LATVIJAS UNIVERSITĀTE

MATEMĀTIKAS UN INFORMĀTIKAS INSTITŪTS

MĀRA GULBE

STEFANA PROBLĒMAS SKAITLISKA RISINĀŠANA KLASISKAJĀ UN VISPĀRINĀTAJĀ NOSTĀDNĒ

Promocijas darba
LR doktora matemātikā zinātniskā grāda iegūšanai
kopsavilkums

Zinātniskais vadītājs
Dr.mat. Nikolajs Avdoņins

Rīga, 1993.

1. Promocijas darbs ir veltīts kristalizācijas procesus aprakstošo uzdevumu risināšanai. Darba mērķis bija - izveidot skaitliskas risināšanas algoritmu gan vienas, gan divu komponenšu sakausējuma kristalizācijas uzdevuma atrisināšanai. Pie tam aplūkojot minēto problēmu kā klasiskajā, tā arī vispārinātajā nostādnē.

Vispārpieņemts kristalizācijas procesa matemātiskais modelis ir J.Stefana vēl 1989. gadā /10/ piedāvātā uzdevuma klasiskā nostādne. No tā laika matemātiskajā fizikā siltumvadīšanas uzdevumu ar fāzu pāreju uz kustīgās cietās un šķidrās fāzes robežas ir pieņemts saukt par Stefana problēmu. Klasiski Stefana problēma tiek formulēta sekojoši:

temperatūras lauks $T(x,y,z,t)$ šķidrajā un cietajā fāzē tiek aprakstīts ar siltumvadīšanas vienādojumu

$$L\frac{\partial T}{\partial t} = div(\lambda(T)\, grad\, T) + f , \tag{1}$$

kristalizācija (kušana) notiek uz fāzu robežas, ko nosaka vienādojums

$$z = \varphi(x,y,t), \quad \varphi(x,y,0) = \varphi_0(x,y), \tag{2}$$

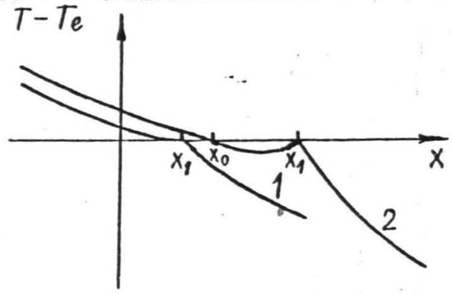
fāzu pāreja notiek līdzsvara apstākļos, t.i., uz fāzu pārejas robežas ir dota līdzsvara temperatūra T_e (jeb kušanas temperatūra T_n vienas komponentes sakausējuma gadījumā)

$$T = T_e \quad pie \quad z = \varphi(x,y,t), \tag{3}$$

fāzu pārejas robežas kustības ātrums tiek noteikts ar fāzu pārejas latentā siltuma atdeves nosacījumu (Stefana nosacījumu)

$$[\lambda(T)\, grad\, T \cdot \vec{n}]_{z=\varphi(x,y,t)} = \gamma v_n(t). \tag{4}$$

Šeit L - tilpuma siltumietilpības koeficients, λ - siltumvadīšanas koeficients, $[\Phi]_{S_t}$ - simbols, kas apzīmē lieluma Φ lēcienu, pārejot robežu S_t, $v_n(t)$ - fāzu pārejas robežas kustības ātrums, vērsts normāles $\vec{n}$ virzienā, $\vec{n}$ - fāzu pārejas robežas S_t normāle, kas vērsta šķidrās fāzes virzienā, f - funkcija, kas attēlo iekšējo siltuma avotu eksistenci. Klasiskajā nostādnē Stefana problēma ir labi izpētīta /22,23,24, 25,26/. Diemžēl norādītā klasiskā nostādne ne vienmēr apmierinoši apraksta kristalizācijas procesus. Tā, piemēram, tāda kausējuma kristalizācijas procesu, kurš sākuma momentā ir pārdzesēts. Šādā gadījumā, fāzu pārejas robežvirsmai pārvietojoties, kausējumā saglabājas pārdzesējums, pie kam temperatūras gradients šķidrajā fāzē pirms robežas ie negatīvs. Un šajā gadījumā ir iespējama vai nu dendritu veidošanās, jo zūd gludas robežas stabilitāte, vai arī sākas spontāns kristalizācijas process kausējuma tilpumā/12/. Tāpat arī iespējami gadījumi, kad pārdzesējums kausējuma tilpumā parādās kristalizācijas procesā/11/. Tā, piemēram, pētot virzītās kristalizācijas modeli, atklājās, ka pie kristalizācijas ātruma, kas pārsniedz kādu kritisko V_K, kausējuma tilpumā parādās pārdzesājums (1.zim.)/11/.



1. zim. 1 - $V_n < V_K$, 2 - $V_n > V_K$, X_0X_1 - pārdzesētā zona

Ir acimredzams, ka problēma klasiskajā Stefana nostādnē neapraksta minēto gadījumu, tā kā pieprasa gludas fāzu pārejas robežas $z=\varphi(x,y,t)$, pie kuras $T=T_e$, eksistenci, uz kuras tiek realizēts Stefana nosacījums (4), jeb citiem vārdiem sakot, izdalās latentais kristalizācijas (kušanas) siltums. Darbos /13,14,17/ ir piedāvāta kvazilidzsvarotas divfāzu zonas teorija. Šis teorijas pamatpieņēmums ir sekojošs: ja kausējuma tilpumā parādās pārdzesējums, tad tas momentāni tiek dzēsts ar augošu dendritu. Tādā veidā rodas divfāzu zona - disperss apgabals, kuru aizņem augoši dendriti, un kurā pārdzesējumam jābūt vienādam ar nulli. Izmantojot divfāzu zonas jēdzienu, varam noformulēt Stefana problēmu sekojošā veidā. Nezināmā fāzu pārejas robeža tiek definēta kā visu to telpas punktu kopa, kuros

$$T(x,y,z,t)=T_e, \tag{5}$$

un kuros notiek latentā kristalizācijas siltuma izdalīšanās. Problēmas nostādni (1),(2),(5),(4) sauc par vispārināto Stefana problēmas nostādni/11/. Šeit tiek ievesta funkcija $\eta(x,y,t)$ - relatīvā cietās fāzes daļa katrā fāzu pārejas robežas punktā.

$$\eta(x,y,t)=\begin{cases}1, & T<T_e\\ \bar{\eta}(x,y,t), & T\equiv T_e\\ 0, & T>T_e\end{cases}, \quad 0<\bar{\eta}(x,y,t)<1, \tag{6}$$

$$L=L_1\eta+L_2(1-\eta), \quad \lambda=\lambda_1\eta+\lambda_2(1-\eta). \tag{7}$$

$L_1, L_2, \lambda_1, \lambda_2$ - siltumietilpības un siltumvadīšanas koeficienti cietajā un šķidrajā fāzē.

Divfāzu zonas teorijas matemātisko pamatojumu ir devis N.Avdoņins/11/. Šajā darbā ir izvesti divfāzu vides vispārinātie makrovienādojumi, pierādīta vispārinātā atrisinājuma eksistance.

2. Kā jau tika minēts, gadījumos, kad kausējuma tilpumā tiek uzdots vai arī parādās pārdzesējums, ir iespējama gludas fāzu pārejas robežas nestabilitāte vai arī var sākties spontāna dendritu augšana. Sevišķi grūti šādus uzdevumus risināt skaitliski. Grūtības sagādā fāzu pārejas robežas noteikšana atklātā veidā, kā arī tieša $v_n(t)$ aprēķināšana. Jāatzīmē, ka šajos gadījumos fāzu pārejas robežai ir diezgan sarežģīta forma. Ir zināmi darbi, kuros fāzu pārejas robežas formas noteikšanai izmanto viendimensiju problēmas atrisinājumu /15, 16/. Diemžēl ar šādu metodi apmierinošus rezultātus var iegūt tikai pie ļoti mazām sakausējuma rādiusa vērtībām. Tāpat zināmas grūtības parādās izmantojot koeficientu nogludināšanas metodi, jo pārāk plašs izrādās apgabals, kurā temperatūra ir ļoti tuva kušanas temperatūrai.

Tāpēc tika stādīts mērķis izveidot tādu doto uzdevumu risināšanas algoritmu, kas ļautu izvairīties no minētajām grūtībām.

Lai izveidotu kristalizācijas problēmu skaitliskas risināšanas metodi veicam vienādojumu (1),(4) viduvēšanu pa lokālu tilpumu /4/. Lai noteiktu $v_n(t)$ izmantojam kristalizācijas ātruma normālā likuma kinētisko nosacījumu /17/:

$$v_n(t)=\mathcal{K}\cdot\Delta T_{S_t} . \tag{8}$$

Pie $\mathcal{K}\to\infty$, $\Delta T_{S_t}\to 0$, S_t -fāzu pārejas robeža, $\Delta T = T_e - T$ - pārdzesējums.

Vienkomponentes sakausējuma gadījumā $T = T_n$.

Vienādojumus (1),(4) varam uzrakstīt vispārinātā veidā /18/:

$$L\,\frac{\partial T}{\partial t}=\operatorname{div}(\lambda(T)\operatorname{grad}T)+\gamma v_n(t)\delta(S_t)+f\ , \tag{9}$$

kur $\delta(S_t)$ - vispārinātā Diraka funkcija, kas koncentrēta uz virsmas S_t .

Taču tieši skaitliski atrisināt vienādojumu (9) arī nevaram, jo jāatrod atklātā veidā S_t un $\delta(S_t)$. Lai izvairītos no šīm grūtībām, ievedam lokāli viduvētas funkcijas patvaļīga robežas punkta x apkārtnē pa tilpumu V_ρ (fāzu pārejas robežas

ρ - apkārtnē):

$$\tilde{T} = \frac{1}{v_\rho} \int_{v_\rho} T(s,t)\,dv \tag{10}$$

Ja L un λ ir telpas mainīgo gludas un nepārtrauktas funkcijas, tad vienādojumu (9) varam viduvēt tieši. Integrējot pa v_ρ, iegūstam:

$$\tilde{L}\,\frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} = \operatorname{div}(\tilde{\lambda}\operatorname{grad}\tilde{T}) + \gamma\,\tilde{v}_n(t)\,\frac{1}{v_\rho}\int_{v_\rho}\delta(s_t)\,dv + \tilde{f}. \tag{11}$$

Pēc δ - funkcijas definīcijas

$$\int_{v_\rho}\delta(s_t)\,dv = \operatorname{mes} s_{t,\rho}\,. \tag{12}$$

Ievērojot (8) varam rakstīt

$$\tilde{v}_n(t) \approx \mathcal{K}\cdot\Delta\tilde{T}\,. \tag{13}$$

Ņemot vērā (12) un (13) vienādojumu (11) varam pārrakstīt sekojoši:

$$\tilde{L}\,\frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} = \operatorname{div}(\tilde{\lambda}\operatorname{grad}\tilde{T}) + \gamma\beta\,\Delta\tilde{T}\,\theta_1(\rho - |x - x^*|) + \tilde{f}\,. \tag{14}$$

Šeit

$$\theta_1(\xi) = \begin{cases} 0, & \xi < 0 \\ 1, & \xi \geq 0 \end{cases}\,, \quad \theta(\xi) = \begin{cases} 0, & \xi \leq 0 \\ 1, & \xi > 0 \end{cases}$$

ir vienības funkcijas; x^* - punkts uz fāzu pārejas robežas .

$$\beta = \frac{\mathcal{K}\operatorname{mes} s_{t,\rho}}{v_\rho}\,. \tag{15}$$

No otras puses

$$\frac{1}{v_\rho}\int_{v_\rho}\tilde{v}_n(t)\,\delta(s_t)\,dv = \frac{1}{v_\rho}\int_{s_{t,\rho}}\tilde{v}_n(t)\,dS = \frac{\partial \tilde{\eta}^\rho}{\partial t}\,, \tag{16}$$

kur $\tilde{\eta}^\rho$ - cietās fāzes relatīvā daļa tilpumā v_ρ .

Tādā veidā viduvēto vienādojumu (11) varam uzrakstīt vispārinātā formā /18/:

$$\tilde{L}\,\frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} = div(\tilde{\lambda}\, grad\, \tilde{T}) + \gamma\,\frac{\partial \tilde{\eta}^{\rho,\beta}}{\partial t} + \tilde{f}\,, \tag{17}$$

kur

$$\frac{\partial \tilde{\eta}^{\rho,\beta}}{\partial t} = \beta\cdot\Delta\tilde{T}\,\theta_1(\rho - |x - x^*|)\,. \tag{18}$$

Tagad vienādojumu (17) varam atrisināt, izmantojot diferenču metodes.

$\dfrac{\partial \tilde{\eta}^{\rho,\beta}}{\partial t} \neq 0$ tikai uz fāzu pārejas robežas. $\tilde{\eta}^{\rho,\beta}=1$ cietajā fāzē un $\tilde{\eta}^{\rho,\beta}=0$ šķidrajā fāzē, tāpēc

$$\theta_1(\rho - |x - x^*|) = \theta(\tilde{\eta}^{\rho,\beta})\,\theta(1-\tilde{\eta}^{\rho,\beta})$$

un

$$\frac{\partial \tilde{\eta}^{\rho,\beta}}{\partial t} = \beta\cdot\Delta\tilde{T}\,\theta(\tilde{\eta}^{\rho,\beta})\,\theta(1-\tilde{\eta}^{\rho,\beta})\,. \tag{19}$$

Vienādojuma (17) atrisinājums $\tilde{T}^{\beta}$ konverģē uz sākotnējās problēmas atrisinājumu telpā $W_2^{1,0}(Q_t)$. Lai pierādītu to, jāiegūst attiecīgie apriorie novērtējumi. Pierādījumu veiksim problēmai ar mainīgo funkciju $u=T-T_n$. Tādā gadījumā $u_n=0$ un $\Delta u=-u$. Tad vienādojums (17) jāapskata funkcijai $\tilde{u}^{\beta}$ un $\Delta\tilde{u}^{\beta}=-\tilde{u}^{\beta}$. Vienādojumu (17) reizinām ar $\tilde{u}^{\beta}$ un integrējam pa apgabalu Q_t, $Q_t = V_\rho \cup [0,t]$. Uz robežas pieņemam homogēnus pirmā veida nosacījumus.

$$\frac{1}{2}\int_{Q_t}\tilde{L}\,\frac{\partial(\tilde{u}^{\beta})^2}{\partial t}\,dv\,dt + \int_{Q_t}\tilde{\lambda}\left(\frac{\partial\tilde{u}^{\beta}}{\partial x_i}\right)^2 dv\,dt = \int_{Q_t}\tilde{f}\,\tilde{u}^{\beta}\,dv\,dt - \\ -\gamma\beta\int_{Q_t}(\tilde{u}^{\beta})^2\,\theta(\tilde{\eta}^{\rho,\beta})\,\theta(1-\tilde{\eta}^{\rho,\beta})\,dv\,dt\,. \tag{20}$$

Izmantojot Koši un Gronuola nevienādības /19/, iegūstam nevienādību

$$\frac{1}{2}\int_{V_\rho}\tilde{L}(\tilde{u}^{\beta})^2 dv + \lambda_0\int_{Q_t}\left(\frac{\partial\tilde{u}^{\beta}}{\partial x_i}\right)^2 dv\,dt + \gamma\beta\int_{Q_t}(\tilde{u}^{\beta})^2\theta(\tilde{\eta}^{\rho,\beta})\,\theta(1-\tilde{\eta}^{\rho,\beta})\,dv\,dt \leq \\ \leq \frac{1}{2}\int_{V_\rho}\tilde{L}(\tilde{u}^{\beta})^2\Big|_{t=0}\,dv + M_1\int_{Q_t}\tilde{f}^2\,dv\,dt\,. \tag{21}$$

Tādējādi esam ieguvuši vienmērīgu atkarībā no β novērtējumu telpā $W_2^{1,0}(Q_t)$. Šāds novērtējums ļauj pāriet uz robežu, kad $\beta \to \infty$, integrālidentitātē, kura atbilst vienādojumam (17):

$$\int_{Q_t} \Big(-\tilde{L}\tilde{u}^{\beta}\frac{\partial \psi}{\partial t}+\tilde{\lambda}\frac{\partial \tilde{u}^{\beta}}{\partial x_i}\frac{\partial \psi}{\partial x_i}+\gamma\beta\tilde{u}^{\beta}\,\theta(\tilde{\eta}^{\beta,\beta})\,\theta(1-\tilde{\eta}^{\beta,\beta})\frac{\partial \psi}{\partial t}- -\psi\tilde{f}\Big)\,d\vartheta\,dt=0. \tag{22}$$

Robežgadījumā, kad $\beta \to \infty$, iegūstam identitāti, kura atbilst vienādojuma (11) vispārinātajam atrisinājumam. Tādā veidā dotās problēmas (1)-(4) atrisināšanu ar lokālās viduvēšanas metodi esam noreducējuši uz sekojošas problēmas atrisināšanu (viduvēšanas zīmes atmetam):

$$L\,\frac{\partial T}{\partial t}=\operatorname{div}(\lambda(T)\,\operatorname{grad} T)+\gamma\,\frac{\partial \eta}{\partial t}+f, \tag{23}$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t}=\beta\,\Delta T\,\theta(\underline{\eta})\,\theta(1-\eta). \tag{24}$$

$\overline{\Delta T}$

Problēmas formulējums ar vienādojumu (23)-(24) palīdzību atspoguļo Stefana problēmu gan klasiskajā, gan vispārinātajā nostādnē. Atšķirība izpaužas vienīgi vienādojuma (24) realizācijā.

Problēmas klasiskajā nostādnē

$$\frac{\partial \eta}{\partial t}=\beta\,\Delta T\big(\theta(\Delta T)\,\theta(1-\eta)\,\theta_1(\eta_{\pm 1}-1)+\theta(-\Delta T)\,\theta(\eta)\big), \tag{25}$$

bet vispārinātās nostādnes gadījumā

$$\frac{\partial \eta}{\partial t}=\beta\,\Delta T\,\theta(\Delta T)\,\theta(1-\eta), \tag{26}$$

kur $\eta_{\pm 1}$ - funkcijas η vērtības fāzu pārejas robežas ρ - apkārtnē. Tādā veidā latentā kristalizācijas (kušanas) siltuma izdalīšanās klasiskās nostādnes gadījumā notiek uz fāzu pārejas robežas, kuru nosaka funkcija η, $\eta(x,y,t)=const\neq\{{0 \atop 1}$, bet vispārinātās nostādnes gadījumā visā to telpas punktu, kuros parādās pārdzesējums, kopā.

Problēmas, kuru apraksta vienādojumi (23),(25) un sākuma un robežnosacijumi

$$\left.\frac{\partial T}{\partial r}\right|_{r=0}=0, \quad \lambda\left.\frac{\partial T}{\partial r}\right|_{r=R}=-\alpha_3\,\varepsilon\,\sigma_0\left(T^4-T^4(x)\right), \tag{27}$$

$$\left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{x=0}=\alpha_1(T-T_1), \quad \left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{x=l}=-\alpha_2\,(T-T_2), \tag{28}$$

$$T(x,r,0)=T_s\,(x,r) \tag{29}$$

skaitliskai risināšnai tika konstruēta diferenču shēma uz nevienmēriga režģa

$$\omega=\{(x_i,r_j): 1\le i\le N, 1\le j\le M, x_{i+1}-x_i=h_i, r_{j+1}-r_j=g_j, x_1=r_1=0, x_N=l, r_M=R\}.$$

$$t=k\tau$$

$$\frac{L}{\lambda}\,\frac{T_{ij}^{k+1}-T_{ij}^{k}}{\tau}=\frac{2}{h_i+h_{i+1}}\left(\frac{T_{i+1j}^{k+1}}{h_{i+1}}-T_{ij}^{k+1}\left(\frac{1}{h_i}+\frac{1}{h_{i+1}}\right)+\frac{T_{i-1j}^{k+1}}{h_i}\right)+$$

$$+\frac{2}{g_j+g_{j+1}}\left(\frac{T_{ij+1}^{k+1}}{g_{j+1}}-T_{ij}^{k+1}\left(\frac{1}{g_j}+\frac{1}{g_{j+1}}\right)+\frac{T_{ij-1}^{k+1}}{g_j}\right)+ \tag{30}$$

$$+\frac{1}{r_j}\,\frac{T_{ij+1}^{k+1}-T_{ij-1}^{k+1}}{g_j+g_{j+1}}+f_{ij}^{k+1}+\frac{\gamma}{\lambda}\left(\frac{\partial\eta}{\partial t}\right)_{ij}^{k+\frac{1}{2}},$$

kur

$$\left(\frac{\partial\eta}{\partial t}\right)_{ij}^{k+\frac{1}{2}}=\beta\,\Delta T_{ij}^{k+1}\Big(\theta(\Delta T_{ij}^{k})\,\theta(1-\eta_{ij}^{k})\sum_{n=-1}^{1}(\eta_{i+n\,j+n}^{k}-1)+$$

$$+\theta(-\Delta T_{ij}^{k})\,\theta(\eta_{ij}^{k})\Big). \tag{31}$$

Funkciju $\eta(x,r,t)$ aprēķina no vienādojuma

$$\frac{\eta_{ij}^{k+1}-\eta_{ij}^{k}}{\tau}=\beta\,\Delta T_{ij}^{k+1}\Big(\theta(\Delta T_{ij}^{k+1})\,\theta(1-\eta_{ij}^{k})\sum_{n=-1}^{1}(\eta_{i+n\,j+n}^{k}-1)+$$

$$+\theta(-\Delta T_{ij}^{k+1})\,\theta(\eta_{ij}^{k})\Big). \tag{32}$$

kur $\eta_{i\pm1 j\pm1}$ - funkcijas $\eta(x,r,t)$ vērtības punktos, kas nobīdīti par aproksimācijas soli patvaļīgā telpas virzienā. Robežnosacījumi tiek aproksimēti parastā veidā.

Kā jau tika atzīmēts, gadījumā, kad kausējuma tilpumā parādās pārdzesējums, ir iespējams fāzu pārejas robežas stabilitātes zudums. Var sākties dendritu augšanas process, vai arī robežas svārstību process laikā. Lai izpētītu fāzu pārejas robežas stabilitāti laikā, apskatīsim kristāla augšanas procesu vienā elementārapgabalā V_ρ (fāzu pārejas robežas ρ - apkārtnē). Šis elementāršūniņas kristalizācijas process sākas ar kādu pārdzesējumu Δu_0. Neņemot vērā summāro siltuma plūsmu caur šūniņas robežām, vienkāršoti šo procesu varam aprakstīt sekojoši:

$$L\frac{\partial u}{\partial t}=\gamma\frac{\partial \eta}{\partial t}, \qquad u\big|_{t=0}=-\Delta u_0$$
$$\frac{\partial \eta}{\partial t}=\beta\Delta u, \qquad \eta\big|_{t=0}=0, \ \Delta u=-u. \tag{33}$$

Nointegrējot atrodam problēmas (33) atrisinājumu

$$u=-\Delta u_0 e^{-\frac{\gamma}{L}\beta t}, \quad \eta=\frac{L}{\gamma}\Delta u_0\left(1-e^{-\frac{\gamma}{L}\beta t}\right). \tag{34}$$

No (34) redzam, ka gan temperatūra $u(t)$, gan arī $\eta(t)$ laikā mainās monotoni. Parametru γ, L, β attiecība iespaido tikai $u(t)$ dilšanas un $\eta(t)$ augšanas ātrumu, bet neiespaido šo funkciju izmaiņas monotono raksturu. Līdz ar to varam, ka laikā notiek stabils kristāla augšanas process. Šis rezultāts ierobežo mūs diferenču shēmas izvēlē.
Izmantojot atklātu shēmu

$$\frac{u^{k+1}-u^{k}}{\tau}=-\frac{\gamma}{L}\beta u^{k}, \quad u^{k+1}=-\left(1-\frac{\gamma}{L}\beta\tau\right)\Delta u_0 \tag{35}$$

pie $\tau > \frac{L}{\gamma\beta}$ parādīsies temperatūras svārstības. Tātad šo shēmu varētu lietot tikai pie ļoti maziem τ, $\tau \lesssim 4\cdot10^{-6}$, kas būtu ļoti neefektīvi. Turpretī, izmantojot pilnīgi aizklātu shēmu

$$\frac{u^{k+1}-u^{k}}{\tau}=-\frac{\gamma}{L}\beta u^{k+1}, \quad u^{k+1}=\frac{-\Delta u_0}{\left(1+\frac{\gamma}{L}\beta\tau\right)}, \tag{36}$$

redzam, ka atrisinājums ir stabils jebkuram τ.
Aprēķiniem vienmēr tika izmantota aizklāta shēma un saistīto gradientu LU-izvirzījuma iterāciju metode/20,21/.

3. Izveidotais algoritms tika izmantots dažādu kristalizācijas uzdevumu risināšanā.

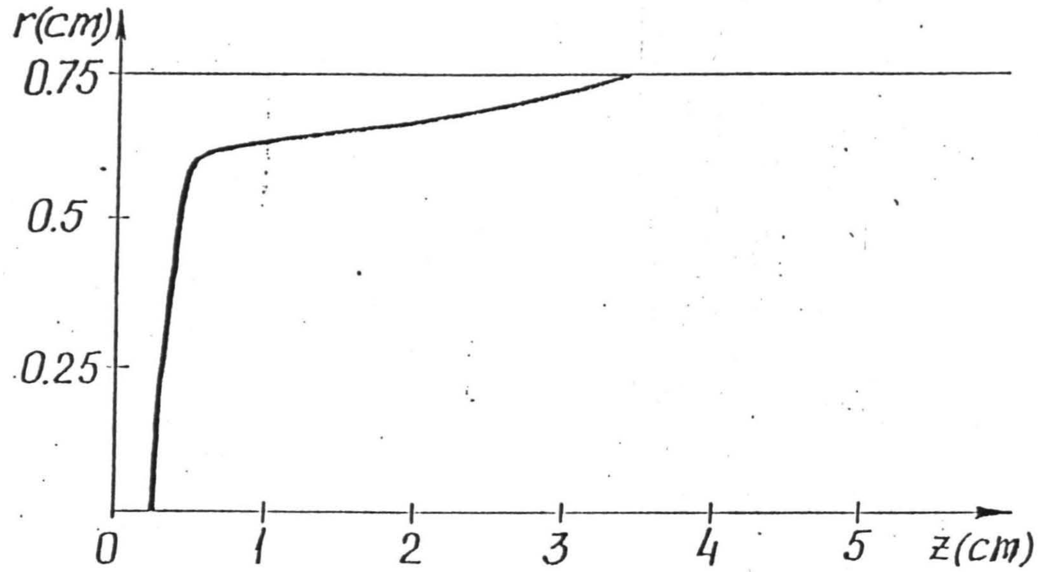
3.1. Uzdevums par kausējuma ar brīvu virsmu kristalizāciju/1/.

Šis uzdevums izsauc īpašu interesi, jo pie intensīvas atdzesēšanas no sānu virsmas iepriekš nav zināms, vai kausējuma tilpumā parādīsies pārdzesējums, vai arī sānu dendrita augšana apsteigs to. Šajā piemērā uzdevuma nostādni veido (23), (25),(27)-(29), kur $f\equiv 0$, $\alpha_3=1$, bet nosacījuma (28) vietā tiek uzdoti nosacījumi

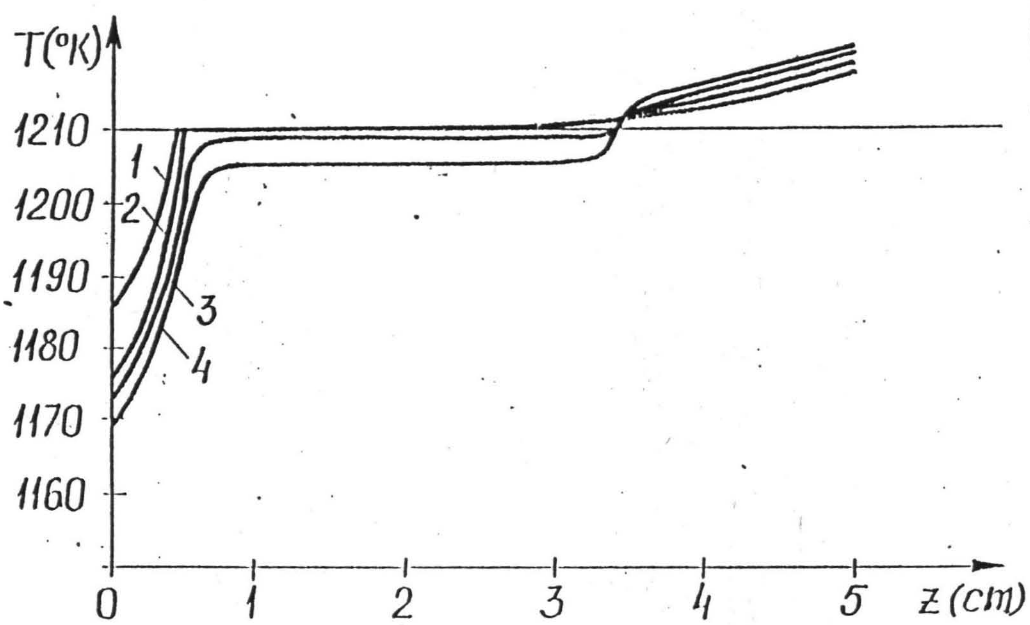
$$\lambda\left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{x=0}=\varepsilon\sigma_0\left(T^4-T_H^4\right), \quad \lambda\left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{x=\ell}=-\varepsilon\sigma_0\left(T^4-T_H^4\right). \tag{37}$$

$$T_H=\begin{cases} T_1, & 0\le x\le x_1 \\ T_2, & x_1< x\le x_2 \\ T_3, & x_2< x\le \ell \end{cases} \tag{38}$$

Zīmējumos 2,3 ir parādīti šā piemēra rezultāti. 2. zīmējumā ir parādīta fāzu pārejas robežas forma, no kuras redzams, ka gar sānu virsmu izveidojies dendrīts. Temperatūras lauka attēlojums 3. zīm. parāda, ka kausējumā pārdzesējums neparādās. Parametri, kas nepieciešami uzdevuma atrisināšnai, atbilst Ge fizikālajām konstantēm:
$\lambda_1=0{,}173$ W·s/(g·K); $\lambda_2=0{,}412$ W·s/(g·K); $\varepsilon_1=0{,}6$; $\varepsilon_2=0{,}18$;
$L_1=L_2=1{,}9$ W·s/(cm^3·K); $T_h=1210^\circ$K; $\sigma_0=5{,}67\cdot 10^{-12}$W/(cm^2·K^4);
$l=5$cm; $R=0{,}75$cm; $x_1=0{,}5$cm; $x_2=3{,}5$cm; $\gamma=430$ J/g;
$T_1=300^\circ$K; $T_2=600^\circ$K; $T_3=1300^\circ$K;

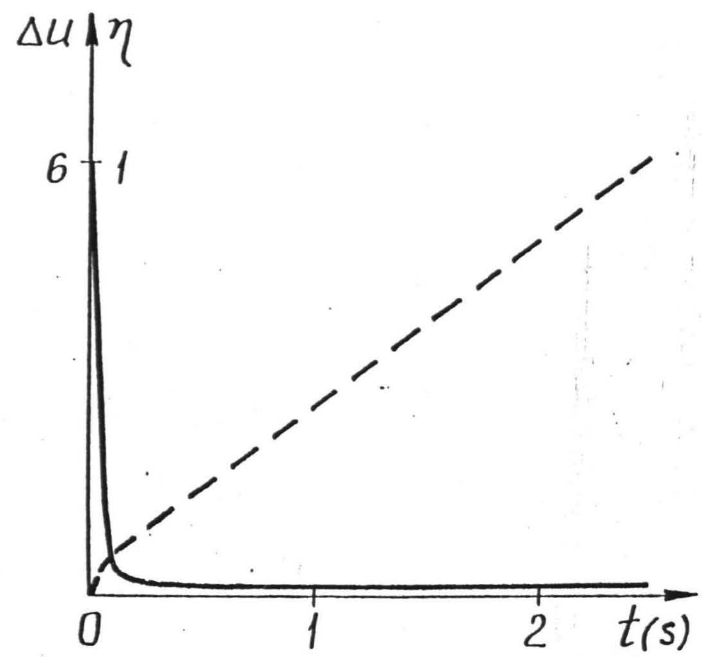


2. zīm. Fāzu pārejas robeža; β=0,5;



3. zīm. Temperatūras sadalījums; β=0.5;

1 - r=0; 2 - r=0,6; 3 - r=0,675; 4 - r=0,75;



4. zīm. Temperatūras un funkcijas $\eta(x,r,t)$ izmaiņa vienā kristalizācijas robežas elementā.

______________ pārdzesējums Δu;

\- - - - - - - funkcijas η izmaiņa;

Kā redzams no 4. zīmējuma, temperatūras $u(x,r,t)$ un funkcijas $\eta(x,r,t)$ izmaiņa vienā kristalizācijas robežas elementā atbilst analitiskajam atrisinājumam (34).

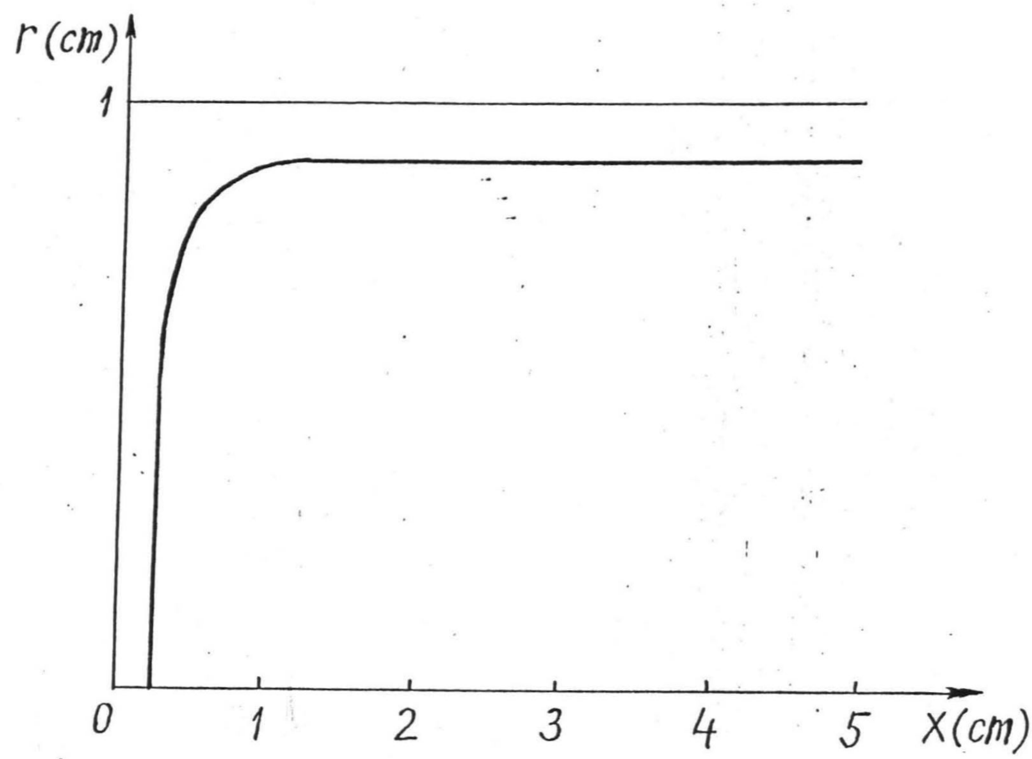
3.2. Kā nākamo piemēru minēsim virzītās kristalizācijas uzdevumu vienkomponentes kausējumam /2, 3, 4/.

Cilindrisks sakausējums ar ātrumu v_0 virzās caur krāsni ar temperatūru $T_0(x)$. Tad uzdevuma nostādnē vienādojums (23) ir uzrakstāms sekojošā veidā (cilindriskajās koordinātēs (x,r)):

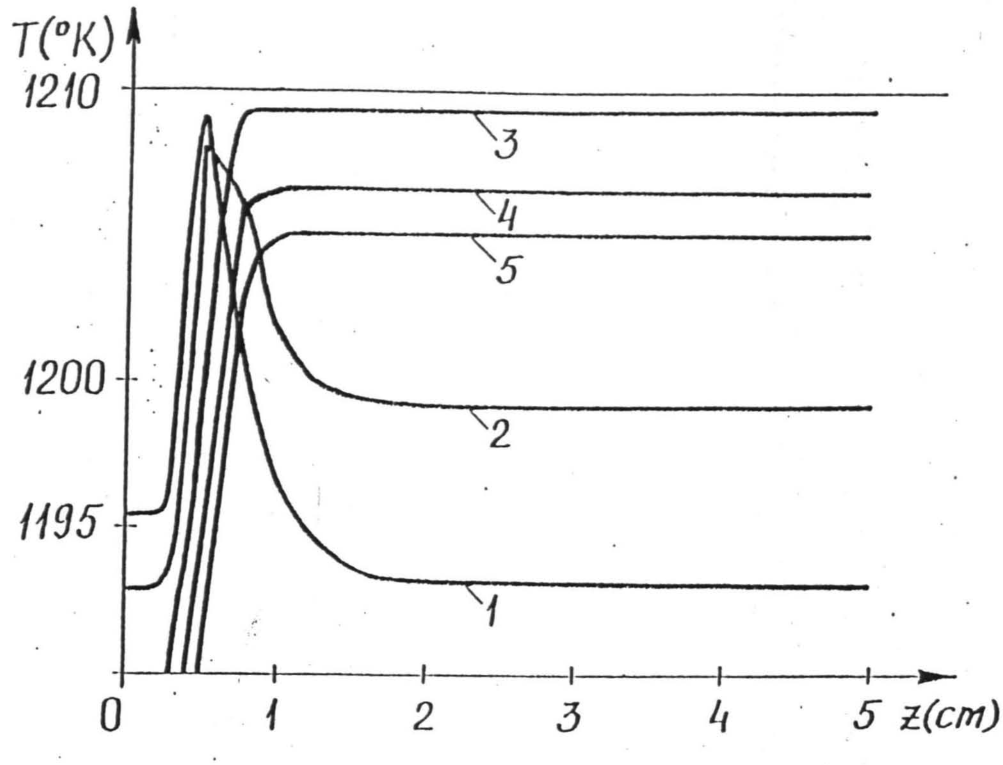
$$L\left(\frac{\partial T}{\partial t}+v_0\frac{\partial T}{\partial x}\right)=\frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial x}\right)+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\lambda r\frac{\partial T}{\partial r}\right)-$$

$$-\alpha_0\left(T-T_0\right)+\gamma\frac{\partial\eta}{\partial t}. \qquad (39)$$

Nosacijumi (25),(27)-(29), kur $\alpha_1=\alpha_2=0$. Fizikālās konstantes tādas pašas kā piemērā 3.1., vienīgi $T_H=T_0=1100°K$. 5. un 6. zīm. ir attēloti fāzu pārejas robežas forma un temperatūras sadalījums virzītās kristalizācijas gadījumā ar iekšējiem avotiem un atdzesēšanu no sānu virsmas. Redzams, ka, neskatoties uz pārdzesējuma parādīšanos kausējumā, notiek stabils kristalizācijas process.



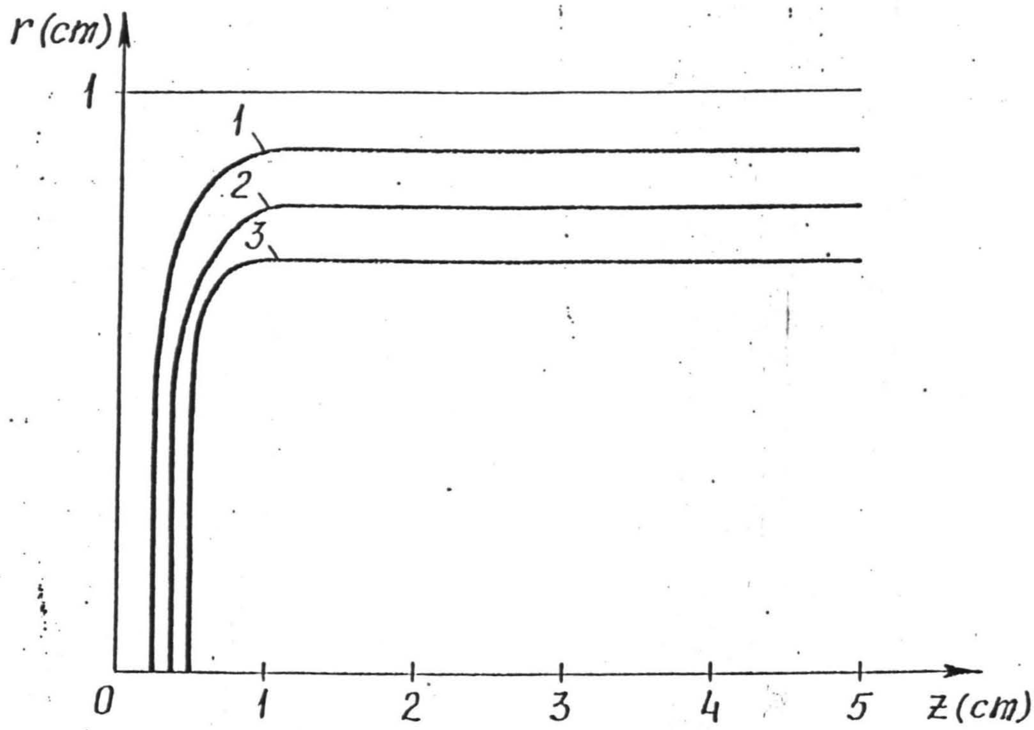
5. zīm. Fāzu pārejas robeža; $\beta=0,5$;



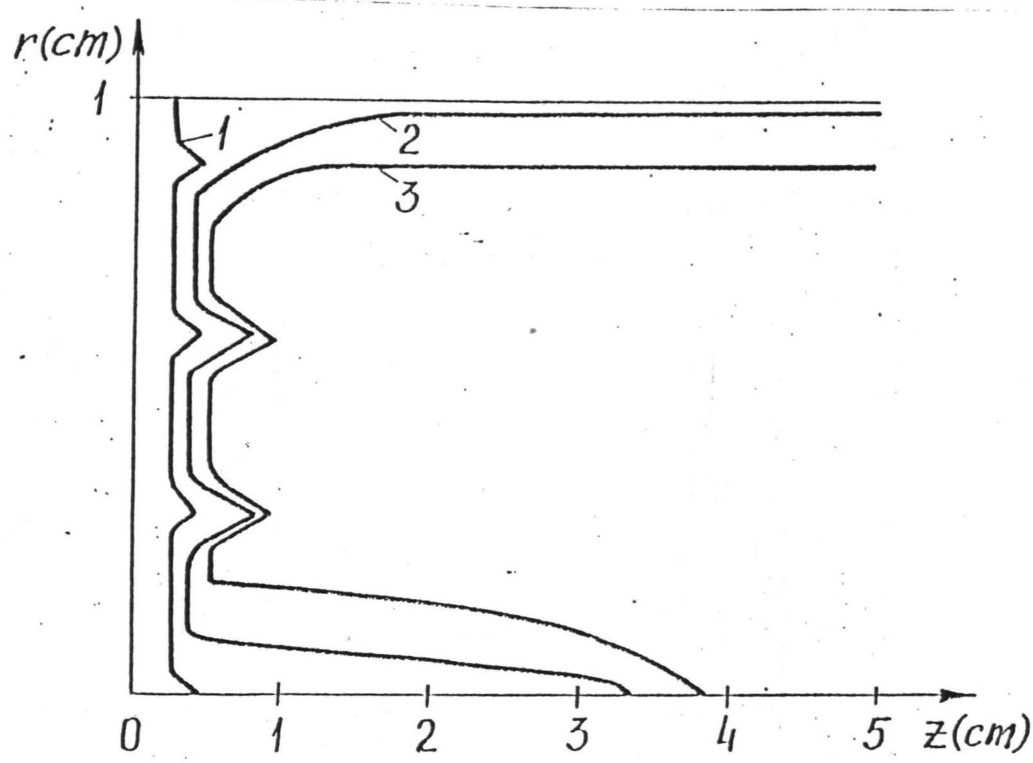
6. zīm. Temperatūras sadalījums virzītās kristalizācijas uzdevumam ar iekšējiem siltuma avotiem; β=o,5; 1 - r=0; 2- r=0,5; 3 - r=0,8; 4 - r=0,9; 5 - r=1;

7. zīm. attēlota fāzu pārejas robeža gadījumā, kad notiek iekšējā un sānu atdzesēšana ($\alpha_0 \neq 0, \alpha_3 = 1$).
Tālāk skaitliski tika analizēts dendritu kristalizācijas process, kad sākuma momentā tiek doti fāzu pārejas robežas mazi ierosinājumi. 8. un 9. zīm. attēlotas fāzu pārejas robežas formas šajā gadījumā. No šiem rezultātiem radzam, ka notiek stabils kristalizācijas process, pat pie $\beta \rightarrow \infty$.

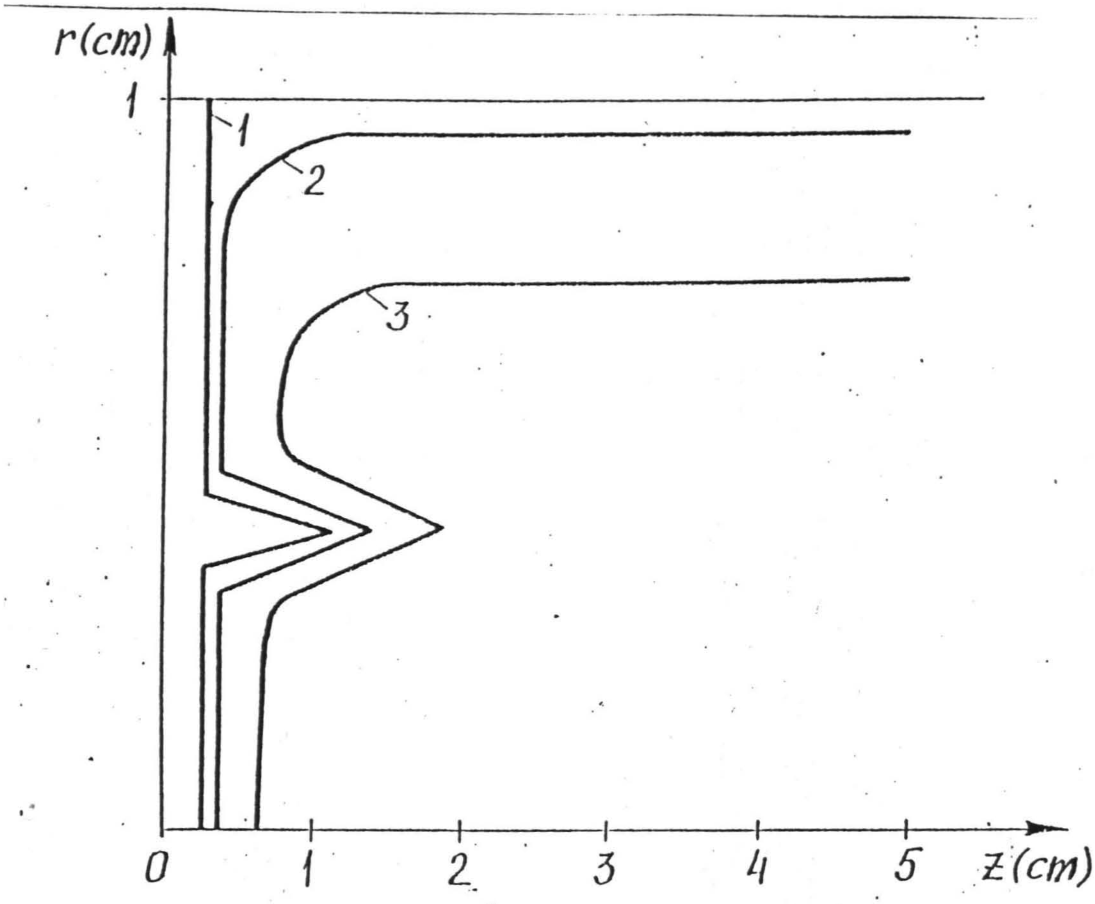
Vēl tika pētīti gadījumi, kad $\alpha_0 = 0$, t.i., bez iekšējiem avotiem, un $T_3(x,r) = -\Delta T_0$, t.i., ar uzdotu sākuma pārdzesējumu. 10. zīm. attēlota augoša kristāla forma gadījumā bez sānu atdzesēšanas, $\alpha_3 = 0$, bet 11. zīm. ar atdzesēšanas nosacījumu uz sānu virsmas, $\alpha_3 = 1$.



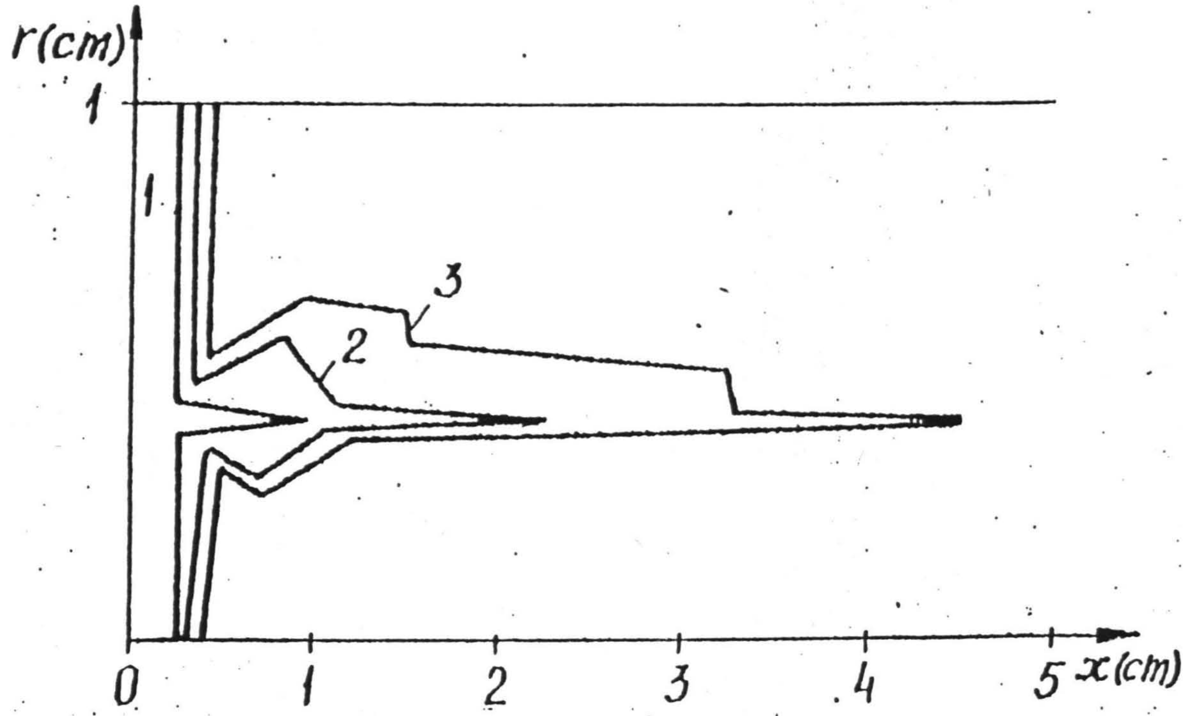
7. zim. Fāzu pārejas robeža.
1 - β=0,5; 2 - β=100; 3 - β=1000;



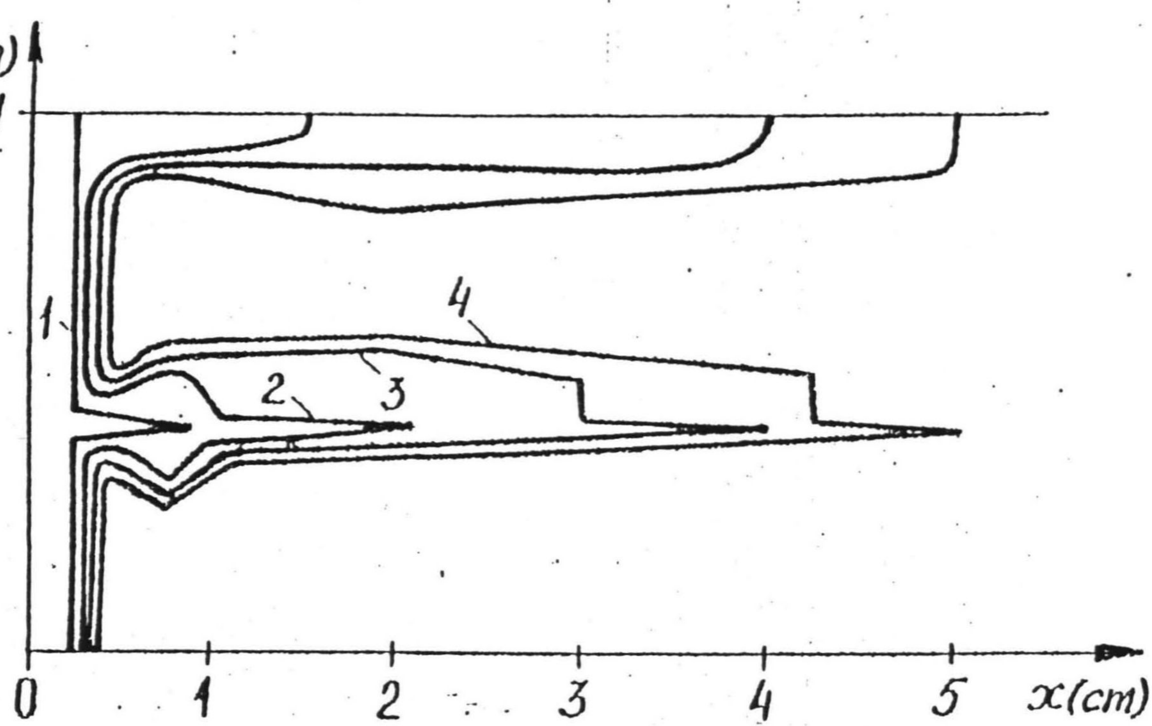
8. zim. Fāzu pārejas robeža; β=0,5;
1 - t=0; 2 - t=1; 3 - t=1,2;



9. zim. Fāzu pārejas robeža; β=1000;
1 - t=0; 2 - t=1; 3 - t=2;



10. zīm. Fāzu pārejas robeža gadījumā ar sākuma pārdzesējumu, bet bez sānu atdzesēšanas; β=1000; 1 - t=0; 2 - t=0,05; 3 - t=0,15;



11. zim. Fāzu pārejas robeža gadijumā ar sākuma pārdzesējumu un ar sānu atdzesēšanu; β=1000;
1 - t=0; 2- t=0,05; 3 - t=0,15; 4 - t=0,25;

4. Tehnoloģisko procesu matemātiskajā modelēšanāliela nozīme ir bināro sakausējumu kristalizācijas uzdevumam. Šo uzdevumu apraksta Stefana problēma termodifūzijas sistēmai. Šeit grūtības parādās jau pie problēmas klasiskajā nostādnē vispārinātā atrisinājumadefinīcijas. N.Avdoņins savā darbā /11/ ir izstrādājis atrisināšanas metodi bināro sakausējumu kristalizācijas problēmai vispārinātajā nostādnē, kas pieļauj pārdzesējumu. Šis atrisinājums nosaka divfāzu zonu. Diemžēl, klasiskajā uzdevuma nostādnē, kad mēs pieņemam gludas fāzu pārejas robežas eksistenci, iespējama pārdzesējuma parādīšanās šķidrajā fāzē. Tāpēc nav derīgs vispārinātā atrisinājuma atrašanas paņēmiens, kas ir izmantots darbā /11/.

Tāpēc, lai izveidotu risināšanas algoritmu termodifūzijas sistēmas Stefana problēmai, veiksim problēmas vienādojumu lokālo viduvēšanu /7/.

Bināro sakausējumu kristalizācijas problēmu apraksta siltumvadīšanas vienādojums

$$L\frac{\partial T}{\partial t} = \operatorname{div}(\lambda(T)\operatorname{grad} T) + f, \tag{40}$$

difūzijas vienādojums

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \operatorname{div}(\mathcal{D}\operatorname{grad} C) \tag{41}$$

un nosacījumi uz fāzu pārejas robežas

$$[\lambda \operatorname{grad} T \cdot \vec{n}]_{S_t} = \gamma v_n(t), \tag{42}$$

$$[\mathcal{D}\operatorname{grad} C \cdot \vec{n}]_{S_t} = (1-m)C\, v_n(t), \tag{43}$$

$$T = T_e = T_n - \alpha C, \quad \Delta T = T_n - T - \alpha C = 0, \tag{44}$$

kur D - difūzijas koeficients, m - piemaisījumu sadalījuma koeficients, α - koeficients, ko nosaka binārās sistēmas fāzu diagramma.

Tālāk uzrakstām vienādojumus (40),(41) un nosacījumus (42),(43) vispārinātā veidā /18/:

$$L\frac{\partial T}{\partial t}=div\left(\lambda(s)\,grad\,T+\gamma v_n(t)\eta(s)\cdot\vec{n}\right)+f, \tag{45}$$

$$\left(1-(1-m)\eta(s)\right)\frac{\partial C}{\partial t}=div\left(D(s)\,grad\,C+(1-m)v_n(t)C\eta(s)\cdot\vec{n}\right), \tag{46}$$

Šeit $\eta(s)$ - vienības funkcija ar lēcienu uz virsmas S_t.

$$\lambda(s)=\lambda_1\eta+\lambda_2(1-\eta),\quad D(s)=D_1 m\eta+D_2(1-\eta). \tag{47}$$

Tālāk veicam vienādojumu (45),(46) viduvēšanu pa lokālu tilpumu V_ρ. Iegūstam

$$\tilde{L}\frac{\partial\tilde{T}}{\partial t}=div\left(\vec{Q}_1^\rho\right)+\tilde{f}, \tag{48}$$

$$\left(1-(1-m)\eta^\rho\right)\frac{\partial\tilde{C}}{\partial t}=div\left(\vec{Q}_2^\rho\right). \tag{49}$$

Šeit tiek ieviesti siltuma plūsmas $\vec{Q}_1$ un masas plūsmas $\vec{Q}_2$ apzīmējumi:

$$\vec{Q}_1=\lambda(s)\,grad\,T+\gamma v_n(t)\eta(s)\cdot\vec{n}, \tag{50}$$

$$\vec{Q}_2=D(s)\,grad\,C+(1-m)v_n(t)C\eta(s)\cdot\vec{n}. \tag{51}$$

Jāatrod viduvētās plūsmas $\vec{Q}_1^\rho$, $\vec{Q}_2^\rho$. Lai to izdarītu pārejam uz lokālu koordinātu sistēmu (n,τ), kuras asis sakrīt ar virsmas S_t normāli un pieskari. Vienādojumus (50) un (51) uzrakstām jaunajās koordinātēs:

$$\frac{1}{\lambda(s)}Q_{1n}=grad_n T+\gamma v_n(t)\cdot\eta(s)\frac{1}{\lambda(s)}, \tag{52}$$

$$\frac{1}{D(s)}Q_{2n}=grad_n C+(1-m)v_n(t)C\eta(s)\frac{1}{D(s)}, \tag{53}$$

$$Q_{1\tau} = \lambda(s)\,\mathrm{grad}_\tau T; \tag{54}$$

$$Q_{2\tau} = \mathcal{D}(s)\,\mathrm{grad}_\tau C. \tag{55}$$

Tālāk veicam (52)-(55) viduvēšanu. Iegūstam

$$(\lambda^{-1})^{\rho} Q^{\rho}_{1n} = \mathrm{grad}_n \tilde{T} + \gamma v_n^{\tau}(t)\frac{\eta^{\rho}}{\lambda_1}, \tag{56}$$

$$(\mathcal{D}^{-1})^{\rho} Q^{\rho}_{2n} = \mathrm{grad}_n \tilde{C} + (1-m)\tilde{C} v_n^{\tau}(t)\frac{\eta^{\rho}}{\mathcal{D}_1 m}, \tag{57}$$

$$Q^{\rho}_{1\tau} = \lambda^{\rho}\,\mathrm{grad}_\tau \tilde{T}, \tag{58}$$

$$Q^{\rho}_{2\tau} = \mathcal{D}^{\rho}\,\mathrm{grad}_\tau \tilde{C}, \tag{59}$$

pie kam

$$(\lambda^{-1})^{\rho} = \frac{\eta^{\rho}}{\lambda_1} + \frac{1-\eta^{\rho}}{\lambda_2}, \quad (\mathcal{D}^{-1})^{\rho} = \frac{\eta^{\rho}}{\mathcal{D}_1 m} + \frac{1-\eta^{\rho}}{\mathcal{D}_2} \tag{60}$$

$$\lambda^{\rho} = \lambda_1\eta^{\rho} + \lambda_2(1-\eta^{\rho}), \quad \mathcal{D}^{\rho} = \mathcal{D}_1 m\,\eta^{\rho} + \mathcal{D}_2(1-\eta^{\rho}).$$

Ievietojot izteiksmēs (48) un (49) plūsmu izteiksmes no (56)-(59), un atgriežoties pie sākotnējās koordinātu sistēmas, iegūstam

$$\tilde{L}\frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} = \mathrm{div}(\hat{\lambda}^{\rho}\,\mathrm{grad}\,\tilde{T}) + \gamma v_n^{\tau}(t)\,\delta^{\rho}(s_t) + \tilde{f}, \tag{61}$$

$$(1-(1-m)\eta^{\rho})\frac{\partial \tilde{C}}{\partial t} = \mathrm{div}(\hat{\mathcal{D}}^{\rho}\,\mathrm{grad}\,\tilde{C}) + (1-m)\tilde{C} v_n^{\tau}(t)\,\delta^{\rho}(s_t), \tag{62}$$

kur $\hat{\lambda}^{\rho}, \hat{D}^{\rho}$ - viduvēto koeficientu matricas, kuru elementi nosakāmi pēc formulām:

$$\lambda^{\rho}_{ij} = \alpha_{in}\alpha_{jm}\tilde{\lambda}_{nm}, \quad \mathcal{D}^{\rho}_{ij} = \alpha_{in}\alpha_{jm}\tilde{\mathcal{D}}_{nm}, \tag{63}$$

$a_{in}=\cos(z_i, z'_n)$, z_i -sākotnējā koordinātu sistēma, z'_n -transformētā koordinātu sistēma; $\tilde{\lambda}_{nm}$, $\tilde{D}_{nm}$ -siltumvadīšanas un difūzijas koeficienti transformētajā koordinātu sistēmā:

$$\begin{pmatrix} \tilde{\lambda}_{11} & \tilde{\lambda}_{12} \\ \tilde{\lambda}_{21} & \tilde{\lambda}_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{(\lambda^{-1})^{\rho}} & 0 \\ 0 & \lambda^{\rho} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \tilde{\mathcal{D}}_{11} & \tilde{\mathcal{D}}_{12} \\ \tilde{\mathcal{D}}_{21} & \tilde{\mathcal{D}}_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{(\mathcal{D}^{-1})^{\rho}} & 0 \\ 0 & \mathcal{D}^{\rho} \end{pmatrix} \tag{64}$$

Ātruma $v_n(t)$ noteikšanai izmantojam (8):

$$v_n(t) = \mathcal{K} \cdot \Delta\tilde{T} \tag{65}$$

$$\delta^{\rho}(s_t) = \frac{1}{v_{\rho}^{t}} \int_{v_{\rho}} \delta(s_t)\, dv = \frac{\operatorname{mes} S_{t,\rho}}{v_{\rho}^{t}} \tag{66}$$

Ievērojot (65) un (66), varam rakstīt

$$v_n(t)\,\delta^{\rho}(s_t) = \mathcal{K}\, \frac{\operatorname{mes} S_{t,\rho}}{v_{\rho}^{t}}\, \Delta\tilde{T} = \beta\, \Delta\tilde{T}\, \theta_1(\rho - |x - x^*|), \tag{67}$$

kur x^*-punkts uz fāzu pārejas robežas S_t . No otras puses

$$v_n(t)\,\delta^{\rho}(s_t) = \frac{1}{v_{\rho}^{t}} \int_{v_{\rho}} v_n(t)\,\delta^{\rho}(s_t)\, dv = \frac{1}{v_{\rho}} \int_{S_{t,\rho}} v_n(t)\, ds = \frac{\partial \eta^{\rho}}{\partial t}. \tag{68}$$

Tādējādi vienādojumus (61) un (62) varam uzrakstīt sekojošā veidā:

$$\tilde{L}\, \frac{\partial \tilde{T}^{\beta}}{\partial t} = \operatorname{div}(\hat{\lambda}^{\rho} \operatorname{grad} \tilde{T}^{\beta}) + f + \gamma^{\nu}\, \frac{\partial \eta^{\rho,\beta}}{\partial t}, \tag{69}$$

$$(1-(1-m)\eta^{\rho,\beta})\, \frac{\partial \tilde{C}^{\beta}}{\partial t} = \operatorname{div}(\hat{\mathcal{D}}^{\rho} \operatorname{grad} \tilde{C}^{\beta}) + (1-m)\, \tilde{C}^{\beta}\, \frac{\partial \eta^{\rho,\beta}}{\partial t} \tag{70}$$

$$\frac{\partial \eta^{\rho,\beta}}{\partial t} = \beta\, \Delta\tilde{T}^{\beta}\, \theta_1(\rho - |x - x^*|), \tag{71}$$

jeb ievērojot (19)

$$\frac{\partial \eta^{\rho,\beta}}{\partial t} = \beta\, \Delta\tilde{T}^{\beta}\, \Theta(\eta^{\rho,\beta})\, \Theta(1-\eta^{\rho,\beta}). \tag{72}$$

Pierādīsim, ka uzdevuma (69)-(72) atrisinājums konverģē uz uzdevuma (61)-(62) atrisinājumu, kad $\beta \to \infty$, $\rho \to 0$. Tāpat kā tīri temperatūras uzdevuma gadījumā pierādījumu veiksim funkcijai $u = T - T_n$. Tad $u_n = 0$ un

$$\Delta u = -u - \alpha C. \tag{73}$$

Funkcijai u uzrakstīsim vienādojumus (69) un (72):

$$\tilde{L}\frac{\partial \tilde{u}^\beta}{\partial t} = \operatorname{div}(\hat{\lambda}^\rho \operatorname{grad} \tilde{u}^\beta) + \tilde{f} + \gamma \frac{\partial \eta^{\rho,\beta}}{\partial t}, \tag{74}$$

$$\frac{\partial \eta^{\rho,\beta}}{\partial t} = \beta \Delta \tilde{u}^\beta \Theta(\eta^{\rho,\beta}) \Theta(1-\eta^{\rho,\beta}). \tag{75}$$

Tagad vienādojumu (74) reizinām ar $\tilde{u}^\beta$, bet vienādojumu (70) ar $\tilde{C}^\beta$ un abus vienādojumus integrējam apgabalā Q_t, uz robežas pieņemot homogēnus pirmā veida robežnosacījumus. Izmantojot Koši un Gronuola nevienādības /19/, iegūstam nevienādību:

$$\int_{Q_t}\left(\tilde{L}(\tilde{u}^\beta)^2 + (1-(1-m)\eta^{\rho,\beta}(\tilde{C}^\beta)^2\right)d\vartheta dt + \int_{Q_t}\left(\lambda^\rho_{ij}\frac{\partial \tilde{u}^\beta}{\partial x_i}\frac{\partial \tilde{u}^\beta}{\partial x_j} + \right.$$
$$\left. + \vartheta^\rho_{ij}\frac{\partial \tilde{C}^\beta}{\partial x_i}\frac{\partial \tilde{C}^\beta}{\partial x_j}\right)d\vartheta dt - \beta\int_{Q_{t,\rho}}\Delta\tilde{u}^\beta\left(\gamma\tilde{u}^\beta) + (1-m)(\tilde{C}^\beta)^2\right)d\vartheta dt \leq \tag{76}$$
$$\leq \frac{1}{2}\tilde{L}\int_{V_\rho}(\tilde{u}^\beta)^2\Big|_{t=0}d\vartheta + \frac{1}{2}\int_{V_\rho}(\tilde{C}^\beta)^2\Big|_{t=0}d\vartheta + M_1\int_{Q_t}(\tilde{f})^2 d\vartheta dt.$$

Šeit $Q_{t,\rho}$-apgabala Q_t daļa, ko aizņem fāzu pārejas robežas S_t ρ-apkārtne, kurā $\Delta\tilde{u}^\beta > 0$. Apgabalā, kurā $\Delta\tilde{u}^\beta > 0$, $-\tilde{u}^\beta > \alpha C$ un pēdējo saskaitāmo nevienādības (76) kreisajā pusē varam novērtēt sekojoši:

$$J = -\beta\int_{Q_{t,\rho}}\Delta\tilde{u}^\beta\left(\gamma\tilde{u}^\beta + (1-m)(\tilde{C}^\beta)^2\right)d\vartheta dt > \beta\int_{Q_{t,\rho}}\Delta\tilde{u}^\beta\left(\gamma\alpha - (1-\right.$$
$$\left.-m)\tilde{C}^\beta\right)\tilde{C}^\beta d\vartheta dt \geq \beta\int_{Q_{t,\rho}}\Delta\tilde{u}^\beta(\gamma\alpha - (1-m))\tilde{C}^\beta d\vartheta dt > 0,$$

ja $\gamma\alpha > 1-m$. Tātad iegūstam vienmērīgu $\tilde{u}^\beta$ un $\tilde{C}^\beta$ novērtējumu pēc β un ρ telpā $W_2^{1,0}(Q_t)$, ja vien $\gamma\alpha > 1-m$. Bet tā kā γ, α, m ir reālu materiālu parametri, pie kuriem šie uzdevumi tiek risināti, un ir zināms, ka $0<m<1$ un $\gamma\alpha\gg1$, tad nosacijums $\gamma\alpha>1-m$ ir izpildīts. Tāpēc varam pāriet uz robežu, kad $\beta\to\infty$, $\rho\to0$ integrālidentitātēs, kuras atbilst vienādojumiem (70) un (74):

$$\int\limits_{Q_t}\Big(-\tilde{L}\tilde{u}^{\beta}\frac{\partial\psi}{\partial t}+\lambda_{ij}^{\rho}\frac{\partial\tilde{u}^{\beta}}{\partial x_i}\frac{\partial\psi}{\partial x_j}+\gamma\,\eta^{\rho,\beta}\frac{\partial\psi}{\partial t}-\\ -\tilde{f}\psi\Big)\,d\vartheta\,dt=0, \tag{77}$$

$$\int\limits_{Q_t}\Big(-\big(1-(1-m)\eta^{\rho,\beta}\big)\tilde{C}^{\beta}\frac{\partial\psi}{\partial t}+D_{ij}^{\rho}\frac{\partial\tilde{C}^{\beta}}{\partial x_i}\frac{\partial\psi}{\partial x_j}+\\ +(1-m)\tilde{C}^{\beta}\eta^{\rho,\beta}\frac{\partial\psi}{\partial t}\Big)\,d\vartheta\,dt=0. \tag{78}$$

Robežgadijumā iegūstam integrālidentitātes, kuras atbilst vienādojumiem (45),(46). Tādā veidā iegūstam sākotnējā uzdevuma (45),(46),(44) atrisinājumu.

Salīdzinot iegūto binārā sakausējuma kristalizācijas uzdevuma nostādni (69),(70),(72) ar viduvētajiem vienādojumiem divfāzu videi divkomponenšu sakausējumam /11/, redzam, ka arī Stefana problēmu termodifūzijas sistēmai vispārinātajā nostādnē varam risināt, izmantojot nostādni (69),(70),(72). Vienīgi fāzu pārejas robežu definējot kā visu to telpas punktu kopu, kuros $T(x,y,t)=T_e$.

5. Skaitliskai divkomponenšu kausējuma kristalizācijas uzdevumu risināšanai matemātiskais modelis /7/ tika veidots no vienādojumiem (69),(70),(72) un sekojošiem sākuma un robežnosacījumiem:

$$\left.\frac{\partial T}{\partial r}\right|_{r=0}=0,\quad \tilde{\lambda}_{22}\left.\frac{\partial T}{\partial r}\right|_{r=R}=-\alpha_3\,\varepsilon\,\sigma_0\left(T^4-T_H^4\right), \tag{79}$$

$$\tilde{\lambda}_{11}\left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{x=0}=\alpha_1(T-T_1),\quad \tilde{\lambda}_{11}\left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{x=e}=-\alpha_2(T-T_2), \tag{80}$$

$$\left.\frac{\partial C}{\partial r}\right|_{r=0}=\left.\frac{\partial C}{\partial r}\right|_{r=R}=0,\quad \left.\frac{\partial C}{\partial x}\right|_{x=0}=\left.\frac{\partial C}{\partial x}\right|_{x=\ell}=0, \tag{81}$$

$$T(x,r,0)=T_s(x,r),\quad C(x,r,0)=C_w \tag{82}$$

Tā kā $\Delta T=T_w-T-\alpha C$, vienādojums (70) iznāk nelineārs, jo satur locekli – $(1-m)\beta\alpha C^2$. Lai varētu šim vienādojumam satādīt lineāru diferenču shēmu un lietot iterācijas metodi, šo locekli vēlāk speciālā veidā linearizēsim.

Uz nevienmērīgā režģa ω tika veidota diferenču shēma, $t=k\tau$.

$$\frac{L}{\lambda}\,\frac{T_{ij}^{k+1}-T_{ij}^{k}}{\tau}=\Lambda_h T_{ij}^{k+1}+\Lambda_g T_{ij}^{k+1}+f_{ij}^{k+1}+\frac{\gamma}{\lambda}\left(\frac{\partial\eta}{\partial t}\right)_{ij}^{k+1/2}, \tag{83}$$

$$\frac{1}{\mathcal{D}}\left(1-(1-m)\eta_{ij}^{k}\right)\frac{C_{ij}^{k+1}-C_{ij}^{k}}{\tau}=\Lambda_h C_{ij}^{k+1}+\Lambda_g C_{ij}^{k+1}+ \tag{84}$$
$$+(1-m)C_{ij}^{k}\frac{1}{\mathcal{D}}\left(\frac{\partial\eta}{\partial t}\right)_{ij}^{k+1}$$

Ilgāk jāpakavējas pie $\frac{\partial\eta}{\partial t}$ aproksimācijas. Ja mēs apskatām uzdevumu klasiskajā nostādnē, tad mēs pieņamam fāzu pārejas robežas virsmas eksistenci, un latentā kristalizācijas siltuma izdalīšanās notiek tikai šīs robežas ρ-apkārtnē. Tad

$$\left(\frac{\partial\eta}{\partial t}\right)_{ij}^{k+1/2}=\beta\,\Delta T_{ij}^{k+1/2}\Big(\Theta(\Delta T_{ij}^{k})\Theta(1-\eta_{ij}^{k})\sum_{n=-1}^{\tilde{n}}\Theta_1(\eta_{i+n\,j+n}^{k}-1)+ \tag{85}$$
$$+\Theta(-\Delta T_{ij}^{k})\Theta(\eta_{ij}^{k})\Big),$$

$$\left(\frac{\partial\eta}{\partial t}\right)_{ij}^{k+1}=\beta\,\Delta T_{ij}^{k+1}\Big(\Theta(\Delta T_{ij}^{k+1/2})\Theta(1-\eta_{ij}^{k})\sum_{n=-1}^{1}\Theta_1(\eta_{i+n\,j+n}^{k}-1)+ \tag{86}$$
$$+\Theta(-\Delta T_{ij}^{k+1/2})\Theta(\eta_{ij}^{k})\Big),$$

kur $\Delta T_{ij}^{k+1/2}=T_h-T_{ij}^{k+1}-\alpha C_{ij}^{k}$, $\Delta T_{ij}^{k+1}=T_w-T_{ij}^{k+1}-\alpha C_{ij}^{k+1}$.

Atšķirīga $\frac{\partial \eta}{\partial t}$ aproksimācija vienādojumos (83) un (84) ir izsaukta ar to, ka stabilam atrisinājumam nepieciešama aizklāta shēma. Tāpēc $\frac{\partial \eta}{\partial t}$ tiek aproksimēts tā, lai vienādojuma (69) aproksimācija būtu aizklāta attiecībā pret T, vienādojuma (70) aproksimācija - attiecībā pret C. Funkciju η nosakām no vienādojuma (72)

$$\eta_{ij}^{K+1} - \eta_{ij}^{K} = \tau \beta \Delta T_{ij}^{K+1} \Big(\Theta(\Delta T_{ij}^{K+1}) \Theta(1-\eta_{ij}^{K}) \sum_{n=-1}^{1} \Theta_1(\eta_{i+n\,j+n}^{K} - 1) + \Theta(-\Delta T_{ij}^{K+1}) \Theta(\eta_{ij}^{K}) \Big). \tag{87}$$

Ja mēs aplūkojam problēmu vispārinātajā nostādnē, tad latentais kristalizācijas siltums izdalās visos punktos, kuros $T=T_e$, un sekojoši

$$\left(\frac{\partial \eta}{\partial t}\right)_{ij}^{K+1/2} = \beta \Delta T_{ij}^{K+1/2} \Theta(\Delta T_{ij}^{K}) \Theta(1-\eta_{ij}^{K}), \tag{88}$$

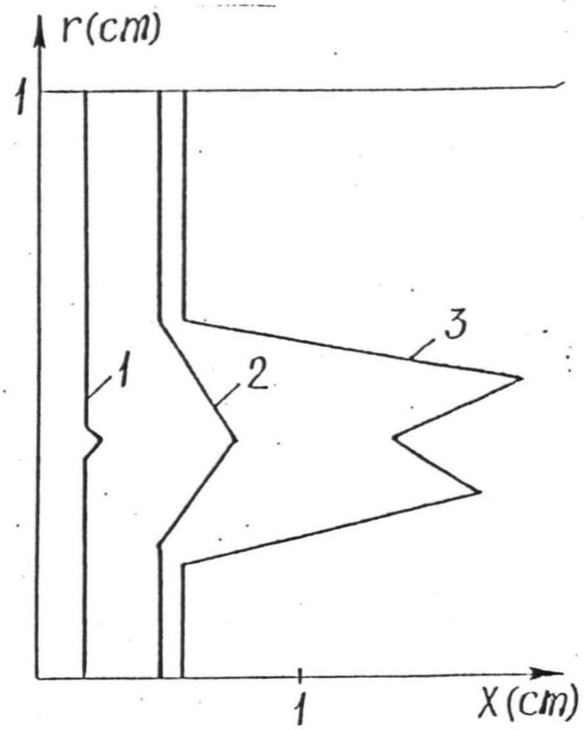
$$\left(\frac{\partial \eta}{\partial t}\right)_{ij}^{K+1} = \beta \Delta T_{ij}^{K+1} \Theta(\Delta T_{ij}^{K+1/2}) \Theta(1-\eta_{ij}^{K}). \tag{89}$$

Funkciju η nosakām no vienādojuma

$$\eta_{ij}^{K+1} - \eta_{ij}^{K} = \tau \beta \Delta T_{ij}^{K+1} \Theta(\Delta T_{ij}^{K+1}) \Theta(1-\eta_{ij}^{K}). \tag{90}$$

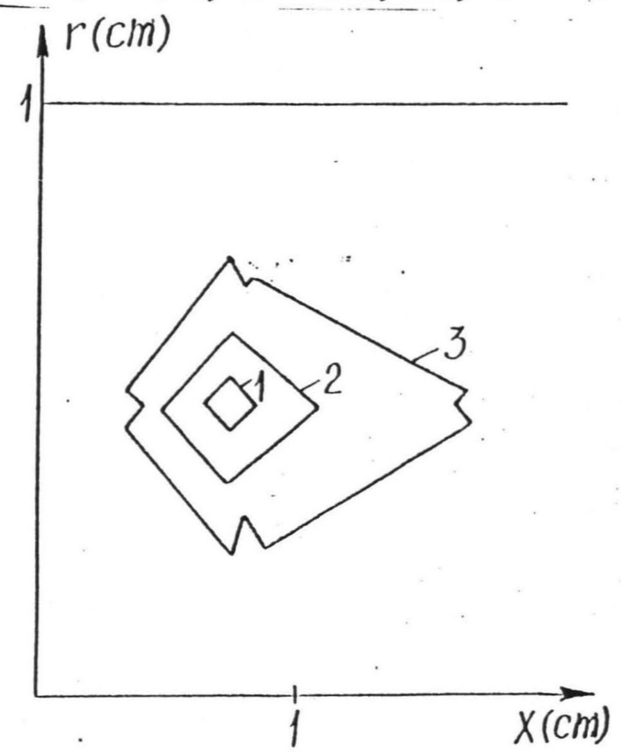
5.1. Termodifūzijas uzdevuma klasiskā nostādnē atrisinājuma ilustrācijai apskatīsim divus piemērus. Tie ir kristāla augšanas process no pamatnītes un no dīgļa kausējuma tilpumā /7/. Šos procesus apraksta vienādojumi (83)-(86), kur f=0, un nosacījumi (79)-(82), kur $\alpha_3=\alpha_1=\alpha_2=0$, $T_3=-\Delta T_0$. 12. zīmējumā parādīta kristāla augšanas procesa no pamatnītes dinamika, bet 13. zīmējumā - kristāla augšanas procesa no dīgļa dinamika. Fizikālās konstantes tādas pašas kā piemērā 3.1., bet difūzijas parametri ir sekojoši:

$D_1=2\cdot10^{-11}$ cm^2/s, $D_2=10^{-5}$ cm^2/s.



12.zim. Dendrita augšanas no pamatnites procesa dinamika;

1 - t=0; 2 - t=0,005; 3 - -t=0,01;



13.zim. Kristāla augšanas no diģļa procesa dinamika;

1 - t=0; 2 - t=0,005; 3 - t=0,01;

5.2. Lai ilustrētu termodifūzijas sistēmas Stefana problēmas vispārinātajā nostādnē risinājumu, aplūkosim vienu pielietojamo uzdevumu. Tā ir metāla ESR procesa modelēšana /9/. Šis peocess ir diezgan sarežģīts un, to modelējot, it jāņem vērā ļoti daudzi faktori - strāvas plūsmu stāvoklis šlagas vannā, elektrodu kušana, pārkarsētu pilienu krišana metāla kausējuma vannā, metāla kristalizācija ar divfāzu zonas veidošanos, hidrodinamikas procesi šlagas vannā un metāla šķidrajā zonā.

Apskatāmajā piemērā ir aplūkota siltuma un masas pārneses problēma apgabalā, kuru aizņem kristalizējošais metāls ar divfāzu zonu /9/. Tika veidots sekojošs modelis:

siltumvadīšanas vienādojums

$$L\frac{\partial T}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial x}\right)+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\lambda r\frac{\partial T}{\partial r}\right)-Lv_0\frac{\partial T}{\partial x}+\gamma\frac{\partial\eta}{\partial t}, \quad (91)$$

difūzijas vienādojums

$$(1-(1-m)\eta)\frac{\partial C}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x}\left(\mathcal{D}\frac{\partial C}{\partial x}\right)+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\mathcal{D}r\frac{\partial C}{\partial r}\right)+(1-m)C\frac{\partial\eta}{\partial t}, \quad (92)$$

vienādojumi (88)-(90), kas nosaka divfāzu zonu, un nosacījumi

$$\lambda\frac{\partial T}{\partial x}\Big|_{x=0}=\left(Lv_0+\frac{\lambda_w}{\delta}\right)\left(T\big|_{x=0}-T_1(r)\right), \quad (93)$$

$$\lambda\frac{\partial T}{\partial x}\Big|_{x=e}=-\alpha_1\left(T-T_1\right), \quad (94)$$

$$\frac{\partial T}{\partial r}\Big|_{r=0}=0,\quad \frac{\partial T}{\partial r}\Big|_{r=R}=-Q(x), \quad (95)$$

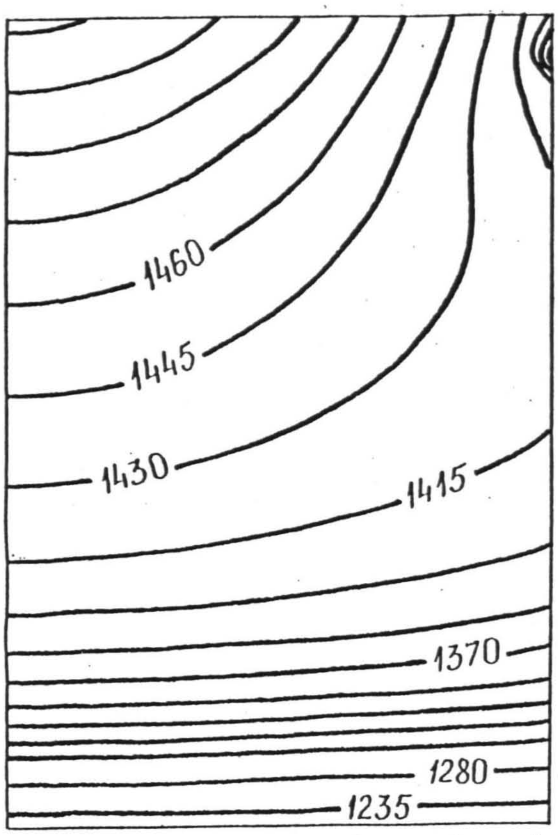
$$\frac{\partial C}{\partial x}\Big|_{x=0}=\frac{\partial C}{\partial x}\Big|_{x=e}=0,\quad \frac{\partial C}{\partial r}\Big|_{r=0}=\frac{\partial C}{\partial r}\Big|_{r=R}=0, \quad (96)$$

$$T(x,r,0)=T_S(x,r),\quad C(x,r,0)=C_n. \quad (97)$$

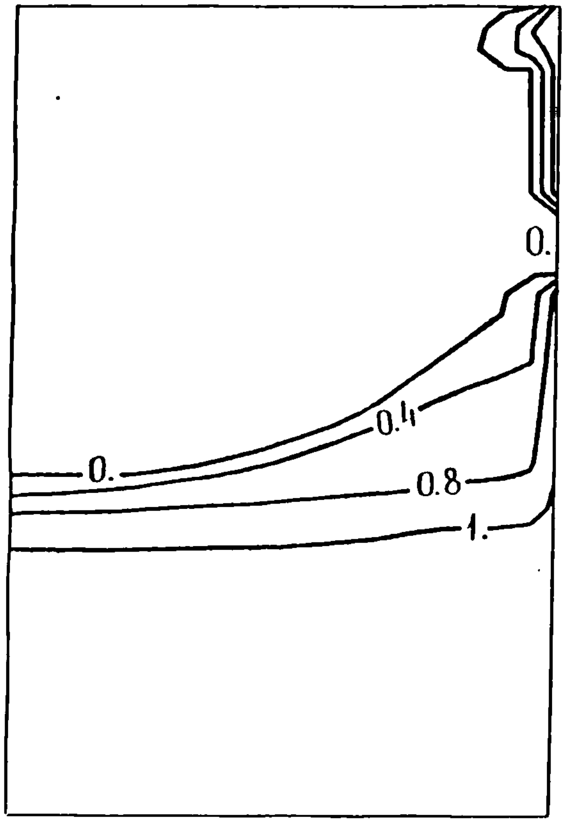
kur δ - šlagas vannā iegremdētā slāņa biezums. $T_1(r)$ pie $x=-\delta$ tiek uzdota no eksperimenta, $Q(x)$ - eksperimentāli uzdota siltuma plūsma uz sānu virsmas. Eksperimentālie dati ir iegūti no Tiro Metālu ZPI Maskavā.

x(cm)	0.	0.6	1.2	1.8	2.4	3.	3.6	4.2	4.8	5.4	6.0
Q(x)(W/cm)	115.	235.	140.	85.	70.	60.	50.	35.	25.	20.	15.

x vērtībām no 6. līdz 20. dota pastāvīga plūsma Q=15 W/cm.
$\gamma=247$ J/g; $v_0=0,02$ cm/s; $\lambda_2=0,155$ W/(cm·K); $\delta=0,1$cm;
$\lambda_1=0,314$ W/(cm·K); $\lambda_m=0,005$ W/(cm·K); $L=5,42$ J/(cm^3·K);
l=20 cm; R=12,5 cm; $T_n=1500^\circ$K; $T_1=100^\circ$C;
14. zīmējumā ir parādīts metāliskā sakausējuma temperatūras lauks, bet 15. zīmējumā divfāzu zonas forma un stāvoklis, kuri labi sakrīt ar eksperimentāli iegūtajiem.



14. zīm. Izotermu lauks kristalizācijas sakausējumā, ievērojot divfāzu zonas veidošanās kinētiku.



15. zim. Divfāzu zonas forma.

Par promocijas darba rezultātiem ir nolasiti 4 referāti - Minskas Starptautiskajā forumā "Siltuma un masas apmaiņa" 1988.gadā, Republikāniskajās konferencēs Minskā "Informātikas un skaitļošanas tehnikas izmantošana tautsamniecibas uzdevumu risināšnā" un Rigā "Tehnoloģisko procesu modelēšanas skaitliskās metodes" 1989.gadā un XI Vissavienibas konferencē "Tērauda un tā sakausējumu kristalizācijas, modificēšanas un liešanas procesi" Volgogradā 1990. gadā. Tāpat iegūtie rezultāti tika izmantoti, lai izpilditu zinātnisko tēmu Nr.90.603. un Nr.90.612. plānus.

Par promocijas darba tēmu ir publicēti 9 darbi. 5 zinātniskie raksti un 4 referātu tēzes.

Autora publicēto darbu saraksts.

1.N.Avdoņins, M.Gulbe. Monokristāliska sakausējuma, kurš tiek atdzesēts no virsmas, kristalizācijas skaitliska analize.-Mat. fizikas pieleitojamie uzdevumi-Riga:LVU-1987.-lpp.4.-13. (kr.val.)

2.M.Gulbe. Kristalizācijas uzdevuma klasiskajā nostādnē risināšana ar lokālās viduvēšanas metodi.-Mat. fizikas pielietojamie uzdevumi-Riga:LVU-1988.-lpp.41.-48.(kr. val.)

3.M.Gulbe, N.Avdoņins. Stabila un nestabila kristāla augšanas procesa pētijums siltuma pārneses divfāzu vidē modelim.-Minskas Starptautiskā foruma tēzes-Minska-1988.- lpp.25.-27.(kr. val.)

4.M.Gulbe, N.Avdoņins. Kristalizācijas frontes stabilitātes pētijums viduvētam siltuma pārneses divfāzu vidē modelim.-Mat. fizikas pielietojamie uzdevumi-Riga:LVU-1989.-lpp.87.-95.(kr.val.)

5.M.Gulbe. Kristāla augšanas procesa no pārdzesēta šķiduma skaitliska modelēšana.-Republ.konf."Tehnoloģisko procesu modelēšanas skaitliskās metodes" tēzes-Riga-1989.-lpp.50.-51. (kr.val.)

6.M.Gulbe. Fāzu pārejas robežas stabilitātes pētijums binārā sakausējuma kristalizācijas uzdevuma piemērā.-Republ.konf. "Informātikas un skaitļošanas tehnikas pielietošana tautsaimniecibas uzdevumos"-Minska-1989.-lpp.38.(kr.val.)

7.N.Avdoņins, M.Gulbe. Lokālās viduvēšanas metode binārā sakausējuma kristalizācijas uzdevuma skaitliskai risināšnai.-Mat.fizikas pielietojamie uzdevumi.Matemātiskā modelēšana.-554.sēj.-Riga:LU-1990.-lpp.18.-27.(kr.val.)

8.N.Avdoņins, M.Gulbe. Metālu sakausējumu kristālisko struktūru un ķimiskās neviendabibas prognozēšanas programmu nodrošinājums.-XI Vissavienibas konf."Tērauda un tā sakausējumu liešanas, kristalizācijas un modificēšanas procesi"-Volgograda-1990.-lpp.44.-45.(kr.val.)

9.N.Avdoņins,M.Gulbe,V.Gotin,V.Mišins. Divfāzu zonas kausējumā analize ESR procesā.-Matemātikas pielietojamie uzdevumi, matemātiskā modelēšana.-564.sēj.-Riga:LU-1991.-lpp.35.-44. (kr.val.)

Citētās literatūras saraksts.

10. Stefan J. Über einige Probleme der Theorie der wärmeleitung . - Sitzungsber. Wien.Akad.Wiss.Math.Naturw. - 1889 - Bd.98 - N.11a - S.473.-484.
11. Авдонин Н.А. Математическое описание процессов кристаллизации. - Рига:Зинатне,1980. -175с.
12. Секерка Р., Маллинз В. Устойчивость плоской поверхности раздела фаз при кристаллизации разбавленного бинарного сплава - В кн.:Проблемы роста кристаллов. - М.,Мир,1968. - с.106.-126.
13. Борисов В.Т. Кристаллизация бинарного сплава при сохранении устойчивости. - ДАН,1961,т.136,№3 - с.583.-586.
14. Борисов В.Т. Двухфазная зона при кристаллизации сплава в нестационарном режиме. - ДАН,1962,т.142,№3 - с.581.-583.
15. Авдонин Н.А., Иванова Г.Ф. Определение формы фронта кристаллизации из одномерного приближения задачи при больших скоростях вытягивания слитка. - Прикладные задачи математической физики. - Рига:ЛГУ - 1983. - с.13.-22.
16.Авдонин Н.А., Иванова Г.Ф. Численное исследование влияния способов аппроксимации на качественное поведение решения задачи Стефана при больших скоростях кристаллизации. - Математическое моделирование. Получение монокристаллов и полупроводниковых структур. - М.:Наука,1968. - с.31.-39.
17. Борисов В.Т. Теория двухфазной зоны металлического слитка -М.:Металлургия,1987. - 222с.
18. Владимров В.С. Уравнения математической физики.-М.:Наука, 1971. - 512с.
19. Ладыженская О.А., Солонников В.А., Уральцева Н.Н. Линейные и квазилинейные уравнения параболического типа. - М.:Наука,1967. - 736с.
20. David S.Kersaw. The incomplate Cholesky-conjugate gradient methods for the iterative solution of system of linear equations. - J.of Comput.Phys. - 1978.-v.26. - p.43.-65.
21. Гончаров А.Л. Реализация метода неполной LU-композиции сопряженных градиентов для решения сеточных уравнений на различных шаблонах. - пр.ИПМ им.М.В.Келдыша АН СССР - М. -1984 - №174

22. Олейник О.А. Об одном методе решения общей задачи Стефана - ДАН - 1960 -т.135 -№5 -с.1054. -1057.

23. Рубинштейн Л.И. Проблема Стефана. - Рига:Звайгзне,1967. - 457с.

24. Карслоу Г., Егер Д. Теплопроводность твердых тел. - М.: Наука,1964. - 487с.

25. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. - М.:Наука,1966. - 724с.

26. А.М.Мейерманов. Задача Стефана. - Новосибирск:Наука,1986-238с.

LU Bibliotēkai

Sakarā ar LR Ministru Padomes Nolikumu par zinātnisko grādu piešķiršanu /1991.g. 4.oktobra lēmums Nr. 262/ LU Promocijas padome matemātikā nosūta Jums

1) Māras Gulbes promocijas darba kopsavilkumu latviešu, krievu un angļu valodā (katrā valodā 1 eks.).

Tēma: "Stefana problēmas skaitliska risināšana klasiskajā un vispārinātajā nostādnē".

2) Zlatas Rusakevičas promocijas darba kopsavilkumu latviešu, krievu un angļu valodā (katrā valodā 1 eks.).

Tēma: "Piesārņojošo šķīdumu siltuma un masas pārneses matemātiskā modelēšana apakszemes ūdeņos".

1994.g.8.decembrī

LU Promocijas padomes matemātikā sekretāre

Gulbe /M.Gulbe/

Pielikums

Māras Gulbes promocijas darba zinātnisko rakstu kopuma saraksts.

1.N.Avdoņins, M.Gulbe. Monokristāliska sakausējuma, kurš tiek atdzesēts no virsmas, kristalizācijas skaitliska analīze.- Mat. fizikas pielietojamie uzdevumi-Rīga:LVU-1987.-lpp.4.-13. (kr.val.)

2.M.Gulbe. Kristalizācijas uzdevuma klasiskajā nostādnē risināšana ar lokālās viduvēšanas metodi.-Mat. fizikas pielietojamie uzdevumi-Rīga:LVU-1988.-lpp.41.-48.(kr. val.)

3.M.Gulbe, N.Avdoņins. Stabila un nestabila kristāla augšanas procesa pētījums siltuma pārneses divfāzu vidē modelim.-Minskas Starptautiskā foruma tēzes-Minska-1988.- lpp.25.-27.(kr. val.)

4.M.Gulbe, N.Avdoņins. Kristalizācijas frontes stabilitātes pētījums viduvētam siltuma pārneses divfāzu vidē modelim.- Mat. fizikas pielietojamie uzdevumi-Rīga:LVU-1989.-lpp.87.-95.(kr.val.)

5.M.Gulbe. Kristāla augšanas procesa no pārdzesēta šķiduma skaitliska modelēšana.-Republ.konf."Tehnoloģisko procesu modelēšanas skaitliskās metodes" tēzes-Rīga-1989.-lpp.50.-51. (kr.val.)

6.M.Gulbe. Fāzu pārejas robežas stabilitātes pētījums binārā sakausējuma kristalizācijas uzdevuma piemērā.-Republ.konf. "Informātikas un skaitļošanas tehnikas pielietošana tautsaimniecības uzdevumos"-Minska-1989.-lpp.38.(kr.val.)

7.N.Avdoņins, M.Gulbe. Lokālās viduvēšanas metode binārā sakausējuma kristalizācijas uzdevuma skaitliskai risināšnai.- Mat.fizikas pielietojamie uzdevumi.Matemātiskā modelēšana.- 554.sēj.-Rīga:LU-1990.-lpp.18.-27.(kr.val.)

8.N.Avdoņins, M.Gulbe. Metālu sakausējumu kristālisko struktūru un ķīmiskās neviendabības prognozēšanas programmu nodrošinājums.-XI Vissavienības konf."Tērauda un tā sakausējumu liešanas, kristalizācijas un modificēšanas procesi"-Volgograda-1990.-lpp.44.-45.(kr.val.)

9.N.Avdoņins,M.Gulbe,V.Gotins,V.Mišins. Divfāzu zonas kausējumā analīze ESR procesā.-Matemātikas pielietojamie uzdevumi, matemātiskā modelēšana.-564.sēj.-Rīga:LU-1991.-lpp.35.-44. (kr.val.)