Прикладные задачи теоретической и математической физики

Министерство высшего и среднего специального образования
Латвийской ССР
Латвийский ордена Трудового Красного Знамени
государственный университет имени Петра Стучки
Вычислительный центр

ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

I

Межведомственный сборник
научных трудов

Латвийский государственный университет им. П.Стучки
Рига 1977

В сборнике помещены работы, посвященные прикладным вопросам теоретической физики. Основное внимание в работах уделяется математической постановке задач, описывающих конкретные физические явления, их качественному анализу и разработке численных методов решения таких задач. Круг вопросов, затронутых в работах, касается задач теории кристаллизации, задачи изучения сильноизлучающих газовых разрядов, эпитаксиальному наращиванию пленок, фильтрации жидкости в пористой среде.

Тематика сборника заинтересует широкий круг математиков, физиков и специалистов, занимающихся приложением задач тепло- и массопереноса к изучению физических процессов кристаллизации, переноса в газовых разрядах, фильтрации жидкости в пористых средах.

Печатается по решению редакционно-издательского совета
ЛГУ им. П.Стучки от 24 декабря 1976 года

П $\frac{20402-012у}{М\ 812(11)-77}$ 77

ТЕОРИЯ ОБОБЩЕННОГО РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ БИНАРНОЙ СИСТЕМЫ

Н.А.Авдонин (ВЦ ЛГУ им.П.Стучки)

Известно, что при кристаллизации расплавов (или растворов) в некоторых случаях возникает переохлаждение перед фронтом кристаллизации. Примеры исследования классического решения задачи Стефана, когда в объеме расплава (раствора) возникает переохлаждение, приводятся в работах [I]-[3]. Постановка задачи, не допускающая переохлаждения, была предложена В.Т.Борисовым [4]. Им была предложена гипотеза, что в случае возникновения переохлаждения начинается рост дендритов, причем растущие дендриты мгновенно снимают переохлаждение. Это приводит к существованию двухфазной зоны - дендритной области, в которой переохлаждение равно нулю. В этом случае естественно ввести в рассмотрение обобщенное решение, т.к. классического решения не существует [2]. Исследование обобщенного решения в случае кристаллизации однокомпонентного материала проведено в работе [5].

В случае кристаллизации бинарной системы обобщенное решение введено в работе [3]. За основу в этой работе было принято уравнение материального баланса, выведенное в [4] отдельно для жидкой фазы.двухфазной зоны. Это привело к вырождающейся системе уравнений, что затрудняет анализ задачи. Ниже вводится обобщенное решение задачи для термо--диффузионной системы, причем уравнения получаются путем макромасштабного осреднения в двухфазной области [ж]. По-

---

[ж] В работах [6],[7] приводится запись уравнений в обобщенном виде. Однако, автор исходил из классического представления о существовании гладкой границы раздела фаз. При таком подходе не представляется возможным обоснованное введение обобщенного решения. В частности, предлагаемый в [7] разностный метод решения задачи остается не обоснованным.

лученные путем осреднения уравнения, естественно, приводят к обобщенной постановке задачи. Далее показано, что полученная система уравнений является параболической по И.Г. Петровскому, но не является сильно параболической системой. Это делает невозможным применение известных методов доказательства существования решения. В настоящей работе дается доказательство существования обобщенного решения поставленной задачи путем сведения уравнений к сильно параболической системе, зависящей от параметра. Одновременно предлагается сходящийся численный алгоритм решения задачи.

I. Вывод осредненных уравнений

Выведем осредненные уравнения по макромасштабам для двухфазной среды. Для простоты будем рассматривать двухкомпонентный раствор. В случае многокомпонентной системы вывод будет вполне аналогичным, если считать заданными равновесные коэффициенты распределения κ_i для каждого компонента. Пусть область Q трехмерного пространства занята бинарным раствором, причем в любом элементарном объеме V могут находиться как твердые, так и жидкие частицы. Например, объем V пронизывают дендриты или растут равноосные зерна, см.рис.I.I. Будем считать, что существует кусочно-гладкая граница раздела фаз Γ_t.

Рис.I.I. Выделение элементарного объема V в двухфазной области. S - внешняя граница объема V; Γ_t - граница раздела твердой и жидкой фаз внутри V.

Температура T и концентрация C компонента в каждой фазе удовлетворяют микромасштабным уравнениям теплопроводности и диффузии с известными коэффициентами теплопроводности, объемной теплоемкости и диффузии для каждой фазы: $\lambda_p, \varkappa_p, D_p; (p=1,2)$;

$$\frac{\partial(\varkappa_p T)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\lambda_p \frac{\partial T}{\partial x_i}\right); \quad x \in V_p; \ t>0, \ p=1,2; \qquad (I.1)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(D_p \frac{\partial C}{\partial x_i}\right); \quad x \in V_p; \ t>0; \ p=1,2. \qquad (I.2)$$

Здесь и далее подразумевается суммирование по повторяющимся индексам i от I до 3.

индекс $p=1$ - относится к твердой фазе,

$p=2$ - к жидкой фазе.

Будем считать, что фазовый переход происходит в равновесных условиях. Тогда на границе раздела фаз Γ_t выполняются следующие условия:

$$\lambda_1 \frac{\partial T}{\partial x_i} \cdot n_i - \lambda_2 \frac{\partial T}{\partial x_i} n_i = -\gamma \rho v_{x_i} \cdot n_i; \qquad (I.3)$$

$$D_1 \frac{\partial C}{\partial x_i} n_i - D_2 \frac{\partial C}{\partial x_i} n_i = (C_\ell - C_s) v_{x_i} \cdot n_i; \qquad (I.4)$$

$$T_\ell = T_A - f_\ell(C_\ell); \quad C_s = \kappa C_\ell. \qquad (I.5)$$

Здесь введены следующие обозначения:

γ - удельная скрытая теплота фазового перехода;

ρ - плотность;

$T_\ell = T_A - f_\ell(C)$ - уравнение линии ликвидус фазовой диаграммы;

$\kappa = C_s / C_\ell$ - равновесный коэффициент распределения ($\kappa < 1$);

$n_i = \cos(n, x_i)$ - косинусы углов между нормалью к поверхности Γ_t, направленной в сторону жидкой фазы, и осью x_i;

v_{x_i} - компоненты вектора скорости продвижения границы раздела фаз.

Уравнения (I.I)-(I.2) проинтегрируем по элементарному объему V с учетом жидкой V_2 и твердой V_1 его частей:

$$\sum_{p=1,2} \int_{V_p} \frac{\partial(\mathcal{L}_p T)}{\partial t} dv = \int_{\Gamma_t} \left(\lambda_1 \frac{\partial T}{\partial x_i} n_i - \lambda_2 \frac{\partial T}{\partial x_i} n_i\right) ds +$$

$$+ \sum_{p=1,2} \int_{S_p} \lambda_p \frac{\partial T}{\partial x_i} n_i \, ds ; \qquad (I.6)$$

$$\sum_{p=1,2} \int_{V_p} \frac{\partial C}{\partial T} dv = \int_{\Gamma_t} \left(D_1 \frac{\partial C}{\partial x_i} n_i - D_2 \frac{\partial C}{\partial x_i} n_i\right) ds +$$

$$+ \sum_{p=1,2} \int_{S_p} D_p \frac{\partial C}{\partial x_i} n_i \, ds . \qquad (I.7)$$

Здесь S_1, S_2 - части границы S, занятые соответственно твердой и жидкой фазой.

Введем осредненные величины по твердой и жидкой частям объема V:

$$\langle T \rangle_p = V_p^{-1} \int_{V_p} T \, dv ; \quad \langle C \rangle_p = V_p^{-1} \int_{V_p} C \, dv ; \quad p = 1,2 , \qquad (I.8)$$

а также по твердой S_{1i} и жидкой S_{2i} частям i-ой грани S_i:

$$\left\langle \lambda_p \frac{\partial T}{\partial x_i} \right\rangle_{pi} = \frac{1}{S_{pi}} \int_{S_{pi}} \lambda_p \frac{\partial T}{\partial x_i} ds_i ; \left\langle D_p \frac{\partial C}{\partial x_i} \right\rangle_{pi} = \frac{1}{S_{ip}} \int_{S_{pi}} D_p \frac{\partial C}{\partial x_i} ds_i . \qquad (I.9)$$

Здесь S_{pi} - площади твердой ($p=1$) и жидкой ($p=2$) части грани S_i, нормальной к оси x_i; $ds_i = n_i ds$.

В уравнениях (I.6), (I.7) преобразуем интегралы типа

$$\int\limits_{V_p}\frac{\partial C}{\partial t}dv=\frac{\partial}{\partial t}\left(\int\limits_{V_p}C dv\right)-C_\ell\frac{\partial V_p}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial t}\left(V_p\langle C\rangle_p\right)-C_\ell\frac{\partial V_p}{\partial t};\; p=1,2. \quad (I.10)$$

Используя эти преобразования, граничные условия (I.3), (I.4) и вводя осредненные величины (I.8), (I.9), перепишем уравнения (I.6), (I.7) в виде:

$$\sum_{p=1,2}\frac{\partial}{\partial t}\left(V_p\langle \varkappa_p T\rangle_p\right)=\sum_{p=1,2}T_\ell\varkappa_p\frac{\partial V_p}{\partial t}+\int\limits_{\Gamma_t}\gamma\rho v_{x_i}\cdot n_i ds+$$

$$+\sum_{p,i}S_{pi}\left\langle\lambda_p\frac{\partial T}{\partial x_i}\right\rangle_{pi}\Big|_-^+ , \quad (I.11)$$

$$\sum_{p=1,2}\frac{\partial}{\partial t}\left(V_p\langle C\rangle_p\right)=C_s\frac{\partial V_1}{\partial t}+C_\ell\frac{\partial V_2}{\partial t}+\int\limits_{\Gamma_t}(C_\ell-C_s)v_{x_i}n_i ds+$$

$$+\sum_{p,i}S_{pi}\left\langle D_p\frac{\partial C}{\partial x_i}\right\rangle_{pi}\Big|_-^+ , \quad (I.12)$$

здесь $\langle q\rangle\big|_-^+$ – означает, что берется разность значений величины $\langle q\rangle$ на правой и левой грани оси x_i.

Разделив уравнения (I.11), (I.12) на V, перейдем к осредненным уравнениям. Для этого примем приближенно, что осредненные по граням величины равны осредненным по объему и что среднее от произведения равно произведению средних величин. Тогда:

$$\langle\varkappa_p T\rangle=\langle\varkappa\rangle_p\langle T\rangle_{pi};\left\langle\lambda_p\frac{\partial T}{\partial x_i}\right\rangle_{pi}=\langle\lambda_p\rangle\frac{\partial\langle T\rangle_p}{\partial x_i}, \quad (I.13)$$

$$\left\langle D_p\frac{\partial C}{\partial x_i}\right\rangle_{pi}=\langle D\rangle_p\frac{\partial\langle C\rangle_p}{\partial x_i}. \quad (I.14)$$

Введя теперь обозначения

$$\eta = V_p/V, \quad \eta_1 + \eta_2 = 1, \quad (p = 1, 2) \tag{I.15}$$

и учитывая, что

$$\int_{\Gamma_t} v_{x_i} \cdot n_i \, ds = \frac{\partial V_i}{\partial t} \tag{I.16}$$

после перехода к пределу при $V \to 0$,получим уравнения для осредненных величин:

$$\sum_{p=1,2} \frac{\partial}{\partial t}\left(\eta_p \langle \mathcal{L} \rangle_p \langle T \rangle_p\right) - \left[\gamma\rho + (\mathcal{L}_1 - \mathcal{L}_2) T_t\right] \frac{\partial \eta_1}{\partial t} =$$

$$= \sum_{p,i} \frac{\partial}{\partial x_i}\left[\langle \lambda \rangle_p \frac{S_{pi}}{S_i} \cdot \frac{\partial \langle T \rangle_p}{\partial x_i}\right], \tag{I.17}$$

$$\sum_{p=1,2} \frac{\partial}{\partial t}\left(\eta_p \langle C \rangle_p\right) = \sum_{p,i} \frac{\partial}{\partial x_i}\left[\langle D \rangle_p \frac{S_{pi}}{S_i} \frac{\partial \langle C \rangle_p}{\partial x_i}\right]. \tag{I.18}$$

Теперь необходимо установить какую-то связь между средними величинами $\langle T \rangle_1$ и $\langle T \rangle_2$, $\langle C \rangle_1$ и $\langle C \rangle_2$. Так как величина T непрерывна на границе раздела фаз, то будем считать, что и средние величины равны: $\langle T \rangle = \langle T \rangle_1 = \langle T \rangle_2$. Кроме того, примем предположение, что средние величины $\langle C \rangle_1$ и $\langle C \rangle_2$ претерпевают такой же скачок, что и распределенные величины на границе раздела фаз:

$$\langle C \rangle_1 = \kappa \langle C \rangle_2 = \kappa \langle C \rangle . \tag{I.19}$$

Если еще пренебречь различием $\mathcal{L}_1$ и $\mathcal{L}_2$ на границе раздела фаз, то уравнения (I.17), (I.18) примут вид:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\langle \mathcal{L} \rangle \langle T \rangle - \gamma\rho\eta_1\right) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\langle \lambda \rangle_i \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial x_i}\right), \tag{I.20}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[\left(\eta_2+\kappa\eta_1\right)\langle C\rangle\right]=\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\langle D\rangle_i\frac{\partial\langle C\rangle}{\partial x_i}\right). \qquad (I.21)$$

Здесь введены новые осредненные величины:

$$\left.\begin{aligned}&\langle \mathcal{L}\rangle=\eta_1\langle \mathcal{L}\rangle_1+\eta_2\langle \mathcal{L}\rangle_2\ ,\\ &\langle\lambda\rangle_i=\langle\lambda\rangle_1\frac{S_{1i}}{S_i}+\langle\lambda\rangle_2\frac{S_{2i}}{S_i}\ ,\\ &\langle D\rangle_i=\langle D\rangle_1\left(\kappa+\langle C\rangle_2\frac{\partial\kappa}{\partial\langle C\rangle_2}\right)\frac{S_{1i}}{S_i}+\langle D\rangle_2\frac{S_{2i}}{S_i}.\end{aligned}\right\} \qquad (I.22)$$

Если положить

$$S_{1i}/S_i=\eta_1\ ,\quad S_{2i}/S_i=\eta_2\ , \qquad (I.23)$$

осредненные коэффициенты по граням $\langle\lambda\rangle_i$, $\langle D\rangle_i$ перейдут в осредненные по объему:

$$\left.\begin{aligned}&\langle\lambda\rangle=\langle\lambda\rangle_1\eta_1+\langle\lambda\rangle_2\cdot\eta_2\ ,\\ &\langle D\rangle=\langle D\rangle_1\left(\kappa+\langle C\rangle_2\frac{\partial\kappa}{\partial\langle C\rangle_2}\right)\eta_1+\langle D\rangle_2\cdot\eta_2.\end{aligned}\right\} \qquad (I.22')$$

Сравним полученную систему уравнений (I.20), (I.21) с уравнениями баланса работы [4]. Уравнение массового баланса В.Т.Борисовым выписано для случая отсутствия диффузии в твердой фазе. В этом случае $\langle D\rangle_1=0$ и уравнение (I.21) примет вид:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\eta_2\langle C\rangle\right)+\kappa\langle C\rangle\frac{\partial\eta_1}{\partial t}+\kappa\eta_1\frac{\partial\langle C\rangle}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\langle D\rangle_2\eta_2\frac{\partial\langle C\rangle}{\partial x_i}\right). \qquad (I.24)$$

Это уравнение отличается от соответствующего уравнения В.Т.Борисова слагаемым $\kappa\eta_1\frac{\partial\langle C\rangle}{\partial t}$, ср. [4]. Это отличие объясняется различными предположениями о связи $\langle C \rangle_1$ и $\langle C \rangle_2$ в двухфазной области. Действительно, левую часть уравнения (I.2I) можно преобразовать так:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\eta_2 \langle C \rangle_2 + \eta_1 \langle C \rangle_1\right) = \frac{\partial}{\partial t}\left(\eta_2 \langle C \rangle_2 + \int\limits_{\eta_1} C_1 \, dv\right) =$$

$$= \frac{\partial}{\partial t}\left(\eta_2 \langle C \rangle_2\right) + C_1\Big|_{\Gamma_t} \cdot \frac{\partial \eta_1}{\partial t} ,$$

так как C_1 не зависит явно от t в случае $D_1 = 0$. Теперь ясно, что уравнение (I.2I) совпадает с уравнением работы [4] в случае $D_1 = 0$, если принять, что

$$C_1\Big|_{\Gamma_t} = \kappa \langle C \rangle_2 . \qquad (I.25)$$

Итак, в работе [4] принято, что концентрация твердой фазы на границе раздела фаз равновесна со средней концентрацией жидкой фазы. Нетрудно видеть, что такое предположение приведет к занижению концентрации в жидкой фазе и завышению концентрации в твердой фазе. В этом свете гипотеза (I.I9) кажется предпочтительней, т.к. несколько компенсирует занижение концентрации твердой фазы. Кроме того, отметим, что уравнения (I.20), (I.2I) имеют полностью дивергентный вид и значительно проще для анализа, чем соответствующие уравнения работы [4], в которой уравнение массового баланса вырождается по всем главным членам при $\eta_2 \to 0$, т.к. оно записано только для жидкой части объема V. Следует отметить, что хотя уравнение (I.2I) описывает только осредненные концентрации по твердой и жидкой фазам, нетрудно восстановить истинный состав твердой фазы в случае $D_1 = 0$ по известной величине $\langle C \rangle_1$. Определение (I.8) для $\langle C \rangle_1$ можем переписать в виде:

$$\langle C \rangle_1 \cdot \eta_1 = \int\limits_{\eta_1} C_1 \, dv_1 ,$$

Дифференцируя последнее соотношение по η_1, получим истинное значение концентрации в твердой фазе:

$$C_1(\eta_1) = \langle C \rangle_1 + \eta_1 \frac{\partial \langle C \rangle_1}{\partial \eta_1} . \qquad (I.26)$$

2. Обобщенная постановка задачи. Обобщенное решение

Система (I.20), (I.2I) осредненных по макромасштабам уравнений описывает кристаллизующуюся систему как сплошную среду, включая двухфазную область, если таковая существует. Для полного описания системы необходимо еще определить $\eta = \eta_1$, $(\eta_2 = 1 - \eta)$. Если считать, что система кристаллизуется без переохлаждения, η естественно определяется следующим образом:

$$\Delta u = T_e - T = T_A - f_e(C) - T ; \qquad (2.I)$$

$$\eta(\Delta u) = \begin{cases} 1, & \Delta u > 0 \\ 0, & \Delta u < 0 \end{cases} . \qquad (2.2)$$

Если существует область, где $\Delta u \equiv 0$, в ней также справедливы уравнения (I.20), (I.2I) и, следовательно, η определяется этими уравнениями при $\Delta u = 0$ как функция x, t.

Полная постановка задачи должна замыкаться заданием начальных и внешних граничных условий. Начальные условия должны включать в себя задание функций T и C и функции $\eta_0(x, 0)$, если в начальный момент существует двухфазная зона. На внешней границе области задаются обычные условия I-го, 2-го или 3-го рода.

В случае спонтанной объемной кристаллизации для функции η можно получить определенное соотношение. Если считать, что скорость зародышеобразования дается выражением, ср. [3]:

$$J = A\exp\left(-B/\Delta u^2\right), \tag{2.3}$$

где A и B - экспериментальные константы, то число зародышей f в элементарном объеме V дается выражением [8]

$$f = V\int_{t_0}^{t} J(\tau)\left(1-\eta(\tau)\right)d\tau. \tag{2.4}$$

Долю твердой фазы η определим в предположении независимого роста отдельных зародышей. Для одного зародыша, возникшего в момент t', относительный объем твердой фазы $W(t,t')$ был определен в работе [3] с учетом влияния теплоотвода и диффузии:

$$W(t,t') = \left(\beta_0\int_{t_0}^{t}\left[\Delta u - \left(f_\ell\left(\frac{C_0}{a}\right) - f_\ell(C_0)\right)\right]d\tau\right)^{3/2}, \tag{2.5}$$

где

$$\beta_0 = 5\lambda/\gamma\rho,\quad a = 1-(1-\kappa)\left(1-\exp(-\delta\dot{r}D^{-1}\right) \approx \kappa, \tag{2.6}$$

$\dot{r}$-скорость роста зародыша, δ- толщина диффузионного слоя. Тогда относительный объем всех зародышей определится интегралом:

$$\eta(t) = \int_{t_0}^{t} J(t')\left(1-\eta(t')\right)W(t,t')\,dt', \tag{2.7}$$

а производная $\partial\eta/\partial t$ выражением:

$$\frac{\partial\eta}{\partial t} = \frac{3}{2}\beta_0\left(\Delta u - f_\ell\left(\frac{C_0}{a}\right) + f_\ell(C_0)\right)\int_{t_0}^{t} J(t')\left(1-\eta(t')\right)W^{1/3}(t,t')\,dt'. \tag{2.8.}$$

В последних формулах всюду имеются в виду осредненные величины, причем знаки осреднения опущены. Задача замыкается условием $\eta = 1$, по которому определяется граница твердой фазы.

Обобщенная формулировка уравнений (I.20), (I.21) имеет дивергентную форму и весьма просто позволяет ввести обобщенное решение. Сформулируем определение обобщенного решения, например, для первой краевой задачи с однородными граничными условиями. Ниже для упрощения записей будем опускать знаки осреднения.

Определение. Обобщенным решением первой краевой задачи для системы (I.20), (I.21) назовем функции T, C класса $V_2^{1,0}(Q_T)$ (см. [9]) и ограниченную функцию η, удовлетворяющие интегральным тождествам:

$$\int\limits_{Q_T}\left[-(\mathcal{L}T-\gamma\rho\eta)\frac{\partial\psi_1}{\partial t}+\lambda\frac{\partial T}{\partial x_i}\,\frac{\partial\psi_1}{\partial x_i}\right]dx\,dt+$$

$$+\int\limits_{Q}(\mathcal{L}T-\gamma\eta)\Big|_{t=0}\cdot\psi_1\Big|_{t=0}\cdot dx=0, \tag{2.9}$$

$$\int\limits_{Q_T}\left[-(1-\eta+\eta k)C\frac{\partial\psi_2}{\partial t}+D\frac{\partial C}{\partial x_i}\,\frac{\partial\psi_2}{\partial x_i}\right]dx\,dt+$$

$$+\int\limits_{Q}(1-\eta+\eta k)C\Big|_{t=0}\cdot\psi_2\Big|_{t=0}\cdot dx=0 \tag{2.10}$$

с произвольными функциями ψ_1, ψ_2 класса $W_2^{2,1}(Q_T)$, обращающимися в нуль на внешней границе S области Q и при $t=T$. $Q_T=Q\times[0,T]$.

3. Сведение уравнений к системе, параболической по И.Г.Петровскому

Покажем, что система (I.20), (I.21) является системой, параболической по И.Г.Петровскому. Все коэффициенты уравнений являются функциями η, а η может быть разрывной функцией Δu. Предварительно заменив функцию η на сглаженную $\tilde\eta$ и учитывая, что (согласно (2.I)):

$$\frac{\partial\tilde\eta}{\partial t}=\frac{\partial\tilde\eta}{\partial\Delta u}\,\frac{\partial\Delta u}{\partial t}=-\frac{\partial\tilde\eta}{\partial\Delta u}\left(\frac{\partial T}{\partial t}+\frac{\partial f_e(C)}{\partial C}\,\frac{\partial C}{\partial t}\right), \tag{3.1}$$

преобразуем уравнения (I.20), (I.21) к виду (для случая $k=\mathrm{const}$):

$$a_1\frac{\partial T}{\partial t}+a_2\frac{\partial C}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\tilde{\lambda}\cdot\frac{\partial T}{\partial x_i}\right), \tag{3.2}$$

$$a_3\frac{\partial T}{\partial t}+a_4\frac{\partial C}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\tilde{D}\frac{\partial C}{\partial x_i}\right). \tag{3.3}$$

Здесь $\tilde{\lambda}=\lambda(\tilde{\eta})$, $\tilde{D}=D(\tilde{\eta})$.

Разрешая систему (3.2), (3.3) относительно $\frac{\partial T}{\partial t}, \frac{\partial C}{\partial t}$ и приводя главные члены к дивергентному виду, получим систему:

$$\frac{\partial T}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x_i}\left(a_{11}\frac{\partial T}{\partial x_i}\right)+\frac{\partial}{\partial x_i}\left(a_{12}\frac{\partial C}{\partial x_i}\right)+F_1(T,C,T_x,C_x), \tag{3.4}$$

$$\frac{\partial C}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x_i}\left(a_{21}\frac{\partial T}{\partial x_i}\right)+\frac{\partial}{\partial x_i}\left(a_{22}\frac{\partial C}{\partial x_i}\right)+F_2(T,C,T_x,C_x). \tag{3.5}$$

Здесь

$$\left.\begin{aligned}
&a_1=\mathcal{L}+\gamma\rho\tilde{\eta}'(\Delta u),\quad a_2=\gamma\rho f_e'(C)\tilde{\eta}'(\Delta u),\\
&a_3=(1-\kappa)C\tilde{\eta}'(\Delta u),\quad a_4=1-(1-\kappa)\tilde{\eta}+(1-\kappa)Cf_e'(C)\tilde{\eta}'(\Delta u),\\
&a_{11}=\tilde{\lambda}P^{-1}\cdot a_4,\quad a_{12}=-\tilde{D}P^{-1}\cdot a_2,\\
&a_{21}=-\tilde{\lambda}P^{-1}\cdot a_3,\quad a_{22}=\tilde{D}P^{-1}\cdot a_1,\quad P=a_1a_4-a_2a_3
\end{aligned}\right\} \tag{3.6}$$

, F_1, F_2 - функции, включающие в себя все члены низшего порядка.

Система (3.4), (3.5) будет параболической по И.Г. Петровскому, ѐсли всѐ корни определителя

$$\begin{vmatrix} a_{11}+\sigma & a_{12} \\ a_{21} & a_{22}+\sigma \end{vmatrix} \qquad (3.7)$$

имеют отрицательные действительные части [10], с.352. В нашем случае достаточно, чтобы было

$$\left.\begin{aligned} \sigma_1\cdot\sigma_2 &= a_{11}\cdot a_{22}-a_{12}\cdot a_{21}>0 \\ \sigma_1+\sigma_2 &= -(a_{11}+a_{22})<0 \end{aligned}\right\}. \qquad (3.8)$$

Будем полагать, что диаграмма фазового равновесия такова, что $f_\ell'(C)\geqslant 0$. Тогда, учитывая, что $\tilde{\eta}'(\Delta u)>0$, легко показать, что $P>0$ и все коэффициенты $a_{11}, a_{12}, a_{21}, a_{22}$ также положительны. Тогда второе неравенство (3.8) очевидно. Покажем, что выполняется первое неравенство (3.8)

$$a_{11}\cdot a_{22}-a_{12}\cdot a_{21}=\tilde{D}\,\tilde{\lambda}\cdot P^{-2}(a_4\cdot a_1-a_2\cdot a_3)=\tilde{D}\cdot\tilde{\lambda}\cdot P^{-1}>0$$

при любых значениях параметров. Итак, система (3.4),(3.5), а следовательно и система (I.20), (I.2I), является параболической по И.Г.Петровскому.

Однако, эта система не является сильно параболической. Действительно, для того, чтобы система (3.4), (3.5) была сильно параболической, необходимо, чтобы главная часть соответствующего эллиптического оператора удовлетворяла условию (см., например, [II], с.244):

$$\int_Q A_{ij}\cdot\frac{\partial\vec{v}}{\partial x_i}\cdot\frac{\partial\vec{v}}{\partial x_j}\,dx \geqslant \nu\int_Q\sum_i\left(\frac{\partial\vec{v}}{\partial x_i}\right)^2 dx-\mu\int_Q\vec{v}\,dx, \qquad (3.9)$$

где

$$A_{ij}=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22}\end{pmatrix},\quad v=\begin{Bmatrix} T \\ C\end{Bmatrix},\quad \nu>0,\ \mu>0.$$

В нашем случае

$$\int\limits_Q A_{ij}\frac{\partial \vec{v}}{\partial x_i}\,\frac{\partial \vec{v}}{\partial x_j}\,dx=\int\limits_Q\Big\{\sum_i\Big[a_{11}\Big(\frac{\partial T}{\partial x_i}\Big)^2+a_{22}\Big(\frac{\partial C}{\partial x_i}\Big)^2\Big]-$$

$$-(a_{12}+a_{21})\frac{\partial T}{\partial x_i}\cdot\frac{\partial C}{\partial x_i}\Big\}\,dx$$

и для того, чтобы получить положительную константу ν, необходимо чтобы было

$$4a_{11}\cdot a_{22}-(a_{12}+a_{21})>0 \qquad (3.10)$$

или

$$4\tilde{D}\cdot\tilde{\lambda}\cdot a_1\cdot a_4>\tilde{\lambda}^2\cdot a_3^2+\tilde{D}^2\cdot a_2^2+2\tilde{\lambda}\cdot\tilde{D}\cdot a_2\cdot a_3. \qquad (3.11)$$

Учитывая значения $a_1,\ldots,a_4$ (3.6) получим:

$$4\tilde{\lambda}\cdot\tilde{D}(\mathcal{L}+\gamma\rho\tilde{\eta}')\left[1-(1-\kappa)\tilde{\eta}+(1-\kappa)\cdot C\cdot f_e'(C)\tilde{\eta}'\right]-$$

$$-2\tilde{\lambda}\tilde{D}(1-\kappa)C\cdot\gamma\cdot f_e'(C)(\tilde{\eta}')^2-\lambda^2(1-\kappa)^2C^2(\tilde{\eta}')^2-$$

$$-\tilde{D}^2(f_e'(C))^2\cdot(\tilde{\eta}')^2>0. \qquad (3.12)$$

Упрощая, получим неравенство

$$4\tilde{\lambda}\tilde{D}\left[(\mathcal{L}+\gamma\rho\cdot\tilde{\eta}')(1-(1-\kappa)\tilde{\eta})+(1-\kappa)C\cdot f_e'\cdot\tilde{\eta}'\right]-$$

$$-(\tilde{\eta}')^2(\tilde{\lambda}(1-\kappa)C-Df'\cdot\gamma\rho)^2>0. \qquad (3.13)$$

При больших значениях $\tilde{\eta}'$ последнее неравенство не будет выполнено. В нашем случае $\tilde{\eta}'$ может возрастать до ∞, так как η может терпеть разрывы первого рода. Поэтому система (3.4), (3.5) не является сильно параболической.

4. Существование обобщенного решения задачи

Доказательство существования решения непосредственно для системы (I.20),(I.2I) затруднительно из-за трудности получения априорных оценок для системы, параболической по И.Г.Петровскому. Предварительно сведем эту систему к сильно параболической системе, зависящей от параметра. Положим, что скорость объемной кристаллизации пропорциональна переохлаждению:

$$\frac{\partial\eta}{\partial t} = \beta\,\Delta u\,\theta(\Delta u)\,\theta(1-\mathcal{J}). \tag{4.I}$$

При этом η определим выражением:

$$\eta = \mathcal{J}(t)\,\theta(1-\mathcal{J}) + \theta(\mathcal{J}-1) \tag{4.2}$$

с учетом того, что в твердой фазе $\eta = 1$. Здесь

$$\mathcal{J}(t) = \beta\int_0^t \Delta u\,\theta(\Delta u)\,d\tau, \tag{4.3}$$

$$\theta(x) = \begin{cases} 0, & x<0 \\ 1, & x\geq 0 \end{cases}$$ – единичная функция,

Δu дается выражением (2.I), β – параметр, определяющий скорость кристаллизации. Из физических соображений ясно, что если скорость кристаллизации стремится к бесконечности ($\beta\to\infty$), то в пределе получим исходную задачу (I.20), (I.2I),(2.2), не допускающую переохлаждения. Предельное решение такой задачи, повидимому, должно совпадать с решением исходной обобщенной задачи. Докажем это строго, а именно, мы докажем, что обобщенное решение задачи (I.20), (I.2I),(2.2), определенное выше, есть предел при $\beta\to\infty$ решений $T_\beta, C_\beta, \eta_\beta$ соответствующих задач для системы:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\mathcal{L}T) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial x_i}\right) + \beta\gamma\rho\,\Delta u\,\theta(\Delta u)\,\theta(1-\mathcal{J}), \tag{4.4}$$

$$\left(1-(1-\kappa)\eta+C\kappa'(C)\eta\right)\frac{\partial C}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x_i}\left(D\frac{\partial C}{\partial x_i}\right)+$$
$$+\beta\cdot(1-\kappa)\cdot C\cdot\Delta u\cdot\theta(\Delta u)\,\theta(1-J). \tag{4.5}$$

Диаграмму фазового равновесия дополним так, чтобы при $C<0$ и $C>1$ было $\kappa(C)\equiv 1$, см.рис.4.I.

$$\kappa(C)=\begin{cases}1, & C<0\\ \kappa(C), & 0\leq C\leq 1\\ 1, & C>1\end{cases} \tag{4.6}$$

Получим оценку в классе $V_2^{1,0}(Q_T)$, равномерную относительно β . С этой целью умножим уравнение (4.4) на T , (4.5) на C , проинтегрируем по области Q_T и сложим. Получим:

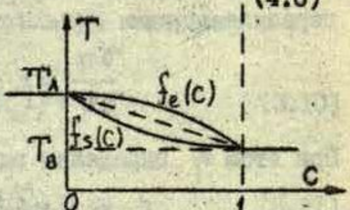

Рис.4.I. Вид диаграммы фазового равновесия

$$\int\limits_{Q_T}\left[0{,}5\,\varkappa\frac{\partial T^2}{\partial t}+0{,}5\left(1-(1-\kappa)\eta\right)\frac{\partial C^2}{\partial t}+C^2\cdot\eta\cdot\kappa'(C)\frac{\partial C}{\partial t}\right]dx\,dt+$$
$$+\int\limits_{Q_T}\left[\sum_i\lambda\left(\frac{\partial T}{\partial x_i}\right)^2+D\left(\frac{\partial C}{\partial x_i}\right)^2\right]dx\,dt= \tag{4.7}$$
$$=\int\limits_{Q_T}\left[\gamma\rho T+(1-\kappa)C^2\right]\frac{\partial\eta}{\partial t}\,dx\,dt\,.$$

Преобразуем первый интеграл в (4.7) к следующему виду:

$$0{,}5\int\limits_{Q}\left[\varkappa T^2\Big|_0^T+\left(1-(1-\kappa)\eta\right)C^2\Big|_0^T\right]dx+0{,}5\int\limits_{Q_T}(1-\kappa)C^2\frac{\partial\eta}{\partial t}\,dx\,dt+$$
$$+0{,}5\int\limits_{Q_T}C^2\cdot\eta\cdot\kappa'(C)\frac{\partial C}{\partial t}\,dx\,dt. \tag{4.8}$$

Будем считать, что $\kappa(C)$ такова, что $\kappa'(C)>0$ и существует первообразная $\varphi(C)>0$ от $C^2\cdot\kappa'(C)$:

$$\varphi'(C)=C^2\kappa'(C). \tag{4.9}$$

Тогда последний интеграл в (4.8) преобразуется так:

$$\int\limits_{Q_T}\eta C^2\cdot\kappa'(C)\frac{\partial C}{\partial t}\,dx\,dt=\int\limits_{Q_T}\eta\frac{\partial\varphi}{\partial t}\,dx\,dt=$$

$$=\int\limits_{Q}\left[\varphi\eta\right]_0^T dx-\int\limits_{Q_T}\varphi\frac{\partial\eta}{\partial t}\,dx\,dt. \tag{4.10}$$

Учитывая все это, преобразуем равенство (4.7):

$$0{,}5\int\limits_{Q}\left(\varkappa T^2+\left(1-(1-\kappa)\eta\right)C^2+\varphi\eta\right)dx+$$

$$+\int\limits_{Q_T}\sum_i\left[\lambda\left(\frac{\partial T}{\partial x_i}\right)^2+D\left(\frac{\partial C}{\partial x_i}\right)^2\right]dx\,dt=$$

$$=\int\limits_{Q}\left(\varkappa T^2+\left((1-(1-\kappa)\eta\right)C^2+\varphi\eta\right)\Big|_{t=0}dx+$$

$$+\int\limits_{Q_T}\left(\gamma\rho T+0{,}5(1-\kappa)C^2+0{,}5\varphi\right)\frac{\partial\eta}{\partial t}\,dx\,dt. \tag{4.11}$$

Оценим сверху последний интеграл в (4.II). Согласно (4.I) $\partial\eta/\partial t\geq 0$. Кроме того, из неравенства $\Delta u\geq 0$ следует, что $T<T_A$. И так как при $C<0$ и $C>1$ $1-\kappa=0$, $\varphi=0$, то последний интеграл I оценивается сверху:

$$I\leq\left[\gamma\rho T_A+0{,}5\max_{0\leq C\leq 1}\left((1-\kappa)C^2+\varphi\right)\right]\cdot\int\limits_{Q_T}\frac{\partial\eta}{\partial t}\,dx\,dt=$$

$$=M_1\int\limits_{Q}(\eta-\eta_0)\,dx\leq M_1\cdot\operatorname{mes}Q=M_2. \tag{4.12}$$

Последнее неравенство и равенство (4.II) позволяют получить равномерную оценку:

$$0{,}5\,\mathcal{L}_0\int\limits_Q T^2\,dx+0{,}5\,\kappa_0\int\limits_Q C^2\,dx+\int\limits_{Q_T}\sum_i\left[\lambda_0\left(\frac{\partial T}{\partial x_i}\right)^2+\right.$$

$$\left.+D_0\left(\frac{\partial C}{\partial x_i}\right)^2\right]dx\,dt\leqslant\int\limits_Q\left(\mathcal{L}T^2+(1-(1-\kappa)\eta)C^2+\varphi\eta\right)\Big|_{t=0}dx+M_2. \tag{4.I3}$$

Здесь введены обозначения

$$\mathcal{L}_0=\min\mathcal{L},\ \kappa_0=\min\kappa(C),\ \lambda_0=\min\lambda,\ D_0=\min D. \tag{4.I4}$$

Если обозначить еще

$$\vartheta_1=0{,}5\min\{\mathcal{L}_0,\kappa_0\},\quad \vartheta_2=\min\{\lambda_0,D_0\}, \tag{4.I5}$$

то последнее неравенство можно записать в более компактной форме:

$$\|v\|_{V_2^{1,0}(Q_T)}=\vartheta_1\max\int\limits_Q\vec{v}^{\,2}dx+\vartheta_2\int\limits_{Q_T}\sum_i\left(\frac{\partial\vec{v}}{\partial x_i}\right)^2dx\,dt\leqslant M(T), \tag{4.I6}$$

где $\vec{v}=\{T,C\}$ и M не зависит от β .

Эта оценка позволяет выбрать из последовательности функций T_β , C_β , η_β подпоследовательность такую, что T_{β_n} , C_{β_n} сходятся сильно в норме $L_2(Q_T)$, $\partial T_{\beta_n}/\partial x_i$, $\partial C_{\beta_n}/\partial x_i$ сходятся слабо в $L_2(Q_T)$, причем соответствующая последовательность η_{β_n} также слабо сходится в $L_2(Q_T)$. Такая сходимость позволяет перейти к пределу под знаком интеграла в тождествах, записанных для T_{β_n} , C_{β_n} , η_{β_n}, аналогично тождествам (2.9),(2.I0).

Следовательно, предельные функции T , C , η являются обобщенным решением исходной задачи. Существование решения задачи для системы (4.4),(4.5) при конечном значении β докажем в следующем параграфе методом конечных разностей.

5. Конечно-разностный метод решения задачи

Переходим к доказательству существования решения первой краевой задачи для системы (4.4),(4.5). Одновременно будет предложен сходящийся разностный метод решения задачи. Для упрощения записей рассмотрим одномерную задачу. Аппроксимируем систему (4.4),(4.5) неявной разностной схемой следующим образом:

$$\mathcal{L} T_t = \left(\lambda_i^n T_x^{n+1}\right)_{\bar{x}} + \gamma \rho \eta_{\bar{t}}\,, \tag{5.I}$$

$$\left[1-(1-\kappa_i^n)\eta_i^n + \left(C_i^{n+1}\kappa'(C_i^n)\right)\cdot\eta_i^n\right]C_t = \left(D_i^n C_x^{n+1}\right)_{\bar{x}} + (1-\kappa_i^n)C_i^n\,\eta_{\bar{t}}\,, \tag{5.2}$$

$$\eta_i^n = \mathcal{J}_i^n\cdot\theta(1-\mathcal{J}_i^n) + \theta(\mathcal{J}_i^n - 1) \tag{5.3}$$

$$\mathcal{J}_i^n = \beta\sum_{m=1}^{n}\Delta u_i^m\cdot\theta(\Delta u_i^m)\tau \tag{5.4}$$

Тогда

$$\eta_{\bar{t}} = \tau^{-1}\left(\eta_i^n - \eta_i^{n-1}\right) = \begin{cases}\beta\Delta u_i^n\,\theta(\Delta u_i^n), & \mathcal{J}_i^n,\ \mathcal{J}_i^{n-1} < 1,\\ \tau^{-1}\left(1-\mathcal{J}_i^{n-1}\right), & \mathcal{J}_i^n > 1,\ \mathcal{J}_i^{n-1} < 1,\\ 0, & \mathcal{J}_i^n,\ \mathcal{J}_i^{n-1} \geqslant 1\end{cases} \tag{5.5}$$

Отметим, что при аппроксимации уравнений (4.4.),(4.5.) все нелинейности взяты с предыдущего слоя, кроме коэффициента $C_i^{n+1}\cdot\kappa'(C_i^n)\cdot\eta_i^n$ при C_t. Такая аппроксимация необходима для осуществления предельного перехода (см. стр.24). По указанному коэффициенту необходимо проделать итерации. Сходимость итерационного процесса следует из полученной ниже оценки (5.I6.).

Здесь и далее приняты следующие обозначения

$$
\begin{aligned}
&u_i^n = u(x_i, t_n);\ u_x^n = h^{-1}(u_{i+1}^n - u_i^n);\\
&u_{\bar{x}}^n = h^{-1}(u_i^n - u_{i-1}^n);\ u_t = \tau^{-1}(u_i^{n+1} - u_i^n);\\
&u_{\bar{t}} = \tau^{-1}(u_i^n - u_i^{n-1});\ \kappa_c = (\kappa_i^{n+1} - \kappa_i^n)/(C_i^{n+1} - C_i^n);\\
&x_i = i\cdot h;\ i = 0,1,2,\dots N;\ t_n = n\cdot\tau;\ n = 0,1,2\dots;\\
&n_T = T/\tau.
\end{aligned}
\tag{5.6}
$$

h, τ - шаги сетки по x и t.

Будем считать, что на внешней границе выполняются однородные условия I-го рода. Начальные условия аппроксимируются обычным образом.

Для решения разностной задачи (5.I)-(5.5) получим априорную в классе сеточных функций оценку, аналогичную оценке (4.I6), равномерную относительно h, τ и β.

Умножим уравнения (5.I),(5.2) на τh и на T_i^{n+1}, C_i^{n+1} соответственно и просуммируем по i от 0 до $N-1$. Используя формулы суммирования по частям и однородные граничные условия $T_0^n = T_N^n = C_0^n = C_N^n = 0$ получим:

$$
\sum_{i=1}^{N-1}\left[T_t\cdot T_i^{n+1} + \left(1-(1-\kappa_i^n)\eta_i^n + C_i^{n+1}\cdot\kappa'(C_i^n)\right)\cdot C_i^{n+1}\cdot C_t\right]\cdot h\cdot\tau +
$$

$$
+\sum_{i=1}^{N-1}\left[\lambda_i^n (T_x^{n+1})^2 + D_i^n (C_i^{n+1})^2\right]\cdot h\cdot\tau =
$$

$$
=\sum_{i=1}^{N-1}\left[\left(\gamma\rho T_i^{n+1} + (1-\kappa_i^n)\cdot C_i^n\cdot C_i^{n+1}\right)\cdot\eta_{\bar{t}}\right]\cdot h\cdot\tau. \tag{5.7}
$$

Проделаем следующие преобразования, см. [I2], с.46:

$$T_t \cdot T_i^{n+1} = 0{,}5\left[(T^2)_t + \tau (T_t)^2\right],$$

$$C_t \cdot C_i^{n+1} = 0{,}5\left[(C^2)_t + \tau (C_t)^2\right],$$

$$\left(1-(1-\kappa_i^n)\eta_i^n\right)(C^2)_t = (C_i^{n+1})^2\left[(1-\kappa_i^{n+1})\eta_t - \eta_i^n \cdot \kappa_c \cdot C_t\right] + \qquad (5.8)$$

$$+\left(\left(1-(1-\kappa)\eta\right)\cdot C^2\right)_t .$$

Тогда

$$\left(1-(1-\kappa_i^n)\eta_i^n + C_i^{n+1}\cdot \kappa'(C_i^n)\cdot \eta_i^n\right) C_i^{n+1}\cdot C_t = 0{,}5\Big[\left(\left(1-(1-\kappa)\eta\right)C^2\right)_t +$$

$$+\tau (C_t)^2 + (C_i^{n+1})^2 (1-\kappa_i^{n+1})\eta_t + (C_i^{n+1})^2 \cdot \eta_i^n \cdot \kappa'(C)\cdot C_t\Big]. \qquad (5.9)$$

Будем считать, что $\kappa(C_i^n)$ такова, что существует функция $\varphi_i^n > 0$, которая определяется условием:

$$\frac{\varphi_i^{n+1} - \varphi_i^n}{C_i^{n+1} - C_i^n} = 0{,}5 (C_i^{n+1})^2 \cdot \kappa'(C_i^n). \qquad (5.10)$$

Тогда последнее слагаемое (в 5.9) можно преобразовать к виду:

$$\eta_i^n \varphi_t = (\eta \varphi)_t - \eta_t \cdot \varphi_i^{n+1}. \qquad (5.11)$$

Учитывая все эти преобразования в тождестве (5.7) и суммируя его по n от 0 до n_τ, получим:

$$0{,}5\|T_i^{n_\tau+1}\|_{2,Q^h} + 0{,}5\left\|\sqrt{1-(1-\kappa)\eta}\cdot C_i^{n_\tau+1}\right\|^2_{2,Q^h} + \sum_{i=1}^{N-1} (\eta\cdot\varphi)_i^{n_\tau+1}\cdot h +$$

$$+0{,}5\tau \|T_t\|^2_{2,Q^h_\tau} + 0{,}5\cdot\tau\|C_t\|^2_{2,Q^h_\tau} + \left\|\sqrt{\lambda_i^n}\cdot T_x\right\|^2_{2,Q^h_\tau} + \left\|\sqrt{D_i^n}\cdot C_x\right\|^2_{2,Q^h_\tau} =$$

$$=0{,}5\|T_i^0\|^2_{2,Q^h} + \left\|\sqrt{1-(1-\kappa)\eta}\cdot C_i^0\right\|^2_{2,Q^h} + \sum_{i=1}^{N-1} (\eta\varphi)_i^0 \cdot h + \qquad (5.12)$$

$$+\sum_{i=1}^{N-1}\sum_{n=0}^{n_\tau}\left[\left(\gamma\rho T_i^{n+1} + (1-\kappa_i^n)\cdot C_i^n \cdot C_i^{n+1}\right)\eta_t + \left(\varphi_i^{n+1} - 0{,}5 (C_i^{n+1})^2 (1-\kappa_i^{n+1})\right)\eta_t\right] h\tau .$$

Здесь введены обозначения сеточных норм:

$$\|C_i^n\|^2_{2,Q^h}=\sum_{i=1}^{N-1}(C_i^n)^2\cdot h;\ \|C_i^n\|^2_{2,Q^h_\tau}=\sum_{n=0}^{n_\tau}\sum_{i=1}^{N-1}(C_i^n)^2\cdot h\tau. \quad (5.13)$$

Последнюю сумму в равенстве (5.12) можно оценить сверху. Так как $\kappa_i^n=1$, $\varphi_i^n=0$ при $C_i^n<0$, $C_i^n>1$ и $\varphi_i^n>0$, то существует $\max\varphi_i^n=\varphi_0$. Кроме того $T_i^n<T_A$, $\eta_i^n\le 1$ и потому вся упомянутая сумма оценивается сверху:

$$\sum_{i=1}^{N-1}\sum_{n=0}^{n_\tau}[\ldots]h\tau\le\Big[\gamma\rho T_A+\max_{0\le C_i^n\le 1}\{(1-\kappa_i^n)C_i^nC_i^{n+1}\}\Big]\sum_{i=1}^{N-1}(\eta_i^{n_\tau}-\eta_i^{-1})h+$$

$$+\Big[0{,}5\max_{0\le C_i^n\le 1}\varphi_i^{n+1}+\max_{0\le C_i^n\le 1}\{(C_i^{n+1})^2(1-\kappa_i^{n+1})\}\Big]\sum_{i=1}^{N-1}(\eta_i^{n_\tau+1}-\eta_i^0)h\le M_1. \quad (5.14)$$

Учитывая все это и вводя еще обозначения:

$$\lambda_0=\min\lambda_i^n;\ D_0=\min D_i^n;\ \kappa_0=\min\{1-(1-\kappa)\eta\}, \quad (5.15)$$

получим неравенство, дающее необходимую оценку:

$$\max_n\|T_i^n\|^2_{2,Q^h}+\kappa_0\max_n\|C_i^n\|^2_{2,Q^h}+2\lambda_0\|T_x^{n+1}\|^2_{2,Q^h_\tau}+ \quad (5.16)$$

$$+2D_0\|C_x^{n+1}\|^2_{2,Q^h_\tau}\le M_2,$$

где

$$M_2=M_1+0{,}5\|T_i^0\|^2_{2,Q^h}+\|\sqrt{1-(1-\kappa_i^0)\eta_i^0}\cdot C_i^0\|^2_{2,Q^h}+\|\varphi_i^0\cdot\eta_i^0\|^2_{2,Q^h}.$$

Из оценки (5.16) следует, что линеаризованная система, соответствующая системе (5.1), (5.2) однозначно разрешима и устойчива.

Решения же системы (5.1), (5.2) T_i^n, C_i^n сходятся к некоторому пределу T, C в норме $V_2^{1,0}(Q_\tau)$, причем η_i^n слабо сходятся к η в норме $L_2(Q_\tau)$.

Для осуществления предельного перехода в соответствующих интегральных тождествах, преобразуем левую часть равенства (5.2) следующим образом:

$$\left(1-(1-\kappa_i^n)\eta_i^n+C_i^{n+1}\cdot\kappa'(C_i^n)\eta_i^n\right)C_t=(1-\kappa_i^n)C_i^n\cdot\eta_{\bar{t}}+$$
$$+\left(\left(1-(1-\kappa)\eta\right)C\right)_t+\tau\left((1-\kappa_i^n)C_i^n\cdot\eta_{\bar{t}}\right)_t. \qquad (5.17)$$

Теперь видим, что сумматорные тождества, записанные для разностных уравнений (5.I), (5.2) аналогично тождествам (2.9), (2.I0) будут отличаться от последних выражением, соответствующим последнему слагаемому в (5.I7):

$$J=\tau\sum_{n=0}^{n_T}\sum_{i=1}^{N-1}\left((1-\kappa_i^n)C_i^n\cdot\eta_{\bar{t}}\right)_t\cdot\psi_i^n\cdot h\tau.$$

Проделав соответствующие оценки, можно показать, что при конечных значениях β $J\to 0$ при $\tau\to 0$. Таким образом предельный переход при $\tau\to 0$, $h\to 0$ приводит к искомому решению T, C, η.

Предложенный разностный алгоритм может быть использован как эффективный метод решения исходной задачи. Отметим, что ограничения (4.9), (5.I0), наложенные на функцию $\kappa(C)$ равновесного распределения хотя и жесткие, но выполнимые, т.к. соответствующую кривую диаграммы фазового равновесия всегда можно аппроксимировать функцией $\kappa(C)$, удовлетворяющей требованиям (4.9), (5.I0). Для многомерных задач доказательство сходимости разностного метода остается таким же. Для численной же реализации следует применить один из методов расщепления многомерного оператора, ср., например, [I2].

Указанный алгоритм был опробован на модельной одномерной задаче кристаллизации однокомпонентного расплава. Метод быстро сходится при увеличении β и дает хорошую аппроксимацию двухфазной зоны, ср. [5], рис.2.

ЛИТЕРАТУРА

I. Иванцов Г.П. "Диффузионное" переохлаждение при кристаллизации бинарного сплава. -„ДАН", 1951, т.81, № 2, с.179-181.

2. Авдонин Н.А. Наличие переохлажденной зоны в тепловой модели процесса направленной кристаллизации слитка.- "Физика и Химия обработки материалов",1972, № 4,с.22--29.
3. Авдонин Н.А. Описание процессов затвердевания бинарных систем с учетом кинетики объемной кристаллизации. - В кн.: Вопросы теории кристаллизации,Рига, 1974, с.56 - - 77.(Учен.зап.Латв.ун-та. Т.216).
4. Борисов В.Т. Кристаллизация бинарного сплава при сохранении устойчивости.- "ДАН", 1961, т.136, № 3, с.583--586.
5. Авдонин Н.А. Теория двухфазной зоны и обобщенное решение задачи Стефана. - В кн.:Вопросы теории кристаллизации. Рига, 1974, с.39-55. (Учен.зап.Латв.ун-та.Т.216)
6. Демченко В.Ф. Некоторые математические модели кинетики фазовых превращений.- "Физика и Химия обработки материалов", 1970, № 4, с.124-131.
7. Демченко В.Ф. О численном решении некоторых задач кинетики фазовых превращений.- "Физика и Химия обработки материалов", 1970, № 5, с. 129-136.
8. Колмогоров А.Н. К статистической теории кристаллизации металлов. - "Изв.АН СССР. Отд.мат. и ест.наук", 1937, т.3, с. 355-361.
9. Ладыженская О.А. и др. Линейные и квазилинейные уравнения параболического типа.М."Наука", 1967. 736 с.
10. Петровский И.Г. Лекции об уравнениях с частными производными. М.,"Наука", 1961, 432 с.
11. Ладыженская О.А. Краевые задачи математической физики. М., "Наука", 1973.407 с.
12. Самарский А.А. Введение в теорию разностных схем. - М., "Наука", 1971. 552 с.

ТРЕХМЕРНАЯ НЕСТАЦИОНАРНАЯ ЗАДАЧА О ЗОННОЙ ПЛАВКЕ С НЕСИММЕТРИЧНЫМ НАГРЕВАТЕЛЕМ

Э.Н.Мартузане (ВЦ ЛГУ им.П.Стучки)

В настоящее время получили развитие методы выращивания монокристаллов в процессе бестигельной зонной плавки, связанные с тем или иным нарушением осевой симметрии плавящегося слитка, выращиваемого кристалла и индуктора. Поэтому стало важным исследовать влияние асимметрии системы на результаты бестигельной зонной плавки. В частности, оказалось важным выяснение влияния асимметрии теплового воздействия на фронт кристаллизации и равномерность распределения примесей по сечению выращенного кристалла,[I] .

В данной работе изучается температурное поле вблизи изотермы плавления при несимметричном расположении индуктора и вращении слитка. Задача изучения тепловых полей ставится как трехмерная задача теплопроводности в двухфазной среде с учетом скрытой теплоты кристаллизации и условий излучения на внешней поверхности слитка по закону Стефана-Больцмана.

I.ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Требуется рассчитать поле температур $T(\bar{x},\bar{r},\bar{\varphi},t)$ и форму поверхности изотермы фазового перехода в слитке в зависимости от мощности кругового индуктора, расположенного асимметрично относительно слитка.

Функция $T(\bar{x},\bar{r},\bar{\varphi},t)$ удовлетворяет уравнению теплопроводности в цилиндрической системе координат.

$$c\rho\frac{\partial T}{\partial t}=\lambda(T)\left(\frac{\partial^2 T}{\partial \bar{x}^2}+\frac{1}{\bar{r}}\frac{\partial}{\partial \bar{r}}\left(\bar{r}\frac{\partial T}{\partial \bar{r}}\right)+\frac{1}{\bar{r}^2}\frac{\partial^2 T}{\partial \bar{\varphi}^2}\right), \quad (I.I.)$$

$$t>0;\ 0\leq \bar{r}\leq R;\ x_{н}\leq \bar{x}\leq x_{к},$$

где c – теплоемкость; ρ – плотность;

$$\lambda(T)=\begin{cases}\lambda_{тв}, & T<T_{пл}\\ \lambda_{ж}, & T>T_{пл}\end{cases}$$ - теплопроводность

λтв.-теплопроводность твердой части;

λж.-теплопроводность жидкой части;

Тпл.-температура плавления;

R - радиус слитка; $x_н, x_к$ - координаты начала и конца слитка, соответственно. Выделение теплоты фазового перехода на поверхности раздела фаз описывается условием Стефана:

$$\mathcal{L}\rho\frac{\partial \Phi}{\partial t}+\left(\left[\lambda(T)\,grad\,T\right]_{T=T_{пл}^-}^{T=T_{пл}^+},\ grad\,\Phi\right), \qquad (I.2.)$$

где $\mathcal{L}$ - удельная скрытая теплота плавления; $\Phi(\bar{x},\bar{r},\bar{\varphi},t)$ - уравнение поверхности изотермы Т=Тпл.; $[\lambda(T)\,grad\,T]$ - означает скачок величины $\lambda(T)\,grad\,T$ через поверхность Т=Тпл. Учитывая излучение по закону Стефана-Больцмана и действие поверхностных источников тепла, создаваемых асимметрично-расположенным индуктором, условие на поверхности слитка записывается так:

$$-\lambda(T)\frac{\partial T}{\partial \bar{r}}\bigg|_{\bar{r}=R}=\varepsilon\sigma T^4-\left(\alpha\bar{x}+\beta+A\cos(\omega t+\varphi)\right), \qquad (I.3.)$$

где ε -степень чёрноты; σ_o - постоянная Стефана-Больцмана; α,β,A - параметры, характеризующие работу индуктора; $\omega=2\pi f$ - угловая скорость; f - частота вращения

$$\frac{\partial T}{\partial \bar{x}}\bigg|_{\bar{x}=x_н}=\frac{2}{3}\left(T_{пл}^{-3/2}-2\sqrt{\frac{\varepsilon\sigma_o}{5\lambda R}}\,\bar{x}\right)^{-5/3}\cdot 2\sqrt{\frac{\varepsilon\sigma_o}{5\lambda R}} \quad - (I.4.)$$

условие на твердом слитке, полученное из решения одномерной задачи теплопроводности для полубесконечного слитка с учетом излучения Стефана-Больцмана, [2] .

$$T=\left(T_{пл}^{-3/2}-2\sqrt{\frac{\varepsilon\sigma_o}{5\lambda R}}\,\bar{x}\right)^{-2/3}, \qquad (I.5.)$$

$$\left.\frac{\partial T}{\partial \bar{x}}\right|_{\bar{x}=x_к} = \alpha \quad \text{—} \tag{I.6.}$$

условие на жидком конце слитка.

По $\bar{\varphi}$ выполняется условие периодичности

$$T(\bar{x},\bar{r},\bar{\varphi},t) = T(\bar{x},\bar{r},\bar{\varphi}+2\pi i,t). \tag{I.7.}$$

Для определения параметров α, β, A следует учесть, что при $A=0$ асимметрия в расположении индуктора и слитка отсутствует. Будем считать, что при $t=0$ в плоскости $\bar{x}=0$ $T=T_{пл}$ и $\frac{\partial T}{\partial t}=0$. При этих условиях

$$\beta = \varepsilon \sigma_0 T_{пл}^4. \tag{I.8.}$$

Пусть индуктор расположен асимметрично относительно слитка, т.е. $A \neq 0$, и отсутствует вращение $\omega = 0$. Пусть изотермическая поверхность T=Тпл. описывается некоторой функцией $\bar{x}=F(\bar{r},\bar{\varphi},t)$, которая при $\bar{\varphi}=\varphi_0$ и $\bar{r}=R$ принимает значение $x_1 = F(R,\varphi_0,t)$, а при $\bar{\varphi}=\varphi_0+\pi$ и $\bar{r}=R$ $-x_2 = F(R,\varphi_0+\pi,t)$. Определим отклонение d как следующую величину

$$d = \max_{0<\varphi<\pi}\left(|x_1 - x_2|\right) \tag{I.9.}$$

Тогда $A = \alpha \cdot d$. $\quad$ (I.10.)

2. МЕТОД РЕШЕНИЯ

При решении задачи были введены следующие безразмерные величины

$$r = \frac{\bar{r}}{R};\quad x = \frac{\bar{x}}{R};\quad \bar{\varphi} = \bar{\varphi};\quad u = \frac{1}{K(u)}\cdot\frac{T-T_{пл}}{T_{пл}-T_1};$$

$$\tau = \frac{\lambda_1 t}{c\rho R^2};\quad K(u) = \begin{cases} 1, & T < T_{пл} \\ \lambda_1/\lambda_2, & T > T_{пл} \end{cases}, \tag{2.1.}$$

где T_1 - температура окружающей среды.

Скрытая теплота плавления, записанная условием Стефана (I.2.), вносится в уравнение (I.I.) в виде сосредоточенной на границе раздела фаз теплоемкости. При расчетах используется метод сглаживания коэффициента уравнения, содержащего δ -функцию [3] , т.е. тепло, сосредоточенное на поверхности раздела фаз "размазывается" на некоторый малый объем, содержащий эту поверхность, так, чтобы общее количество тепла осталось неизменным.

В принятых безразмерных переменных уравнение (I.I.) примет вид:

$$\alpha_s(u)\frac{\partial u}{\partial \tau} = \mathrm{div}(\mathrm{grad}\, u), \qquad (2.2.)$$

где $\alpha_s(u)$ после сглаживания будет следующей кусочно-постоянной функцией:

$$\alpha_s(u) = \begin{cases} 1, & u < -L \\ \alpha_1(u-L)^2 + \alpha_2(u-L) + \lambda_0, & -L < u < L \\ \lambda_0, & u > L \end{cases}, \qquad (2.3.)$$

$$\alpha_1 = -\frac{3b}{4L^3}, \quad \alpha_2 = \frac{1}{2L}\left(\lambda_0 - 1 - \frac{3b}{L}\right), \quad \lambda_0 = \frac{\lambda_{тв}}{\lambda_{ж}},$$

$$b = \frac{\mathcal{L}}{c(T_{пл} - T_1)};$$ $2L$ -интервал сглаживания

Условие (I.3.) на поверхности слитка будет следующее

$$-\frac{\partial u}{\partial r}\bigg|_{r=1} = \frac{\varepsilon\sigma_0 R}{\lambda(u)(T_{пл}-T_1)}\left(\kappa(u)u(T_{пл}-T_1)+T_{пл}\right)^4 -$$

$$-\frac{R}{\lambda(u)(T_{пл}-T_1)}\left\{\alpha\left(Rx + v\frac{c\rho R^2}{\lambda_{тв}}\tau\right) + \beta + A\cos\left(\omega\frac{c\rho R^2}{\lambda_{тв}} + \bar{\varphi}\right)\right\}. \qquad (2.4.)$$

Перейдем к неподвижной системе координат (z, r, φ, τ) связанной с покоящимся индуктором:

$$z = x + v\,\frac{c\rho R\tau}{\lambda_{т0}}\,, \quad \varphi = \overline{\varphi} + \omega\,\frac{c\rho R^2\tau}{\lambda_{т0}} \qquad (2.5.)$$

и введем обозначения

$$c_1 = \varepsilon\sigma_0 R(T_{пл} - T_1)^3, \; c_2 = \frac{T_{пл}}{T_{пл} - T_1}\,, \; c_3 = \frac{R}{T_{пл} - T_1}\,,$$

$$\mu_1 = \frac{c\rho R v}{\lambda_{т0}}\,, \quad \mu_2 = \frac{c\rho R^2\omega}{\lambda_{т0}}\,. \qquad (2.6.)$$

Тогда уравнения (2.2.) и (2.4.) примут следующий вид:

$$\alpha_3(u)\left(\frac{\partial u}{\partial \tau} + \mu_1\frac{\partial u}{\partial x} + \mu_2\frac{\partial u}{\partial \varphi}\right) = \operatorname{div}(\operatorname{grad} u)\,; \qquad (2.7.)$$

$$-\left.\frac{\partial u}{\partial r}\right|_{r=1} = \frac{c_1}{\lambda(u)}\left(c_2 + k(u)u\right)^4 - \frac{c_3}{\lambda(u)}\left(\alpha R z + \beta + A\cos\varphi\right). \qquad (2.8.)$$

Условие (I.4.) примет следующий вид:

$$\left.\frac{\partial u}{\partial z}\right|_{z=z_н} = \frac{4}{3}\sqrt{\frac{\varepsilon\sigma_0}{5\lambda(u)R}}\cdot\frac{1}{k(u)}\cdot c_3\left(T_{пл}^{-3/2} - 2\sqrt{\frac{\varepsilon\sigma_0}{5\lambda(u)R}}\;R(z - \tau\mu_1)\right)^{-5/3}. \qquad (2.9.)$$

Условие (I.6.) станет таким:

$$\left.\frac{\partial u}{\partial z}\right|_{z=z_к} = \frac{\alpha R}{k(u)(T_{пл} - T_1)}\,. \qquad (2.10.)$$

Для решения поставленной задачи была использована схема аппроксимационной поправки расщепления Н.Н.Яненко [4] для трехмерного параболического уравнения

$$\frac{u^{n+1/6}-u^{n}}{a\tau}=\Lambda_1 u^{n+1/6}$$
$$\frac{u^{n+2/6}-u^{n+1/6}}{a\tau}=\Lambda_2 u^{n+2/6}$$
$$\frac{u^{n+1/2}-u^{n+2/6}}{a\tau}=\Lambda_3 u^{n+1/2} \qquad (2.11.)$$
$$\frac{u^{n+1}-u^{n}}{\tau}=\Lambda u^{n+1/2},$$

где $\Lambda_1, \Lambda_2, \Lambda_3$ – конечно-разностные операторы по переменным $\varkappa, \tau, \varphi$, соответственно; $\Lambda=\sum_{i=1}^{3}\Lambda_i$. Известно, что схема (2.11.) имеет полную аппроксимацию и сильную устойчивость при $1/2 \le a \le 1$.

Разностная аппроксимация уравнения (2.7.) на первом подслое при неравномерной сетке по $\varkappa$ будет следующая:

$$\left(\alpha_i+\alpha_s(u)\mu_1\delta_i\right)u_{i+1jk}^{n+1/6}-\left(\beta_i+\frac{1}{a\tau}\right)u_{ijk}^{n+1/6}+ \qquad (2.12.)$$
$$+\left(\gamma_i-\alpha_s(u)\mu_1\delta_i\right)u_{i-1jk}^{n+1/6}=-\frac{u_{ijk}^{n}}{a\tau},$$

где

$$\alpha_i=\frac{2}{h_{i+1}(h_i+h_{i+1})};\ \beta_i=\frac{2}{h_i\cdot h_{i+1}};\ \gamma_i=\frac{2}{h_i(h_i+h_{i+1})};\ \delta_i=\frac{1}{h_i+h_{i+1}};$$

h_i, h_{i+1} – шаги по $\varkappa$.

Краевые условия (2.9.) и (2.10.) записываются следующим образом:

$$u_{1jk}=u_{2jk}-\frac{4}{3}\sqrt{\frac{\varepsilon\sigma_0}{5\lambda(u)R}}\ \frac{h_1 c_3}{\kappa(u)}\left(T_{пл}^{-3/2}-2\sqrt{\frac{\varepsilon\sigma_0 R}{5\lambda(u)}}(\varkappa-\mu_1\tau)\right)^{-5/3}, \qquad (2.13.)$$

$$u_{N-1jk}=u_{Njk}-\frac{ARh_k}{d\,\kappa(u)(T_{пл}-T_1)} \qquad (2.14.)$$

Значения функции u_{ijk} определяются методом прогонки [5]

Разностная аппроксимация уравнения (2.7.) на втором подслое будет следующая:

$$\frac{r_{j+1/2}}{r_j g^2} u^{n+2/6}_{ij+1k} - \left(\frac{2}{g^2} + \frac{\alpha_s(u)}{a\tau}\right) u^{n+2/6}_{ijk} + \frac{r_{j-1/2}}{r_j g^2} u^{n+2/6}_{ij-1k} = \qquad (2.15.)$$

$$= -\alpha_s(u) \frac{u^{n+1/6}_{ijk}}{a\tau} ,$$

где $r_{j+1/2}$, $r_{j-1/2}$ – значения координат по радиусу в половинных узлах разностной сетки; r_j -значение в целых узлах сетки.

Радиус покрывается разностной сеткой с равномерным шагом $g = r_{j+1} - r_j$, начиная с $r_1 = g/2$ до $r_M = R - g/2$

Для того, чтобы получить краевое условие для прогонки по r при $r = r_1$, необходимо записать разностную аппроксимацию уравнения

$$\alpha_s(u)\frac{\partial u}{\partial \tau} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial u}{\partial r}\right) \qquad (2.16.)$$

$$\alpha_s(u)\frac{u^{n+2/6}_{ijk} - u^{n+1/6}_{ijk}}{a\tau} = \frac{1}{r_1 g}\left(r_{3/2}\frac{\partial u}{\partial r}\Big|_{r=r_{3/2}} - r_{1/2}\frac{\partial u}{\partial r}\Big|_{r=r_{1/2}}\right).$$

Учитывая, что $r_{1/2} = 0$, будем иметь

$$\alpha_s(u)\frac{u^{n+2/6}_{i1k} - u^{n+1/6}_{i1k}}{a\tau} = \frac{r_{3/2}}{r_1}\cdot\frac{u^{n+2/6}_{i2k} - u^{n+2/6}_{i1k}}{g^2} , \qquad (2.17.)$$

откуда

$$u^{n+2/6}_{i1k} = \frac{r_{3/2}\, a\tau}{\alpha_s(u) r_1 g^2 + r_{3/2}\, a\tau} u^{n+1/3}_{i2k} +$$

$$+ \frac{\alpha_s(u) r_1 g^2 u_1^{n+1/6}}{\alpha_s(u) r_1 g^2 + r_{3/2}\, a\tau} . \qquad (2.18.)$$

Запишем разностную аппроксимацию уравнения (2.16.) при $r = r_m$:

$$\alpha_s(u)\frac{u_{imk}^{n+2/6}-u_{imk}^{n+1/6}}{a\tau}=\frac{1}{r_m g}\left(r_{m+1/2}\frac{\partial u}{\partial r}\Big|_{r_{m+1/2}}-r_{m-1/2}\frac{\partial u}{\partial r}\Big|_{r_{m-1/2}}\right). \quad (2.19.)$$

Учитывая условие на поверхности $r = R$ (2.4.), получим следующее конечно-разностное выражение для краевого условия при $r = r_m$.

$$\frac{r_{m-1/2}}{r_m}\cdot\frac{u_{im-1k}^{n+2/6}}{g^2}=\left\{\frac{\alpha_s(u)}{a\tau}+\frac{r_{m-1/2}}{r_m g^2}+\frac{r_{m+1/2}}{r_m g}\,\frac{c_1}{\lambda(u)}\times\right.$$

$$\left.\times\left(c_2+k(u)u_{imk}^{n+1/6}\right)k(u)\right\}u_{imk}^{n+2/6}-\frac{\alpha_s(u)}{a\tau}u_{imk}^{n+1/6}+$$

$$+\frac{r_{m+1/2}}{r_m g}\left\{\frac{c_1}{\lambda(u)}c_2\left(c_2+k(u)u_{imk}^{n+1/2}\right)^3-\right.$$

$$\left.-\frac{c_3}{\alpha_s(u)}\left(\alpha R z+\beta+A\cos\varphi\right)\right\}. \quad (2.20.$$

На третьем подслое разностная аппроксимация с равномерным шагом ℓ по углу φ будет следующая:

$$\left(\frac{1}{r_j^2\ell^2}-\frac{\mu_2\alpha_s(u)}{2\ell}\right)u_{ijk+1}^{n+1/2}-\left(\frac{2}{r_j^2\ell^2}+\frac{\alpha_s(u)}{a\tau}\right)u_{ijk}^{n+1/2}+$$

$$+\left(\frac{1}{r_j^2\ell^2}+\frac{\mu_2\alpha_s(u)}{2\ell}\right)u_{ijk-1}^{n+1/2}=-\frac{\alpha_s(u)}{a\tau}u_{ijk}^{n+2/6}. \quad (2.21.)$$

Учитывая, что по углу φ должно выполняться условие периодичности, для определения значений функции на третьем подслое будем осуществлять циклическую прогонку, [6] .

На целом слое значения функции рассчитываются явным методом.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Задача (2.7.)-(2.10.) решалась численно на ЭВМ "ДЖИИ/4I5" при следующих значениях физических констант: R =2.25см; $x_н$ =-I.I25см; $x_к$=I.I25см; c =0.22кал/град; ρ= 2.3г/см^3; $\mathcal{L}$ =430кал/г; Тпл.=I690^{0}К; σ_0=0.75·I0^{-12} кал/см^{2}секград^4; ε=0.65; $\lambda_{тв}$= $\lambda_ж$=0.52Iкал/см сек град; d =0.3см; v =0 мм/мин; f=0,0I ÷ 2 об/сек.

Для счета была выбрана разностная сетка (x_i, r_j, φ_k) размера I9xI0x8;
Шаг по пространству h выбирался переменным: по краям слитка h_1 =0.225см; в середине - h_2=0.045см.
Шаг по радиусу g брался постоянным, равным 0.225см. Шаг по углу ℓ брался также постоянным, равным 0.7854. Устойчивый счет начинался при шаге по времени τ =0.0075сек.

По предложенной методике были рассчитаны температурные поля при различных угловых скоростях вращения.

На рисунке I представлены графики температуры в точке ($0, R, 0$) по времени; кривая I - для f =0.3об/сек; кривая 2 - для f =Iоб/сек.
Из этих графиков видно, что с увеличением времени амплитуда колебаний уменьшается, и температура выравнивается, причем для большей частоты этот процесс идет быстрее. Для частоты f=I об/сек для времени t =I4,7 сек. колебания температуры происходят в пределах I^0.

На рисунке 2 приводятся изотермы фазового перехода для плоскостей (x , r) по углам φ ; а) - для случая f =0.3об/сек. на момент времени процесса t =9,6сек; в) для случая f =Iоб/сек на момент времени процесса t = I4,7сек. Кривая I соответствует изотерме Т=Тпл для плоскости φ =0; кривая 2 - для $\varphi = \pi/4$; кривая 3 - для $\varphi=\pi/2$; кривая 4 - для $\varphi=\frac{3}{4}\pi$; кривая 5 - для $\varphi=\pi$; кривая 6- для $\varphi=5/4\,\pi$; кривая 7 - для $\varphi=3/2\,\pi$; кривая 8 - для $\varphi=\frac{7}{4}\pi$.

Этот рисунок дает представление о форме границы раздела фаз. На рисунке 3 изображены изотермы фазового перехода для плоскостей (r, φ) в разных сечениях по x ; а) для случая f =0.3об/сек на момент времени процесса t =9,6 сек. в) для случая f =1об/сек на момент времени процесса t = 14,7 сек.

На рисунке 4 представлены графики температуры в точках ($0, R, \varphi$); кривая I - для f =0,3об/сек;
кривая 2 - для f =1об/сек.

Из экспериментальных данных при отсутствии вращения величина отклонения d (I.9.) принимается равной 0,3 см. Как показал численный счет, на достигнутые моменты времени эта величина отклонения оказалась равной 0.081см для f =0,3 об/сек и 0,066см для f =1об/сек (рис.2).

Таким образом, можно сделать вывод, что увеличение угловой скорости вращения уменьшает влияние асимметрии в расположении системы слиток - индуктор, а, следовательно, обеспечивает более равномерное распределение примесей по сечению выращенного кристалла.

В заключение автор пользуется возможностью выразить благодарность Авдонину Н.А., Калису Х.Э., Мартузану Б.Я. за полезные советы и помощь в работе.

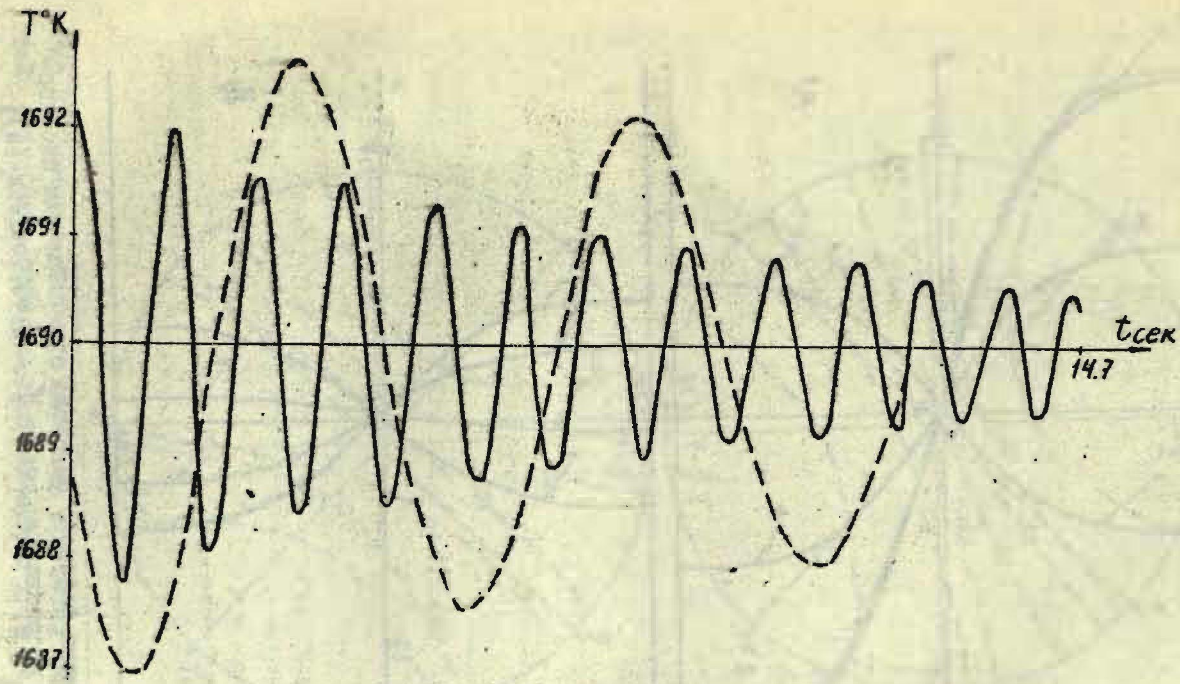

Рис.I. Температурные колебания по времени для определенной точки слитка при различных частотах вращения слитка: f =0,3об/сек (I); Iоб/сек(2)

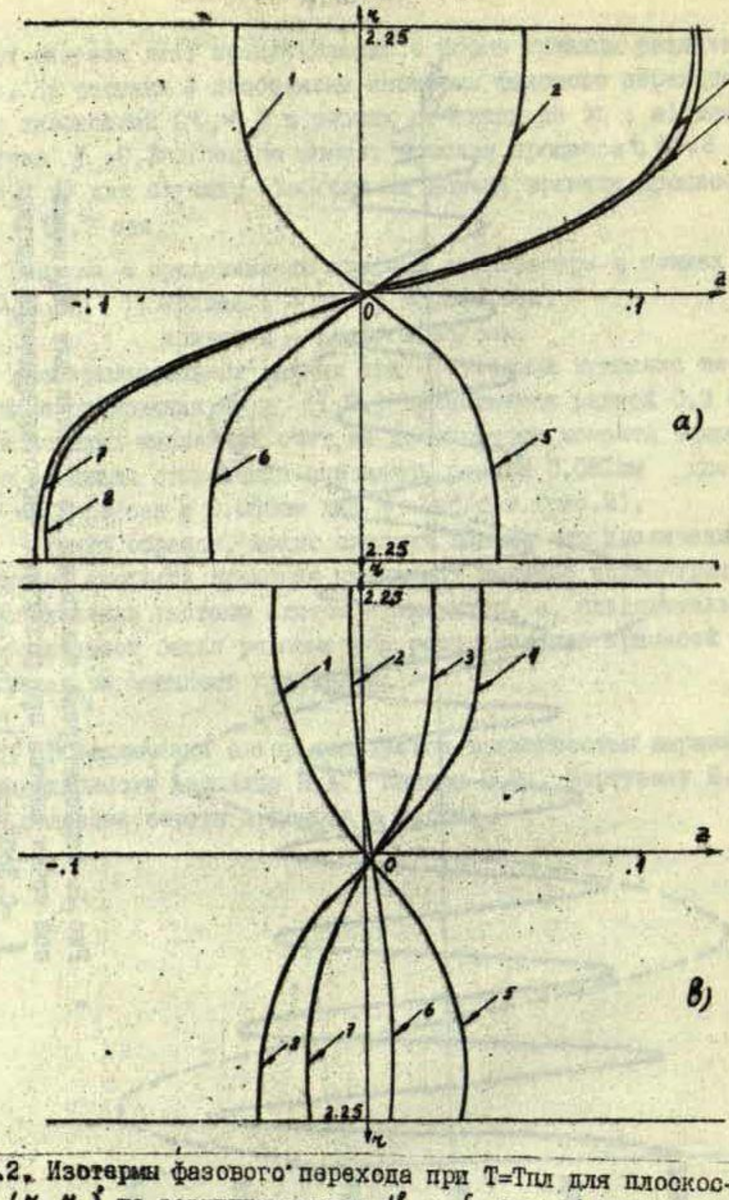

Рис.2. Изотермы фазового перехода при Т=Тпл для плоскостей (z, r) по различным углам φ : f =0,3об/сек (а); I об/сек (в)

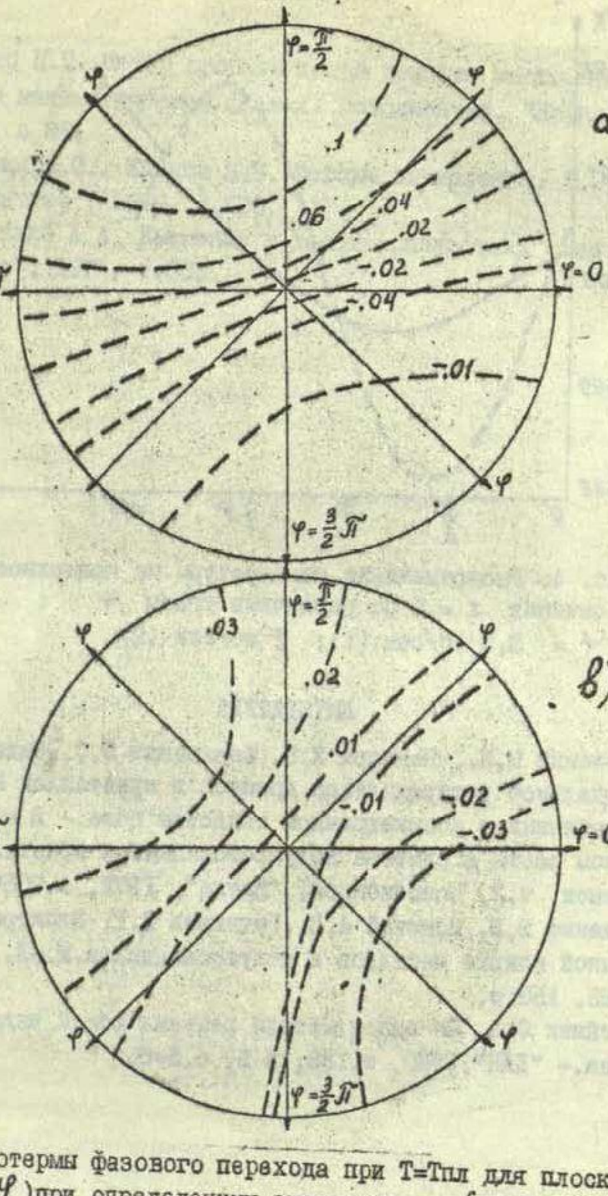

Рис.3. Изотермы фазового перехода при T=Tпл для плоскостей (τ, φ) при определенных значениях x ; f =0,3об/сек (а); I об/сек (в).

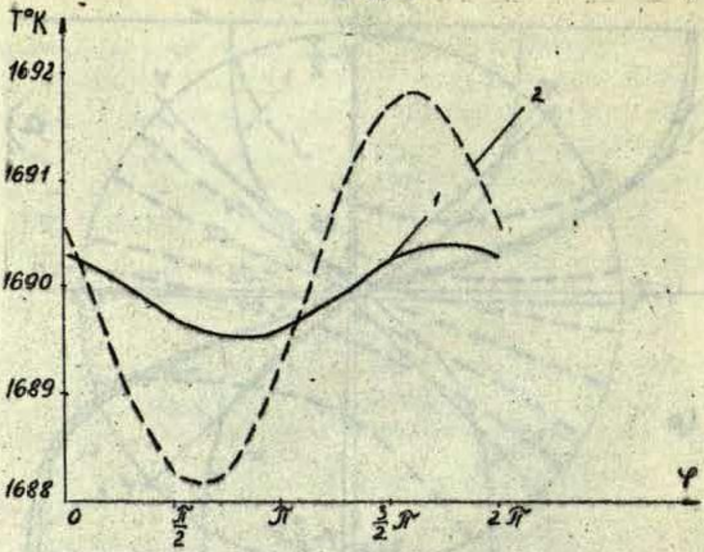

Рис. 4. Распределение температуры на поверхности слитка в сечении х = 0 по различным углам φ :
f = 0,3 об/сек (I); I об/сек (2).

ЛИТЕРАТУРА

I. Осовский М.И., Неймарк К.Н.,Фалькевич Э.С.,Сахаров Б.А. Радиальное распределение примеси в кристаллах кремния, выращенных в асимметричном тепловом поле.- В кн.: Процессы роста и синтеза полупроводниковых кристаллов и пленок. ч.2, Новосибирск, "Наука", 1972, с.208-2II.
2. Башенко В.В.,Донской А.В.,Ратников Д.Г. Электротермия зонной плавки металлов и полупроводников.М.-Л.,"Энергия", 1965. I53 с.
3. Олейник О.А. Об одном методе решения общей задачи Стефана.- "ДАН",1960, т.I35, № 5, с.5-8.

4. Яненко Н.Н. Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики. Новосибирск, "Наука", 1967, с 88.
5. Березин И.С., Жидков Н.П. Методы вычислений. Ч.2, М., "Физматгиз", 1959, с.506.
6. Самарский А.А. Введение в теорию разностных схем. М., "Наука", 1971, с.535.

РАСЧЕТ НАГРЕВА И ПЕРЕНОСА ГАЗА В ПРОЦЕССЕ ЭПИТАКСИАЛЬНОГО НАРАЩИВАНИЯ С УЧЕТОМ ВРАЩЕНИЯ ПЬЕДЕСТАЛА И ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ КОЭФФИЦИЕНТОВ

М.А.Кравченко, А.С.Кузнецов (ЗЧМ,г.Светловодск)
Б.Я.Мартузан, Н.Л.Уланова (ВЦ ЛГУ им.П.Стучки,г.Рига)

При выращивании эпитаксиальных пленок определяющими технологическими характеристиками являются температурное поле и поля компонент скорости газа, переносящего реагирующее вещество, поскольку именно температура определяет ход реакции, а скорость газа, в особенности вблизи подложек, определяет поступление вещества в зону реакции. Поэтому на выяснение этих вопросов направлены усилия многих исследователей.

Настоящая работа продолжает развиваемые в предыдущей работе [I] усилия по разработке математической модели процессов, имеющих место при эпитаксиальном наращивании в вертикальном реакторе открытого типа. Как и в работе [I] рассматривается щель между стенкой реактора и пьедесталом но здесь допускается вращение пьедестала, и исследуется влияние вращения на поступательные компоненты скорости газа. Кроме того в работе изучается влияние температурной зависимости вязкости и коэффициента теплопроводности газа на потоки и температуру газа.

Показано, что учет температурной зависимости вязкости мало влияет на результаты расчетов поступательных компонент скорости и температуру, сравнительно сильно влияет на вращательную компоненту скорости. Приводится приближенная формула для вращательной компоненты скорости при переменной вязкости. Учет зависимости коэффициента теплопроводности от температуры приводит к несущественному изменению поля скоростей, но значительно влияет на температурное распределение, в особенности на значения температурного градиента вблизи пьедестала. Кроме того показано слабое влияние вращения пьедестала на температуру и продольную компоненту скорости, а также сильное влияние вращения на поперечную компоненту скорости.

В отличие от предыдущей работы [1], теперь применяется цилиндрическая система координат (r, x) с осью x, направленной вдоль газового потока, $x=0$ на входе в щель между стенкой реактора и пьедесталом.

Система уравнений для вертикальной компоненты скорости u, радиальной компоненты скорости v и вращательной компоненты скорости w для сжимаемой жидкости с вязкостью, зависящей от температуры, с учетом естественной конвекции имеет вид [2]:

$$\frac{\partial(\rho u^2)}{\partial x} + \frac{1}{r}\frac{\partial(r\rho u v)}{\partial r} = 2\frac{\partial}{\partial x}\left(\mu\left[\frac{2}{3}\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{1}{r}\frac{\partial(rv)}{\partial r}\right]\right) + $$

$$+ \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} r\mu\left(\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial x}\right) - g\beta(T - T_0),$$

$$\frac{\partial(\rho u v)}{\partial x} + \frac{1}{r}\frac{\partial(r\rho v^2)}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\mu\frac{\partial u}{\partial r} + \mu\frac{\partial v}{\partial x}\right) + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\mu r\left(\frac{\partial v}{\partial r} - \right. \quad (I)$$

$$\left. - \frac{1}{3}\left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{r}\frac{\partial r v}{\partial r}\right)\right) + \frac{\rho w^2}{r} - \frac{\mu}{r}\left(\frac{2v}{r} - \frac{2}{3}\left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{r}\frac{\partial r v}{\partial r}\right)\right),$$

$$\frac{\partial(w u)}{\partial x} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial(r^2 v w)}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial x}\mu\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} r^3\mu\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{w}{r}\right),$$

$$R_0 < r < R_0 + H, \quad 0 < x < L,$$

где $\mu(T)$ - вязкость, зависящая от температуры,
L - высота щели,
T - температура газа,
T_0 - температура на входе в щель,
g - ускорение свободного падения,
β - коэффициент термического расширения, равный $\frac{1}{T}$
ρ - плотность газа, получаемая из уравнения состояния идеального газа,
R_0 - радиус пьедестала,
H - ширина щели.

Давление внутри реактора считается постоянным и равным I атм. Температура газа внутри щели удовлетворяет уравнению теплопроводности:

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda(T)\frac{\partial T}{\partial x}\right)+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\lambda(T)\frac{\partial T}{\partial x}\right)+u\frac{\partial T}{\partial x}+v\frac{\partial T}{\partial x}=0, \quad (2)$$

где $\lambda(T)$ - коэффициент теплопроводности.

В качестве краевых условий на входе в щель задавались постоянные значения компонент скорости $u=u_0$, $v=0$; на выходе из щели ставились условия: $\frac{\partial u}{\partial x}=\frac{\partial v}{\partial x}=\frac{\partial w}{\partial x}=0$, что соответствует условию установления потока: такое же условие принималось для w на входе в щель $-\partial w/\partial x=0$.

На твердых стенках задавались условия равенства нулю всех компонент скорости, кроме условия для w на стенке пьедестала, где принималось $w=2\pi\omega_0 R_0=w_0$, ω_0 - угловая скорость вращения пьедестала. Температура на пьедестале считалась заданной и обычно принималась постоянной $T_n=1250°C$. Условие на внутренней стенке реактора для температуры имело вид, ср. [I]:

$$\lambda(T)\frac{\partial T}{\partial r}=\lambda^*\left(\frac{T^*-T}{h^*}\right),$$

где λ^* - коэффициент теплопроводности материала стенки,
h - толщина стенки,
T^* - температура охлаждающей стенку воды.

Поставленная краевая задача решалась на ЭВМ методом, предложенным в [2].

Численные значения вязкости изучаемого газа (водорода) в зависимости от температуры были взяты из [4] и потом аппроксимировались полиномом 6-ой степени методом наименьших квадратов:

$$\mu(T)=0{,}194\cdot10^{-22}T^6-0{,}102\cdot10^{-18}T^5+0{,}212\cdot10^{-15}T^4-$$
$$-0{,}215\cdot10^{-12}T^3+0{,}106\cdot10^{-9}T^2-0{,}577\cdot10^{-8}T+0{,}539\cdot10^{-5}.$$

Аналогично учитывалась и зависимость коэффициента теплопроводности от температуры. Соответствующий полином имеет вид:

$$\lambda(T) = -0{,}151\cdot10^{-18}T^6 + 0{,}129\cdot10^{-15}T^5 - 0{,}477\cdot10^{-12}T^4 +$$

$$+0{,}950\cdot10^{-9}T^3 - 0{,}992\cdot10^{-6}T^2 + 0{,}866\cdot10^{-3}T - 0{,}0101.$$

На рисунке I приводятся результаты для продольной компоненты скорости u, рассчитанные с постоянными, а также с переменными вязкостью и теплопроводностью (кривые I-3). Как видно, имеющееся различие практически не существенно. Эти результаты были получены для плоской щели. Изменение, которое вносит переход на цилиндрическую систему координат для щели с $R_0=4H$, характеризуют результаты, приведенные на том же рисунке, для случаев вращающегося и покоящегося пьедестала (кривые 4 и 5). Ясно, что для этого случая переход на цилиндрическую систему координат внес ошибку, сравнимую с ошибкой, вносимой пренебрежением температурной зависимостью. Вращение же пьедестала, в сущности, не повлияло на продольную компоненту скорости.

На распределение температуры из всех этих факторов влияет только нелинейность коэффициента $\lambda(T)$. Особенно сильно это влияние проявляется при счете градиента температуры вблизи пьедестала, что показывает сравнение кривых I, 2 и 6 на рисунке 2. На этом же рисунке приводятся графики распределения градиента температуры вблизи пьедестала по высоте для различных значений температуры входящего газа (кривые 3-8). Эти кривые подтверждают качественный вывод о более равномерном распределении градиента при повышении температуры входящего газа, полученный в [I] при расчетах с пренебрежением температурной зависимостью λ.

На рисунке 3 приводится распределение массового расхода поперек щели для различных значений температуры входящего газа для случая зависимости λ и μ от температуры. Здесь также полностью сохраняется качественное поведение кривых в зависимости от температуры входящего газа, имеющееся в случае отсутствия температурной зависимости. Следует только заметить, что при учете температурных зависимостей возвратное течение вдоль поверхности пьедестала наступает при более высоких значениях температуры входящего газа. Так, на рисунке 3 оно появляется только при $T_0 = 1100^\circ C$, а в аналогичном случае с постоянными вязкостью и теплопроводностью при $T_0 = 900^\circ C$.

Значительно большее влияние рассматриваемые факторы оказывают на поперечную компоненту скорости v. Так, на рисунке 4 приводятся расчеты для плоской щели, цилиндрической щели без вращения и с вращением. Видно, что вращение увеличило компоненту v примерно в два раза.

Поскольку величина компоненты v представляется весьма важным технологическим параметром, ее зависимость от вращения может служить оправданием для введения вращательной компоненты w в математическое описание процесса. С другой стороны, такое введение увеличивает и так уже громоздкую систему уравнений Навье-Стокса. Однако, как следует из расчетов такой системы (I), компонента w слабо зависит от координаты x. Это позволяет предложить для расчетов компоненты w приближенные формулы.

Наиболее простой является классическая формула для течения жидкости между двумя вращающимися цилиндрами. Для случая покоящегося внешнего цилиндра она имеет вид [3]:

$$w(r) = \frac{R_0^2 \, w_0}{(R_0+H)^2 - R_0^2} \left(\frac{(R_0+H)^2}{r} - r \right). \qquad (3)$$

Значения w, рассчитанные по этой формуле и полученные при численном решении полной системы (I), приведены на рисунке 5. Согласие нельзя считать удовлетворительным хотя бы потому, что кривые ведут себя качественно по разному.

Можно легко вывести формулу, аналогичную формуле (3), для случая, когда жидкость между цилиндрами имеет вязкость зависящую от координаты r, путем решения упрощенного уравнения для компоненты w из системы (I). Для нашего случая такая формула имеет вид:

$$w(r) = \frac{w_0 r}{R_0 \int\limits_{R_0}^{R_0+H} \frac{dr}{\mu(r) r^3}} \int\limits_{R_0}^{r} \frac{dr}{\mu(r) r^3} + \frac{w_0}{R_0} r . \qquad (4)$$

Легко видеть, что формула (4) переходит в формулу (3) при постоянной вязкости.

Расчет по формуле (4) проводился со значениями вязкости $\mu(T(r))$, полученными для значений температуры, рассчитанной при отсутствии вращения. Полученные результаты фактически совпадают с кривой 2 на рисунке 5, представляющей решение системы I. Таким образом, для получения вращательной компоненты w нет необходимости включать соответствующее уравнение для нее в систему уравнений (I), а достаточно применить формулу (4) при известных зависимостях температуры от радиуса и вязкости от температуры.

ЛИТЕРАТУРА

I. Кравченко М.А. и др. О температурных градиентах в газовом потоке при эпитаксиальном наращивании кремния.- В кн.:Вопросы теории кристаллизации, вып.2, Рига, 1975, с.92-99.(Учен.зап.Латв.ун-та т.237).
2. Госмен А.Д. и др. Численные методы исследования течений вязкой жидкости. М.,"Мир", 1972. 323 с.
3. Слезкин Н.А. Динамика вязкой несжимаемой жидкости. М., "Гостехиздат", 1955. 519 с.
4. Теплофизические свойства веществ. Под ред.Н.Б.Варгафтика. М., "Госэнергоиздат", 1956, 630 с.

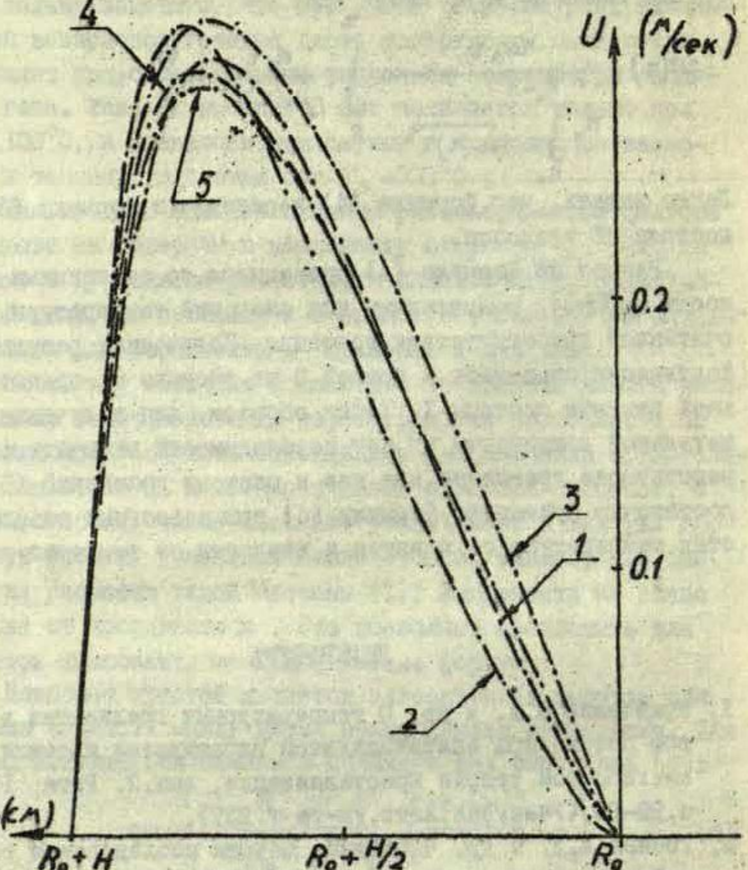

Рис.I Распределение компоненты скорости U.
I–3 декартовая система координат; I – постоянная вязкость и теплопроводность, 2– постоянная теплопроводность, переменная вязкость, 3 – переменная вязкость и теплопроводность; 4–5 цилиндрическая система координат; 4– пьедестал вращается; 5–пьедестал не вращается

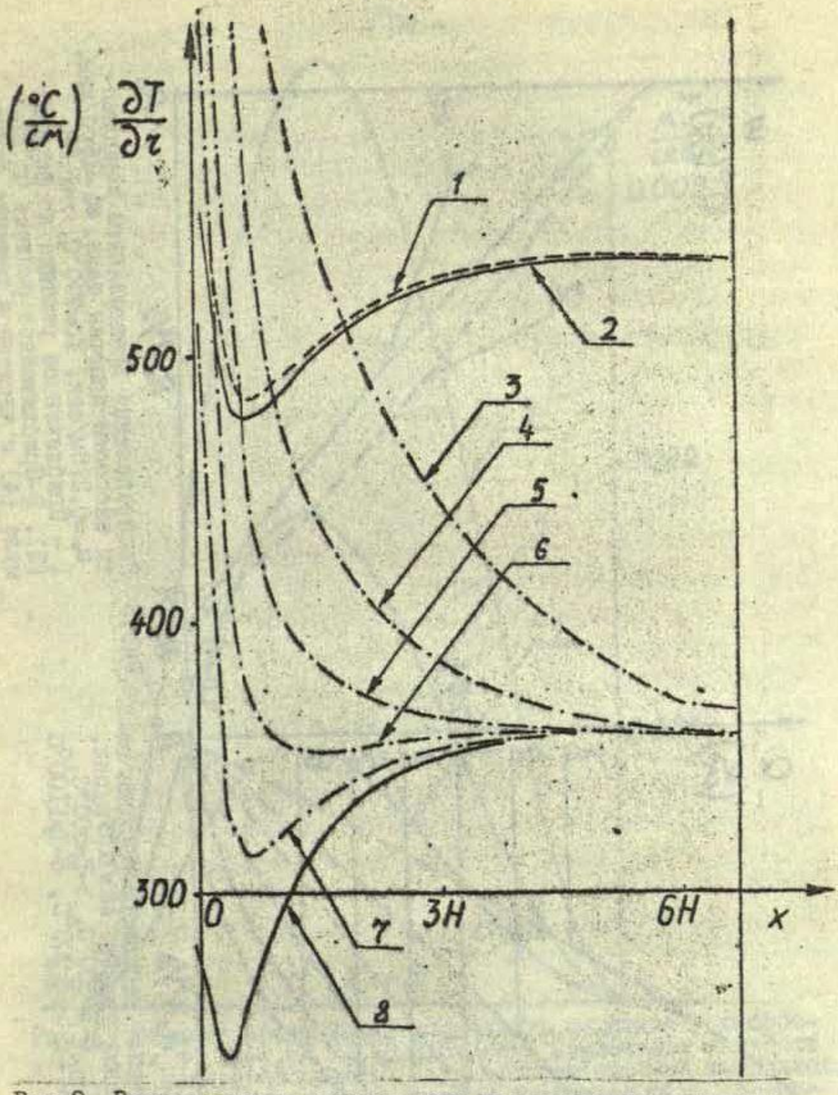

Рис.2 Распределение радиального градиента температуры вдоль поверхности пьедестала. I- To=700°C, постоянная теплопроводность и вязкость, 2-T₀=700°C, постоянная теплопроводность,переменная вязкость; 3-8 переменные теплопроводность и вязкость, 3 - To=100°C, 4 - To=300°C, 5 -To=500°C, 6-To=700°C, 7 -To=900°C, 8 -To=II00°C

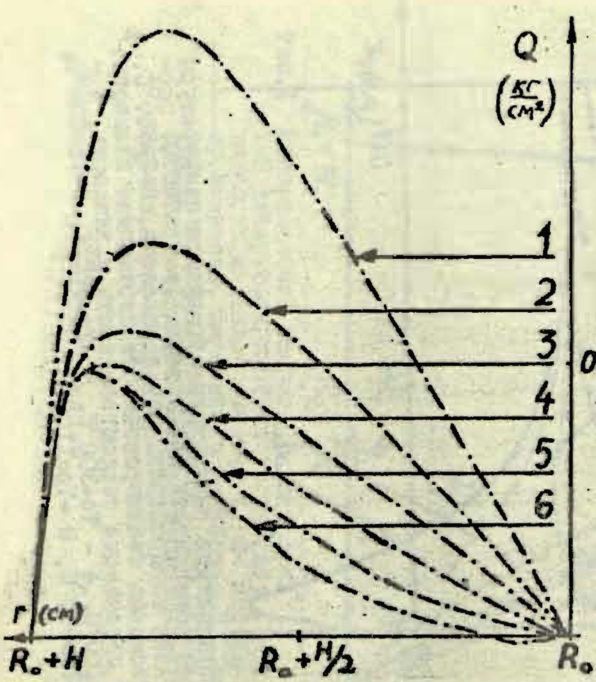

Рис.3 Распределение массового расхода газа при различных T_0. $u_0 = 0.215$ м/сек. 1-T_0=100°C, 2-T_0=300°C, 3-T_0=500°C, 4 -To=700°C, 5-T_0=900°C, 6-T_0=1100°C

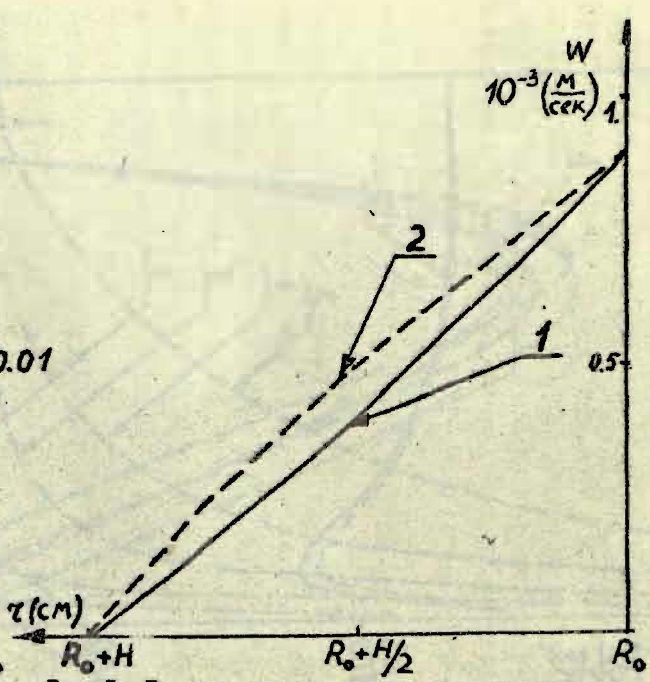

Рис.5 Распределение вращательной компоненты скорости поперек щели. w_0 =15об/мин, u_0 =0,215м/сек, To=700°C, x=1,5H. 1 – Приближенное решение по формуле (3), 2-Приближенное решение по формуле (4) и численное решение системы (1)

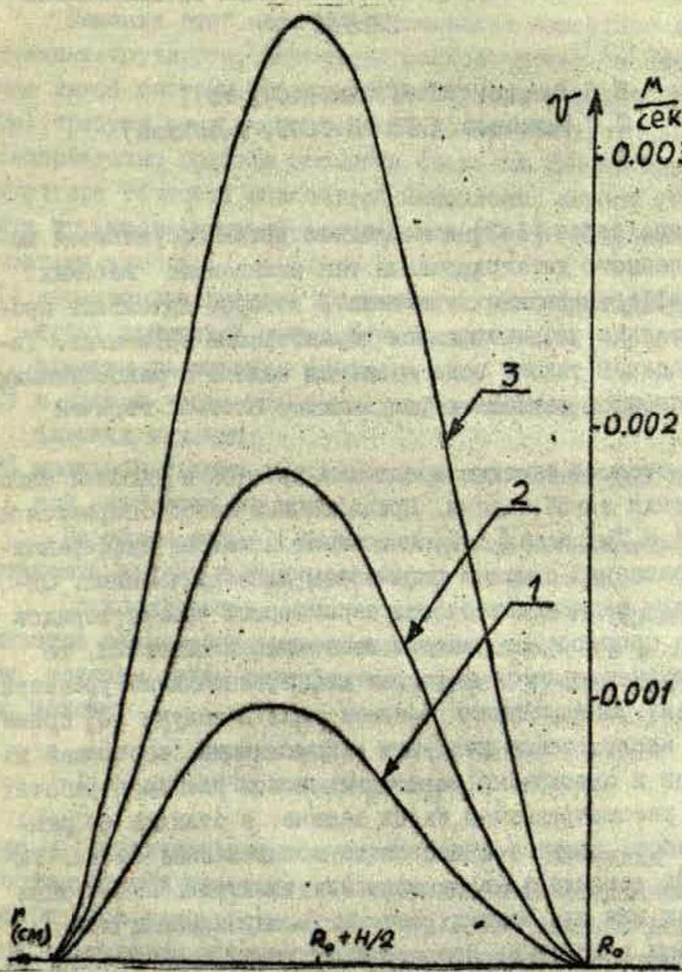

Рис.4 Влияние вращения на радиальную компоненту скорости v, x=I,5H U_0 =0.215м/сек. Переменная вязкость и теплопроводность. I-декартовая система координат, 2 - цилиндрическая система координат ω_0=0, 3 -цилиндрическая система координат ω_0 = I5об/мин

МЕТОД РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ О РЕКОМБИНАЦИИ РАСШИРЯЮЩЕЙСЯ ПЛАЗМЫ

Е.Д.Люмкис (ВЦ ЛГУ им.П.Стучки),
С.С.Филиппов (ИПМ АН СССР, г.Москва)

В ряде работ [I-3] в последнее время обсуждаются методы численного интегрирования так называемых "жестких" систем дифференциальных уравнений, которые описывают процессы с сильно различающимися характерными временами. Типичной задачей такого рода является задача о рекомбинации при инерционном разлете первоначально плотной горячей плазмы.

В настоящей заметке предложен простой и удобный алгоритм решения такой задачи. Предложенный метод опирается на теорему А.Н.Тихонова [4,5] и состоит в замене дифференциальных уравнений с малым параметром алгебраическими. Однако, в силу разномасштабности характерных времен, порядок системы в процессе ее решения постоянно повышается, то есть восстанавливаются исходные дифференциальные уравнения.

Модель инерционного разлета газа в вакуум [6] применялась к исследованию кинетики рекомбинации, состоящей из электронов и однократно заряженных ионов плазмы в работах [7-9]. В рассматриваемой здесь задаче, в отличие от указанных работ, имеются многократно ионизованные атомы. Такая плазма возникает, например, при электрическом взрыве проволочек или при мощных разрядах между металлическими электродами в вакууме. Исследование такой задачи сводится к решению задачи Коши для нестационарной системы нелинейных уравнений, описывающих изменение концентраций и баланс электронной и тяжелой компонент плазмы в пространственно однородном случае. Система уравнений замыкается условиями квазинейтральности и сохранения числа тяжелых частиц.

Решение этой задачи представляет известные вычислительные трудности. Непосредственное численное интегрирование такой системы уравнений (например, методом Рунге-Кутта) требует столь мелкого шага по времени, что приводит к неоправданно большим временам счета на ЭВМ и, главное, - к потере точности вследствие накопления ошибок округления. Эти трудности связаны со следующими качественными особенностями задачи:

1) характерные времена ионизации и рекомбинации для некоторых уравнений могут быть много меньше характерного времени расширения плазмы;
2) в правые части уравнений входят разности двух весьма близких величин;
3) масштабы времен ионизации и рекомбинации для ионов разной кратности различны.

Перейдем далее к более подробной математической постановке задачи и описанию метода ее решения.

Предполагается, что в начальный момент времени имеется равновесная плазма заданной плотности и температуры, которая затем расширяется, причем ее плотность падает по закону:

$$n(t) = n(t_0)\left(\frac{t_0}{t}\right)^{\mu}, \qquad (I)$$

где μ характеризует геометрию разлета (значения $\mu = 1, 2, 3$ соответствуют плоскому, цилиндрически-симметричному или сферически-симметричному разлету). При разлете ионизационное равновесие нарушается и концентрации нейтральных атомов n_0 и ионов различной кратности n_i ($i = 1, 2, \ldots, k$) определяются уравнениями кинетики:

$$\begin{cases} \dfrac{dn_0}{dt} = -\alpha_0 n_e n_0 + \beta_0 n_e^2 n_1 - \dfrac{\mu}{t} n_0 \equiv S_0 - \dfrac{\mu}{t} n_0, \\ \dfrac{dn_i}{dt} = -\alpha_i n_e n_i + \beta_i n_e^2 n_{i+1} + \alpha_{i-1} n_e n_{i-1} - \\ \qquad - \beta_{i-1} n_e^2 n_i - \dfrac{\mu}{t} \equiv S_i - S_{i-1} - \dfrac{\mu}{t} n_i, \\ i = 1, 2, \dots, \kappa - 1. \end{cases} \tag{2}$$

Здесь α_i и β - коэффициенты ионизации электронным ударом и тройной рекомбинации, зависящие только от электронной температуры (в рассматриваемой модели другие процессы не учитываются), n_e - концентрация электронов, определяемая из условия квазинейтральности:

$$n_e = \sum_{i=1}^{\kappa} i n_i . \tag{3}$$

Условие сохранения числа тяжелых частиц имеет вид:

$$\sum_{i=0}^{\kappa} n_i = n(t). \tag{4}$$

Начальные значения n_i определялись из системы уравнений Саха [6].

Температура T находится из уравнения баланса энергии

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = -\frac{5}{3}\frac{\mu}{t}\varepsilon + Q , \tag{5}$$

где $\varepsilon = \frac{3}{2}(n_e + n)\kappa T$ - плотность внутренней энергии плазмы, Q - мощность, выделяемая в единице объема в процессе рекомбинации,

$$Q = \sum_{i=0}^{\kappa-1} S_i I_i . \tag{6}$$

I_i - потенциал ионизации i -го иона. Первый член в правой части (5) представляет собой работу расширения плазмы. Отрыв электронной температуры от температуры тяжелых частиц не учитывается.

Замена переменных

$$n_i^* = \left(\frac{t}{t_0}\right)^{\mu} \cdot n_i \qquad (7)$$

позволяет упростить уравнения (2), устранив в правых частях члены, содержащие множитель μ/t.

Основная идея предлагаемого способа решения этой задачи состоит в использовании такой комбинации асимптотического и численного (конечно-разностного) методов, которая логически вытекает из самой структуры исследуемой системы и перечисленных выше особенностей задачи. В общих чертах наши рассуждения можно описать следующим образом.

Характерные времена ионизации $\tau_i^{(1)} \sim 1/\alpha_i n_e$ и рекомбинации $\tau_i^{(2)} \sim 1/\beta_i n_e^2$ для высокозарядных ионов $(i > k^*)$ оказываются много меньше характерного времени разлета t. Это позволяет рассматривать уравнения кинетики для соответствующих ионов как уравнения, содержащие малый параметр при производных и, опираясь на теорему Тихонова, заменить дифференциальные уравнения с малым параметром алгебраическими уравнениями. Последние получаются (с точностью до $O(\nu)$, где ν - малый параметр), если приравнять нулю правую часть соответствующего уравнения системы (2). Поскольку S_i, входящие в уравнение (6) для Q выражаются через dn_i/dt, выражения для них через n_i, T, dT/dt, а также производные dn_k/dt, $k < k^*$ можно получить из соотношений, получаемых при дифференцировании уравнений Саха. Физически такая процедура означает то, что ионы n_i при $i > k^*$, скорость ионизации и рекомбинации которых гораздо больше скорости разлета плазмы и, следовательно, скорости изменения ее температуры, следят за температурой плазмы, находясь в ионизационном равновесии с ионом n_k^*. Выделение энергии при рекомбинации высокозарядных ионов вычисляется как для квазистационарного процесса.

При уменьшении температуры коэффициенты α_i экспоненциально убывают, а β_i растут по степенному закону. Поэтому невязки алгебраических уравнений растут с течением времени. Для разных i α_i и β_i отличаются на порядки величин. Это позволяет сохранить заданную точность решения, не уменьшая шаг по времени, посредством последовательного восстановления дифференциальных уравнений. Алгебраическое уравнение заменяется дифференциальным в тот момент времени t^*, когда характерные времена ионизации и рекомбинации данного иона становятся сравнимыми с характерным временем разлета. Таким образом, в ходе решения порядок системы постепенно повышается.

Опасность быстрой потери точности при вычитании почти равных величин с коэффициентами α_i и β_i автоматически снимается при переходе от дифференциальных уравнений к алгебраическим. Описанный выше метод применен для решения модельной задачи о рекомбинации разлетающейся плазмы многократно ионизованной меди, которая представляет интерес для интерпретации экспериментов по электрическому взрыву проволочки. Проделанные на ЭВМ расчеты подтвердили эффективность метода. Например, при относительной точности 10^{-4} в расчете комбинированным методом шаг по времени составлял $\sim 10^{-2}\, t_0$, тогда как при решении всей системы методом Рунге-Кутта при той же относительной точности шаг приходилось уменьшать в 10^4-10^5 раз.

ЛИТЕРАТУРА

1. Gear C.W. The Automatic Integration of Stiff Ordinary Differential Equations.-В книге:Information Processing 68, 1969, v.1, p.187,(Proc.IFIP Congress, Edinburgh).

2. Fowler M.E., Warten R.H. A Numerical Integration Technique for ODE with Separated Eigenvalues.-"IBM J.Res. Develop.", 1967, No.11, p.5-8.

3. Gear C,W. DIFSUB for Solution of Ordinary Differential Equations. "Comm.of ICM", 1971, No.14, p.176-181.

4. Тихонов А.Н. Системы дифференциальных уравнений, содержащих малые параметры при производных.-"Мат.сборник", 1952, т.31 (73), № 3, с.575-586.

5. Васильева А.Б., Бутузов В.Ф. Асимптотические разложения решений сингулярно возмущенных уравнений. М., "Наука", 1973, 272с.

6. Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М., "Наука", 1966, 686с.

7. Кузнецов Н.М., Райзер Ю.П. О рекомбинации электронов в плазме, расширяющейся в пустоту.-"ПМТФ", 1965, № 4, с.10-16.

8. Сыцько Ю.И., Филиппов С.С. Рекомбинация и роль резонансного излучения в расширяющейся плазме.-Препринт ИПМ АН СССР, № 31, М., 1973, 21с.

9. Гудзенко Л.И., Евстигнеев В.В., Сыцько Ю.И., Филиппов С.С., Яковленко С.И. Инверсность заселенностей в интенсивно распадающейся водородной плазме.-Препринт ИПМ АН СССР, № 63, М., 1971, 34с.

КАЧЕСТВЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РЕШЕНИЙ УРАВНЕНИЙ, МОДЕЛИРУЮЩИХ КВАЗИСТАЦИОНАРНЫЙ СИЛЬНОИЗЛУЧАЮЩИЙ ГАЗОВЫЙ РАЗРЯД

Е.Д.Люмкис (ВЦ ЛГУ им.П.Стучки)

Подробное теоретическое исследование физических явлений, происходящих в газовом разряде, возможно лишь при численном моделировании разрядов. Это объясняется тем,что разряды, как правило, описываются сложной нелинейной системой уравнений. Некоторые результаты численных исследований квазистационарного разряда в ксеноне в рамках модели, учитывающей неравновесность процессов в плазме, излучение в непрерывном спектре и линейчатое излучение, приведены в работах [1-3]. Наличие численного решения задачи отнюдь не исключает необходимости в качественном анализе системы уравнений, позволяющем более полно понять смысл и характер решений, полученных с помощью ЭВМ.

Изучение газового разряда в плазме ксенона необходимо, в частности, для исследования сложных физико-химических процессов и получения электрических и оптических характеристик ламп, используемых для накачки мощных лазеров на твердом теле. В типичных для работы таких ламп условиях коэффициенты электронной теплопроводности $\varkappa_e$ и теплопроводности тяжелых частиц $\varkappa_т$, а также коэффициент амбиполярной диффузии D_a оказываются малыми параметрами при старших производных для соответствующих уравнений теплопроводности и диффузии. Это позволяет получить асимптотические решения соответствующих уравнений в виде ряда по указанным малым параметрам. Развитию и обоснованию методов асимптотического сингулярно возмущенных дифференциальных уравнений по малому параметру при старшей производной посвящен большой цикл работ А.Н.Тихонова, А.Б.Васильевой и др. (см.[4-8] и библиогр. в [5]). Здесь будут широко использоваться полученные в этих работах результаты.

В работе [9] газовый разряд моделировался более простой по сравнению с [I-3] системой уравнений. Там предполагалось, в частности, существование больцмановского равновесия в заселении уровней атома ксенона, а также пренебрегалось отрывом электронной и ионной температур. Тем не менее многие характеристики разряда удовлетворительно описываются приведенными там уравнениями, поэтому при асимптотическом анализе ограничимся для простоты приближением работы [9].

Уравнение энергетического баланса цилиндрического столба плазмы тогда запишется в виде

$$\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(r\,\varkappa(T)\frac{dT}{dr}\right)=\varphi(r,T)-\sigma(T)E^2. \qquad (I)$$

Здесь $\varkappa(T)$ и $\sigma(T)$ - коэффициенты тепло- и электропроводности плазмы, E - напряженность электрического поля в трубке, T - температура плазмы, $\varphi(r,T)$ - дивергенция интегрального потока излучения. Вообще говоря, функция $\varphi(r,T)$ определяется из решения уравнения переноса излучения. Поскольку анализ совместной системы весьма сложен, будем предполагать, что $\varphi(r,T)$ - известная функция координат и температуры.

При переходе к безразмерным переменным температуру и функций от нее ($\sigma(T)$ и $\varkappa(T)$) будем относить к их характерным значениям T°, σ_0, $\varkappa_0$, где T° - температура на оси разряда, $\sigma_0=\sigma(T^\circ)$, $\varkappa_0=\varkappa(T^\circ)$, функцию φ - к характерному значению джоулева тепловыделения в центре разряда $\sigma_0 E^2$, а координату r - к радиусу трубки R. Тогда вместо (I) получим:

$$\mu^2 \frac{1}{\tilde{r}} \frac{d}{d\tilde{r}} \left(\tilde{r} \, \tilde{\varkappa} \, \frac{d\tilde{T}}{d\tilde{r}} \right) = \tilde{\varphi} - \tilde{\sigma} . \qquad (2)$$

В области температур 10000–30000^{0}K, давлений $p \sim 10$–30 атм и $R \sim 0.1$–1 см (такие параметры типичны для ламп, используемых для накачки твердотельных лазеров) величина $\mu^2 = \frac{1}{R^2} \frac{\varkappa_0 T^0}{\sigma_0 E^2}$ равна $\sim 10^{-3} - 10^{-6}$. Таким образом уравнение (2) можно считать уравнением с малым параметром μ^2 при производной. Опуская знак "$\sim$" у безразмерных параметров и вводя обозначение $W = \mu \varkappa \frac{dT}{dr}$ получим:

$$\begin{cases} \mu \dfrac{dW}{dr} = \varphi - \sigma - \mu \dfrac{W}{r} , \\ \mu \dfrac{dT}{dr} = \dfrac{W}{\varkappa} . \end{cases} \qquad (3)$$

Граничные условия системы (3) имеют вид:

$$W(0) = 0, \; T(1) = T_0 . \qquad (4)$$

п.I. Перейдем к построению асимптотики по μ задачи (3)-(4). Введем обозначение

$$\vec{z} = \begin{pmatrix} W \\ T \end{pmatrix} \qquad (5)$$

и будем искать решение в виде суммы

$$z(r,\mu) = \bar{z}(r,\mu) + \Pi z(\tau_0,\mu) + Q z(\tau_1,\mu), \qquad (6)$$

каждый член которой представляет собой асимптотический ряд по степеням μ :

$$\begin{cases} \bar{z}(\tau,\mu) = \bar{z}_0(\tau) + \mu \bar{z}_1(\tau) + \ldots + \mu^n \bar{z}_n(\tau) + \ldots \\ \Pi z(\tau_0,\mu) = \Pi_0 z(\tau_0) + \mu \Pi_1 z(\tau_0) + \ldots + \mu^n \Pi_n z(\tau_0) + \ldots \\ Q z(\tau_1,\mu) = Q_0 z(\tau_1) + \mu Q_1 z(\tau_1) + \ldots + \mu^n Q_n z(\tau_1) + \ldots \end{cases} \tag{7}$$

Здесь Πz и Qz – пограничные функции в окрестности точек $\tau = 0$ и $\tau = 1$ и зависят, соответственно, от $\tau_0 = \frac{\tau}{\mu}$ и $\tau_1 = \frac{(\tau - 1)}{\mu}$.

Правые части системы (3) также можно записать аналогично (6), а каждый член этой суммы – в виде ряда по степеням μ. Уравнения для коэффициентов асимптотического разложения находятся путем приравнивания членов при одинаковых степенях μ, зависящих от τ, τ_0, τ_1.

В нулевом приближении по μ $\Pi_0 W = 0$, $\Pi_0 T = 0$, функции $\bar{T} = \bar{T}(\tau)$ и $\bar{W} = \bar{W}_0(\tau)$ находятся из решения вырожденной системы

$$\begin{cases} \varphi(\tau, \bar{T}_0) - \sigma(\bar{T}_0) = 0; \\ \bar{W}_0 = 0 . \end{cases} \tag{8}$$

Функции $Q_0 W$ и $\Pi_0 W$ определяются уравнениями

$$\begin{cases} \dfrac{dQ_0 W}{d\tau_1} = \varphi(1, \bar{T}_0(1) + QT) - \sigma(\bar{T}_0(1) + Q_0 T), \\ \dfrac{dQ_0 T}{d\tau_1} = \dfrac{Q_0 W}{\varkappa(\bar{T}_0(1) + Q_0 T)} \end{cases} \tag{9}$$

с краевыми условиями

$$\begin{cases} Q_0 T(0) = T_0 - \bar{T}_0(1), \\ Q_0 W(-\infty) = Q_0 T(-\infty) = 0 . \end{cases} \tag{10}$$

Из решения этих уравнений можно найти распределение температуры по радиусу и связанные с температурой пара - метры, в частности, $Q_0 W(0)$, а, следовательно, и величину теплового потока на границе со стенкой.

Пограничные функции $Q_0 W$ и $Q_0 T$ существенны лишь вблизи границы плазмы со стенкой, экспоненциально убывая при удалении от стенки. Поведение температуры в центральной зоне определяется функцией $\overline{T}(r)$. Из (8) следует, в частности, что в нулевом приближении по μ температура в разряде будет постоянной в канале всюду, кроме узкого пограничного слоя $\sim \mu$, если функция φ зависит только от температуры. Однородность температурного столба может нарушаться, например, при увеличении оптической толщины разряда, когда излучательная способность плазмы φ оказывается зависящей явным образом от координаты r.

Рассмотренное выше асимптотическое решение близко к точному при выполнении ряда требований. Сформулируем их применительно к нашему случаю, следуя теореме 4.2 § I4 работы [5].

I. Функции $\Phi_1 \equiv \varphi - \sigma$ и $\Phi_2 \equiv W/\varkappa$ будем считать достаточное число раз ($n+2$) дифференцируемыми в некоторой открытой области G переменных $(\vec{x}, r)$.

II. Уравнение $\varphi - \sigma = 0$ имеет изолированный корень $\overline{T}(r)$ на отрезке $[0,1]$ такой, что точки $(0, \overline{T}(r), r) \in G$, а $\overline{T}(r)$ непрерывна на $[0,1]$.

III. Собственные значения λ_1, λ_2 матрицы

$$\Gamma = \begin{vmatrix} \frac{\partial \Phi_1}{\partial W} & \frac{\partial \Phi_1}{\partial T} \\ \frac{\partial \Phi_2}{\partial W} & \frac{\partial \Phi_2}{\partial T} \end{vmatrix}$$, взятые при $T = \overline{T}(r)$, $W = \overline{W} = 0$,

удовлетворяют условиям: $\operatorname{Re} \lambda_1 < 0$, $\operatorname{Re} \lambda_2 > 0$ при $0 < r < 1$. Собственные значения матрицы Γ в нашем случае равны:

$$\lambda_{1,2}=\pm\sqrt{\frac{1}{\text{æ}}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial T}-\frac{\partial\sigma}{\partial T}\right)}\Bigg|_{T=\bar{T}(\tau)}=\pm\sqrt{\frac{\sigma}{\text{æ}}\frac{\partial}{\partial T}\left(\ln\frac{\varphi}{\sigma}\right)}\Bigg|_{T=\bar{T}(\tau)}.$$

Таким образом, если функция φ/σ будет возрастающей функцией температуры, требование III будет выполнено[ж)].

IУ. Граничное значение T_0 на правом конце достаточно близко к $\bar{T}(1)$ (находится в области влияния этого корня, см. [4,5]).

Пусть $z_n(\tau,\mu)=\sum_{k=0}^{n}\mu^k(\bar{z}_k(\tau)+Q_k z(\tau_1))$. Тогда при выполнении условий I-IУ будет иметь место теорема, ср. [5] : существуют достаточно малые постоянные $\mu_0>0, \delta>0$ и константа $c>0$ такие, что при $0<\mu\leqslant\mu_0$ в δ-трубке кривой L_0 существует единственное решение $z(\tau,\mu)$ краевой задачи (3)-(4) и имеет место равенство:

$$\|z(\tau,\mu)-z_n(\tau,\mu)\|\leqslant c\,\mu^{n+1}$$

при $0\leqslant\tau\leqslant 1$. Под кривой L_0 подразумевается кривая, состоящая из двух частей:

$$L_{01}=\{(z,\tau): z=\bar{z}_0(\tau),\ 0\leqslant\tau\leqslant 1\}$$

$$L_{02}=\{(z,\tau): z=\bar{z}_1(1)+Q_0 z(\tau_1), \tau_1\leqslant 0,\ \tau=1\}$$

а под δ-трубкой этой кривой - ее δ-окрестность в области G. Заметим, что для $Q_k z(\tau_1)$ имеет место оценка

$$\|Q_k z(\tau_1)\|\leqslant c_1\exp(\alpha\tau_1) \qquad \text{при } \tau_1\leqslant 0,$$

где $c_1>0,\ \alpha>0$ - некоторые константы.

ж) Это условие совпадает с условием устойчивости нестационарного разряда по отношению к перегреву (ср. [3]).

п.2. Существенным требованием при построении асимптотики (6-7) задачи (3)-(4) было требование III монотонного роста функции $\varepsilon \equiv \varphi/\sigma$ с температурой. В реальных разрядах такая монотонность может нарушаться. Детальный учет влияния поглощения (именно поглощение определяет зависимость $\varphi(r,T)$ от координаты r) представляется возможным только при численном моделировании процесса [2,3]. Поэтому здесь рассмотрим различные возможные случаи, определяемые характером поведения $\varphi(r,T)$, считая, что зависимость φ от температуры может быть немонотонной.

а) I. Пусть функция $\Phi_1(r,T) \equiv \varphi - \sigma$ при любом $r \in [0,1]$ имеет три корня $\xi_i(r)$, i =1,2,3 такие, что

I) $\xi_1(r) < \xi_2(r) < \xi_3(r)$

2) область $\{(T,r): \xi_1(r) \leq T \leq \xi_3(r), 0 \leq r \leq 1\} \subset G$

3) $$\left.\frac{d\Phi_1}{dT}\right|_{T=\xi_i(r)} > 0, \; i = 1,3 \quad \text{при } 0 \leq r \leq 1$$

$$\left.\frac{d\Phi_1}{dt}\right|_{T=\xi_2(r)} < 0 \quad \text{при } 0 \leq r \leq 1.$$

Оказывается тогда, что при выполнении требований, аналогичных I и IУ предыдущего пункта и некоторых дополнительных, сформулированных ниже, решение задачи (3)-(4) может быть таким, как изображено на рис.I, то есть помимо существования пограничного слоя у стенки трубки, при некотором значении радиуса $r = r_0$ будет иметь место "внутренний пограничный слой", где решение переходит с корня ξ_3 на корень ξ_1 [5].

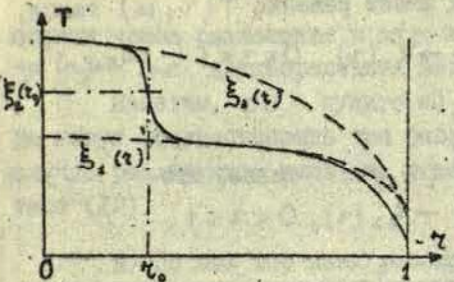

Рис.I. Сплошная кривая-близкое к разрывному решение задачи (4)-(5), переходящее с корня $\xi_3(\tau)$ на корень $\xi_1(\tau)$ в точке $(\tau_0, \xi_2(\tau_0))$

Такое близкое к разрывному решение задачи будем искать в виде асимптотических разложений (6), (7), но по отдельности на отрезках $[0,\tau_0]$ и $[\tau_0, 1]$. Величина τ_0 определяется из условия непрерывности функций $T(\tau)$ и $W(\tau)$ в точке $\tau=\tau_0$, а уравнение для определения τ_0 примет вид

$$\int\limits_{\xi_3(\tau_0)}^{\xi_2(\tau_0)} \Phi_1 \varkappa \, dT = \int\limits_{\xi_1(\tau_0)}^{\xi_2(\tau_0)} \Phi_1 \varkappa \, dT \qquad \text{(II)}$$

Говорят, что в этом случае в точке $\tau=\tau_0$ реализуется "ячейка". Сформулируем здесь дополнительные требования:

II. Уравнение (II) относительно τ_0 имеет решение $\tau^0=\bar{\tau}_0$ и $0<\bar{\tau}_0<1$.

Ш. Производная $\dfrac{d}{d\tau}\displaystyle\int\limits_{\xi_3(\tau)}^{\xi_1(\tau)} \Phi_1 \varkappa \, dT\Big|_{\tau=\bar{\tau}_0} \neq 0.$

При выполнении условий I-Ш данного пункта существует такое решение задачи (3)-(4), для которого справедливы равенства:

$$\lim_{\mu\to 0} T(\tau,\mu) = \begin{cases} \xi_3(\tau), & 0<\tau<\tau_0 \\ \xi_1(\tau), & \tau_0<\tau<1 \end{cases} \qquad \text{(I2)}$$

$$\lim_{\mu\to 0} W(\tau,\mu)=0 \qquad \text{при } 0<\tau<\tau_0,\ \tau_0<\tau<1.$$

Кроме того, задача всегда имеет решение $\tilde{T}(\tau,\mu)$ такое, что
$$\tilde{T}(\tau,\mu) \underset{\mu\to 0}{\to} \xi_1(\tau), \quad 0<\tau<1$$
и может иметь решение $\tilde{\tilde{T}}(\tau,\mu)$ такое, что
$$\tilde{\tilde{T}}(\tau,\mu) \underset{\mu\to 0}{\to} \xi_3(\tau), \quad 0<\tau<1 .$$
В последнем случае надо особо проверить выполнение требования IУ п.I. с соответствующими изменениями - вместо (I) надо подставить $\xi_3(1)$.

В силу условий II и III для существования разрывного решения (I2) необходимо, чтобы φ явно зависело от τ. Такое решение может, однако, существовать и в том случае, если система (3) является автономной, но выполняется равенство (II) [3].

б) Рассмотрим здесь коротко еще один случай, который может привести к существованию решения типа (I2). Именно, будем предполагать (вместо I в 2а), что на полуинтервале $[0,\tau_0)$ уравнение $\Phi_1(\tau,T)=0$ имеет три корня $\xi_1(\tau)<\xi_2(\tau)<\xi_3(\tau)$ (все требования I на $[0,\tau_0)$ для этих корней выполняются), а на $(\tau_0,1)$ - - корень только один, $\xi_1(\tau)$, причем $\left.\frac{\partial\Phi_1}{\partial T}\right|_{T=\xi_1(\tau)}>0$ при $\tau_0<\tau\leqslant 1$. Оказывается, что и в этом случае существует решение, для которого справедливы предельные соотношения (I2), хотя характер и природа асимптотики в окрестности точки τ_0 существенно меняется. В литературе указанный случай получил название явления срыва решения (суть этого явления состоит в том, что решение $\xi_3(\tau)$, подходя к точке τ_0, где $\left.\frac{\partial\Phi_1}{\partial T}\right|_{\tau=\tau_0}=0$, как бы по инерции проходит ее и попадает в область влияния корня $\xi_1(\tau)$). Этот случай впервые рассмотрен Л.С.Понтрягиным и Е.Ф.Мищенко в работах [7,8]. Там же выписаны два первых члена разложения в виде $\varkappa = \bar{\varkappa}^{(1)} + \mu^{2/3}\varkappa^{(2)} + \mu \ln\mu\, \varkappa^{(3)} + \ldots$ с пренебрежением величинами порядка μ.

Заметим, что в пункте а) рассматривался случай, когда могут сосуществовать три различных решения, а в данном случае реализуются лишь два решения – $\xi_1(\tau)$ и решение типа (I2).

в) До сих пор нами рассматривались случаи, когда температура на оси T° такова, что $\left.\dfrac{\partial \Phi_1}{\partial T}\right|_{T=T^\circ} > 0$.

Можно, однако, построить решение, для которого $\left.\dfrac{\partial \Phi_1}{\partial T}\right|_{T=T^\circ} < 0$, но поле E при этом будет определяться параметрами задачи. Поэтому при переходе к безразмерным переменным в уравнении (2), величины φ и σE^2 будем относить к некоторой характерной величине выделяемого в единице объема джоулева тепла $\sigma_0 E_0^2$, т.е. положим $\tilde{\varphi} = \varphi/\sigma_0 E_0^2$, $\tilde{\sigma} = \sigma/\sigma_0$, $\tilde{E} = E/E_0$. Тогда вместо (3) получим:

$$\begin{cases} \mu \dfrac{dW}{d\tau} = \varphi - \sigma E^2 - \mu \dfrac{W}{\tau} \\[2ex] \mu \dfrac{dT}{d\tau} = \dfrac{W}{\varkappa} \end{cases} \qquad (I3)$$

К граничным условиям (4) добавится теперь еще одно – $T(0) = T^\circ$. Лишнее условие будет служить уравнением для определения поля E, которое является собственным значением задачи (I3). Решение такой задачи будем искать в виде тех же асимптотических разложений, что и в п.п. I и 2а, а уравнение для определения поля E примет вид:

$$\int_{T^\circ}^{\xi_2} \Phi_1 \varkappa\, dT = \int_{\xi_1}^{\xi_2} \Phi_1 \varkappa\, dT. \qquad (I4)$$

Вид решения, отвечающего рассмотренному здесь случаю, изображен на рис.2.

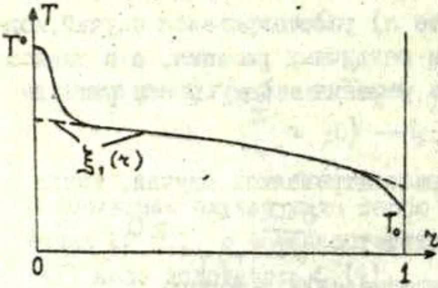

Рис.2. Сплошная кривая-контрагированное температурное распределение, переходящее на корень $\xi_1(r)$ при $r \approx r_0 \sim \mu$.

Как видно из рисунка, температура газа вблизи центра может быть существенно больше температуры на периферии. Подобное явление контракции разрядов неоднократно описывалось в литературе. Такие решения, как правило, оказываются неустойчивыми по отношению к малым возмущениям.

3. Некоторые стационарные решения, построенные в предыдущих пунктах, могут оказаться неустойчивыми по отношению к флуктуациям температурного профиля в разряде. Нестационарное уравнение, описывающее изменение температуры разряда во времени, имеет вид обычного уравнения теплопроводности:

$$c\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\varkappa\frac{\partial T}{\partial r}\right) + \sigma E^2 - \varphi . \qquad (15)$$

Здесь c - теплоемкость газа. Будем искать решение уравнения (15) в виде суммы $T = \bar{T}(r) + v(r,t)$, где $\bar{T}(r)$ - решение стационарной задачи, а $v(r,t)$ - малое отклонение. После соответствующих нормировок и линеаризации задачи уравнение для $v(r,t)$ примет вид

$$c\frac{\partial v}{\partial t}=\mu^2\tilde{\varkappa}\frac{\partial^2 v}{\partial r^2}+\alpha(r)\frac{\partial v}{\partial r}+\beta(r)v. \qquad (16)$$

Коэффициент $\alpha(r)$ оказывается величиной $\sim\mu^2$, а

$\beta(r)=O(\mu^2)-\left.\frac{\partial\Phi_1(r,T)}{\partial T}\right|_{T=\bar{T}(r)}$. Поскольку в случаях I и 2б)

$\left.\frac{\partial\Phi_1}{\partial T}\right|_{T=\bar{T}(r)}\geqslant 0$, рассмотренные там решения устойчивы по отношению к малым возмущениям. Более сложных рассуждений требует анализ устойчивости тех решений, в которых имеется внутренний пограничный слой. Производная $\frac{\partial\Phi_1}{\partial T}$ тогда положительна всюду, кроме узкого пограничного слоя, толщина которого порядка μ. Анализ показывает, что для развития перегревной неустойчивости необходимо, чтобы выполнялось неравенство:

$$\left.\frac{\partial}{\partial T}(\sigma E^2-\varphi)\right|_{\substack{r=r_0\\ T=\xi_2(r_0)}} > (\pi-1)\frac{\varkappa}{(\Delta r)^2}, \qquad (17)$$

где Δr - характерный размер неоднородности плазмы в квазистационарном состоянии. Неравенство (17) включает в себя, как легко видеть, оценку

$$\sigma E^2 \geqslant \frac{\varkappa\,\Delta T}{(\Delta r)^2} \qquad (18)$$

полученную в работе [10].

4. В предыдущих пунктах приведены асимптотические решения задачи при немонотонном поведении функции $\varepsilon(r,T)$ Остановимся здесь на физических причинах, которые могут приводить к такой немонотонности.

Наиболее просто выяснить характер зависимости функции $\varepsilon(T)$ для случая объемного поглощения. Для тормозного и рекомбинационного излучения функция $\varphi \sim n_e^2$, а $\sigma \sim n_e$, следовательно, $\varepsilon \sim n_e$, т.е. будет возрастающей функцией температуры до тех пор, пока плазма не станет полностью ионизованной. В области температур 16000-20000°К, когда у ксенона осуществляется переход от первой ионизации ко второй, рост n_e замедляется, и функция $\varepsilon(T)$ может стать немонотонной (см.рис.3).

В том же приближении малой оптической толщины влияние линейчатого излучения оценивается следующим образом: функция $\varphi \sim n_m$, где n_m - число атомов на верхних возбужденных уровнях. Из распределения Больцмана следует что $n_m \sim \exp(-E_m/kT)$, а из уравнения Саха - $n_e \sim \exp(-I/kT)$, I - потенциал ионизации атома. Отсюда $\varepsilon \sim \exp[-(E_m - I/2)/kT]$, т.е. будет возрастать с ростом температуры, если $E_m > I/2$. Для ксенона это условие выполняется, поэтому линейчатое излучение оказывается дополнительным фактором, приводящим к сглаживанию функции ε.

На рис.3. приведена рассчитанная с учетом реальных особенностей сечений функция $E \approx \sqrt{\varepsilon(T)}$ для ксенона (см.также [3]), учитывающая объемное, тормозное и рекомбинационное излучение при давлении p =10 атм. Там же нанесена зависимость $E(T)$ для лампы с R =0.35 см с учетом линейчатого излучения, полученная после численного решения квазистационарной задачи. Видно, что линейчатое излучение снимает возможность контракции разряда. Соответствующие температурные профили с учетом и без учета линейчатого излучения изображены на рис.4. Поведение контраги-

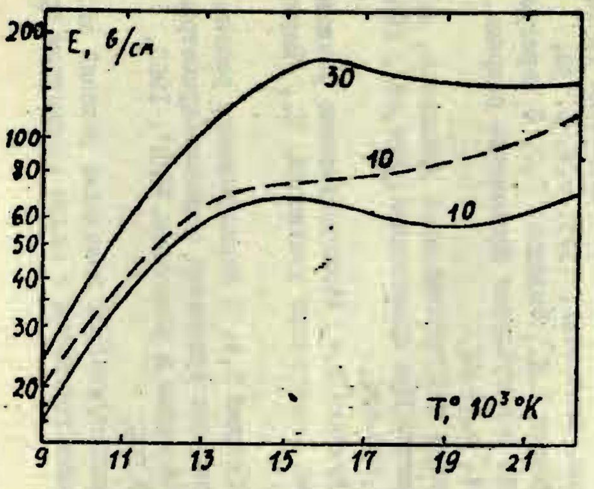

Рис.3. Зависимость поля E от осевой температуры T°. R =0.35 см. Сплошные кривые - без учета линейчатого излучения, штриховая - линейчатое излучение учтено. Цифры при кривых - рабочее давление P в атмосферах.

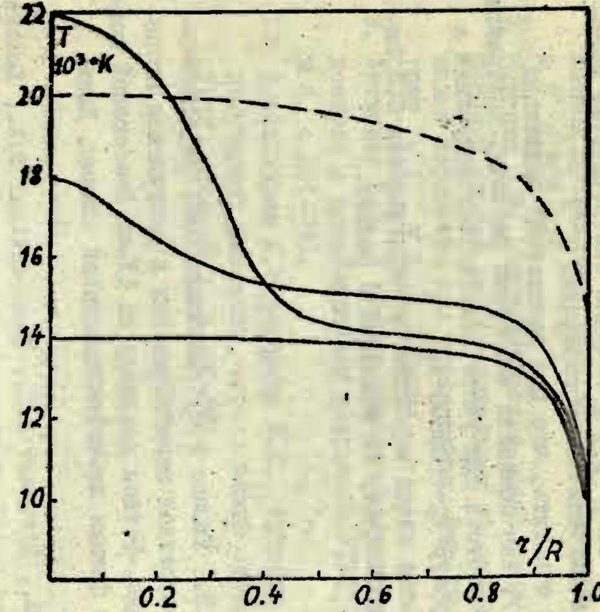

Рис.4. Температурные распределения в разряде. R =0.35 см, p =10 атм. Сплошные кривые - без учета линейчатого излучения, штриховая - линейчатое излучение учтено.

рованных температурных распределений соответствует полученным в п.2 асимптотическим решениям.

Следует отметить, что при пониженных давлениях ($p \sim$ I атм), как показали численные расчеты, контракция разряда имеет место и при учете линейчатого излучения в области температур $T \sim 20000^{\circ}$K.

В заключение автор выражает признательность С.С.Филиппову и О.Б.Москалеву за внимание к работе.

ЛИТЕРАТУРА

I. Литвинов И.И., Люмкис Е.Д., Филиппов С.С. Неравновесность и перегревная неустойчивость в импульсном ксеноновом разряде.-Тезисы докладов на IУ-ой Всесоюзной конференции по физике низкотемпературной плазмы. Киев, 1975, с.59.

2. Filippov S.S., Litvinov I.I., Konstantinov B.A., Lumkis E.D. Improved Model of Strongly Radiating Discharge in Xenon.-Proc.of 12-th Intern.Conf.on Phenomena in Ionized Gases. Holland, Eindhoven, 1975, v.1, p.138.

3. Литвинов И.И., Люмкис Е.Д., Филиппов С.С. О перегревной неустойчивости в импульсном ксеноновом разряде.-"ПМТФ", 1976, № I, с.27-30.

4. Тихонов А.Н. Системы дифференциальных уравнений, содержащих малые параметры при производных.-"Мат.сб.", 1952, т.3I(73), № 3, с.575-586.

5. Васильева А.Б., Бутузов В.Ф. Асимптотические разложения решений сингулярно возмущенных уравнений. М., "Наука", 1973. 272с.

6. Васильева А.Б., Тупчиев В.А. О периодических решениях систем дифференциальных уравнений с малым параметром при производных, близких к разрывным."ДАН", 1968, т.178, № 4, с.767-770.

7. Понтрягин Л.С. Асимптотическое поведение решений систем дифференциальных уравнений с малым параметром при

высших производных."Изв.АН СССР Сер.мат.", 1957, т.21, № 5, с.605-626.

8. Мищенко Е.Ф. Асимптотическое вычисление периодических решений систем дифференциальных уравнений, содержащих малые параметры при производных.-"Изв.АН СССР Сер.мат.", 1957, т.21, № 5, с.627-654.

9. Литвинов И.И. К теории мощного электрического разряда в ксеноне с преобладанием излучения.-"ТВТ", 1973, т.II, № 4, с.695-705.

10. Александров А.Ф., Маршак И.С., Рухадзе А.А. К теории излучающих разрядов, ограниченных стенками.-"ЖТФ", 1974, т.44, № 3, с.491-501.

ДВУХТЕМПЕРАТУРНОЕ ПОЛЕ В ГЕТЕРОГЕННОЙ СРЕДЕ В ПРИБЛИЖЕНИИ СОСРЕДОТОЧЕННОЙ ЕМКОСТИ

А.А.Буйкис (ЛГУ им.П.Стучки)

Практически все работы, относящиеся к анализу температурных полей в нефтяных пластах, исходят из предположения о возможности пренебрежения отличием температур различных фаз реальной пористой среды (скелета пласта и фильтрующихся жидкостей). В таком случае математическая постановка задачи содержит одно (общее для всех фаз) уравнение параболического типа с членами первого порядка (соответствующими вынужденной конвекции в слое – в пласте) и классическое уравнение теплопроводности в остальной области(для окружающих пород). Нам известна только одна работа [I], в которой дается аналитическое решение задачи о температурном поле в нефтяном пласте при учете различия температур обеих фаз. Однако эта работа ограничивается рассмотрением теплоизолированного пласта. Практически совпадающие с ней постановки задач, но относящиеся к другой физической ситуации, рассматривались многими авторами, начиная с В.Нуссельта [2] и А.Анцелиуса [3],

В этой работе мы рассматриваем задачу о нахождении температурного поля пласта при учете различия температуры твердого скелета и фильтрующейся жидкости и теплообмена пласта с окружающими породами при трактовке пласта как сосредоточенной емкости. Упрощающие предположения, принятые в настоящей работе, совпадают по существу с предположениями, принятыми в известной работе Х.Ловерье [4], в которой, однако, рассмотрен случай однофазной среды.

Переходим к постановке задачи. Для ознакомления читателя с выводом уравнений энергии в насыщенных пористых средах можно рекомендовать монографию [5](см.гл.I, § 4).

Введем следующие обозначения: индекс "0" относится к фильтрующейся жидкости, "I" к скелету пласта, "2" - к окружающим пласт породам; пусть $\varkappa_{ij}$ - коэффициент межфазного теплообмена между i-той и j-той фазами (на единицу поверхности контакта), $\alpha_{ij} = \varkappa_{ij} S_{ij}$, где S_{ij} - удельная поверхность контакта (т.е. поверхность контакта фаз в единице объема гетерогенной среды). Далее, пусть m - пористость пласта, h - его мощность, Q - объемный расход нагнетаемой в пласт жидкости, $\kappa_i, c_i, \rho_i, a_i^2$ - соответственно теплопроводность, теплоемкость, плотность, температуропроводность i-той фазы; пусть координата x направлена вдоль пласта, y - перпендикулярно ему, t - время. Размерные независимые переменные будем характеризовать нижним индексом "р".

В постановке задачи приняты традиционные (общепринятые) предположения: рассматривается бесконечно глубоко залегающий горизонтальный пласт, принимается совпадение теплофизических свойств для пород, покрывающих и подстилающих пласт, а также для жидкости, нагнетаемой в пласт и находившейся там до начала нагнетания, наконец, пренебрегается тепловыми эффектами из-за изменения давления. Сделаем, кроме того, следующие допущения:

I) пласт и окружающие его породы анизотропны: теплопроводность их в направлении x равна нулю; в направлении y окружающие породы имеют конечную теплопроводность, совпадающую с ее реальным значением; скелет пласта и фильтрующая жидкость в направлении y имеют бесконечную теплопроводность;

2) на границе между пластом и породами (на кровле пласта, на плоскости $y=0$) теплообмен осуществляется следующим образом: между скелетом пласта и окружающими породами имеет место непрерывность температуры и потока, а между жидкостью и окружающими породами - теплообмен по Ньютону, т.е.

имеем

$$\kappa_0 \frac{\partial T_0}{\partial y_p}\bigg|_{y_p=0} = \varkappa_{02}(T_2 - T_0)\Big|_{y_p=0};$$

3) температуры обеих фаз в пласте, а также окружающих пород до начала нагнетания равны между собой и постоянны (равны ϑ_0); температура нагнетаемой жидкости на входе в пласт также постоянна (равна ϑ_1).

Первые два допущения позволяют считать, что температура скелета пласта $T_1(x_p, t_p)$ совпадает со значением температуры окружающих пород $T_2(x_p, y_p, t_p)$ на границе пласта, т.е. $T_2(x_p, 0, t_p) = T_1(x_p, t_p)$ и, тем самым, ввести для их обозначения один общий символ:

$$T_1(x_p, y_p, t_p).$$

Математическая постановка задачи при сделанных предположениях имеет следующий вид:

$$\frac{\partial T_1}{\partial t_p} = a_2^2 \frac{\partial^2 T_1}{\partial y_p^2}, \quad x_p > 0,\ y_p > 0,\ t_p > 0, \tag{I}$$

$$\frac{\partial T_1}{\partial t_p} = \frac{\kappa_2}{c_1 \rho_1 h}\frac{\partial T_1}{\partial y_p} + \frac{\alpha_{01}}{(1-m)c_1\rho_1}(T_0 - T_1),$$
$$x_p > 0,\ y_p = 0,\ t_p > 0, \tag{2}$$

$$\frac{\partial T_0}{\partial t_p} = \frac{\varkappa_{02}}{c_0 \rho_0 h}(T_1 - T_0) - \frac{Q}{mh}\frac{\partial T_0}{\partial x_p} + \frac{\alpha_{01}}{m c_0 \rho_0}(T_1 - T_0), \tag{3}$$
$$x_p > 0,\ y_p = 0,\ t_p > 0.$$

$$T_0\Big|_{t_p=0} = T_1\Big|_{t_p=0} = \vartheta_0, \quad T_0\Big|_{x_p=0} = \vartheta_1, \quad T_1\Big|_{y_p\to\infty} = \vartheta_0. \qquad (4)$$

В качестве безразмерных независимых переменных возьмем

$$x' = \frac{k_2 c_2 \rho_2 m}{c_1^2 \rho_1^2 h Q} x_p, \quad y' = \frac{c_2 \rho_2}{c_1 \rho_1 h} y_p, \quad t' = \frac{k_2 c_2 \rho_2}{c_1^2 \rho_1^2 h^2} t_p \qquad (5)$$

и введем следующие безразмерные температуры:

$$u = \frac{T_0 - \vartheta_0}{\vartheta_1 - \vartheta_0}, \quad v = \frac{T_1 - \vartheta_0}{\vartheta_1 - \vartheta_0},$$

т.е. нормированную температуру жидкости обозначим через $u(x', t')$, окружающих пород - через $v(x', y', t')$, при этом $v(x', 0, t')$ определяет температуру скелета пласта.

Задача (1)-(4) в безразмерных величинах принимает следующий вид:

$$\frac{\partial v}{\partial t'} = \frac{\partial^2 v}{\partial y'^2}, \quad x' > 0, \ y' > 0, \ t' > 0, \qquad (6)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t'} = \frac{\partial v}{\partial y'} + \alpha(u - v), \quad x' > 0, \ y' = 0, \ t' > 0, \qquad (7)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t'} = -\frac{\partial u}{\partial x'} + \alpha_1(v - u), \quad x' > 0, \ y' = 0, \ t' > 0, \qquad (8)$$

$$u\big|_{t'=0} = v\big|_{t'=0} = 0, \quad u\big|_{x'=0} = 1, \quad v\big|_{y'\to\infty} = 0. \tag{9}$$

Здесь

$$\alpha = \frac{\alpha_{01} c_1 \rho_1 h^2}{(1-m) k_2 c_2 \rho_2}, \quad \alpha_1 = \left(\frac{\alpha_{01}}{m} + \frac{\varkappa_{02}}{h}\right) \frac{c_1^2 \rho_1^2 h^2}{k_2 c_0 \rho_0 c_2 \rho_2}.$$

Наконец, если ввести новые независимые безразмерные переменные

$$x = \alpha_1 x', \quad y = y', \quad t = t' - x', \tag{I0}$$

то задача, подлежащая решению, примет вид:

$$\frac{\partial v}{\partial t} = \frac{\partial^2 v}{\partial y^2}, \quad x > 0, \; y > 0, \; t > 0, \tag{I1}$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = \frac{\partial v}{\partial y} + \alpha(u - v), \quad x > 0, \; y = 0, \; t > 0, \tag{I2}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} = v - u, \quad x > 0, \; y = 0, \; t > 0, \tag{I3}$$

$$v\big|_{t=0} = 0, \quad u\big|_{x=0} = 1, \quad v\big|_{y\to\infty} = 0. \tag{I4}$$

Задачу (II)-(I4) будем решать при помощи интегрального преобразования Лапласа. При этом используем следующее обозначение:

$$\mathcal{L}[f(t);p]=\int_0^\infty e^{-pt}f(t)dt=\bar{f}(p),$$

а соответствие между оригиналом и изображением укажем знаком $\doteq$ напр. $\bar{f}(p)\doteq f(t)$. Переходя к изображениям, после несложных преобразований решение получаем в виде:

$$\bar{u}=\bar{u}(x,p)=\frac{1}{p}\exp\left(-x+\frac{\alpha x}{p+\sqrt{p}+\alpha}\right),$$

$$\bar{v}=\bar{v}(x,y,p)=\frac{\alpha}{p(p+\sqrt{p}+\alpha)}\exp\left(-x+\sqrt{p}\,y+\frac{\alpha x}{p+\sqrt{p}+\alpha}\right).$$

Начнем с обращения функции $\bar{u}(x,p)$. Для этого представим ее в виде:

$$e^{x}\bar{u}=\frac{1}{p}+\frac{1}{\sqrt{p}}\cdot\frac{1}{\sqrt{p}}\left[\exp\left(\frac{\alpha x}{p+\sqrt{p}+\alpha}\right)-1\right]=\bar{f}(p)+\bar{g}_1(p)\cdot\frac{1}{\sqrt{p}}\bar{g}_2(p).$$

Для обращения $\bar{g}_2(p)=\exp\left(\frac{\alpha x}{p+\sqrt{p}+\alpha}\right)-1$ воспользуемся сначала возможностью рассматривать $\bar{g}_2(p)$ как функцию $\bar{g}_{21}(p+\sqrt{p})$, а потом теоремой о сдвиге. Получающейся функции $\bar{g}(p)=\exp\left(\frac{\alpha x}{p}\right)-1$ соответствует оригинал $g(t)=\sqrt{\alpha x t^{-1}}\,J_1(2\sqrt{\alpha x t})$ см. [6], где $J_1(z)$ - модифицированная функция Бесселя первого рода (напр. [7]). Окончательно решение $u(x,t)$ - температура фильтрующейся по пласту жидкости - получается в виде:

$$u(x,t)=e^{-x}+\sqrt{\alpha x}\,e^{-x}\int_0^t e^{-\alpha\tau}J_1(2\sqrt{\alpha x\tau})\,\mathrm{erfc}\frac{\tau}{2\sqrt{t-\tau}}\frac{d\tau}{\sqrt{\tau}}. \quad (15)$$

Для нахождения оригинала функции $\bar{v}(x,y,t)$ представим ее в виде:

$$\bar{v} = \alpha e^{-x} \frac{1}{\sqrt{p}} \bar{f}(p) \cdot \bar{g}(p),$$

где

$$\bar{f}(p) = \frac{1}{\sqrt{p}} e^{-\sqrt{p}\, y}, \quad \bar{g}(p) = \bar{g}_1(p+\sqrt{p}).$$

Здесь

$$\bar{g}_1(p) = \frac{1}{p+\alpha} \exp\left(\frac{\alpha x}{p+\alpha}\right) \doteq e^{-\alpha t} J_0\left(2\sqrt{\alpha x t}\right).$$

Воспользовавшись известными основными соотношениями преобразования Лапласа, получаем

$$v(x,y,t) = \alpha e^{-x} \int_0^t e^{-\frac{y^2}{4(t-\eta)}} \frac{d\eta}{\sqrt{t-\eta}} \int_0^\eta e^{-\alpha\tau - \frac{\tau^2}{4(\eta-\tau)}} J_0\left(2\sqrt{\alpha x \tau}\right) \frac{d\tau}{\sqrt{\eta-\tau}}.$$

Изменение порядка интегрирования позволяет упростить полученное решение:

$$v(x,y,t) = \alpha e^{-x} \int_0^t e^{-\alpha\tau} J_0\left(2\sqrt{\alpha x \tau}\right) \operatorname{erfc} \frac{y+\tau}{2\sqrt{t-\tau}}\, d\tau. \tag{16}$$

Представляющую особый интерес температуру скелета пласта $v(x,0,t)$ можем окончательно преобразовать к виду:

$$v(x,0,t) = \alpha e^{-x} \int_0^t e^{-\alpha\tau} J_0\left(2\sqrt{\alpha x \tau}\right) \operatorname{erfc} \frac{\tau}{2\sqrt{t-\tau}}\, d\tau. \tag{17}$$

Насколько нам известно, до сих пор при изучении температурных полей в нефтяных пластах в многофазном рассмотрении не использовались постановки, аналогичные (6)-(9) - типа сосредоточенной емкости (с производными "высокого порядка" в граничных условиях [8]), позволяющие получить эффективное аналитическое решение соответствующей задачи. Путем сопоставления экспериментальных данных и найденных аналитических решений (I5), (I6) можно получить оценку величины реального коэффициента межфазного теплообмена α_{ij}, не прибегая к существенно упрощающим предположениям (например, замена реальной пористой среды системой чередующихся пластинок [9]).

Отметим в заключение, что мы предполагаем посвятить другие работы более подробному обоснованию получения исходной постановки (I)-(4), анализу полученного решения, а также рассмотрению разностных схем для численного решения постановок задач, подобных рассмотренной или обобщающей ее (напр. с учетом теплопроводности фаз вдоль пласта). Наличие двух краевых условий со старшими производными не препятствуют построению эффективных разностных схем. Например, для (6)-(9), при наличии в правой части уравнения (8) члена $b\frac{\partial v}{\partial y}$, может быть предложена следующая (с успехом опробованная на практике) разностная схема. Для (6) строится стандартная неявная схема с весами. В (7), (8) для повышения порядка аппроксимации по y' пользуемся обычным методом (см.напр.[I0]) использования основного уравнения (6) на границе. Из получающейся системы двух уравнений, связывающих значения функций u и v на границе $y'=0$ со значением v на первом (по y') слое, можно исключить неизвестное пока значение функции u и, тем самым, получить обычное соотношение типа $v_0 = \varkappa_1 v_1 + \nu_1$, как для краевого условия 3$^{\text{го}}$ рода. Таким образом, для перехода на следующий временной слой нужно проводить N (число узлов по x') последовательных прогонок по y', причем после каждой прогонки элементарными арифметическими действиями находится соответствующее значение u. Если рассматривается постановка, учитывающая теплопроводность фаз вдоль пласта (т.е. вдоль границы $y'=0$), то для (8) принимается монотонная (по x') схема второго порядка точности [10] и переход на следующий временной слой осуществляется в два этапа: сначала прогонка для двух функций по границе $y'=0$, после этого N прогонок по y'. Наконец, если основное уравнение не имеет вырождения по x', то можно применить схему типа метода переменных направлений, причем расчет опять начинается с матричной прогонки по границе $y'=0$.

После написания этой работы автору стала известна аннотация работы [II], из которой видно, что в ней рассматривалась подобная задача.

ЛИТЕРАТУРА

I. Чарный И.А. Нагревание призабойной зоны при закачке горячей жидкости в скважину.- "Нефтяное хозяйство", 1953, №№ 2,3, с..15-19, с..14-19.

2. Nusselt W. Der Wärmeübergang im kreuzström-"Zeitschrift des Vereines deutscher Ingenieure", 1911, v.55,No.48, 17-19.

3. Anzelius A. Uber Erwärmung vermittels durshströmender Medien -"Zeitschrift fur angewandte Mathematik und Mechenik", 1926, B.6. No.4, 28-31.

4. Lauwerier H.A. The transport of heat in an oil layer caused by the injection of hot fluid.- "Applied Scientific Research, Section A," 1955, v.5, No.2,3, 145-150.

5. Николаевский В.Н. и др. Механика насыщенных пористых сред. М., "Недра", 1970. 335с.
6. Бейтмен Г., Эрдейи А. Таблицы интегральных преобразований. Т.I, М., "Наука", 1969. 344с.
7. Бейтмен Г., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции. Т.2. М., "Наука", 1966. 296с.
8. Тихонов А.Н. О краевых условиях, содержащих производные порядка, превышающего порядок уравнения. -"Математический сборник", 1950, 26(68), № I, с.35-56.
9. Чекалюк Э.Б. Термодинамика нефтяного пласта. М., "Недра", 1965. 238с.
10. Самарский А.А. Введение в теорию разностных схем. М., "Наука", 1971. 552с.
11. Антимиров М.Я., Панферова А.А. О температурном поле при движении жидкости в двухкомпонентной пористой среде, контактирующей с непроницаемыми стенками.-"Инженерно-физический журнал", 1972, ХХШ, № 5, с.916-917.

О КИНЕТИКЕ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ И НОВОМ КИНЕТИЧЕСКОМ УРАВНЕНИИ

П.М.Колесников, Т.А. Карпова

(Институт тепло- и массообмена, АН БССР, г.Минск)

При изучении кинетики фазовых превращений в многофазных средах возникает задача об изучении образования зародышей фазы, их росте и распаде. Кинетика образования зародышей твердой фазы при конденсации или жидкой и газообразной фазы при кипении и испарении описывается известными уравнениями Фольмера, Беккера-Деринга, Френкеля-Зельдовича, Куртни, Пробстина, Кантровица и др. [I]. Дальнейший рост этих зародышей может быть рассмотрен на основе кинетики роста или распада единичных зародышей, для монодисперсных сред при отсутствии взаимного влияния зародышей друг на друга, однако для большого числа зародышей такое рассмотрение должно быть заменено кинетическим описанием. В ряде работ были предложены различные кинетические уравнения для функций распределения частиц по скоростям и размерам, для процессов конденсации жидкости или газа в твердое тело [I], [2], процессов сублимации, кипения и кавитации для пузырьков газа и пара, однако в этих работах обычно рассматриваются функции распределения или только по размерам [5], или по скоростям без учета размеров [6], или с учетом размеров, но без распределения по скоростям [I].

Ниже предложено общее кинетическое уравнение для функции распределения f частиц по времени, координатам, скоростям и размерам частиц

$$f(t, x, y, z, u, v, w, r). \qquad (I)$$

Изменение функции распределения будет описываться кинетическим уравнением, предложенным П.М.Колесниковым, которое в одномерном случае имеет вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + u\frac{\partial f}{\partial x} + u\frac{\partial f}{\partial u} + \frac{\partial \dot{r} f}{\partial r} = I\delta(r - r_{кр}). \quad (2)$$

Для зародышей вязкой жидкости можно принять в качестве силы $\dot{v}$ силу Стоксова трения $\dot{v} = au$ или другие известные выражения, например $\dot{v} = a_1 u^2$ и т.д.

Мы примем далее, что $\dot{v}(u) = \varphi_0(u)$. (3)

Если рассматривать свободно-молекулярный режим роста (распада) зародышей, то скорость роста определяется известной формулой Кнудсена

$$\dot{r} = \frac{\alpha_к}{\rho_в}\frac{P - P_\infty(T_s)}{\sqrt{2\pi r T}}, \quad (4)$$

в которой скорость роста не зависит от размера частиц r или другими формулами, например, формулой Максвелла или Фукса для континуального режима роста зародышей, которые применяются в континуальной теории дисперсных систем.

Это уравнение можно решать по методу характеристик, как это было сделано ранее одним из авторов для решения кинетического уравнения плазмы [7] - [9]. Оператор I может быть функциональным или интегральным.

Уравнения характеристик имеют вид

$$dt = \frac{dx}{u} = \frac{du}{\varphi_0(u)} = \frac{dr}{\dot{r}} = \frac{df}{I\delta(r - r_{кр}) - \frac{\partial \dot{r}}{\partial r} f}. \quad (5)$$

Учитывая, что в свободномолекулярном режиме $\frac{\partial \dot{r}}{\partial r} = 0$, можно найти ряд первых интегралов, а по ним построить общий интеграл и найти явный вид функции распределения.

Изложим сначала стационарный случай, когда t можно рассматривать просто как параметр.

Из соотношения $\frac{dx}{u} = \frac{du}{\varphi_0(u)}$, находим первый интеграл

$$x = \int \frac{du \cdot u}{\varphi_0(u)} + c_1. \quad (6)$$

Пусть $\varphi_0 = au$, тогда $x = \frac{u}{a} + c_1$, при $\varphi_0(u) = au^2$ имеем $x = \frac{1}{a}\ln u + c_1$ и т.д.

В стационарном случае можно записать $\dot{\tau} = u\varkappa'(x)$, тогда $\frac{dx}{u} = \frac{d\tau}{u\varkappa'(x)}$ дает следующий интеграл

$$\varkappa(x) + C_2 = \tau, \qquad (7)$$

где $\varkappa(x) = \frac{\alpha_к}{\rho_в}\int\limits_{x_1}^{x}\frac{P - P_\infty(T_s)}{n\sqrt{2\pi RT}}\,dx.$

И, наконец, из соотношений $\frac{dx}{u} = \frac{df}{I(x)\delta(\tau-\tau_{кр})}$ получаем еще один интеграл

$$f = \int\limits_{x_1}^{x}\frac{dx\,I}{u}\delta(\tau-\tau_{кр}) = \int\limits_{x_1}^{x}\frac{I(\xi)}{u(\xi)}\delta\left[\varkappa(\xi)+C_2-\tau_{кр}(\xi)\right]d\xi + C_3. \quad (8)$$

Если использовать граничное условие при $x = x_0$,

$$u = u_0,\ \tau = \tau_0,\ f = f_0(x_0, u_0, \tau_0) \qquad (а)$$

можно по виду функции f_0 определить вид функции распределения $f(x, u, \tau)$.

В нестационарном случае дело несколько усложняется, т.к. удается найти в явном виде не все интегралы системы уравнений (5). По-прежнему имеет место интеграл (6). Соотношение $dt = \frac{dx}{u}$ необходимо рассматривать как определение u, однако интеграл системы $d\tau = \dot{\tau}\frac{dx}{u}$ без предположения о характере $\dot{\tau}$ явно найти не удается, т.е. имеем

$$\tau = \int \dot{\tau}\,\frac{dx}{u} + C_2 \qquad (10)$$

поэтому выражение (8) принимает более общий вид

$$f = \int\limits_{x_1}^{x}\frac{I(\xi,t)}{u(\xi,t)}\delta\left[\int\limits_{x_1}^{x}\dot{\tau}\frac{dx}{u} + C_2 - \tau_{кр}(\xi,t)\right]d\xi + C_3. \qquad (11)$$

Соответственно усложняется построение явного вида функции распределения.

Обобщение на случай функций распределения для частиц разных сортов очевидно и может быть выполнено обычными методами [10].

Для построения функций распределения можно использовать различные асимптотические методы типа метода Чепмена и Энскога, метода моментов и др. [10].

Моментом функции распределения по размерам порядка n назовем величину

$$M^{(n)} = \int_{r_{кр}}^{\infty} r^n f \, dr. \qquad (12)$$

Умножая уравнения (2) поочередно на r^n получим вместо кинетических уравнений осредненные по размерам макроскопические характеристики, что важно для построения моделей полидисперсных сред.

Применим полученное уравнение к кинетике образования и роста пузырьков.

Простейшая модель для изменения радиуса пузырьков основана на уравнении Рэлея [3]

$$r \frac{d^2 r}{dt^2} + \frac{3}{r}\left(\frac{dr}{dt}\right)^2 = -\frac{P_0}{\rho}, \qquad (13)$$

что при $P_0 = const$ дает скорость изменения радиуса пузырьков

$$\dot r = \sqrt{\frac{r}{3}\,\frac{P_0}{\rho r^3}\left(R_0^3 - r^3\right)}. \qquad (14)$$

Если учесть силы газового давления в пузырьке, то уравнение пульсаций

$$r \ddot r = \frac{3}{2} \dot r^2 = \frac{P_0}{\rho_ж}\left(\frac{R_0}{r}\right)^{3\gamma} \qquad (15)$$

дает скорость изменения радиуса

$$\dot r = \sqrt{\frac{2}{3}\,\frac{P_0}{\rho_0(\gamma - 1)}\left[\left(\frac{R_0}{r}\right)^{3\gamma} - \left(\frac{R_0}{r}\right)^{3\gamma}\right]}. \qquad (16)$$

Учет поверхностного натяжения приводит к уравнению

$$r\ddot{r} + \frac{3}{2}\dot{r}^2 + \frac{1}{\rho}\left[P_v - P_\infty + P_0\frac{R_0^{3\gamma}}{r^{3\gamma}} - \frac{2\sigma}{r}\right] = 0 \qquad (17)$$

и также дает скорость роста, зависящую от радиуса.

Для всех этих уравнений $\frac{\partial \dot{r}}{\partial r} \neq 0$. Полагая, что на пузырек действуют силы сопротивления, пропорциональные скорости $\dot{v} = \varphi_0(u)$ с учетом приведенных соотношений нетрудно проинтегрировать уравнения (5). Результаты и дальнейшие обобщения из-за отсутствия места будут опубликованы отдельно.

Обозначения

f - функция распределения, t - время, x , y , z -координаты, u , v , w - скорости, r - размер частиц, I - -количество зародышей, образовавшихся в единицу времени, δ - функция Дирака, $r_{кр}$ - критические размеры зародыша, $\dot{v}$ - ускорение частицы, $\dot{r}$ - скорость роста частий, a_i - коэффициенты, T - температура, P - давление $\alpha_к$ - коэффициент акксмодации, $\rho_в$ - плотность частицы (капли), T_s - температура насыщения, P_∞ -давление на границе капли, $\varphi_0(v)$ - заданный закон, c_i - - постоянные интегрирования, $M^{(n)}$ - момент функции распределения, r - радиус пузырька, γ - показатель адиабаты, $\rho_ж$ - плотность жидкости, R_0 - начальный размер пузырька, σ - поверхностное натяжение, P_v - давление пара в пузырьке, P_∞ - давление вдали от пузырька, P_0 - давление газа в пузырьке.

Литература

1. Стернин Л.Е. Основы газодинамики двухфазных течений в соплах. М., „Машиностроение", 1974. 212 с.
2. Френкель Я.И. Кинетическая теория жидкостей. М., "Наука", 1975. 592 с.
3. Вопросы физики кипения. Под ред. И.Т. Аладьева. М., "Мир", 1964. 443 с.
4. Буевич Ю.А. О кинетике массообмена полидисперсной системы частиц с окружающей средой.- "ПМТФ", 1966, № 1, с. 50-57.
5. Токарев В.М. Исследование кинетики и кризиса кипения.- В кн.: Тепло- и массоперенос, т.2, ч.1. Минск, 1972, с.322.
6. Жданов В.М., Шулепов Л.Н. К кинетической теории переконденсации в бинарной газовой смеси при произвольных числах Кнудсена.- "Изв.АН СССР. Сер.МЖГ", 1975, № 4, с.150-155.
7. Колесников П.М. Электродинамическое ускорение плазмы. М., "Атомиздат", 1971. 389 с.
8. Колесников П.М., Хижняк Н.А. О нелинейных колебаниях плазмы за фронтом образования заряженных частиц.- "ЖТФ", 1965, т.35, № 10, с.1736-1742.
9. Колесников П.М., Хижняк Н.А. Состояние плазмы за фронтом ионизации.- В кн.: Техническая электромагнитная гидродинамика. М., Металлургия, 1965, с.236.
10. Колесников П.М. Введение в нелинейную электродинамику. Минск, "Наука и техника", 1971. 382 с.

ПОСТРОЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ГЕТЕРОФАЗНОГО ЗАТВЕРДЕВАНИЯ СПЛАВОВ.

В.Н.Карножицкий, В.В.Барковский,
Т.И.Лавриненко (ИПЛ АН УССР, г.Киев).

Глубокое изучение физики процессов литья, увеличение количества управляющих факторов и их усложнение требуют разработки достоверных математических моделей формирования отливок, так как прямое численное исследование этих процессов позволяет получить только набор значений искомых величин, которые очень трудно использовать для практических целей[1], [2].

Настоящая работа посвящена построению математической модели гетерофазного затвердевания отливок в кристаллизаторе переменной мощности при введении в расплав микрохолодильников.

В основу разработки математической модели положены следующие физические положения:

1.Мощность тепловых эффектов затвердевания и плавления пропорциональна объёмной доле жидкой фазы, определяемой по диаграмме равновесного состояния исследуемого сплава [1].

2.Движущей силой процессов теплообмена в системе микрохолодильник-расплав являются процессы нагрева и плавления микрохолодильников. В общем случае мощность теплового влияния микрохолодильников является функцией координаты (x), времени (τ), массы и теплофизических характеристик (m) микрохолодильников $W_4 = f(x,\tau,m)$, а при равномерном их распределении - $W_4 = f(\tau,m)$ [3].

3.Расплав охлаждается в высокотеплопроводном кристаллизаторе, регулируемой мощности $(\lambda_1 \to \infty)$.

4.Дискретность сопряжения отливки с поверхностью кристаллизатора, окисные пленки, покрытия и зазор создают условия несовершенного контакта расплава (отливки) с кристаллизатором [4],[5].

5.Внешняя поверхность кристаллизатора охлаждается по законам Ньютона, Стефана-Больцмана и путем испарительного охлаждения.

6.При $Pr\,Gr$ (где Pr и Gr ,соответственно, критерий Прандтля и Грасгофа) для учета конвективного теплообмена коэффициент молекулярной теплопроводности $\lambda_м$ заменяется эффективным значением $\lambda_э = \lambda_м \varepsilon_к$ (где $\varepsilon_к$ - коэффициент конвекции) [6].

Перейдем к построению математической модели.

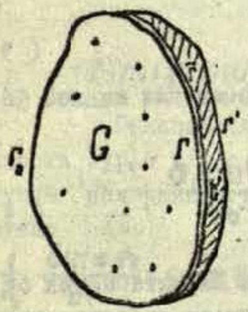

Рис.I

Тепловое состояние гетерофазной системы, занимающей односвязную область G с достаточно гладкой границей $\dot{G} = \Gamma \cup \Gamma_2 \cup \tilde{S}$, $\tilde{S} = \Gamma \cap \Gamma_2$ характеризуется скалярным полем температуры (Рис.I).

Значение локально-мгновенной температуры системы определяется из уравнения теплового баланса.

Если относительное содержание микрохолодильников мало $m = 0{,}06 \div 0{,}1$, то теплоты перегрева расплава достаточно, чтобы расплавить частицы. Энтальпия элементарного объема расплава W равна сумме теплоемкости $W_1 = \int_0^u c_p \rho\, du$ и количеству теплоты затвердевания расплава $W_2 = q \rho S(u)$ за вычетом теплоаккумулирующей способности $W_3 = \int_{u_0}^{u} c_{p_x} \rho_x\, du$ и количества теплоты плавления $W_4 = q_x \rho_x S(u)$ микрохолодильников, т.е.

$$W = (1-m)(W_1 + W_2) - m(W_3 + W_4). \qquad (1)$$

При охлаждении элементарного объема расплава ниже температуры ликвидуса (u_1) в нем образуется твердая фаза. В соответствии с положением I количество твердой фазы зависит от локально-мгновенной температуры и вида диаграммы состояния (химсостава) исследуемого сплава. При равновесной кристаллизации сплава функциональная зависимость изменения твердой фазы ($S_т$) определяется по правилу рычага [2] с последующей аппроксимацией полученных данных степенной зависимостью

$$S_т = 1 - \left(\frac{u(x,\tau) - u_2}{u_1 - u_2}\right)^n , \qquad (2)$$

где u_2 - температура солидуса, n - некоторая константа.

Тепловая мощность фазового превращения равна

$$\frac{\partial W_2}{\partial \tau} = q\rho \frac{\partial S}{\partial \tau} , \qquad (3)$$

(S - функциональная зависимость изменения жидкой фазы $S = 1 - S_т$), а с учетом (2)

$$\frac{\partial W_2}{\partial \tau} = q\rho n \left(\frac{u(x,\tau) - u_2}{u_1 - u_2}\right)^{n-1} \frac{1}{u_1 - u_2} \frac{\partial u(x,\tau)}{\partial \tau} . \qquad (4)$$

При независимости теплофизических характеристик от температуры (в расчетах могут использоваться средние значения) $W_1 = c_p \rho u(x,\tau)$, а

$$\frac{\partial W_1}{\partial \tau} = c_p \rho \frac{\partial u(x,\tau)}{\partial \tau} . \qquad (5)$$

Изменение средней температуры микрохолодильников для стадии нагрева описывается экспоненциальной зависимостью $(u(x,\tau) - u_0) e^{-b_1\tau}$, а изменение их энтальпии- уравнением

$$\frac{\partial W_3}{\partial \tau} = -c_{p_x}\rho_x\left(u(x,\tau)-u_0\right)\varepsilon_1 e^{-\varepsilon_1\tau}. \qquad (6)$$

Изменение энтальпии микрохолодильников для стадии их плавления определяется уравнением

$$\frac{\partial W_4}{\partial \tau} = -4\pi q_x \rho_x A^3 \tau^2, \qquad (7)$$

$$A = \frac{\alpha \Delta u}{q_x \rho_x}, \qquad \Delta u \equiv u_н - \frac{u_н - u_р}{2},$$

где α - коэффициент теплообмена на поверхности микрохолодильника; $u_н$ - начальная температура расплава; $u_р$ - равновесная температура гетерофазной системы, определяемая из уравнения теплового баланса

$$(1-m)\left(c_p\rho(u_н-u_р)\right) = m\left(c_{p_x}\rho_x(u_р-u_0)+q_x\rho_x\right). \qquad (8)$$

Подставляя (I) в основное уравнение теплопроводности Фурье [I] с учетом (4), (5) , (6) и (7) получим нелинейное уравнение теплопроводности в гетерофазной системе

$$\frac{1}{a_c}\frac{\partial u(x,\tau)}{\partial \tau} = \Delta u(x,\tau) - \frac{m}{\lambda_c(1-m)}\Big(c_{p_x}\rho_x\left(u(x,\tau)-u_0\right)\varepsilon_1 e^{-\varepsilon_1\tau} + 4\pi q_x\rho_x A^3\tau^2\Big) + E(u,x,\tau), \qquad (9)$$

$$E(u,x,\tau) \equiv \begin{cases} 1 & u(x,\tau) > u_1 \\ -\dfrac{q\rho n}{\lambda_c(u_1-u_2)}\left(\dfrac{u(x,\tau)-u_2}{u_1-u_2}\right)^{n-1}\dfrac{\partial u(x,\tau)}{\partial \tau}, & u_1 \ge u(x,\tau) \ge u_2 \\ 0 & u(x,\tau) < u_2 \end{cases}$$

$a_c \equiv \dfrac{\lambda_c}{c_{p_c}\rho_c}$, a_c - эквивалентный коэффициент теплопроводности гетерофазной системы .

В соответствии с положением 6 условие теплообмена на внешней поверхности кристаллизатора описывается уравнением

$$\lambda_1 \frac{\partial u(x,\tau)}{\partial n} = -\alpha_c(\tau)\left(u(x_1,\tau)-u_c(\tau)\right) - \sigma\varepsilon\left(u^4(x_1,\tau)-u_c^4(\tau)\right) \pm q(\tau), \quad x_1 \in \Gamma'. \qquad (10)$$

Используя среднее во времени значение коэффициента лучистого $\alpha_\lambda = \sigma\varepsilon \dfrac{\bar{u}^4(x_1,\tau)-\bar{u}_2^4}{\bar{u}_1 - \bar{u}_2}$ и конвективного теплообмена α_c граничное условие (10) можно записать следующим образом

$$\lambda_1 \frac{\partial u(x_1,\tau)}{\partial n} = -\alpha_э\left(u(x,\tau)-u_c(\tau)\right) \pm q(\tau), \quad x_1 \in \Gamma', \qquad (11)$$

$$\alpha_э = \alpha_\lambda + \alpha_c .$$

В соответствии с положением 4 теплообмен на поверхности Γ описывается граничным условием несовершенного контакта

$$-\lambda_p \frac{\partial u(x,\tau)}{\partial n} = \alpha_к\left(u(x_1,\tau)-u(x,\tau)\right) = -\lambda_1 \frac{\partial u(x_1,\tau)}{\partial n}, \quad x \in \Gamma, \; x_1 \in \tilde{\Gamma}, \qquad (12)$$

где $\Gamma' \cup \tilde{\Gamma} = \dot{G}'$, $\dot{G}'$ – поверхность кристаллизатора.

Из условия (12) следует , что

$$u(x_1,\tau) = u(x,\tau) - \begin{cases} \dfrac{\lambda_p}{\alpha_к} \dfrac{\partial u(x,\tau)}{\partial n}, & x \in \Gamma \\ \dfrac{\lambda_1}{\alpha_к} \dfrac{\partial u(x_1,\tau)}{\partial n}, & x_1 \in \tilde{\Gamma} \end{cases} \qquad (13)$$

Температурное поле кристаллизатора удовлетворяет неоднородному уравнению теплопроводности с регулируемыми и равномерно распределенными по объему стоками тепла, интенсивностью $A_1 N(\tau)$

$$c_1\rho_1 \frac{\partial u(x_1,\tau)}{\partial \tau} = \lambda_1 \Delta u(x_1,\tau) + A_1 N(\tau), \qquad x \in G', \qquad (14)$$

где G' - область, занимаемая кристаллизатором.

Проинтегрируем уравнение (I4) по объему плоского кристаллизатора (V)

$$c_1\rho_1\int\limits_V \frac{\partial u(x_1,\tau)}{\partial\tau}dv = \lambda_1\int\limits_V \Delta u(x_1,\tau)\,dv + \int\limits_V A_1 N(\tau)\,dv. \qquad (I5)$$

Применив к равенству (I5) теорему Гаусса, получим

$$c_1\rho_1\int\limits_V \frac{\partial u(x_1,\tau)}{\partial\tau}dv = \lambda_1\int\limits_{G'} \frac{\partial u(x_1,\tau)}{\partial\tau}ds + \int\limits_V A_1 N(\tau)\,dv. \qquad (I6)$$

На основании следствия из теоремы о среднем для кратных интегралов и в силу того, что $\frac{\partial u(x_1,\tau)}{\partial n}\Big|_{\bar\Gamma} = -\frac{\partial u(x,\tau)}{\partial n}\Big|_{\Gamma}$; $G' = \bar\Gamma \cup \Gamma'$ можно записать

$$c_1\rho_1\frac{\partial u_1(x_1,\tau)}{\partial v}v = \lambda_1 s'\frac{\partial u_1(x_1,\tau)}{\partial n}\Big|_{\bar\Gamma} - \lambda_1 s''\frac{\partial u_1(x_1,\tau)}{\partial n}\Big|_{\Gamma'} + A_1 N(\tau)v \qquad (I7)$$

или

$$c_1\rho_1\delta\frac{\partial u_1(x_1,\tau)}{\partial v} = \lambda_1\frac{\partial u_1(x_1,\tau)}{\partial n}\Big|_{\bar\Gamma} - \lambda_1 r\frac{\partial u_1(x_1,\tau)}{\partial n}\Big|_{\Gamma'} + A_1 N(\tau)\delta, \qquad (I8)$$

$$\delta = v/s', \quad r = s''/s',$$

где s', s'' - соответственно, площадь поверхности $\bar\Gamma$ и Γ' кристаллизатора; $u_1(x_1,\tau)$ - значение температуры в средней точке кристаллизатора.

Воспользовавшись (II), (I2), (I3) и тем, что в кристаллизаторе отсутствует градиент температуры, получим эквивалентное граничное условие на поверхности отливки

$$c_1\rho_1\delta\frac{\partial u(x,\tau)}{\partial\tau} = \frac{\lambda_\rho}{\alpha_\kappa}\frac{\partial^2 u(x,\tau)}{\partial n\,\partial\tau} + \left(\alpha_э\frac{\lambda_\rho}{\alpha_\kappa} - \lambda_o r\right)\frac{\partial u(x,\tau)}{\partial n} -$$

$$-\alpha_э\left(u(x,\tau) - u_c(\tau)\right) \pm q(\tau) + AN(\tau)\delta, \quad x\in\Gamma. \qquad (I9)$$

Другая поверхность отливки (Γ_2) теплоизолирована, поэтому

$$\frac{\partial u(x,\tau)}{\partial n} = 0. \qquad (20$$

Начальное распределение температуры характеризуется функцией координат и имеет вид

$$u(x,0) = \psi(x), \qquad x \in G \cup \Gamma. \qquad (21)$$

Таким образом, математическая модель теплофизических процессов гетерофазного затвердевания сплавов принимает вид краевой задачи для нелинейного уравнения теплопроводности (8) с нестационарными на части поверхности Γ граничными условиями (19), (20) и начальным условием (21). Особенность этой модели состоит в том, что эквивалентное граничное условие (19), содержащее смешанную производную второго порядка, позволяет избавиться от рассмотрения теплофизических процессов, происходящих в кристаллизаторе, который влияет на процесс кристаллизации расплава.

Полученная краевая задача (8), (19)-(21) довольно сложная, поэтому решать ее в таком виде можно только численными методами. Однако, если допустить некоторую схематизацию реального процесса, то это позволит свести сформулированную краевую задачу (8), (19)-(21) к линейной краевой задаче с нестационарными граничными условиями на части поверхности Γ.

Допустим, что функциональная зависимость изменения твердой фазы $S_т$ описывается законом

$$S_т = 1 - \left(\frac{k(\tau)x^m - u_2}{u_1 - u_2}\right)^n, \qquad (22)$$

где $k(\tau)$ - темп автомодельного изменения температурного поля.

Учитывая (22), уравнение (8) примет вид

$$\frac{1}{a_\tau}\frac{\partial u(x,\tau)}{\partial n}=\Delta u(x,\tau)-\frac{m}{\lambda_\tau(1-m)}\left(c_{p_2}\rho_2(u(x,\tau)-u_0)\varepsilon_1 e^{-\varepsilon_1\tau}+\right.$$

$$\left.+4\pi q_2\rho_2 A^3\tau^2\right)+E(u,x,\tau)\quad,\quad x\in G\ ,$$

$$E(u,x,\tau)\equiv\begin{cases}1 & , \quad u(x,\tau)>u_1\\ -\dfrac{q\rho n x^m}{\lambda_c(u_1-u_2)}\left(\dfrac{\kappa(\tau)x^m-u_2}{u_1-u_2}\right)^{n-1}\dfrac{d\kappa(\tau)}{d\tau} & , \quad u_1\geq u(x,\tau)\geq u_2\\ 0 & , \quad u(x,\tau)<u_2\ .\end{cases}\qquad(23)$$

Контактное тепловое сопротивление заменим эквивалентной тепловой стенкой, что позволит условие несовершенного контакта (I3) заменить условием

$$u(x,\tau)\Big|_\Gamma=\kappa_2\,u(x_1,\tau)\Big|_\Gamma+b\ ,\qquad(24)$$

где κ_2 и b – известные коэффициенты, зависящие от температуры кристаллизатора.

Учитывая (24), получим новое краевое условие на поверхности

$$\frac{c_1\rho_1\delta}{\kappa_2}\frac{\partial u(x,\tau)}{\partial\tau}=\left(\alpha_э\frac{\lambda_p}{\alpha_к}-\lambda_p r\right)\frac{\partial u(x,\tau)}{\partial n}\pm q(\tau)-$$

$$-\alpha_э\,(u(x,\tau)-u_c(\tau))+A_1N(\tau)\delta\ ,\qquad(25)$$

$$x\in\Gamma\ .$$

Таким образом, сделанные допущения позволили нелинейную задачу (8), (I9)–(2I) свести к линейной

$$\begin{aligned}&\frac{1}{a_0}\frac{\partial u(x,\tau)}{\partial\tau}=\Delta u(x,\tau)+\varphi_0(u,x,\tau)\ , && x\in G;\\ &\frac{1}{a_c}\frac{\partial u(x,\tau)}{\partial\tau}=-\frac{\partial u(x,\tau)}{\partial n}+\varphi_1(u,x,\tau), && x\in\Gamma;\\ &\frac{\partial u(x,\tau)}{\partial n}=0\ , && x\in\Gamma_2;\\ &u(x,0)=\psi(x)\ , && x\in G\cup\Gamma,\end{aligned}\qquad(26)$$

где $\varphi_0(u,x,\tau) = -\frac{m}{\lambda_c(1-m)}\left(c_p \rho_2 (u(x,\tau)-u_0)\varepsilon_1 e^{-\varepsilon_1\tau} + \right.$

$$\left. + 4\pi q_0 \rho_0 A^3 \tau\right) + \begin{cases} 1 & u(x,\tau) > u_1 \\ -\frac{q\rho n x^m}{\lambda_c(u_1-u_2)}\left(\frac{k(\tau)x^m - u_2}{u_1 - u_2}\right)^{n-1}\frac{dk(\tau)}{d\tau}, & u_1 \le u(x,\tau) \le u_2 \\ 0, & u(x,\tau) < u_2 \end{cases}$$

$$\varphi_1(u,x,\tau) = -\alpha_\vartheta\left(u(x,\tau) - u_c(\tau)\right) + A_1 N(\tau)\delta \pm q(\tau),$$

$$\bar{a}_c = \frac{k_2\left(\lambda_p r - \alpha_\vartheta \frac{\lambda_p}{\alpha_k}\right)}{c_1 \rho_1 \delta}.$$

Не нарушая общности в задаче (26) коэффициенты a_c и $\bar{a}_c$ можно считать равными единице, так как это можно достичь, сделав линейную замену переменных.

Для исследования задачи (26) используем методы функционального анализа.

Рассмотрим ортогональную сумму гильбертовых пространств $L^2 = L_2(G) \oplus L_2(\Gamma)$ со скалярным произведением

$$(U,V)_{L^2} = (u_0(x_0), v_0(x_0))_{L_2(G)} + (u_1(x_1), v_1(x_1))_{L_2(\Gamma)}, \qquad (27)$$

где элементы $U = (u_0(x_0), u_1(x_1))$, $V = (v_0(x_0), v_1(x_1))$ пространства L^2, $u_0(x_0) \in L_2(G)$, $u_1(x_1) \in L_2(\Gamma)$, а $x_0 \in G$ вплоть до Γ_2, $x_1 \in \Gamma$.

Пусть $C^2(G \cup \Gamma)$ - множество дважды непрерывно дифференцируемых функций $G \cup \Gamma$.

Оператор $\mathcal{A}'$ определим в L^2 подобно [7], [8] на элементах $\varphi(x) \in C^2(G \cup \Gamma)$ таких, что $\left.\frac{\partial \varphi}{\partial n}\right|_{\Gamma_2} = 0$ как оператор действующий по закону

$$(\varphi(x_0), \varphi(x_1)) \longrightarrow \left(-(\Delta\varphi)(x_0), \left(\frac{\partial \varphi}{\partial n}\right)(x_1)\right). \qquad (28)$$

Согласно [7] , [10] оператор $\mathcal{A}'$ - симметрический, имеющий область определения плотную в L^2 . Оператор $\mathcal{A}'$ допускает замыкание, которое обозначим через $\mathcal{A}$. В [7] , [9] доказано, что $\mathcal{A}$ - самосопряженный оператор.

В силу построения оператора $\mathcal{A}$ задача (26) в гильбертовом пространстве L эквивалентна задаче Коши

$$\frac{dU(\tau)}{d\tau} = -\mathcal{A}U(\tau) + F(u,\tau), \qquad U(0) = \Psi \in L^2, \tag{29}$$

где $U(\tau) = (u_0(x_0,\tau), u_1(x_1,\tau))$, $\Psi = (\psi(x_0), \psi(x_1))$,
$F(u,\tau) = (\varphi_0(u_0,x_0,\tau) , \varphi_1(u_1,x_1,\tau))$.

В силу [9] задача (26) разрешима и имеет единственное решение, причем она может быть сведена к интегральному уравнению

$$u(x_0,\tau) = \sum_{\alpha=1}^{\infty} e_\alpha(x_0,\lambda_\alpha)\Big(\sum_{i=0}^{1} \int_{G^i} e^{-\lambda_\alpha \tau} \psi(x_i) e_\alpha(x_i,\lambda_\alpha)dx_i +$$

$$+ \int_0^\tau \Big(\int_{G^i} e^{-\lambda_\alpha(\tau-t)} \varphi_i(\xi_i,u_i,\tau) e(\xi_i,\lambda_i) d\xi_i \Big) dt\Big), \tag{30}$$

$$(G^0 = G , \ G^1 = \Gamma) ,$$

где $e_\alpha(x_i,\lambda_\alpha)$ - собственные функции, а λ_α - собственные числа оператора $\mathcal{A}$.

Для нахождения собственных функций и собственных значений оператора $\mathcal{A}$ решим следующую задачу

$$\begin{aligned} -\Delta e_k(x) &= \lambda_k e_k(x) , && x \in G; \\ \frac{\partial e_k(x)}{\partial n} &= \lambda_k e_k(x) , && x \in \Gamma_1; \\ \frac{\partial e_k(x)}{\partial n} &= 0 && x \in \Gamma_2. \end{aligned} \tag{31}$$

Очевидно, что вид собственных функций зависит от геометрической формы области G , занимаемой расплавом.

I.Область G представляет собой бесконечную плиту, толщина которой равна h . Согласно [9] уравнение для нахождения собственных чисел имеет вид

$$tg\,\mu_k h = -\mu_k \qquad , \quad (\mu_k = \sqrt{\lambda_k}) , \qquad (32)$$

а собственные функции

$$e_k(x) = A_k \cos \mu_k (x+h) \ , \qquad (33)$$

где

$$A_k = \sqrt{\frac{2}{h + \cos^2 \mu_k h}} \ .$$

2.Область G представляет собой бесконечный круговой цилиндр единичного радиуса. Боковую поверхность обозначим через Γ (Γ_2 - отсутствует). Начало координат расположено в геометрическом тепловом центре. Используя результаты работы [9] , запишем уравнение для нахождения собственных чисел

$$\mathcal{J}'_m(\mu_k) = \mu_k \mathcal{J}_m(\mu_k) \ , \qquad (34)$$

где $\mathcal{J}_m(\mu_k)$ - функция Бесселя первого рода m-го порядка (под k - подразумевается два индекса m и s)

$$e_k(r,\varphi) = \frac{\mathcal{J}_m(\mu_k, r) \begin{matrix} \cos m\varphi \\ \sin m\varphi \end{matrix}}{\mathcal{J}_m(\mu_k) \sqrt{\frac{\pi}{2}(1+\delta_{om})(3+\mu_k - \frac{m^2}{\mu_k^2})}} \ . \qquad (35)$$

3.Область G представляет собой шар единичного радиуса, Г-сфера, ограничивающая шар. (Γ_2 - отсутствует).

$$e_k(r,\theta,\varphi) = \mathcal{J}_{n+1/2}(\mu_k, r)\, Y_n^{(j)}(\theta,\varphi) \ , \qquad (36)$$

где $Y_n^{(j)}$ - сферические функции ,

$$Y_n^{(0)}(\theta,\varphi) = P_n(\cos\theta),$$
$$Y_n^{(-j)}(\theta,\varphi) = P_n^j(\cos\theta)\cos j\varphi,$$
$$Y_n^{(j)}(\theta,\varphi) = P_n^j(\cos\theta)\sin j\varphi.$$
$$j = 1, 2, \ldots, n.$$

Собственные числа находятся из уравнения

$$J'_{n+1/2}(\mu_k) = \mu_k \cdot J_{n+1/2}(\mu_k). \tag{37}$$

Обозначения.

c_p, c_{p_x}, c_1 - соответственно, удельная теплоемкость расплава, микрохолодильников и кристаллизатора; ρ, ρ_x, ρ_1 -плотность отливки, микрохолодильников и кристаллизатора; q, q_x - количество теплоты кристаллизации расплава и плавления микрохолодильников; $\lambda_p, \lambda_x, \lambda_1$ - коэффициент теплопроводности расплава, микрохолодильников и кристаллизатора; u_0 - начальная температура микрохолодильников; m - относительное содержание микрохолодильников; ε_1 - темп нагрева микрохолодильников; $\lambda_c = \lambda(m, \lambda_p, \lambda_x)$ - коэффициент теплопроводности системы; $c_{p_c} = c_p(m, c_p, c_{p_x})$ - эквивалентная удельная массовая теплоемкость системы; $\rho_c = \rho(m, \rho, \rho_x)$ - эквивалентная плотность системы; $\alpha_3(\tau)$ - коэффициент конвективного теплообмена; σ - постоянная Стефана-Больцмана; ε - приведенная степень черноты; $q(\tau)$ - мощность испарительного охлаждения; $u_c(\tau)$ - температура внешней среды; α_c - коэффициент контактного теплообмена; A_1 - параметр кристаллизатора; $N(\tau)$ - тепловая мощность кристаллизатора.

Авторы выражают благодарность Н.А.Авдонину за обстоятельный критический разбор первоначальной рукописи статьи.

Литература

1. Лыков А.В. Теория теплопроводности. М., "Высшая школа", 1967. 600с.
2. Чалмерс Б. Теория затвердевания. М., "Металлургия", 1969. 325с.
3. Карножицкий В.Н., Куц Г.А., Затуловский С.С. Исследование теплообмена и кинетики плавления дисперсных частиц в расплаве стали.-В кн.: Проблемы стального слитка. М., "Металлургия", 1975, с.375-381.
4. Карножицкий В.Н. К вопросу о понятии и методах определения теплового сопротивления зоны контакта твердых тел.-В кн.:Тепломассоперенос. т.XI, Минск, Из-во ИТМО АН БССР, 1969. с.1018-1028.
5. Карножицкий В.Н. Теплообмен в зоне сопряжения отливки и формы.-В кн.: Формовочные материалы и формообразование. Киев, Из-во ИПЛ АН УССР, 1959, с.196-200.
6. Кутателадзе С.С., Боришанский В.М. Справочник по теплопередаче. Л.-М., "Госэнергоиздат", 1959. 417с.
7. Барковский В.В. Самосопряженность операторов, порожденных уравнением Шредингера и неоднородными граничными условиями на части границы.- "Дифф.уравн.", 1970, т.4, № 3, с.513-524.
8. Барковский В.В. Смешанные краевые задачи общего вида, нестационарные на части границы.-"ДАН", № 1, т.195, с.9-12.
9. Митропольский Ю.А., Нижник Л.П., Кульчицкий В.Л. Нелинейные задачи теплопроводности с производной по времени в граничных условиях. Препринт Института Математики АН УССР, Киев, 1974. 25с.

РЕФЕРАТЫ

УДК 536.421.4+536.421.1.

ТЕОРИЯ ОБОБЩЕННОГО РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ БИНАРНОЙ СИСТЕМЫ. А в д о н и н Н.А. "Прикладные задачи теоретической и математической физики, I", 1977.

Путем осреднения получены обобщенные уравнения термо-диффузионной задачи при наличии двухфазной зоны. Показано, что полученная система уравнений является параболической по И.Г.Петровскому, но не является сильно параболической системой. Доказано существование обобщенного решения путем сведения уравнений к сильно параболической системе, зависящей от параметра. Одновременно предложен эффективный разностный метод решения задачи.

Библиография (12), рис.2.

УДК 518.61:536.242.2

ТРЕХМЕРНАЯ НЕСТАЦИОНАРНАЯ ЗАДАЧА О ЗОННОЙ ПЛАВКЕ С НЕСИММЕТРИЧНЫМ НАГРЕВАТЕЛЕМ. М а р т у з а н е Э.Н. "Прикладные задачи теоретической и математической физики, I", 1977.

В работе изучается температурное поле вблизи изотермы плавления при несимметричном расположении индуктора путем численного решения трехмерного уравнения теплопроводности в двухфазной среде с учетом скрытой теплоты кристаллизации и условий излучения на внешней поверхности слитка по закону Стефана-Больцмана.

Показано, что амплитуда колебаний температурного поля уменьшается со временем. Сделан вывод, что увеличение угловой скорости вращения уменьшает влияние асимметрии в расположении системы слиток-индуктор, а, следовательно, обеспечивает более равномерное распределение примесей по сечению выращенного кристалла.

Библиография (6), рис.4.

УДК 621.315.592

РАСЧЕТ НАГРЕВА И ПЕРЕНОСА ГАЗА В ПРОЦЕССЕ ЭПИТАКСИАЛЬНОГО НАРАЩИВАНИЯ С УЧЕТОМ ВРАЩЕНИЯ ПЬЕДЕСТАЛА И ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ КОЭФФИЦИЕНТОВ. Кравченко М.А., Кузнецов А.С., Мартузан Б.Я., Уланова Н.Л. "Прикладные задачи теоретической и математической физики, I", 1977

Изучается температура и газовые потоки в реакторе для выращивания эпитаксиальных пленок путем численного решения уравнений Навье-Стокса в симметрических координатах для вязкого, теплопроводящего, сжимаемого газа и уравнения теплопроводности с учетом вращения пьедестала и температурной зависимости вязкости и коэффициента теплопроводности.

Показано несущественное влияние учета нелинейной зависимости вязкости на температуру и поступательные компоненты скорости. Дается приближенная формула для вращательной компоненты скорости при переменной вязкости. Показано сильное влияние температурной зависимости коэффициента теплопроводности на значения радиального градиента температуры вблизи пьедестала.

Библиография (4), рис.5.

УДК 537.56+518.5

МЕТОД РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ О РЕКОМБИНАЦИИ РАСШИРЯЮЩЕЙСЯ ПЛАЗМЫ. Люмкис Е.Д., Филиппов С.С. "Прикладные задачи теоретической и математической физики, I", 1977.

Предлагается метод численного решения системы обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка, часть из которых имеет малый параметр при производной. Метод опирается на теорему А.Н.Тихонова и состоит в замене дифференциальных уравнений с малым параметром алгебраическими. Разномасштабность характерных времен позволяет постепенно повышать порядок системы в процессе ее решения, последовательно восстанавливая исходные дифференциальные уравнения. Метод применен к решению модельной задачи об инерционном разлете плазмы, которая сводится к решению системы уравнений баланса частиц и энергии с учетом процессов ионизации и рекомбинации.

Библиография (9).

УДК 537.54

КАЧЕСТВЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РЕШЕНИЙ УРАВНЕНИЙ, МОДЕЛИРУЮЩИХ КВАЗИСТАЦИОНАРНЫЙ СИЛЬНОИЗЛУЧАЮЩИЙ ГАЗОВЫЙ РАЗРЯД. Л ю м к и с Е.Д. "Прикладные задачи теоретической и математической физики", I, 1977.

Для простой модели квазистационарного сильноизлучающего газового разряда в предположении локального термодинамического равновесия построены асимптотические решения в виде ряда по малому параметру. Таким малым параметром для разряда в ксеноне в рассматриваемых условиях является коэффициент теплопроводности. Выяснены условия, при которых возможна контракция разряда. Полученные асимптотические решения сравниваются с результатами численного расчета.

Библиография (IO), рис.4.

УДК 517.947+532.546+536.242

ДВУХТЕМПЕРАТУРНОЕ ПОЛЕ В ГЕТЕРОГЕННОЙ СРЕДЕ В ПРИБЛИЖЕНИИ СОСРЕДОТОЧЕННОЙ ЕМКОСТИ. Б у й к и с А.А."Прикладные задачи теоретической и математической физики", I, 1977.

В статье дается постановка и аналитическое решение в замкнутом виде задачи об определении температурного поля гетерогенного слоя (нефтяной пласт при учете различия температур скелета пласта и фильтрующейся жидкости) при теплообмене этого слоя с однородной окружающей средой и трактовке его как сосредоточенной емкости.

Математическая постановка задачи сводится к решению уравнения теплопроводности с двумя краевыми условиями, содержащими старшие производные. Решение задачи получено применением интегрального преобразования Лапласа. Кратко указывается на возможные разностные схемы для численного нахождения решений задач подобного типа.

Библиография (II).

УДК 536.423.I.

О кинетике фазовых превращений и новом кинетическом уравнении. Колесников П.М., Карпова Т.А. "Прикладные задачи теоретической и математической физики", I, 1977.

Предложено новое кинетическое уравнение с учетом образования и роста зародышей, описывающее кинетику образования и испарения жидких капель, кинетику образования газовых пузырьков с учетом влияния на кинетику процессов тепло- и массообмена в многофазных средах. На основе кинетического уравнения строятся функции распределения частиц по размерам и другим свойствам, получены некоторые общие аналитические решения кинетического уравнения, проводится сопоставление с известными ранее кинетическими уравнениями.

УДК 536.421.4 +
534.421.1

Построение математической модели гетерофазного затвердевания сплавов. Карножицкий В.Н., Барковский В.В., Лавриненко Т.И. "Прикладные задачи теоретической и математической физики", I, 1977.

В работе дается описание температурного поля отливки или слитка с учетом сложных граничных условий на поверхности отливки (условие, включающее производную по времени) и плавления твердых частиц (микрохолодильников) в перегретом расплаве. Путем линеаризации задача сводится к абстрактной задаче Коши, после чего обосновывается существование и единственность решения поставленной задачи. Решение задачи сводится к решению интегрального уравнения. Библиография (9), рис.I.

СОДЕРЖАНИЕ

ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

I

Межведомственный сборник научных трудов

Редактор Р.Довгополова
Технический редактор К.Судник
Корректор К.Судник

Латвийский государственный университет им. П.Стучки
Рига 1977

Подписано к печати 03.02.1977. ЯТ 04025. Зак.№ 219
Бумага № I. Ф/б 60х84/16. 7,0 физ.печ.л. 5,2 уч.-изд.л.
Тираж 500 экз. Цена 78 к.

Отпечатано на ротапринте, Рига-50, ул.Вейденбаума,5
Латвийский государственный университет им. П.Стучки