可以得知，即 $s_n = x_{j_n} + p_n \Delta x = (j_n + p_n) \Delta x$ ，因為 $p_{n+1} \Delta x = s_{n+1} - x_{j_n}$ 和 $p_n \Delta x = s_n - x_{j_n}$ ，因此

$$s_{n+1} - s_n = (p_{n+1} - p_n) \Delta x = -\frac{K_1}{L\rho} \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\frac{p_n}{1+p_n} u_{j_n-1}^n + \frac{1+p_n}{p_n} u_{j_n}^n \right)$$

故

$$L\rho \frac{(p_{n+1} - p_n) \Delta x}{\Delta t} = -K_1 \frac{1}{\Delta x} \left\{ (1-\theta) \left[\frac{p_n}{1+p_n} u_{j_n-1}^n - \frac{1+p_n}{p_n} u_{j_n}^n \right] + \theta \left[\frac{p_{n+1}}{1+p_{n+1}} u_{j_n-1}^{n+1} - \frac{1+p_{n+1}}{p_{n+1}} u_{j_n}^{n+1} \right] \right\}$$

即

$$p_{n+1} = p_n + \frac{-K_1}{L\rho} \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \left\{ (1-\theta) \left[\frac{p_n}{1+p_n} u_{j_n-1}^n - \frac{1+p_n}{p_n} u_{j_n}^n \right] + \theta \left[\frac{p_{n+1}}{1+p_{n+1}} u_{j_n-1}^{n+1} - \frac{1+p_{n+1}}{p_{n+1}} u_{j_n}^{n+1} \right] \right\}$$

3.1.3 離散化之數學模型

由 §3.1.1 與 §3.1.2 兩小節，冰水融解問題的數學模型可以用下列表示：假設 $x_{j_n} < x_s^n < x_{j_{n+1}}$ ，則 $u_0^{n+1} = u_s^{n+1} = 0$ ， $\forall n$ ，以及

$$\frac{-2\lambda_1\theta}{1+p_{n+1}} u_{j_n-1}^{n+1} + \left(1 + \frac{2\lambda_1\theta}{p_{n+1}} \right) u_{j_n}^{n+1} = \frac{2\lambda_1(1-\theta)}{1+p_n} u_{j_n-1}^n + \left(1 - \frac{2\lambda_1(1-\theta)}{p_n} \right) u_{j_n}^n,$$

且當 $1 \leq m \leq j_n - 1$ 時，

$$-\lambda_1\theta u_{m-1}^{n+1} + (2\lambda_1\theta + 1) u_m^{n+1} - \lambda_1\theta u_{m+1}^{n+1} = \lambda_1(1-\theta) u_{m-1}^n + (1 - 2\lambda_1(1-\theta)) u_m^n + \lambda_1(1-\theta) u_{m+1}^n,$$

將此結果用矩陣的方式表示，並令 $a_1 = \lambda_1 \theta$ 、 $b_1 = \lambda_1 (1 - \theta)$ 以簡化表示式：

$$\begin{aligned}
 & \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -a_1 & 1+2a_1 & -a_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -a_1 & 1+2a_1 & -a_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & -a_1 & 1+2a_1 & -a_1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{-2a_1}{1+p_{n+1}} & 1 + \frac{2a_1}{p_{n+1}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_0^{n+1} \\ u_1^{n+1} \\ u_2^{n+1} \\ \vdots \\ u_{j_n-1}^{n+1} \\ u_{j_n}^{n+1} \end{bmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ b_1 & 1-2b_1 & b_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & b & 1-2b_1 & b_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & b_1 & 1-2b_1 & b_1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{2b_1}{1+p_n} & 1 - \frac{2b_1}{p_n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_0^n \\ u_1^n \\ u_2^n \\ \vdots \\ u_{j_n-1}^n \\ u_{j_n}^n \end{bmatrix}
 \end{aligned}$$

由 Stefan 條件，我們可以估計出 p_{n+1} ，很顯然地，若 $p_{n+1} < 1$ (圖3(a))，代表 s_{n+1} 與 s_n 在同一個區間內 (x_{j_n}, x_{j_n+1}) ，反之，若 $p_{n+1} > 1$ (圖3(b))，表示 s_{n+1} 落在 (x_{j_n+1}, x_{j_n+2}) 個區間內。即交界面 s_{n+1} 會越過 x_{j_n} ，此時 x_{j_n} 會由原本的冰轉換成水。此時 x_{j_n} 的溫度，需由 Lagrange 插值多項式 (2.4) 來估計

$$u_{j_n+1}^{n+1} = \frac{1-p_{n+1}}{1+p_{n+1}} u_{j_n-1}^{n+1} - \frac{2(1-p_{n+1})}{p_{n+1}} u_{j_n}^{n+1}$$

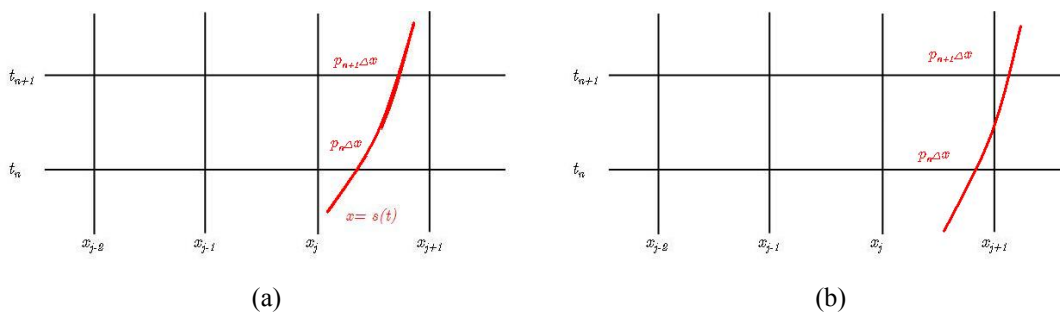


圖 3: $s(t_n)$ 與 $s(t_{n+1})$ 可能的情况

3.1.4 穩定性

利用 Neumann (Fourier) 分析來驗證此離散化後系統的穩定性條件, 令 $u_m^n = e^{i\beta x_m} e^{\alpha t_n} = e^{i\beta(m\Delta x)} e^{\alpha(n\Delta t)} = e^{i\beta(m\Delta x)} \cdot \xi^n$, $\xi = e^{\alpha\Delta t}$, 並且將 u_m^n 代入 (3.2), 則

$$-\lambda_1 \theta u_{m-1}^{n+1} + (2\lambda_1 \theta + 1) u_m^{n+1} - \lambda_1 \theta u_{m+1}^{n+1} = \lambda_1 (1 - \theta) u_{m-1}^n + (1 - 2\lambda_1 (1 - \theta)) u_m^n + \lambda_1 (1 - \theta) u_{m+1}^n$$

即

$$e^{i\beta m \Delta x} \xi^{n+1} [-\lambda_1 \theta (e^{i\beta \Delta x} + e^{-i\beta \Delta x} - 2) + 1] = e^{i\beta m \Delta x} \xi^n [\lambda_1 (1 - \theta) (e^{i\beta \Delta x} + e^{-i\beta \Delta x} - 2) + 1]$$

即

$$\left[4\lambda_1 \theta \sin^2 \left(\frac{\beta \Delta x}{2} \right) + 1 \right] \xi = 1 - 4\lambda_1 (1 - \theta) \sin^2 (\beta \Delta x)$$

所以

$$\xi = \frac{1 - 4\lambda_1 (1 - \theta) \sin^2 (\beta \Delta x)}{4\lambda_1 \theta \sin^2 \left(\frac{\beta \Delta x}{2} \right) + 1}$$

若 $|\xi| < 1$, 此系統將會穩定, 所以

$$\left| \frac{1 - 4\lambda_1 (1 - \theta) \sin^2 (\beta \Delta x)}{4\lambda_1 \theta \sin^2 \left(\frac{\beta \Delta x}{2} \right) + 1} \right| < 1 \quad \text{即} \quad -1 < \frac{1 - 4\lambda_1 (1 - \theta) \sin^2 (\beta \Delta x)}{4\lambda_1 \theta \sin^2 \left(\frac{\beta \Delta x}{2} \right) + 1} < 1$$

故

$$-1 - 2\lambda_1 \theta \sin^2 \left(\frac{\beta \Delta x}{2} \right) < -2\lambda_1 (1 - \theta) \sin^2 \left(\frac{\beta \Delta x}{2} \right) < 2\lambda_1 \theta \sin^2 \left(\frac{\beta \Delta x}{2} \right)$$

以下分成兩種情況討論:

情形 1: 考慮上述不等式左邊 $-1 - 2\lambda_1 \theta \sin^2 \left(\frac{\beta \Delta x}{2} \right) < -2\lambda_1 (1 - \theta) \sin^2 \left(\frac{\beta \Delta x}{2} \right)$, 即

$$-1 - 2\lambda_1 \theta \sin^2 \left(\frac{\beta \Delta x}{2} \right) < -2\lambda_1 (1 - \theta) \sin^2 \left(\frac{\beta \Delta x}{2} \right) \quad \text{即} \quad 2[\lambda_1 (1 - \theta) - \lambda_1 \theta] \sin^2 \left(\frac{\beta \Delta x}{2} \right) < 1$$

因此 $2\lambda_1(1-2\theta) < 1$ 則可得

$$\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} < \frac{1}{2(1-2\theta)k_1}$$

由於 $\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} > 0$, 所以 $\frac{1}{2(1-2\theta)k_1} > 0 \Rightarrow 0 \leq \theta < \frac{1}{2}$ 。

情形 2: 考慮不等式右邊 $-2\lambda_1(1-\theta)\sin^2\left(\frac{\beta\Delta x}{2}\right) < 2\lambda_1\theta\sin^2\left(\frac{\beta\Delta x}{2}\right)$, 即

$$-2\lambda_1(1-\theta)\sin^2\left(\frac{\beta\Delta x}{2}\right) < 2\lambda_1\theta\sin^2\left(\frac{\beta\Delta x}{2}\right) \quad \text{即} \quad [2\lambda_1\theta + 2\lambda_1(1-\theta)]\sin^2\left(\frac{\beta\Delta x}{2}\right) > 0$$

因此 $2\lambda_1\theta + 2\lambda_1(1-\theta) > 0$ 故得 $2\lambda_1 > 0$ 。因為 $\lambda_1 = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}k_1$ 且 $\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}, k_1 > 0$, 所以 $2\lambda_1 > 0$ 恆成立。

因此, 其穩定性條件整理可得以下定理:

定理 2. *Stefan* 單相問題經有限差分離散化後, 其穩定性條件為:

$$\begin{cases} \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} < \frac{1}{2(1-2\theta)k_1} & , 0 \leq \theta < \frac{1}{2} \\ \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} : \text{無條件限制} & , \frac{1}{2} \leq \theta \leq 1 \end{cases}$$

3.2 一維兩相的 Stefan 問題

兩相問題為單相問題的推廣, 考慮初始溫度為非融解溫度時, 熱源對於移動邊界的影響。接下來將以水的區域、冰的區域、鄰近 $s(t)$ 的區域與 Stefan 條件四個部分做離散化。考慮在有限區間 $[0, x_f]$ 及時間 $[0, t_f]$ 內, 對空間與時間分別均勻分割 N_x 與 N_t 等份。

3.2.1 熱傳導方程

不失一般性, 假設 $x_{j_n} < x_s^n < x_{j_n+1}$, 而會發生熱傳導的現象有兩個部分: 一是水的區域, 另一個是冰的區域。因為 Stefan 條件的關係會使得交界面移動, 而且我們使用均勻網格來分割, 所以在交界面會有兩種狀況, 導致在交界面附近的熱傳導方程近似方式會不一樣。

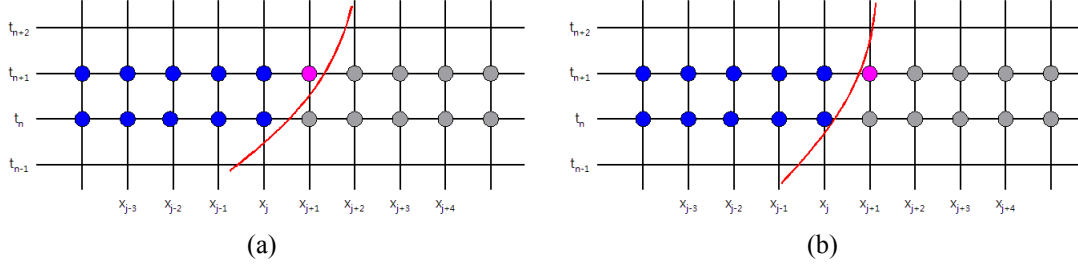


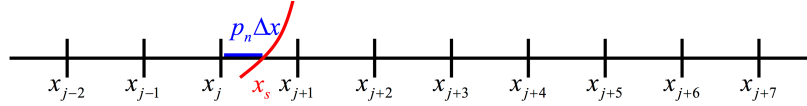
圖 4: 兩相問題網格點圖

在圖 4 兩種情況中，左圖 (a) 為水的區域，我們使用的數值方法與一維單相的方法一樣，如下：

$$-\lambda_1 \theta u_{m-1}^{n+1} + (2\lambda_1 \theta + 1) u_m^{n+1} - \lambda_1 \theta u_{m+1}^{n+1} = \lambda_1 (1 - \theta) u_{m-1}^n + (1 - 2\lambda_1 (1 - \theta)) u_m^n + \lambda_1 (1 - \theta) u_{m+1}^n, \quad 1 \leq m \leq j_n - 1 \quad (3.4)$$

$$\frac{-2\lambda_1 \theta}{1 + p_{n+1}} u_{j_n-1}^{n+1} + \left(1 + \frac{2\lambda_1 \theta}{p_{n+1}}\right) u_{j_n}^{n+1} = \frac{2\lambda_1 (1 - \theta)}{1 + p_n} u_{j_n-1}^n + \left(1 - \frac{2\lambda_1 (1 - \theta)}{p_n}\right) u_{j_n}^n, \quad m = j_n \quad (3.5)$$

其中 $\lambda_1 = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} k_1$ 。

圖 5: 鄰近 $s(t)$ 之網格點示意圖

右圖 (b) 冰的部分，由圖 5 我們可以觀察到 $x_{j_n+1} - x_s^n = (1 - p_n) \Delta x$ ，當 $m \geq j_n + 2$ 時， $x_{m+1} - x_m = \Delta x$ ，為均勻網格，此部分恰巧與水的部分相反。故可以在 $j_n + 2 < m < N_x - 1$ ，對空間項使用 (2.2) 之二階導數的中央差分，時間項使用 (2.1) 之一階導數的中央差分

$$(u_t)_m^n = \frac{u_m^{n+1} - u_m^n}{\Delta t}, \quad j_n + 3 \leq m \leq N_x - 1, \quad 0 < n < N_t - 1$$

$$(u_{xx})_m^n = (1 - \theta) \frac{u_{m+1}^n - 2u_m^n + u_{m-1}^n}{(\Delta x)^2} + \theta \frac{u_{m+1}^{n+1} - 2u_m^{n+1} + u_{m-1}^{n+1}}{(\Delta x)^2}, \quad j_n + 3 \leq m \leq N_x - 1, \quad 0 < n \leq N_t - 1$$

即

$$\frac{u_{m+1}^{n+1} - u_m^n}{\Delta t} = k_2 \left\{ (1 - \theta) \frac{u_{m+1}^n - 2u_m^n + u_{m-1}^n}{(\Delta x)^2} + \theta \frac{u_{m+1}^{n+1} - 2u_m^{n+1} + u_{m-1}^{n+1}}{(\Delta x)^2} \right\}$$

移項整理

$$-\lambda_2 \theta u_{m+1}^{n+1} + (1 + 2\lambda_2 \theta) u_m^{n+1} - \lambda_2 \theta u_{m-1}^{n+1} = \lambda_2 (1 - \theta) u_{m+1}^n + (1 - 2\lambda_2 (1 - \theta)) u_m^n + \lambda_2 (1 - \theta) u_{m-1}^n \quad (3.6)$$

其中 $\lambda_2 = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} k_2$.

當 $m = j_n + 2$ 時，使用 *Lagrange* 插值多項式 (2.4)。

$$\begin{aligned} (u_{xx})_{j_n+1}^n &= \frac{1}{(\Delta x)^2} \left[\frac{-2}{2-p_n} u_{j_n+2}^n + \frac{2}{3-p_n} u_{j_n+3}^n \right] \\ (u_{xx})_{j_n+1}^{n+1} &= \frac{1}{(\Delta x)^2} \left[\frac{-2}{2-p_{n+1}} u_{j_n+2}^{n+1} + \frac{2}{3-p_{n+1}} u_{j_n+3}^{n+1} \right] \end{aligned}$$

代入熱傳導方程：

$$\begin{aligned} \frac{u_{j_n+1}^{n+1} - u_{j_n+1}^n}{\Delta t} &= k_2 \left\{ (1 - \theta) \frac{1}{(\Delta x)^2} \left[\frac{-2}{2-p_n} u_{j_n+2}^n + \frac{2}{3-p_n} u_{j_n+3}^n \right] \right. \\ &\quad \left. + \theta \frac{1}{(\Delta x)^2} \left[\frac{-2}{2-p_{n+1}} u_{j_n+2}^{n+1} + \frac{2}{3-p_{n+1}} u_{j_n+3}^{n+1} \right] \right\} \end{aligned}$$

移項整理後

$$\left(1 + \frac{2\lambda_2 \theta}{2-p_n+1} \right) u_{j_n+2}^{n+1} - \frac{2\lambda_2 \theta}{3-p_{n+1}} u_{j_n+3}^{n+1} = \left(1 - \frac{2\lambda_2 (1-\theta)}{2-p_n} \right) u_{j_n+2}^n + \frac{2\lambda_2 (1-\theta)}{3-p_n} u_{j_n+3}^n \quad (3.7)$$

此時仍有一個點的函數值尚未求得，即 $u_{j_n+1}^{n+1}$ 。首先必須先考慮此點的狀態，

若 $p_{n+1} > 1$ ， $u_{j_n+1}^{n+1}$ 是為水，利用 $(x_{j_n-1}, u_{j_n-1}^{n+1})$ ， $(x_{j_n}, u_{j_n}^{n+1})$ ， (x_s^n, u_s^{n+1}) 與方程式 (2.4)

近似：

$$u_{j_n+1}^{n+1} = \frac{1-p_{n+1}}{1+p_{n+1}} u_{j_n-1}^{n+1} - \frac{2(1-p_{n+1})}{p_{n+1}} u_{j_n}^{n+1}$$

若 $p_{n+1} < 1$ ， $u_{j_n+1}^{n+1}$ 是為冰，利用 (x_s^n, u_s^{n+1}) ， $(x_{j_n+2}, u_{j_n+2}^{n+1})$ ， $(x_{j_n+3}, u_{j_n+3}^{n+1})$ 與方程式

(2.4) 近似：

$$u_{j_n+1}^{n+1} = \frac{2(1-p_{n+1})}{2-p_{n+1}} u_{j_n+2}^{n+1} - \frac{1-p_{n+1}}{3-p_{n+1}} u_{j_n+3}^{n+1}$$

3.2.2 移動邊界

雙相的 Stefan 條件為 $L\rho \frac{ds(t)}{dt} = -K_1 \frac{\partial u_1}{\partial x}(s(t), t) + K_2 \frac{\partial u_2}{\partial x}(s(t), t)$, $\forall t > 0$, 在交界面附近非均勻網格, 所以利用 *Lagrange* 插值來近似, 且要求誤差階數為二階, 由方程式 (2.4) 得

水的區域:

$$\frac{\partial u_1}{\partial x} \Big|_{x_s^n} = \frac{1}{\Delta x} \left(\frac{p_n}{1+p_n} u_{j_n-1}^n - \frac{1+p_n}{p_n} u_{j_n}^n + \frac{2p_n+1}{p_n(1+p_n)} u_s^n \right)$$

此式已由單相得知。

冰的區域一樣利用 (2.4) 近似,

$$\frac{d}{dx} P_3(x) = \frac{2x - (x_{j_n+2} + x_{j_n+3})}{(x_s^n - x_{j_n+2})(x_s^n - x_{j_n+3})} f(x_s^n) + \frac{2x - (x_s^n + x_{j_n+3})}{(x_{j_n+2} - x_s^n)(x_{j_n+2} - x_{j_n+3})} f(x_{j_n+2}) + \frac{2x - (x_s^n + x_{j_n+2})}{(x_{j_n+3} - x_s^n)(x_{j_n+3} - x_{j_n+2})} f(x_{j_n+3})$$

因為 $x_{j_n+2} - x_s = (2 - p_n) \Delta x$, $x_{j_n+3} - x_{j_n+2} = \Delta x$, 則

$$\frac{\partial u_2}{\partial x} \Big|_{x_s^n} = \frac{1}{\Delta x} \left(\frac{2p_n - 5}{(2 - p_n)(3 - p_n)} u_s^n + \frac{3 - p_n}{2 - p_n} u_{j_n+2}^n - \frac{2 - p_n}{3 - p_n} u_{j_n+3}^n \right)$$

$$\frac{\partial u_2}{\partial x} \Big|_{x_s^n} = \frac{1}{\Delta x} \left(\frac{2p_{n+1} - 5}{(2 - p_{n+1})(3 - p_{n+1})} u_s^{n+1} + \frac{3 - p_{n+1}}{2 - p_{n+1}} u_{j_n+2}^{n+1} - \frac{2 - p_{n+1}}{3 - p_{n+1}} u_{j_n+3}^{n+1} \right)$$

其中 $u_s^n = 0, \forall n$, 所以

$$\begin{aligned} L\rho \frac{s_{n+1} - s_n}{\Delta t} &= -K_1 \frac{1}{\Delta x} \left\{ (1 - \theta) \left[\frac{p_n}{1+p_n} u_{j_n-1}^n - \frac{1+p_n}{p_n} u_{j_n}^n \right] + \theta \left[\frac{p_{n+1}}{1+p_{n+1}} u_{j_n-1}^{n+1} - \frac{1+p_{n+1}}{p_{n+1}} u_{j_n}^{n+1} \right] \right\} \\ &\quad + K_2 \frac{1}{\Delta x} \left\{ (1 - \theta) \left[\frac{3-p_n}{2-p_n} u_{j_n+2}^n - \frac{2-p_n}{3-p_n} u_{j_n+3}^n \right] + \theta \left[\frac{3-p_{n+1}}{2-p_{n+1}} u_{j_n+2}^{n+1} - \frac{2-p_{n+1}}{3-p_{n+1}} u_{j_n+3}^{n+1} \right] \right\} \end{aligned}$$

又 $p_{n+1} \Delta x - p_n \Delta x = s_{n+1} - s_n$, 則

$$\begin{aligned} L\rho (p_{n+1} - p_n) \Delta x &= -K_1 \frac{\Delta t}{\Delta x} \left\{ (1 - \theta) \left[\frac{p_n}{1+p_n} u_{j_n-1}^n - \frac{1+p_n}{p_n} u_{j_n}^n \right] + \theta \left[\frac{p_{n+1}}{1+p_{n+1}} u_{j_n-1}^{n+1} - \frac{1+p_{n+1}}{p_{n+1}} u_{j_n}^{n+1} \right] \right\} \\ &\quad + K_2 \frac{\Delta t}{\Delta x} \left\{ (1 - \theta) \left[\frac{3-p_n}{2-p_n} u_{j_n+2}^n - \frac{2-p_n}{3-p_n} u_{j_n+3}^n \right] + \theta \left[\frac{3-p_{n+1}}{2-p_{n+1}} u_{j_n+2}^{n+1} - \frac{2-p_{n+1}}{3-p_{n+1}} u_{j_n+3}^{n+1} \right] \right\} \end{aligned} \quad (3.8)$$

3.2.3 離散化之數學模型

由 §3.2.1、§3.2.2 我們可將原數學模型離散化如下:

$$\left\{ \begin{array}{ll}
u_0^{n+1} = 0, & \forall n \\
-\lambda_1 \theta u_{m-1}^{n+1} + (2\lambda_1 \theta + 1) u_m^{n+1} - \lambda_1 \theta u_{m+1}^{n+1} \\
= \lambda_1 (1 - \theta) u_{m-1}^n + (1 - 2\lambda_1 (1 - \theta)) u_m^n + \lambda_1 (1 - \theta) u_{m+1}^n, & 1 \leq m \leq j_n - 1, \\
\frac{-2\lambda_1 \theta}{1+p_{n+1}} u_{j_n-1}^{n+1} + \left(1 + \frac{2\lambda_1 \theta}{p_{n+1}}\right) u_{j_n}^{n+1} = \frac{2\lambda_1 (1-\theta)}{1+p_n} u_{j_n-1}^n + \left(1 - \frac{2\lambda_1 (1-\theta)}{p_n}\right) u_{j_n}^n, & m = j_n \\
u_s^{n+1} = 0, & \forall n \\
\left\{ \begin{array}{ll}
u_{j_n+1}^{n+1} = \frac{1-p_{n+1}}{1+p_{n+1}} u_{j_n-1}^{n+1} - \frac{2(1-p_{n+1})}{p_{n+1}} u_{j_n}^{n+1}, & \text{if } p_{n+1} > 1 \\
u_{j_n+1}^{n+1} = \frac{2(1-p_{n+1})}{2-p_{n+1}} u_{j_n+2}^{n+1} - \frac{1-p_{n+1}}{3-p_{n+1}} u_{j_n+3}^{n+1}, & \text{if } p_{n+1} < 1
\end{array} \right. & m = j_n + 1 \\
\left(1 + \frac{2\lambda_2 \theta}{2-p_n+1}\right) u_{j_n+2}^{n+1} - \frac{2\lambda_2 \theta}{3-p_{n+1}} u_{j_n+3}^{n+1} = \left(1 - \frac{2\lambda_2 (1-\theta)}{2-p_n}\right) u_{j_n+2}^n + \frac{2\lambda_2 (1-\theta)}{3-p_n} u_{j_n+3}^n, & m = j_n + 2 \\
-\lambda_2 \theta u_{m+1}^{n+1} + (1 + 2\lambda_2 \theta) u_m^{n+1} - \lambda_2 \theta u_{m-1}^{n+1} \\
= \lambda_2 (1 - \theta) u_{m+1}^n + (1 - 2\lambda_2 (1 - \theta)) u_m^n + \lambda_2 (1 - \theta) u_{m-1}^n, & j_n + 3 \leq m \leq N_x - 1
\end{array} \right.$$

令 $a_1 = \lambda_1 \theta$, $b_1 = \lambda_1 (1 - \theta)$, $a_2 = \lambda_2 \theta$, $b_2 = \lambda_2 (1 - \theta)$, 則上述的模型可以用下列矩陣形式表示:

水的部分:

$$= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -a_1 & (1+2a_1) & -a_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -a_1 & (1+2a_1) & -a_1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & -a_1 & (1+2a_1) & -a_1 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & -a_1 & (1+2a_1) & -a_1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{-2a_1}{1+p_{n+1}} & 1 + \frac{2a_1}{p_{n+1}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_0^{n+1} \\ u_1^{n+1} \\ u_2^{n+1} \\ \vdots \\ u_{j_n-2}^{n+1} \\ u_{j_n-1}^{n+1} \\ u_{j_n}^{n+1} \end{bmatrix} \\
= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ b_1 & (1-2b_1) & b_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & b_1 & (1-2b_1) & b_1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & b_1 & (1-2b_1) & b_1 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & b_1 & (1-2b_1) & b_1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{2b_1}{1+p_n} & 1 - \frac{2b_1}{p_n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_0^n \\ u_1^n \\ u_2^n \\ \vdots \\ u_{j_n-2}^n \\ u_{j_n-1}^n \\ u_{j_n}^n \end{bmatrix}$$

冰的部分:

$$\begin{aligned}
 & \begin{bmatrix} 1 + \frac{2a_2}{2-p_{n+1}} & \frac{-2a_2}{3-p_{n+1}} & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -a_2 & (1+2a_2) & -a_2 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -a_2 & (1+2a_2) & -a_2 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & -a_2 & (1+2a_2) & -a_2 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & -a_2 & (1+2a_2) & -a_2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{j_n+2}^{n+1} \\ u_{j_n+3}^{n+1} \\ u_{j_n+4}^{n+1} \\ \vdots \\ u_{N_x-2}^{n+1} \\ u_{N_x-1}^{n+1} \\ u_{N_x}^{n+1} \end{bmatrix} \\
 = & \begin{bmatrix} 1 - \frac{2b_2}{2-p_n} & \frac{2b_2}{2-p_n} & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ b_2 & (1-2b_2) & b_2 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & b_2 & (1-2b_2) & b_2 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & b_2 & (1-2b_2) & b_2 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & b_2 & (1-2b_2) & b_2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{j_n+2}^n \\ u_{j_n+3}^n \\ u_{j_n+4}^n \\ \vdots \\ u_{N_x-2}^n \\ u_{N_x-1}^n \\ u_{N_x}^n \end{bmatrix}
 \end{aligned}$$

若 $p_{n+1} > 1$, $u_{j_n+1}^{n+1}$ 爲水, 則有 $u_{j_n+1}^{n+1} = \frac{1-p_{n+1}}{1+p_{n+1}}u_{j_n-1}^{n+1} - \frac{2(1-p_{n+1})}{p_{n+1}}u_{j_n}^{n+1}$; 又若 $p_{n+1} < 1$, $u_{j_n+1}^{n+1}$ 爲冰, 則有 $u_{j_n+1}^{n+1} = \frac{2(1-p_{n+1})}{2-p_{n+1}}u_{j_n+2}^{n+1} - \frac{1-p_{n+1}}{3-p_{n+1}}u_{j_n+3}^{n+1}$ 。

3.2.4 穩定性

在水的部分, 雙相與單相是一樣的迭代式, 其穩定性條件相同, 即當 $0 \leq \theta < \frac{1}{2}$ 時, $\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} < \frac{1}{2(1-2\theta)k_1}$; 而當 $\frac{1}{2} \leq \theta \leq 1$ 時, $\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}$ 並無條件限制。而在冰的區域, 同樣利用 *Neumann* (*Fourier*) 分析來驗證此離散化後系統的穩定性條件, 令 $u_m^n = e^{i\beta x_m} e^{\alpha t_n} = e^{i\beta(m\Delta x)} e^{\alpha(n\Delta t)} = e^{i\beta(m\Delta x)} \cdot \xi^n$, $\xi = e^{\alpha\Delta t}$, 並且將 u_m^n 代入方程式 (3.6) 則

$$e^{i\beta m\Delta x} \xi^{n+1} [-\lambda_2 \theta (e^{i\beta\Delta x} + e^{-i\beta\Delta x} - 2) + 1] = e^{i\beta m\Delta x} \xi^n [\lambda_2 (1-\theta) (e^{i\beta\Delta x} + e^{-i\beta\Delta x} - 2) + 1]$$

即

$$\left[4\lambda_2 \theta \sin^2 \left(\frac{\beta\Delta x}{2} \right) + 1 \right] \xi = 1 - 4\lambda_2 (1-\theta) \sin^2 (\beta\Delta x)$$

整理得

$$\xi = \frac{1 - 4\lambda_2 (1-\theta) \sin^2 (\beta\Delta x)}{4\lambda_2 \theta \sin^2 \left(\frac{\beta\Delta x}{2} \right) + 1}$$

若 $|\xi| < 1$ ，此系統將會穩定，所以

$$\left| \frac{1 - 4\lambda_2(1-\theta)\sin^2\left(\frac{\beta\Delta x}{2}\right)}{4\lambda_2\theta\sin^2\left(\frac{\beta\Delta x}{2}\right) + 1} \right| < 1$$

即

$$1 - 2\lambda_2\theta\sin^2\left(\frac{\beta\Delta x}{2}\right) < -2\lambda_2(1-\theta)\sin^2\left(\frac{\beta\Delta x}{2}\right) < 2\lambda_2\theta\sin^2\left(\frac{\beta\Delta x}{2}\right)$$

情形 1: 考慮不等式左邊: $-1 - 2\lambda_2\theta\sin^2\left(\frac{\beta\Delta x}{2}\right) < -2\lambda_2(1-\theta)\sin^2\left(\frac{\beta\Delta x}{2}\right)$ ，則

$$-1 - 2\lambda_2\theta\sin^2\left(\frac{\beta\Delta x}{2}\right) < -2\lambda_2(1-\theta)\sin^2\left(\frac{\beta\Delta x}{2}\right) \quad \text{即} \quad 2[\lambda_2(1-\theta) - \lambda_2\theta]\sin^2\left(\frac{\beta\Delta x}{2}\right) < 1$$

因此有 $\lambda_2 < 1/2(1-2\theta)$ ，所以

$$\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} < \frac{1}{2(1-2\theta)k_2}$$

因為 $\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} > 0$ ，所以 $\frac{1}{2(1-2\theta)k_2} > 0 \Rightarrow 0 \leq \theta < \frac{1}{2}$ 。

情形 2: 考慮不等式右邊: $-2\lambda_2(1-\theta)\sin^2\left(\frac{\beta\Delta x}{2}\right) < 2\lambda_2\theta\sin^2\left(\frac{\beta\Delta x}{2}\right)$ ，則

$$-2\lambda_2(1-\theta)\sin^2\left(\frac{\beta\Delta x}{2}\right) < 2\lambda_2\theta\sin^2\left(\frac{\beta\Delta x}{2}\right) \quad \text{即} \quad [2\lambda_2\theta + 2\lambda_2(1-\theta)]\sin^2\left(\frac{\beta\Delta x}{2}\right) > 0$$

因此 $2\lambda_2\theta + 2\lambda_2(1-\theta) > 0$ 所以 $2\lambda_2 > 0$ 。因為 $\lambda_2 = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}k_2$ 且 $\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}, k_2 > 0$ ，所以 $2\lambda_2 > 0$ 恆成立。

因此整個系統的穩定性條件整理如下定理所示:

定理 3. *Stefan* 兩相問題經有限差分離散化後，穩定性條件為:

$$\begin{cases} \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} < \min\left\{\frac{1}{2(1-2\theta)k_1}, \frac{1}{2(1-2\theta)k_2}\right\}, & 0 \leq \theta < \frac{1}{2} \\ \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}: \text{無條件限制} & \frac{1}{2} \leq \theta \leq 1 \end{cases} \quad (3.9)$$

經由上述定理可知為了數值計算的穩定性，我們一定要選擇 $\frac{1}{2} \leq \theta \leq 1$ 之間，因此以下的數值計算，我們選擇 $\theta = 1$ ，即利用隱式差分算法來進行。

四、數值演算及結果

4.1 演算法

設定初始條件：假設初始值 $t_0 = 0.01$ ，即 $u(x, t_0)$ ， $\forall x > 0$ 為已知。

在一維雙相的模型中，若假設冰的溫度 $T_\infty = 0$ ，即變為單相問題。此時理論值的初始值條件 $t_0 = 0$ ，則 $u(x, 0)$ ， $\forall x > 0$ 為已知，且 $u(x, 0) = 0$ ， $\forall x > 0$ ，以此條件來進行迭代的話，會得到 $u(x, t_1) = u(x, t_2) = \dots = u(x, t_{N_x}) = 0$ ， $\forall x > 0$ ，所以必須重新選定初始值，而選定後的初始值又必須接近 0，故取 $t_0 = 0.01$ 來取代理論值的初始值 $t_0 = 0$ 。

接下來我們將利用已離散化的 Stefan 問題來進行數值計算，以一維兩相的 Stefan 問題為例，由 $n = 0$ 開始，共有下列步驟：

步驟 1：

$$\begin{aligned} \text{若 } \theta = 0, \text{ 則 } p_{n+1} &= p_n + \frac{1}{L\rho} \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \left\{ -K_1 \left[\frac{p_n}{1+p_n} u_{j_n-1}^n - \frac{1+p_n}{p_n} u_{j_n}^n \right] + K_2 \left[\frac{3-p_n}{2-p_n} u_{j_n+2}^n - \frac{2-p_n}{3-p_n} u_{j_n+3}^n \right] \right\} \\ \text{若 } \theta \neq 0, \text{ 則 } p_{n+1} &= \frac{-\tilde{p}_{n+1} R(\tilde{p}_{n+1}) + \hat{p}_{n+1} R(\hat{p}_{n+1})}{R(\tilde{p}_{n+1}) - R(\hat{p}_{n+1})} \end{aligned}$$

若 $\theta = 0$ ，為全顯式，故 p_{n+1} 可由上一步的資訊獲得，即

$$p_{n+1} = p_n + \frac{1}{L\rho} \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \left\{ -K_1 \left[\frac{p_n}{1+p_n} u_{j_n-1}^n - \frac{1+p_n}{p_n} u_{j_n}^n \right] + K_2 \left[\frac{3-p_n}{2-p_n} u_{j_n+2}^n - \frac{2-p_n}{3-p_n} u_{j_n+3}^n \right] \right\}$$

若 $\theta \neq 0$ ，由 (3.8) 得知

$$\begin{aligned} p_{n+1} &= p_n - \frac{K_1}{L\rho} \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \left\{ (1-\theta) \left[\frac{p_n}{1+p_n} u_{j_n-1}^n - \frac{1+p_n}{p_n} u_{j_n}^n \right] + \theta \left[\frac{p_{n+1}}{1+p_{n+1}} u_{j_n-1}^{n+1} - \frac{1+p_{n+1}}{p_{n+1}} u_{j_n}^{n+1} \right] \right\} \\ &\quad + \frac{K_2}{L\rho} \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \left\{ (1-\theta) \left[\frac{3-p_n}{2-p_n} u_{j_n+2}^n - \frac{2-p_n}{3-p_n} u_{j_n+3}^n \right] + \theta \left[\frac{3-p_{n+1}}{2-p_{n+1}} u_{j_n+2}^{n+1} - \frac{2-p_{n+1}}{3-p_{n+1}} u_{j_n+3}^{n+1} \right] \right\} \end{aligned}$$

在此式中 $u_{j_n-1}^{n+1}$ ， $u_{j_n}^{n+1}$ ， $u_{j_n+2}^{n+1}$ ， $u_{j_n+3}^{n+1}$ 的數值尚未得知，故 p_{n+1} 並無法直接求得。所以我們利用全顯式時的 p_{n+1} 與上一步 p_n 來估測給定的 θ 所對應的 p_{n+1} 。假設

$$\begin{cases} \tilde{p}_{n+1} = p_n + \frac{1}{L\rho} \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \left\{ -K_1 \left[\frac{p_n}{1+p_n} u_{j_n-1}^n - \frac{1+p_n}{p_n} u_{j_n}^n \right] + K_2 \left[\frac{3-p_n}{2-p_n} u_{j_n+2}^n - \frac{2-p_n}{3-p_n} u_{j_n+3}^n \right] \right\}, \\ \hat{p}_{n+1} = p_n, \end{cases}$$

並利用 (3.8)，令函數

$$\begin{aligned} R(p_{n+1}) &= L\rho(p_{n+1} - p_n)\Delta x - K_1 \frac{\Delta t}{\Delta x} \left\{ (1-\theta) \left[\frac{p_n}{1+p_n} u_{j_n-1}^n - \frac{1+p_n}{p_n} u_{j_n}^n \right] + \theta \left[\frac{p_{n+1}}{1+p_{n+1}} u_{j_n-1}^{n+1} - \frac{1+p_{n+1}}{p_{n+1}} u_{j_n}^{n+1} \right] \right\} \\ &\quad + K_2 \frac{\Delta t}{\Delta x} \left\{ (1-\theta) \left[\frac{3-p_n}{2-p_n} u_{j_n+2}^n - \frac{2-p_n}{3-p_n} u_{j_n+3}^n \right] + \theta \left[\frac{3-p_{n+1}}{2-p_{n+1}} u_{j_n+2}^{n+1} - \frac{2-p_{n+1}}{3-p_{n+1}} u_{j_n+3}^{n+1} \right] \right\} \quad (4.1) \end{aligned}$$

其中 $u_{j_n}^{n+1}, u_{j_{n+2}}^{n+1}$ 由 (3.5) (3.7) 知 $u_{j_n}^{n+1} = u_{j_n}^{n+1}(p_{n+1})$, 且 $u_{j_{n+2}}^{n+1} = u_{j_{n+2}}^{n+1}(p_{n+1})$, 將 \tilde{p}_{n+1} 與 \hat{p}_{n+1} 代入 §3.2.3 中的矩陣, 求出相對應的 $(u_{j_{n-1}}^{n+1})_{\tilde{p}}$, $(u_{j_n}^{n+1})_{\tilde{p}}$, $(u_{j_{n+1}}^{n+1})_{\tilde{p}}$, $(u_{j_{n+3}}^{n+1})_{\tilde{p}}$ 及 $(u_{j_{n-1}}^{n+1})_{\hat{p}}$, $(u_{j_n}^{n+1})_{\hat{p}}$, $(u_{j_{n+1}}^{n+1})_{\hat{p}}$, $(u_{j_{n+3}}^{n+1})_{\hat{p}}$, 之後再將這些數據代入 (4.1) 中, 可得 $R(\tilde{p}_{n+1})$, $R(\hat{p}_{n+1})$, 此兩點在圖形可能有二種情況:

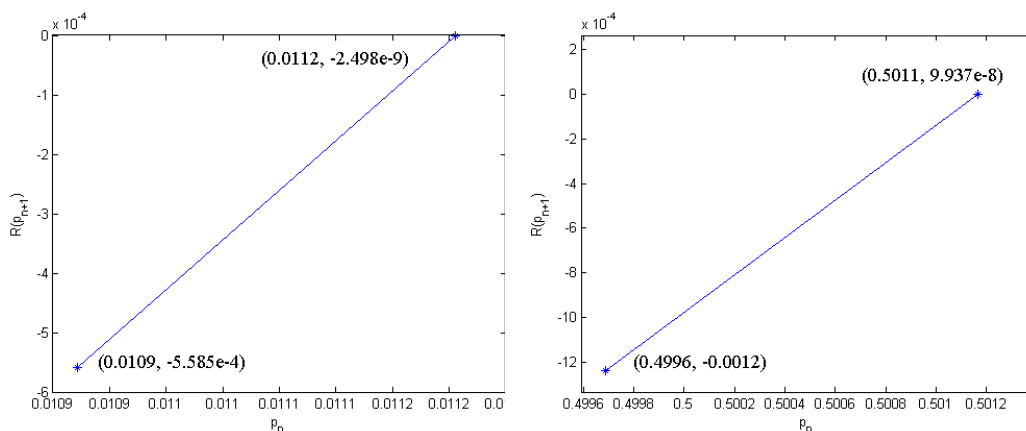


圖 6: $R(\tilde{p}_{n+1})$ 與 $R(\hat{p}_{n+1})$ 之關係圖

所以我們利用這兩點做線性插值

$$\frac{R(p_{n+1}) - R(\hat{p}_{n+1})}{p_{n+1} - \hat{p}_{n+1}} = \frac{R(p_{n+1}) - R(\tilde{p}_{n+1})}{p_{n+1} - \tilde{p}_{n+1}}$$

即

$$(p_{n+1} - \tilde{p}_{n+1}) [R(p_{n+1}) - R(\hat{p}_{n+1})] = \tilde{p}_{n+1} [R(p_{n+1}) - R(\hat{p}_{n+1})] - \hat{p}_{n+1} [R(p_{n+1}) - R(\tilde{p}_{n+1})]$$

所以

$$p_{n+1} = \frac{\tilde{p}_{n+1} [R(p_{n+1}) - R(\hat{p}_{n+1})] - \hat{p}_{n+1} [R(p_{n+1}) - R(\tilde{p}_{n+1})]}{R(\tilde{p}_{n+1}) - R(\hat{p}_{n+1})},$$

又因為 $R(p_{n+1}) = 0$, 故

$$p_{n+1} = \frac{-\tilde{p}_{n+1} R(\hat{p}_{n+1}) + \hat{p}_{n+1} R(\tilde{p}_{n+1})}{R(\tilde{p}_{n+1}) - R(\hat{p}_{n+1})}$$

步驟 2: 將 [步驟 1] 求得的 p_{n+1} 代入 §3.2.3 的矩陣中, 求出 t_{n+1} 時所對應的溫度函數 u^{n+1} 。

步驟 3: 由 [步驟 1] 判斷 $p_{n+1} > 1$ 或 $p_{n+1} < 1$, 並決定 $u_{j_n+1}^{n+1}$ 的狀態, 再求近似值。

由 [步驟 3] 當 $x_{j_n} < x_s^n < x_{j+1}$ 時, 我們可以得到 u_m^{n+1} , $1 \leq m \leq N_x$, $m \neq j+1$ 。此時尚有一點 $u_{j_n+1}^{n+1}$ 未知, 故首先必須由 [步驟 1] 得到的 p_{n+1} 來判斷此點的狀態為水或冰, 由 §3.2.1, 故

若 $p_{n+1} > 1$, $u_{j_n+1}^{n+1}$ 為水

$$u_{j_n+1}^{n+1} = \frac{1-p_{n+1}}{1+p_{n+1}} u_{j_n-1}^{n+1} - \frac{2(1-p_{n+1})}{p_{n+1}} u_{j_n}^{n+1}$$

若 $p_{n+1} < 1$, $u_{j_n+1}^{n+1}$ 為冰

$$u_{j_n+1}^{n+1} = \frac{2(1-p_{n+1})}{2-p_{n+1}} u_{j_n+2}^{n+1} - \frac{1-p_{n+1}}{3-p_{n+1}} u_{j_n+3}^{n+1}$$

步驟 4: 重複 [步驟 1] ~ [步驟 3], 即可得到 $t_0, t_1, t_2, \dots, t_f$ 對應的數值解。

經由第三節理論的推導, 我們必須驗證程式的正確性, 所以必須利用解析解的數值來做對照, 並檢測其數值解的誤差是否在可接受範圍內, 所以接下來對數值解的溫度分佈還有交界面位置來做簡單的分析與比對。我們給定單相或雙相 Stefan 問題中所需要的參數, 如下:

$$\left\{ \begin{array}{ll} T_1 = 25.0, & (\text{°C}) \text{ 水的加熱溫度} \\ T_\infty = -5.0, & (\text{°C}) \text{ 冰的加熱溫度} \\ K_1 = 0.5664 \times 10^{-2}, & (\text{W}/(\text{cm} \text{ °C})) \text{ 水的熱傳導係數} \\ K_2 = 2.16 \times 10^{-2}, & (\text{W}/(\text{cm} \text{ °C})) \text{ 冰的熱傳導係數} \\ c_1 = 4.186, & (\text{J}/(\text{g} \text{ °C})) \text{ 水的比熱} \\ c_2 = 2.3023, & (\text{J}/(\text{g} \text{ °C})) \text{ 冰的比熱} \\ L = 334.88, & (\text{J}/\text{g}) \text{ 潛熱} \\ \rho = 1, & (\text{g}/\text{cm}^3) \text{ 密度} \end{array} \right.$$

並給定空間計算區間 $[x_0, x_f] = [0, 0.1]$ 和時間計算區間 $[t_0, t_f] = [0.01, 4.01]$ 的邊界值。考慮穩定性條件 (3.9), 故我們針對空間分割 $N_x = 20$ 與時間分割 $N_t = 16000$ 來做探討, 並在時間

$t = t_n$ 時，定義誤差函數

$$\begin{cases} \|e\|_p = \left(\frac{\sum_{m=1}^{N_x} |u_m^n - u(x_m, t_n)|^p}{N_x} \right)^{1/p}, & 1 \leq p < \infty \\ \|e\|_\infty = \max_m |u_m^n - u(x_m, t_n)| \end{cases}$$

經由 Matlab 可以驗證我們的離散化結果，並採用隱式法來模擬當邊界改變為週期熱源時所造成的溫度分佈及交界面的位置。

4.2 範例應用

原本的數學模型中，是在初始位置給予穩定熱源 T_1 加熱。假若現在在有限空間內，將熱源改為週期熱源，是否可以模擬？在實際的例子中，我們可以想像南北極冰層隨著四季的變化而造成冰層的融解，而一年的四季溫度的變化可看做是一個週期溫度函數，所以希望藉由模擬週期溫度函數，來觀察冰融解成水的溫度變化狀況及交界面移動的情形。

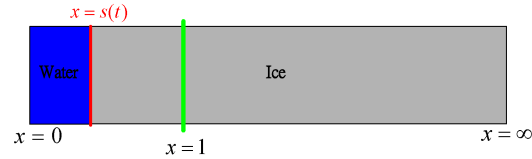


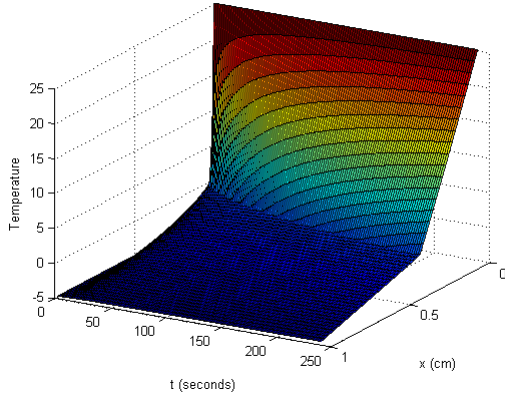
圖 7: 範例應用的計算空間

利用原本的程式稍做修改來模擬當熱源改變時的溫度變化及交界面的行為。由於原本 Stefan 問題是定義 $[0, \infty)$ 內，但在以下探討的範例中，均設定在空間 $[0, 1]$ 區間內 (圖 7)，時間為 240 秒的情況下，並選擇隱式有限差分來模擬。對應的熱源為

$$u(0, t) = T_1 + R_1 \sin(\omega_1 t + \theta_1),$$

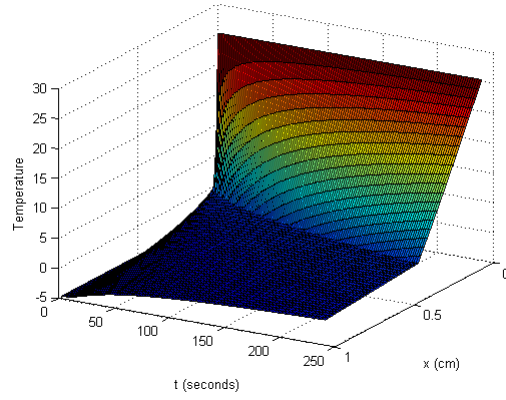
$$u(1, t) = T_2 + R_2 \sin(\omega_2 t + \theta_2)$$

即在兩側給予週期性的熱源，觀察冰溶解過程中溫度的變化以及界面移動情形，模擬結果如圖 8 與圖 9 所示。當 $u(0, t) = T_1 = 25$ 而 $u(1, t) = T_2$ 分別為 -5 或 $T_\infty \left(1 - \operatorname{erfc}\left(\frac{1}{2\sqrt{k_2 t}}\right) / \operatorname{erfc}\left(\frac{\gamma}{2\sqrt{k_2}}\right) \right)$ 即固定熱源作用下，對應之 3D 溫度分布分別如圖 8(a) 與 (b) 所示，而 2D 之溫度分佈則分別如圖 9(a) 與 (b) 所示，圖 8 其餘圖形為當週期熱源作用在邊界時，模擬之 3D 溫度分佈圖。



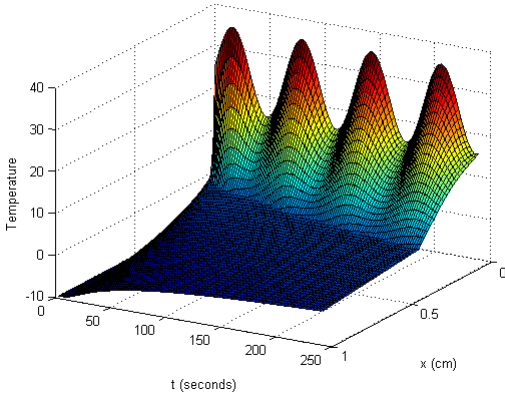
$$(a) T_1 = 25, R_1 = 0, \omega_1 = 0, \theta_1 = 0$$

$$T_2 = -5, R_2 = 0, \omega_2 = 0, \theta_2 = 0$$



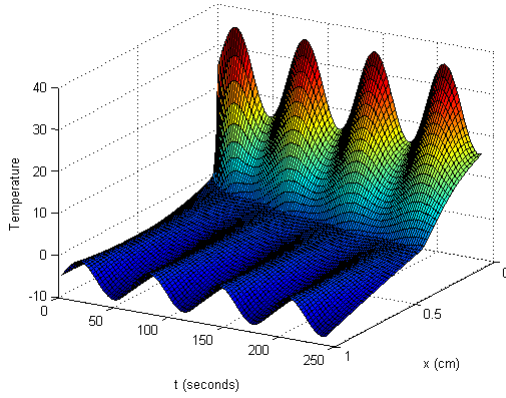
$$(b) T_1 = 25, R_1 = 0, \omega_1 = 0, \theta_1 = 0,$$

$$T_2 = T_\infty \left(1 - \operatorname{erfc}\left(\frac{1}{2\sqrt{k_2 t}}\right) / \operatorname{erfc}\left(\frac{\gamma}{2\sqrt{k_2}}\right) \right)$$



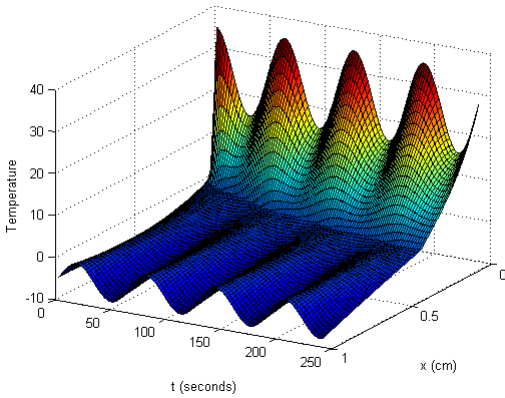
$$(c) T_1 = 25, R_1 = 10, \omega_1 = \frac{1}{10}, \theta_1 = 0$$

$$T_2 = T_\infty \left(1 - \operatorname{erfc}\left(\frac{1}{2\sqrt{k_2 t}}\right) / \operatorname{erfc}\left(\frac{\gamma}{2\sqrt{k_2}}\right) \right)$$



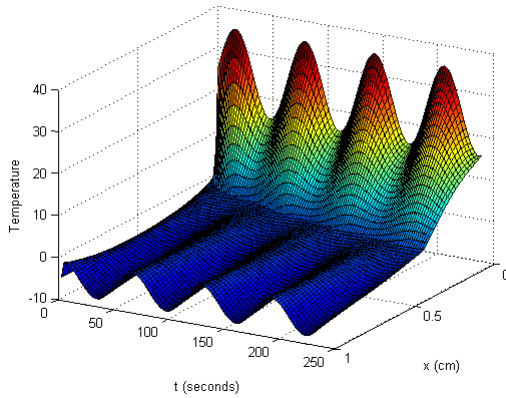
$$(d) T_1 = 25, R_1 = 10, \omega_1 = \frac{1}{10}, \theta_1 = 0,$$

$$T_2 = -5, R_2 = 4, \omega_2 = \frac{1}{10}, \theta_2 = 0$$



$$(e) T_1 = 25, R_1 = 10, \omega_1 = \frac{1}{10}, \theta_1 = \frac{\pi}{2},$$

$$T_2 = -5, R_2 = 4, \omega_2 = \frac{1}{10}, \theta_2 = 0$$



$$(f) T_1 = 25, R_1 = 10, \omega_1 = \frac{1}{10}, \theta_1 = 0,$$

$$T_2 = -5, R_2 = 4, \omega_2 = \frac{1}{10}, \theta_2 = \frac{\pi}{2}$$

圖 8: 模擬 3D 溫度分佈圖

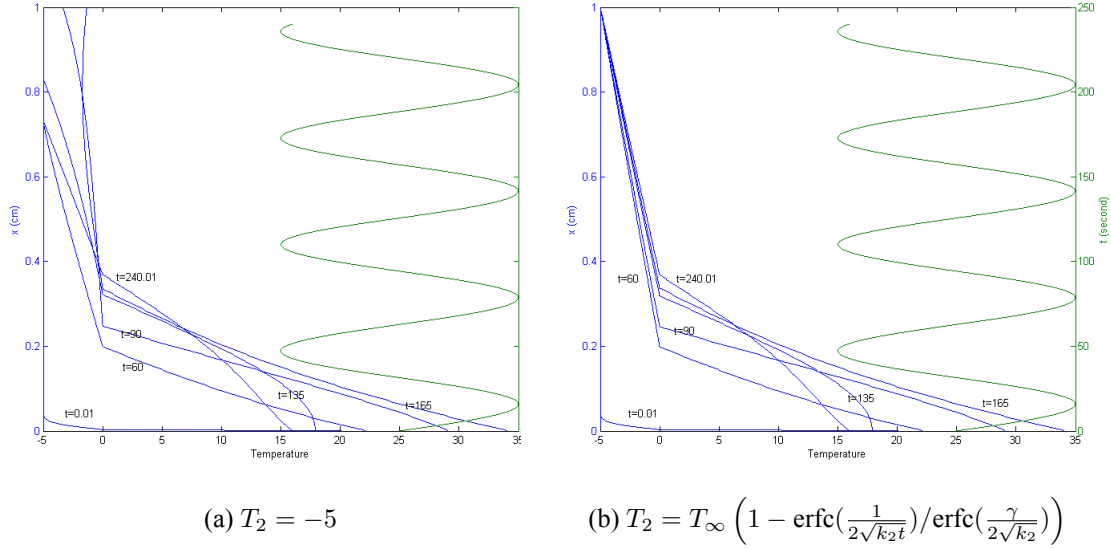


圖 9: 當 $u(0, t) = T_1 = 25$ 而不同的 $u(1, t) = T_2$ 時模擬的 2D 溫度分佈圖

此外，我們除了對週期熱源所造成的溫度分佈有興趣外，另外更引起注意的是交界面 $s(t)$ 的行為，所以接下來我們比較參數對交界面位置 $s(t)$ 的行為之影響。首先考慮單邊熱源加熱，即 $u(0, t) = 25 + R_1 \sin(\omega_1 t)$ 、 $u(1, t) = 0$ 時，參數 R_1 與 ω_1 對交界面 $s(t)$ 之影響如圖 10 所示，其中圖 10(a) 說明當頻率固定在 $\omega_1 = 1/20$ ，而控制振幅 R_1 增大即溫度幅度增加時， $s(t)$ 的也呈現震盪現象，其幅度也隨之變大；圖 10(b) 說明當振幅固定在 $R_1 = 20$ ，而控制頻率 ω_1 增快時， $s(t)$ 前進震盪現象越不明顯，反之若 ω_1 減半， $s(t)$ 的頻率也隨之減半。不管是控制振幅 R_1 或頻率 ω_1 其影響程度會隨著時間增加而減少，主因 $s(t)$ 越遠離加熱源時，會逐漸平緩，趨於穩定。

考慮雙邊熱源加熱 $u(0, t) = 25 + R_1 \sin(\omega_1 t)$ 、 $u(1, t) = -5 + R_2 \sin(\omega_2 t)$ 時，參數 R_1 、 R_2 、 ω_1 與 ω_2 對交界面 $s(t)$ 之影響如圖 11 所示，其中圖 11(a) 為熱源頻率相同 $\omega_1 = \omega_2 = 1/20$ ，但兩邊振幅不同時對 $s(t)$ 的影響，當 R_1 固定的情形， R_2 的振幅增大，兩邊溫度會同時上升，但 R_2 振幅較大時 $s(t)$ 移動會較快；類似的當 R_2 固定， R_1 的振幅較大，則 $s(t)$ 移動會較快。圖 11(b) 為熱源振幅固定 $R_1 = 10$ 、 $R_2 = 4$ 的情況下，兩端頻率的效應，當固定 ω_1 時， ω_2 越小，代表其溫度上升下降均較平緩，所以 $s(t)$ 的移動速度較快，反之考慮 ω_2 固定，控制 ω_1 時亦然；但當兩者頻率不同時，會有當左端開始下降時，右端卻仍處於上昇狀態，兩端溫差變小，故 $s(t)$ 的移動速度變比兩邊頻率相同時慢。所以我們可以得知左端水區域的加熱源的影響較冰區域的加熱源來的顯著，除此之外，振幅越大，頻率越小，對 $s(t)$ 的影響也較明顯。

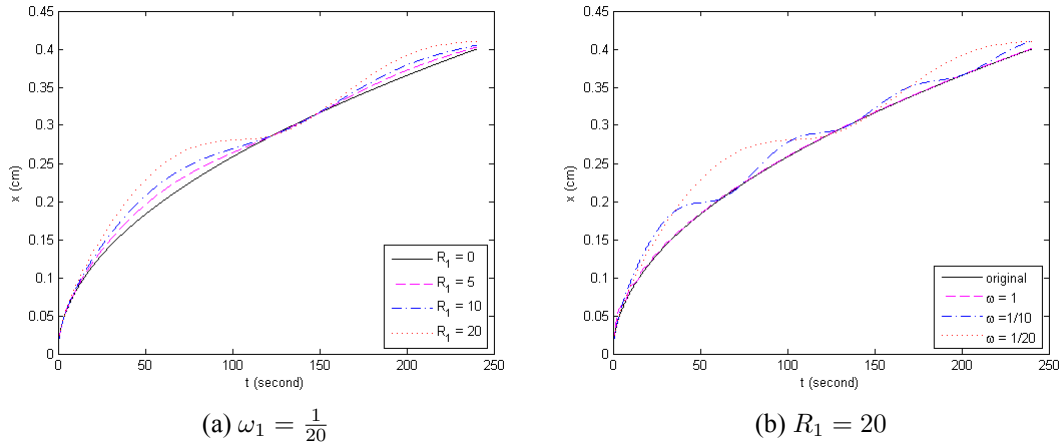


圖 10: 單邊熱源加熱 $u(0, t) = 25 + R_1 \sin(\omega_1 t)$ 、 $u(1, t) = 0$ 時，參數變動對界面 $s(t)$ 之影響

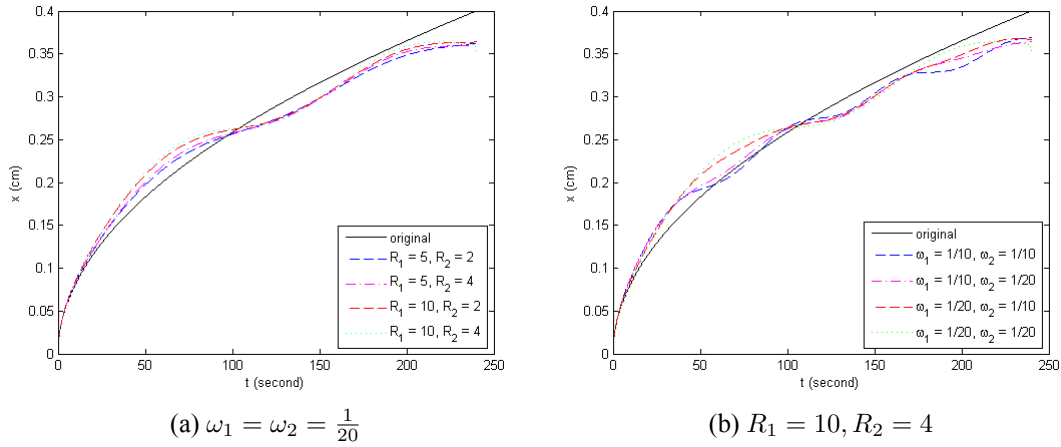


圖 11: 雙邊熱源加熱 $u(0, t) = 25 + R_1 \sin(\omega_1 t)$ 、 $u(1, t) = -5 + R_2 \sin(\omega_2 t)$ 時，參數變動對界面 $s(t)$ 之影響

接下來我們考慮若 R_1 、 R_2 、 ω_1 、 ω_2 均固定的情形下，兩端週期熱源有相位差時的影響效應，如圖 12 所示，由圖中我們可以發現兩端有相位差時均較完全同步時移動稍慢，但以左端產生相位差的影響較右端有相位差時大。

此外，若我們在 $x = 0$ 、 $x = 1$ 處，各以穩定熱源 T_1 、 T_2 加熱於兩端時，只要 T_1 、 T_2 溫差夠大，我們可以發現其 $s(t)$ 均會在 240 秒內穩定下來，如圖 13 所示；圖 13(a) 顯示當 $T_2 = -65$ 時，即使將左端的溫度提升到 $T_1 = 100$ ，交界面還是會穩定下來；反過來，若 $T_1 = 25$ 時，將右端的溫度 T_2 從 -95 升高到 -5 ，明顯交界面到穩定所需時間需變長。在交界面的計算時，當前後

兩次迭代的交界面位置 $|x_s^{n+1} - x_s^n| < 5 \times 10^{-7}$ ，即視交界面為到達穩定位置，不再移動，其中 $x_s^n = s(t_n)$ 而 t_n 為第 n 次迭代之時間，圖13(a)與(b)對應之數值計算結果分別如表1所示。由觀察此圖，我們可以透過兩端的溫度差之控制手法來控制冰塊的融解速度與數量。

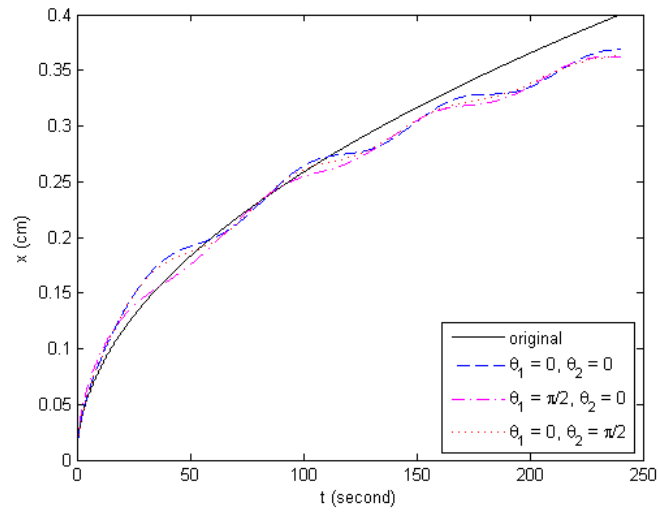
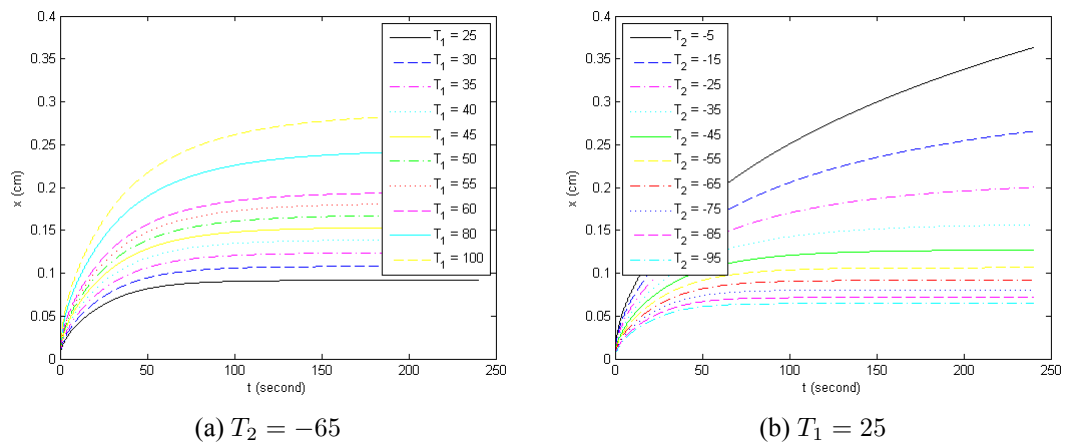


圖 12: 兩端週期熱源具相位差時, $s(t)$ 位置圖



(a) $T_2 = -65$

(b) $T_1 = 25$

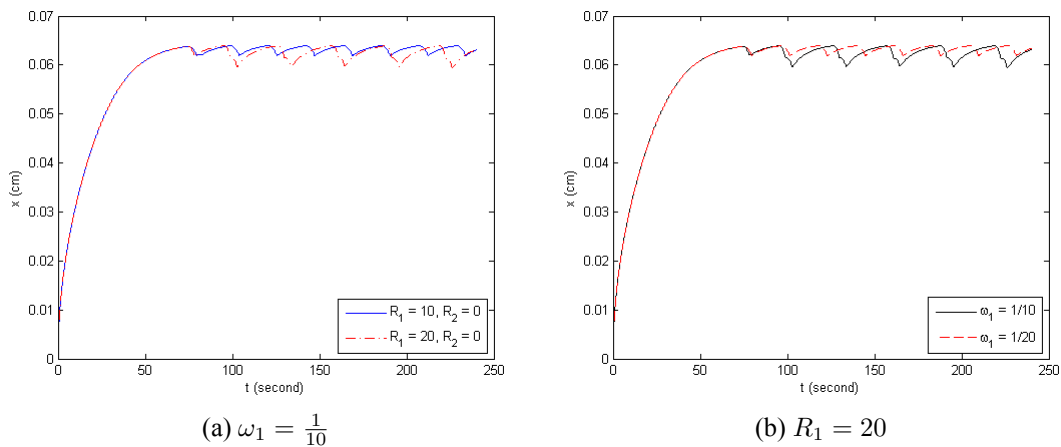
圖 13: 兩端為穩定熱源, $s(t)$ 的穩定位置

表 1: 固定熱源溫度 $s(t)$ 的穩定位置計算

$T_2(1, t) = -65$				$T_1(1, t) = 25$			
$T_1(0, t)$	$s(t)$	$1 - s(t)$	time	$T_2(0, t)$	$s(t)$	$1 - s(t)$	time
25	0.09043903	0.90956097	99.860	-5	--	--	--
30	0.10661713	0.89338287	110.940	-15	--	--	--
35	0.12222769	0.87777231	121.640	-25	--	--	--
40	0.13730036	0.86269964	131.890	-35	0.15483712	0.84516288	194.420
45	0.15186432	0.84813568	141.700	-45	0.12513491	0.87486509	145.960
50	0.16594339	0.83405661	151.030	-55	0.10499850	0.89500150	117.590
55	0.17956301	0.82043699	159.920	-65	0.09043903	0.90956097	99.860
60	0.19274409	0.80725591	168.360	-75	0.07941379	0.92058621	88.210
80	0.24148555	0.75851445	198.100	-85	0.07076909	0.92923091	80.190
100	0.28466959	0.71533041	222.320	-95	0.06380655	0.93619345	74.440

前面探討單邊或雙邊週期熱源對 $s(t)$ 影響之情形，屬於 $s(t)$ 還在遞增的過程當中，現在想討論當 $s(t)$ 穩定後，討論週期熱源對穩態行的影響。由於已知在 $s(t)$ 在加入週期熱源後會呈現週期性的行為，但其影響會隨著與熱源的週期變化而受影響。先假設系統在固定熱源 $u(0, t) = 25$ 、 $u(1, t) = -95$ 作用，約在 74.44 秒後， $s(t)$ 到達穩定，再調整熱源為週期熱源，觀察 $s(t)$ 的穩態行為變化。

設只改變左端為週期熱源 $u(0, t) = 25 + R_1 \sin(\omega_1 t)$ ，即只有左端加入週期熱源並固定頻率為 $\omega_1 = \frac{1}{10}$ 時，則 $s(t)$ 之穩態行為為如圖 14(a) 所示，亦即 $s(t)$ 穩態振幅隨 R_1 之振幅增大而增大，但同時 $s(t)$ 之頻率也隨之加快；反過來若固定振幅為 $R_1 = 20$ 時，則 $s(t)$ 之穩態行為為如圖 14(b) 所示，亦即 $s(t)$ 穩態振幅會隨 ω_1 之加快而加快，但同時 $s(t)$ 之振幅也隨之降低。

圖 14: 週期熱源 $u(0, t) = 25 + R_1 \sin(\omega_1 t)$ 、 $u(1, t) = -95$ 影響下 $s(t)$ 穩定後之行為

接著我們討論兩端的熱源均改為週期熱源 $u(0, t) = 25 + R_1 \sin(t/10)$ 、 $u(1, t) = -95 + R_2 \sin(t/10)$ 時，而頻率則固定在 $\omega_1 = \omega_2 = 1/10$ 時，振幅對交界面穩態行為的影響，如圖15所示。圖15(a)為當 R_2 固定，穩態振幅會隨 R_1 增加而增大，但頻率也隨之加快；而圖15(b)則為當 R_1 固定，穩態振幅不會隨 R_2 增加而有明顯改變，但頻率卻隨之加快。從此圖和上圖比較單邊熱源的效果，可見兩邊熱源對振幅的影響並不明顯，但對交界面的穩態行為之頻率明顯變慢。

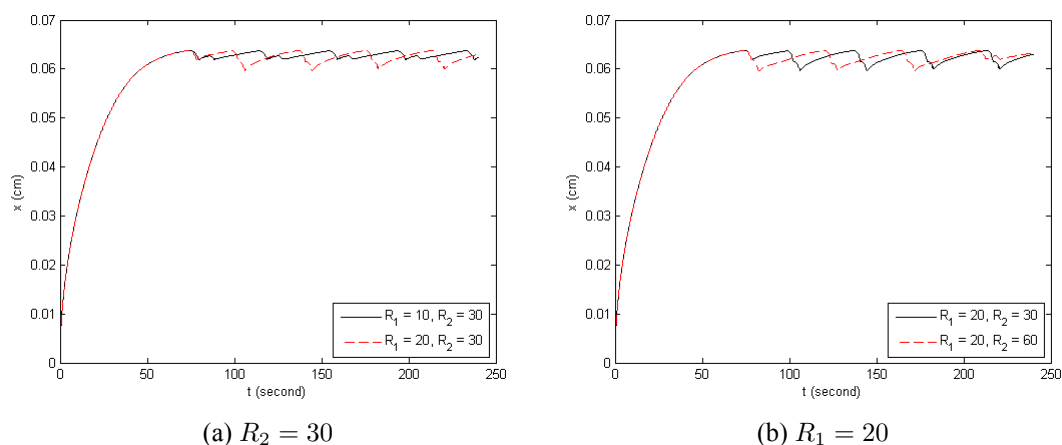


圖 15: 週期熱源 $u(0, t) = 25 + R_1 \sin(t/10)$ 、 $u(1, t) = -95 + R_2 \sin(t/10)$ 影響下 $s(t)$ 穩定後之行爲

結合兩圖的效應，可知在交界面呈現穩態行為時，週期熱源的加入會可以控制 $s(t)$ 也具有週期性的前進與後退，但因為熱的傳遞速度與穩定位置的關係，會決定哪端的熱源會影響較大，而這說明我們可以藉由兩端的熱源來控制 $s(t)$ 。

五、結論

在本文中經由第四節例子探討，可得知在有限空間內，兩端熱源的改變會使得 $s(t)$ 改變。週期性熱源會使得 $s(t)$ 有週期性的移動效果，且頻率及振幅均會受到影響，熱源的頻率越小影響越大，熱源的振幅越大影響越大。除此之外，若左右兩端均取不同熱源加熱且溫差夠大時，最終可在此區域內達到穩定狀態，也就是 $s(t)$ 的位置將固定不變，而且在穩定後，可藉由週期熱源來調控交界面呈現週期性前進後退之穩態行為，這說明了交界面 $s(t)$ 的確會受週期熱源導致週期性的行為而影響。所以可推測假若需要讓 $s(t)$ 呈現某種特定規律或形狀增長時，應可藉由控制週期熱源的振幅與頻率來達到所要的目的。

參考文獻

- [1] J. Crank. *Free and moving boundary problems*. Clarendon Press-Oxford, 1984. 17
- [2] W. F. Trench, On an Explicit for the solution of a Stefan Problem, *Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics* 7(2) (1959) 184-204. 17
- [3] R. M. Furzeland, A Compararive Study of Numerical Methods for Moving Boundary Problems, *Journal of the Institute of Mathematics and Its Applications* 26 (1980) 419-429. 17, 19
- [4] M. Zerroukat and C. R. Chatwin, An explicit unconditionally stable variable time-step method for one-dimensional Stefan problems, *International Journal for Numerical Method in Engineering* 35 (1992) 1503-1520. 19
- [5] 吳兆春, 定時間步長變坐標步長差分求解單相 Stefan 問題, *Chinese Journal of Computational Physics* 20(6) (2003) 521-524. 19
- [6] J. Caldwell and Y. Y. Kwan, Numerical methods for one-dimensional Stefan problems, *Communications in Numerical Methods in Engineering* 20 (2004) 535-545. 19
- [7] D. V. Alexandrov, D. L. Aseev, I. G. Nizovtseva, H.-N. Huang, and D. Lee, Nonlinear dynamics of directional solidification with a mushy layer. Analytic solutions of the problem, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 50 (2007) 3616-3623. 19
- [8] D. V. Alexandrov, I. G. Nizovtseva, A. P. Malygin, H.-N. Huang, and D. Lee, Unidirectional solidification of binary melts from a cooled boundary: analytical solutions of a nonlinear diffusion-limited problem, *Journal of Physics: Condensed Matter* 20 (2008) 114105 (6pp). 19
- [9] S. Kutluay, Numerical schemes for one-dimensional Stefan-like problems with a forcing term, *Applied Mathematics and Computation* 168 (2005) 1159-1168. 19
- [10] S. Savović and J. Caldwell, Finite difference solution of one-dimensional Stefan problem with periodic boundary conditions, *International Journal of Hear and Mass Trandfer* 46 (2003) 2911-2916. 19

The Finite-Difference Solution of One-Dimensional Stefan Problems

Ching-Hung Chiu* Huang-Nan Huang*

Abstract

This article presents the finite difference solution for one-dimensional two-phase Stefan problems. The explicit, Crank-Nicolson, and implicit schemes are discussed. Beside the derivation of the convergence condition for each scheme, the associated efficiency and accuracy are compared via numerical experiments. Finally, we use the implicit scheme to simulate the interface movement for Stefan problems with one- or two-sides periodic heat sources at the boundary.

Keywords: finite-difference method, Stefan problem, moving boundary problem

*Department of Applied Mathematics, Tunghai University, Taichung 40704, Taiwan