Министерство высшего и среднего специального
образования Латвийской ССР
Латвийский ордена Трудового Красного Знамени
государственный университет им. П.Стучки

Вычислительный центр

ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ
МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ

Латвийский государственный университет им. П.Стучки
Рига 1987

УДК 536.421

Н.А.Авдонин, М.Л.Гулбе
ВЦ ЛГУ им.П.Стучки,Рига

ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО СЛИТКА, ОХЛАЖДАЕМОГО С ПОВЕРХНОСТИ

Данная статья посвящена анализу случаев решения задачи о фазовом переходе (задачи Стефана) как в классической, так и в обобщенной постановке.

В работе /I/ сформулировано положение: при кристаллизации чистого (однокомпонентного) расплава, охлаждаемого с поверхности, дендриты растут лишь вдоль поверхности образца, не проникая вглубь расплава. Показать в расчете, что вдоль поверхности образца растет дендрит вытянутой формы, и что переохлаждение не проникает вглубь расплава, весьма трудно. Для приближенного построения границы раздела фаз, т.е. определения формы дендрита, в /I/ использовано решение одномерной задачи. Таким же образом задача решалась и в /2,3/. Температура в слитке $T(r,z,t)$ осреднялась по радиусу: $\tilde{T}=\frac{2}{R^2}\int\limits_0^R T(r,z,t)\,r\,dr$, и вводилась еще одна неизвестная функция $\eta(z,t)$ -доля твердой фазы в сечении слитка. Форма фронта кристаллизации восстанавливалась по найденным значениям функции $\eta(z)$, которая выражается через координату $\rho(z)$ границы раздела фаз $\eta(z)=\frac{\pi R^2-\pi\rho^2(z)}{\pi R^2}$, $\rho(z)=R\sqrt{1-\eta(z)}$ и тем самым восстанавливается конфигурация границы раздела фаз в двумерной задаче. Однако удовлетворительное определение формы раздела фаз можно ожидать лишь при малых значениях радиуса слитка R. Следует отметить, что граница раздела фаз в рассматриваемом случае имеет сложную форму. Производная $\rho'(z)$ меняется почти от нуля,вблизи поверхности слитка, до бесконечности. Это обстоятельство делает численный расчет особо трудным, как это и отмечено в /I/. Для решения задачи в обобщенной постановке также использовался метод сглаживания /4,5,6/, "размазывания" скрытой теплоты по температурному интервалу. В

/3/ проведено сравнение результатов полученных методом сглаживания с аналитическим решением осредненной одномерной задачи. Как отмечено в /3/, в целом форма фронта кристаллизации согласуется с формой восстановленной из одномерного аналитического решения, однако, у боковой поверхности слитка наблюдается качественное отличие или двух - фазная область. В /3/ также отмечается особая трудность расчетов методом сглаживания коэффициентов в интервале температур, возникающей из-за наличия обширной области с температурой, близкой к T_n .

Целью настоящей работы является разработка численного алгоритма и расчет модельного примера, показывающий в двумерном случае рост дендрита вдоль поверхности образца. В работе используется метод введения параметра β , для двухфазной зоны определяющего скорость объемной кристаллизации /I/. Таким образом рассматривается следующая математическая модель двумерной задачи о кристаллизации слитка.

Температурное поле в слитке $T\ (r,z,t)$ и граница раздела фаз $z=\varphi(r,t)$ описываются следующим уравнением и условиями:

$$div(\lambda(T)\,grad\,T)=c(T)\rho(T)\left(\frac{\partial T}{\partial t}+v_0\frac{\partial T}{\partial z}\right) \qquad (I)$$

$$t>0,\quad 0\leqslant r\leqslant R,\quad 0\leqslant z\leqslant \ell$$

$$\left.\frac{\partial T}{\partial r}\right|_{r=0}=0 \qquad (2)$$

$$\lambda(T)\left.\frac{\partial T}{\partial r}\right|_{r=R}=-\varepsilon\sigma_0\left(T^4-T_H^4\right) \qquad (3)$$

$$\lambda(T)\frac{\partial T}{\partial z}\bigg|_{z=0} = \varepsilon\sigma_0(T^4 - T_н^4) \tag{4}$$

$$\lambda(T)\frac{\partial T}{\partial z}\bigg|_{z=\ell} = -\varepsilon\sigma_0(T^4 - T_н^4) \tag{5}$$

$$T(r,z,0) = T_0(z) \tag{6}$$

$$\gamma\rho\frac{\partial\varphi}{\partial t} = \left[\lambda(T)\frac{\partial T}{\partial n}\right]_{\varphi(r,t)}, \tag{7}$$
$$T = T_п, \quad z = \varphi(r,t),$$

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

$$\lambda(T) = \begin{cases}\lambda_1, & T < T_п \\ \lambda_2, & T > T_п\end{cases} \tag{8}$$

$T_п$ - температура плавления,
$C(T)$ - удельная теплоемкость,

$$c(T) = \begin{cases}c_1, & T < T_п \\ c_2, & T > T_п\end{cases}$$

$\rho(T)$ - плотность,

$$\rho(T) = \begin{cases}\rho_1, & T < T_п \\ \rho_2, & T > T_п\end{cases}$$

v_0 - стационарная скорость кристаллизации,
γ - удельная скрытая теплота фазового перехода,
$T_н$ - температура окружающей среды,

$$T_н(z) = \begin{cases}T_1, & 0 \leqslant z \leqslant z_1 \\ T_2, & z_1 < z \leqslant z_2 \\ T_3, & z_2 < z \leqslant \ell,\end{cases} \tag{9}$$

ε - степень черноты,

σ_0 - постоянная Стефана-Больцмана.

Далее осуществляется замена переменных

$$u(T)=\int_0^T \frac{\lambda(\xi)}{\lambda_1}\,d\xi\,. \tag{10}$$

Для учета условия Стефана (7) вводится функция $\eta(T,z,t)$ - доля твердой фазы

$$\eta(T,z,t)=\begin{cases}1, & T<T_n\\ \bar\eta(z,t), & T\equiv T_n\\ 0, & T>T_n\end{cases} \tag{11}$$

$$0\leqslant\eta(T,z,t)\leqslant 1\,,\qquad 0<\bar\eta(z,t)<1\,.$$

Учитывая замену переменных (10) и введенную функцию η (11) уравнение (1) в обобщенной записи /1/ принимает вид

$$\frac{c\rho}{\lambda(u)}\left(\frac{\partial u}{\partial t}+v_0\frac{\partial u}{\partial z}\right)=\frac{\partial^2 u}{\partial z^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial u}{\partial r}\right)+\gamma\rho\frac{\partial\eta}{\partial t}\,. \tag{12}$$

Если мы ищем классическое решение задачи (1)-(7), то $\frac{\partial\eta}{\partial t}\neq 0$ только на границе раздела фаз. Полагаем на границе раздела фаз, что скорость объемной кристаллизации

$$\frac{\partial\eta}{\partial t}=\beta\cdot\Delta u\cdot\theta(\Delta u)\cdot\theta(1-\eta)\cdot\theta_1(\eta_{+1}-1)\,, \tag{13}$$

где $\Delta u=u_n-u$,

β - параметр, определяющий эту скорость,

$$\theta(s)=\begin{cases}0, & s\leqslant 0\\ 1, & s>0\,,\end{cases}\qquad \theta_1(s)=\begin{cases}0, & s<0\\ 1, & s\geqslant 0\,,\end{cases} \tag{14}$$

η_{+1} - значение функции $\eta(z,t)$ в точке соседней с рассматриваемой в направлении, перпендикулярном направлению скорости v_0 к поверхности образца. С учетом (13) уравнение (12) переходит в уравнение

$$a(u)\left(\frac{\partial u}{\partial t}+v_0\frac{\partial u}{\partial z}\right)=\frac{\partial^2 u}{\partial z^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial u}{\partial r}\right)+$$

$$+\beta\cdot\Delta u\cdot\theta(\Delta u)\cdot\theta(1-\eta)\cdot\theta_1(\eta_{+1}-1)\,, \qquad (15)$$

где $a(u)=\dfrac{c(u)\cdot\rho(u)}{\lambda(u)}$

$$c(u)=c_1\cdot\eta+c_2(1-\eta),$$
$$\rho(u)=\rho_1\cdot\eta+\rho_2(1-\eta),$$
$$\lambda(u)=\lambda_1\cdot\eta+\lambda_2(1-\eta).$$

В /I/ доказана сходимость приближенных решений u_β задачи (I5), (2)-(6) к точному решению исходной задачи (I)-(7) при $\beta\to\infty$. Задача (I2), (I3), (2)-(6) рассматривается как в классической, так и обобщенной постановке. Классическая постановка задачи требует существования гладкой границы раздела фаз и выполнения условия(7) только на этой гладкой границе $z=\varphi(r,t)$. В численном алгоритме это условие реализуется через уравнение (I3). При этом рассматриваются два случая. Случай А: уравнение (I3) берем в форме

$$\frac{\partial\eta}{\partial t}=\beta\cdot\Delta u\cdot\theta(\Delta u)\cdot\theta(1-\eta)\,, \qquad (16)$$

т.е. в пространстве мы допускаем движение границы раздела фаз только в направлении скорости v_0.

Случай В: уравнение (I3) используем в несокращенной форме, т.е. считаем границу раздела фаз движущейся в пространстве как в направлении скорости v_0, так и в направлении перпендикулярному ей к поверхности образца.

Далее рассмотрим алгоритм реализации численного расчета задачи в обобщенной постановке. Условие Стефана (7) в обобщенной постановке задачи формулируется следующим образом /I/: граница раздела фаз отыскивается как множество точек, в которых $T=T_n$, причем на этом множестве выполняется условие (7). Следуя этой формулировке для учета условия Стефана, берем уравнение (I3) в виде

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = \beta \cdot \Delta u \cdot \theta(\Delta u). \qquad (17)$$

Для решения задачи (I2), (I3), (2)-(6) осуществлялась конечно-разностная аппроксимация. Для расчетов применялся полуявный метод аппроксимационной поправки Яненко /7/. Нелинейные условия (3)-(5) линеаризовывались заменой T^4 на $T^3 \cdot T$, и на каждом временном шаге проводились итерации по нелинейности, причем T^3 считалось известным с предыдущей итерации. При первой итерации T^3 бралось с предыдущего временного слоя. Итерации продолжались до тех пор, пока получаемая при этом невязка не становилась меньше наперед заданного ε_H.

Численная реализация обобщенной постановки соответствует случаю роста монокристалла в ампуле или контейнере, охлаждаемого с поверхности. Приведем основные результаты этого случая. На рис.I и 2 отображены результаты решения задачи (I)-(7) в обобщенной постановке, т.е. решения уравнений (I2), (I7) с условиями (2)-(6). Форма границы раздела фаз (рис.I), полученная при разных значениях параметра β, показывает, что вдоль поверхности образца растет дендрит вытянутой формы. Из вида температурного поля, представленного на рис.2, следует, что переохлаждение вглубь расплава не проникает.

Реализация классического решения задачи Стефана соответствует случаю кристаллизации слитка со свободной поверхностью, т.е. случаю отсутствия на боковой поверхности подложки или затравки. Этот случай представляет особый интерес, так как при интенсивном охлаждении с боковой поверхности априори неизвестно, будет ли переохлаждение проникать вглубь расплава или рост поверхностного дендрита будет опережающим и переохлаждение в объеме расплава будет отсутствовать. Анализ случая реализации классического решения поставленной задачи представлен на рис.3,4,5. Формы границы раздела фаз (рис.3), полученные

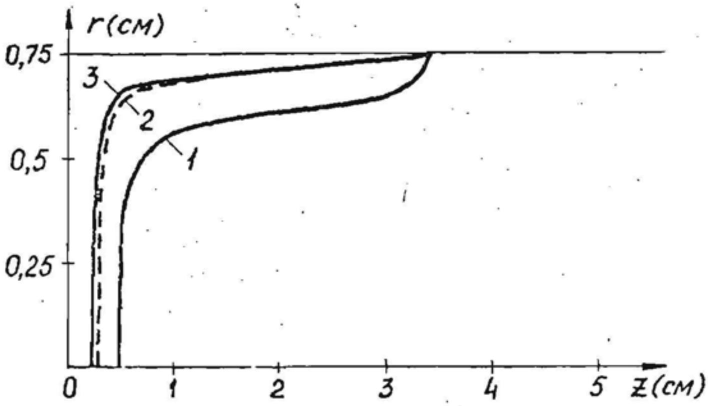

Рис.I. Граница раздела фаз. I-β=0,5; 2 -β=2; 3 -β=3.

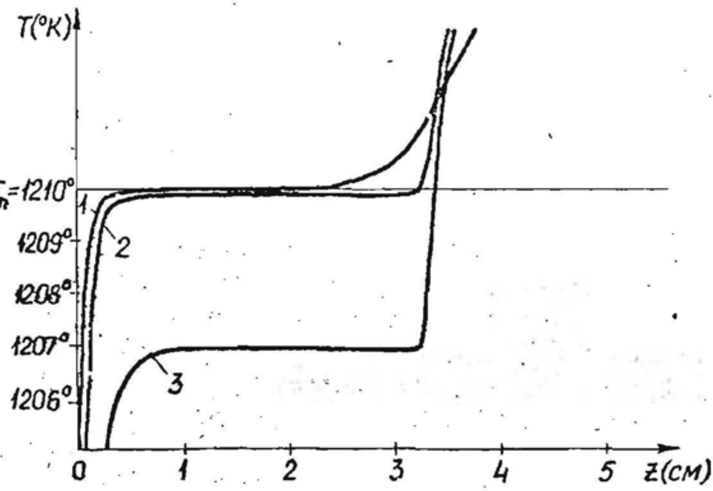

Рис.2. Осевое распределение температуры. I -r=0,0;
2 -r=0,675; 3 -r=R=0,75; β =0,5.

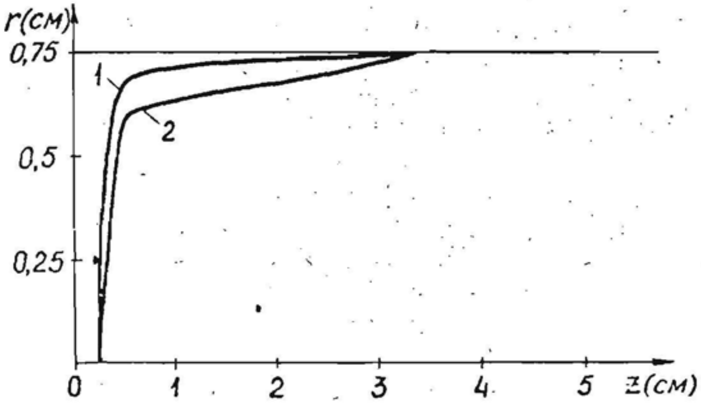

Рис.3. Граница раздела фаз. I - случай А, 2 - случай В; β =0,5.

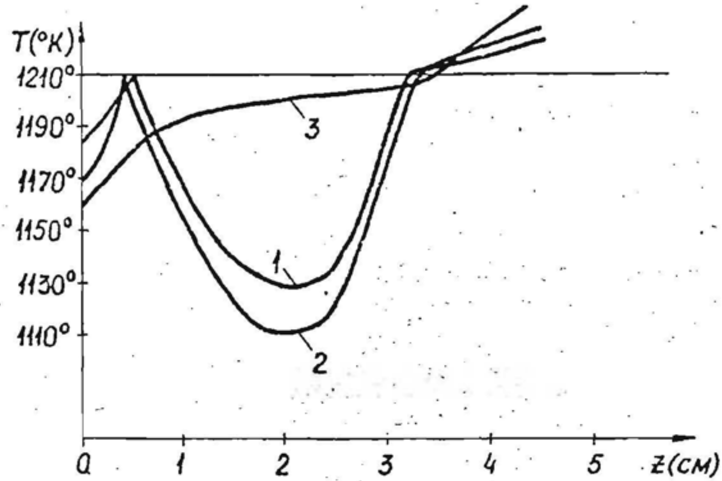

Рис.4. Осевое распределение температуры, случай А. I-r=0,0; 2-r=0,675; 3-r=R=0,75; β =0.5.

как при решении задачи в случае А, т.е. решения уравнений (I2), (I6) с условиями (2)-(6), так и при решении задачи в случае В, т.е. решения уравнений (I2), (I3) с условиями (2)-(6), отображают рост дендрита вытянутой формы вдоль поверхности образца и в этих случаях. Температурное поле в случае А (рис.4) показывает, что перед границей раздела фаз существует глубокая зона переохлаждения. Однако в полной постановке нахождения классического решения (случай В) переохлаждение равно нулю. Максимальное его значение составляет $0{,}3^{\circ}$, что совпадает с погрешностью численного счета. Температурное поле, иллюстрирующее этот случай, приведено на рис.5. Отсюда можно сделать вывод, что для получения классического решения в обобщенной постановке необходимо формулировать задачу с использованием уравнения (I3) в полной его форме. Случай А, по-видимому, не соответствует реальному процессу. Это свидетельствует о неполноте формулировки в случае А.

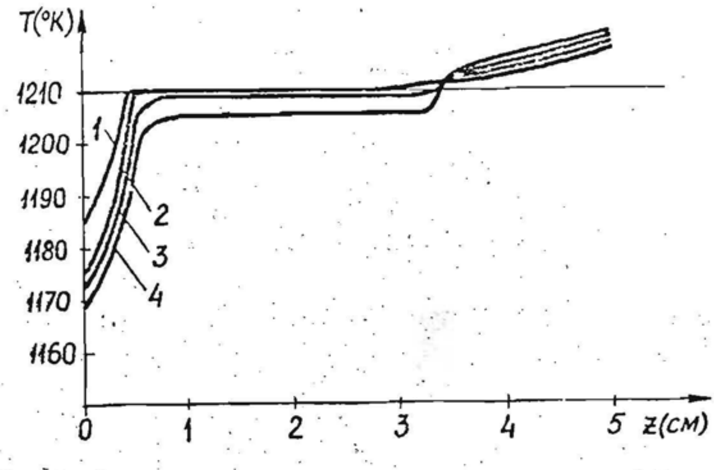

Рис.5. Осевое распределение температуры, случай В.
I -r=0,0; 2-r=0,6; 3-r=0,675; 4-r=R=0,75; β =0,5.

Таким образом, проведенные расчеты для случая кристаллизации в ампуле подтвердили положение /1/ о невозможности переохлаждения внутри объема расплава в случае обобщенной постановки задачи. Для случая решения задачи в классической постановке, показано, что вдоль боковой поверхности имеет место опережающий рост дендрита и отсутствие переохлаждения в объеме расплава.

Задача численно решалась при следующих значениях физических констант для германия:

$\lambda_1 = 0{,}173$ вт с/(г град); $\lambda_2 = 0{,}412$ вт/(см град);
$c_1 = c_2 = 0{,}34$ вт с/(г град); $\rho_1 = \rho_2 = 5{,}6$ г/см^3;
$T_n = 1210^0$К; $\varepsilon_{тв.} = 0{,}6$; $\varepsilon_{ж.} = 0{,}18$;
$\sigma_0 = 5{,}67 \cdot 10^{-12}$ вт/(см$^2 \cdot$ град^4); $v_0 = 0{,}02$ см/с;
$\ell = 5$ см; $R = 0{,}75$ см; $z_1 = 0{,}5$ см; $z_2 = 3{,}5$ см;
$T_1 = 300^0$К; $T_2 = 600^0$К; $T_3 = 1300^0$К.

Список литературы

1. Авдонин Н.А. Математическое описание процессов кристаллизации.- Рига:Зинатне, 1980.- 175 с.
2. 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.
3. 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, 1986.- С.31-39.
4. Самарский А.А., Моисеенко Б.Д.Экономичная схема сквозного счета для многомерной задачи Стефана. Журн.вычисл.мат. и мат.физики. - 1965. - Т.5. - С.816-827.
5. Авдонин Н.А., Мартузан Б.Я., Пыленкова Э.Н. и др. Решение тепловой задачи, связанной с процессом направленной кристаллизации слитков//Латв.мат.ежегодник. - Рига:Зинатне, 1970. - Вып.7. - С.3-15.

Межвузовский сборник научных трудов
ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ
Рига: ЛГУ им.П.Стучки, 1988

УДК 536.421. I + 536.24

М.Л.Гулбе
ВЦ при ЛГУ им.П.Стучки

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ В КЛАССИЧЕСКОЙ ПОСТАНОВКЕ МЕТОДОМ ЛОКАЛЬНОГО ОСРЕДНЕНИЯ

В работе /I/ разработан метод решения задачи кристаллизации в обобщенной постановке. Методом локального осреднения по малым объемам ΔV^2 была введена функция $\eta(u)$ – доля твердой фазы в элементарном объеме ΔV^2, причем функция $\eta(u)$ в обобщенной постановке задачи определялась следующим образом:

$$\eta(u) = \begin{cases} 0, & u > 0 \\ 1, & u < 0. \end{cases} \tag{I}$$

В этом случае переохлаждение в жидкой зоне не допускается, что видно из определения функции $\eta(u)$. Однако, в классической постановке задачи, если допустить существование гладкого фронта кристаллизации (поверхности фазового перехода), переохлаждение в жидкой фазе возможно. Целью настоящей работы является построение численного метода решения задачи в классической постановке, допускающей переохлаждение и исследование устойчивости движения границы раздела фаз.

I. Постановка задачи

Рассмотрим задачу о фазовом переходе в следующей постановке. Цилиндрический слиток движения со скоростью v_0 вдоль муфеля печи с температурой $T_0(x)$. Тогда уравнение, описывающее температурное поле $T(r,x,t)$ в жидкой и твердой фазе в неподвижной системе координат записывается следующим образом:

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\lambda_i\frac{\partial T}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(\lambda_i\frac{\partial T}{\partial z}\right)-\alpha_0(T-T_0)=C_i\left(\frac{\partial T}{\partial t}+v_0\frac{\partial T}{\partial z}\right) \quad (2)$$

$$t>0\ ;\ 0\le r\le R\ ;\ 0\le z\le \ell$$

$i=1$ относится к твердой фазе, $i=2$ – к жидкой фазе. На границе фазового перехода $z=\varphi(r,t)$ выполняется условие Стефана:

$$\gamma\rho\frac{\partial\varphi}{\partial t}=\lambda_1\frac{\partial T}{\partial n}\Big|_{z=\varphi(r,t)}-\lambda_2\frac{\partial T}{\partial n}\Big|_{z=\varphi(r,t)}, \quad (3)$$

$$T=T_{\text{пл}}.$$

На боковой поверхности слитка выполняется условие излучения по закону Стефана-Больцмана:

$$\lambda\frac{\partial T}{\partial r}\Big|_{r=R}=-\varepsilon\sigma_0\left(T^4-T_0^4\right). \quad (4)$$

Кроме того выполняются условия:

$$\frac{\partial T}{\partial r}\Big|_{r=0}=0, \quad (5)$$

$$\frac{\partial T}{\partial z}\Big|_{z=0}=\alpha_1(T-T_1),\ \frac{\partial T}{\partial z}\Big|_{z=\ell}=-\alpha_2(T-T_2), \quad (6)$$

$$T(r,z,0)=T_H(r,z). \quad (7)$$

λ_1,λ_2 – коэффициенты теплопроводности жидкой и твердой фаз соответственно,

C_i – объемная теплоемкость,

ρ – плотность,

$T_{\text{пл}}$ – температура плавления,

γ – удельная скрытая теплота фазового перехода,

$T_i,\ i=0,1,2$ – температура окружающей среды,

T_H – начальная температура,

ε – степень черноты, σ_0 – постоянная Стефана-Больцмана.

Аналогично /I/ вводим осредненную функцию

$$T^{\delta}=\frac{1}{\delta^2}\int\limits_{x-\frac{1}{2}\delta}^{x+\frac{1}{2}\delta}\int\limits_{z-\frac{1}{2}\delta}^{z+\frac{1}{2}\delta} s\,T(s,\xi,t)\,ds\,d\xi \tag{8}$$

и получаем осредненное уравнение

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\lambda(\eta^{\delta})\frac{\partial T^{\delta}}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(\lambda(\eta^{\delta})\frac{\partial T^{\delta}}{\partial z}\right)-\alpha_0(T^{\delta}-T_0)=$$

$$=c(\eta^{\delta})\left(\frac{\partial T^{\delta}}{\partial t}+v_0\frac{\partial T^{\delta}}{\partial z}\right)-\gamma\rho(\eta^{\delta})\frac{\partial\eta^{\delta}}{\partial t}. \tag{9}$$

Условия (4)-(7) остаются без изменений.
Здесь

$$\begin{aligned}\lambda(\eta^{\delta})&=\lambda_1\eta^{\delta}+\lambda_2(1-\eta^{\delta}),\\ c(\eta^{\delta})&=c_1\eta^{\delta}+c_2(1-\eta^{\delta}),\\ \rho(\eta^{\delta})&=\rho_1\eta^{\delta}+\rho_2(1-\eta^{\delta}).\end{aligned} \tag{10}$$

Средние значения коэффициентов теплопроводности, объемной теплоемкости и плотности.

Функция η^{δ} остается неопределенной. Ясно, что доля твердой фазы $\eta^{\delta}=1$ – в твердой фазе, $\eta^{\delta}=0$ – в жидкой фазе, однако в δ – окрестности границы раздела фаз она меняется от 0 до I. Полагаем, что в этой окрестности η^{δ} меняется по закону

$$\frac{\partial\eta^{\delta}}{\partial t}=\beta\,\Delta T^{\delta},\qquad \Delta T^{\delta}=T_n-T^{\delta} \tag{11}$$

Вне δ – окрестности границы раздела фаз $\frac{\partial\eta^{\delta}}{\partial t}=0$.
Можно показать, что при $\delta\to 0$ решение осредненной задачи (9)-(II) стремится к решению задачи (2)-(7) в классической постановке.

2. Алгоритм численного решения

Для задачи (9),(II),(4)-(7) осуществляем конечно-разностную аппроксимацию. Для удобства выкладок мы в дальнейшем в (9) и (II) индекс δ опускаем. Вводим неравномерную сетку в пространстве

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

и дифференциальные уравнения (9), (II) заменяем разностными. В направлении t выбираем равномерный шаг τ, $t = t_0 + k\tau$. Тогда разностное уравнение записывается в виде

$$\frac{c_{ij}}{\lambda_{ij}} \cdot \frac{u_{ij}^{k+1} - u_{ij}^{k}}{\tau} = \frac{u_{i+1j}^{k+1} - 2u_{ij}^{k+1} + u_{i-1j}^{k+1}}{h_i \cdot h_{i+1}} +$$

$$+ \frac{u_{ij+1}^{k+1} - 2u_{ij}^{k+1} + u_{ij-1}^{k+1}}{g_j \cdot g_{j+1}} + \frac{1}{r_j} \cdot \frac{u_{ij+1}^{k+1} - u_{ij-1}^{k+1}}{g_j + g_{j+1}} -$$

$$- \frac{c_{ij} v_0}{\lambda_{ij}} \cdot \frac{u_{i+1j}^{k+1} - u_{i-1j}^{k+1}}{h_i + h_{i+1}} - \alpha_0 (u_{ij}^{k+1} - T_0) +$$

$$+ \frac{\gamma \rho_{ij}}{\lambda_{ij}} \beta \, \Delta u_{ij}^{k+1} \cdot \theta(\Delta u_{ij}^{k}) \cdot \theta(1 - \eta_{ij}^{k}) \cdot \theta_1(\eta_{i\pm1, j\pm1}^{k} - 1), \tag{I2}$$

$$c_{ij} = c_1 \eta_{ij}^{k} + c_2 (1 - \eta_{ij}^{k}),$$
$$\lambda_{ij} = \lambda_1 \eta_{ij}^{k} + \lambda_2 (1 - \eta_{ij}^{k}),$$
$$\rho_{ij} = \rho_1 \eta_{ij}^{k} + \rho_2 (1 - \eta_{ij}^{k}),$$

$$\frac{\eta_{ij}^{k+1} - \eta_{ij}^{k}}{\tau} = \beta \, \Delta u_{ij}^{k+1} \, \theta(\Delta u_{ij}^{k+1}) \cdot \theta(1 - \eta_{ij}^{k}) \cdot \theta_1(\eta_{i\pm1, j\pm1}^{k} - 1), \tag{I3}$$

где $\Delta u_{ij} = u_n - u_{ij}$.

$$\theta(s) = \begin{cases} 0, & s \le 0 \\ 1, & s > 0, \end{cases} \qquad \theta_1(s) = \begin{cases} 0, & s < 0 \\ 1, & s \ge 0. \end{cases} \tag{I4}$$

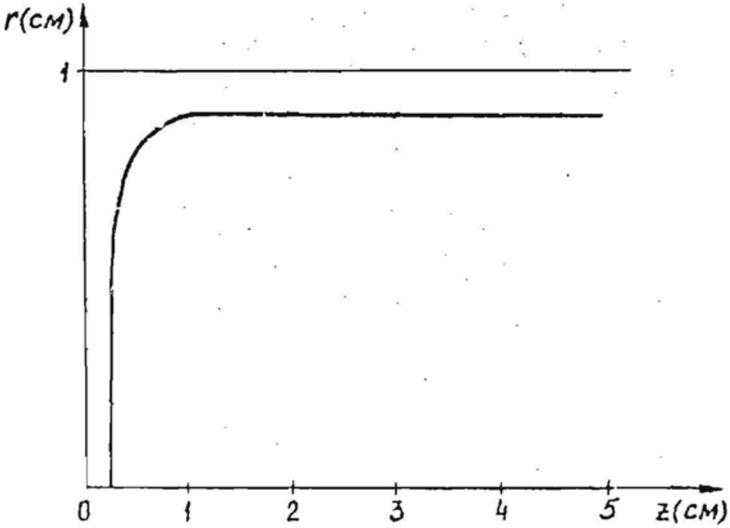

Рис.I. Граница раздела фаз, β =0.5

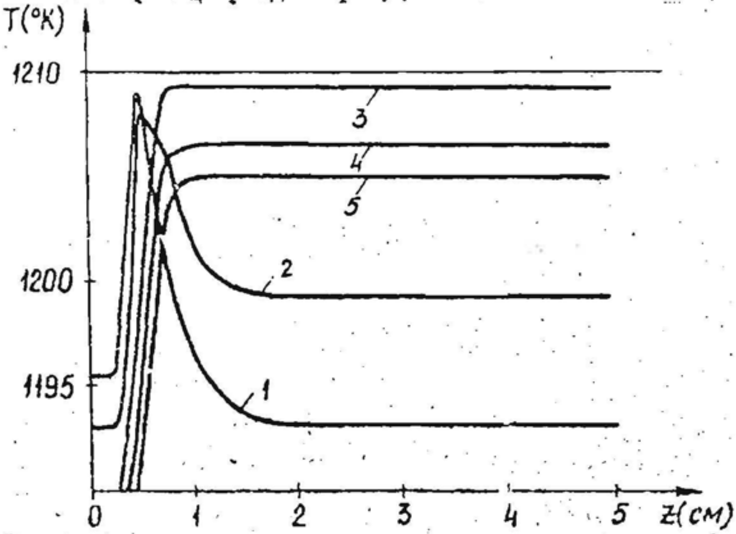

Рис.2. Осевое распределение температуры. I – τ =0.0, 2 – τ =0.5, 3 – τ =0.8, 4 – τ =0.9, 5 – τ =I.

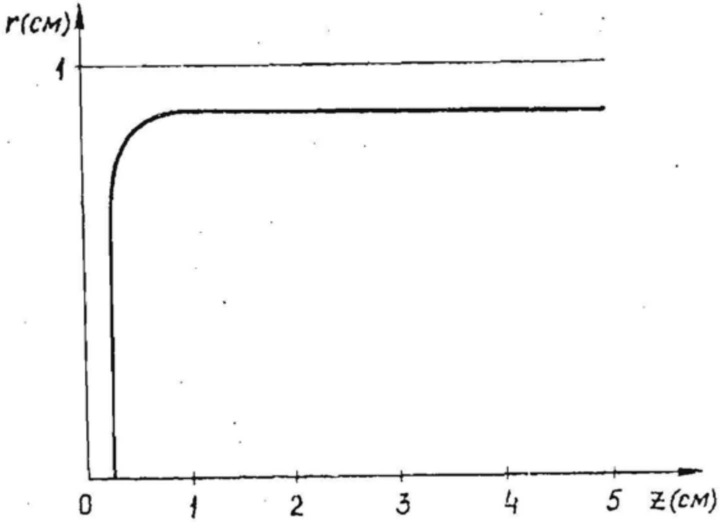

Рис.3. Граница раздела фаз, β =0.5

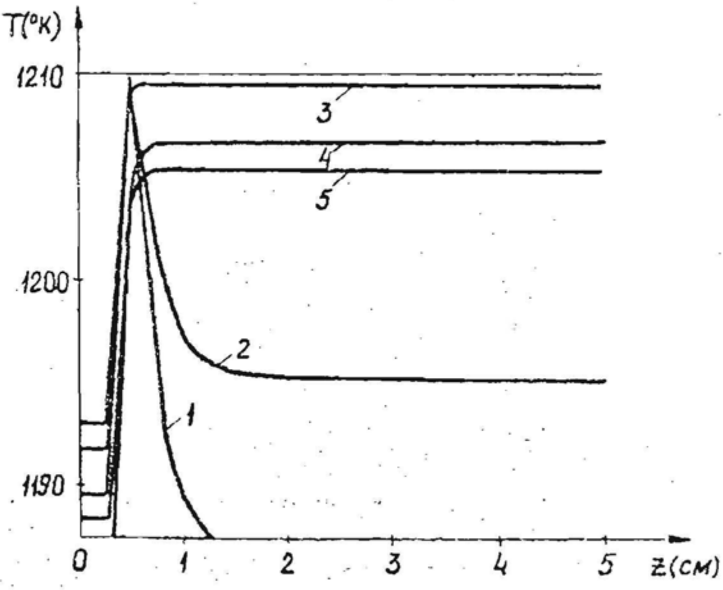

Рис.4. Осевое распределение температуры I - τ=0.0, 2 - τ=0.5, 3 - τ=0.8, 4 - τ=0.9, 5 - τ=I.

Для расчетов применялись итерационные методы. Использовались полуявный метод аппроксимационной поправки Яненко /2/ и эффективный метод неполного LU - разложения сопряженных градиентов /3,4/. Применение метода разложения по функциям Халецкого ускоряет процесс счета квазистационарной задачи, так как дает возможность увеличить шаг по времени до 20 раз.

3. Результаты расчетов

На рис.1,2 представлено решение задачи полуявным методом аппроксимационной поправки Яненко. Видим, что переохлаждение появляется во всем объеме расплава, однако рост происходит устойчиво несмотря на наличие бокового дендрита. На рис. 3,4 представлены аналогичные результаты, полученные из расчетов по методу неполного LU -разложения. Из представленных результатов видим, что происходит устойчивый рост кристалла, несмотря на сложную форму границы раздела фаз.

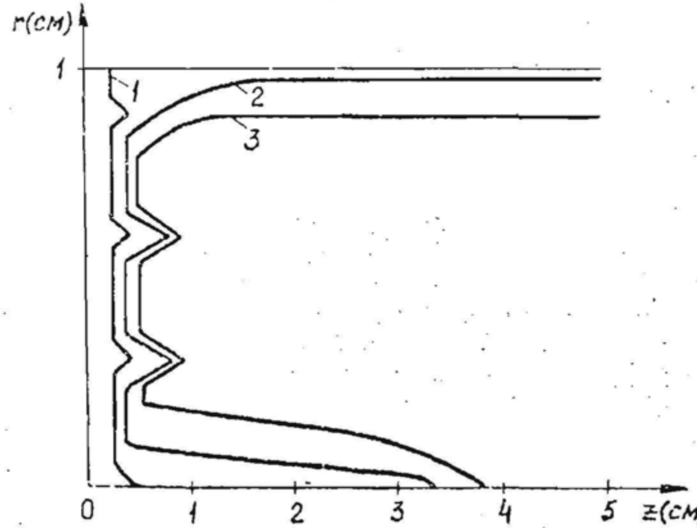

Рис.5. Граница раздела фаз. I - t=0, 2 - t=I, 3 - t=I,2

Сравнивая рисунки I,2 с рисунками 3,4 видим, что результаты, полученные двумя разными методами, качественно не отличаются, а количественное отличие не превышает I%. На рис.5 представлены результаты расчетов, когда на границе раздела фаз в начальный момент заданы возмущения фронта кристаллизации. Как видим, и в этом случае происходит устойчивый рост кристалла, причем начальные возмущения сохраняют свою форму в процессе роста.

Задача численно решалась при следующих значениях физических констант:
объемная теплоемкость $c = c^{\circ}\rho$, где c° - удельная теплоемкость,

λ_1 =0,173 вт/(см град), λ_2 =0,412 вт/(см град),
$c_1^{\circ} = c_2^{\circ}$ =0,34 вт с/(г град), $\rho_1 = \rho_2$ =5,6 г/см^3,
T_k =1210°K, ε_1 =0,6, ε_2 =0,18, v_0 =0,02 см/с,
σ_0 =5,67 10^{-12}вт/(см^2 град), ℓ =5 см, R =I см,
$\alpha_1 = \alpha_2$ =0, α_0 =I, T_0 =1100°K.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Авдонин Н.А. Математическое описание процессов кристаллизации. Рига: Зинатне, 1980. 175 с.
2. Яненко Н.Н. Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики. Новосибирск, 1967. 88 с.
3. Гончаров А.Л. Реализация метода неполной LU -декомпозиции сопряженных градиентов для решения сеточных уравнений на различных шаблонах. Препринт ИПМ им. М.В.Келдыша АН СССР. М. 1984, № 174.
4. Kershaw D.S. The Incomplete Cholesky-Conjugate Gradient Method for the Iterative solution of system of linear equations. J. of Comput. Phys. 1978. V.26. P.43-65.

Сборник научных трудов
ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ
Рига: ЛГУ им.П.Стучки,1989

УДК 536.421.1+536.24

М.Л.Гулбе,Н.А.Авдонин
ВЦ при ЛГУ им.П.Стучки,
Рига

ИССЛЕДОВАНИЕ УСТОЙЧИВОСТИ ФРОНТА КРИСТАЛЛИЗАЦИИ НА ОСРЕДНЕННОЙ РАСЧЕТНОЙ МОДЕЛИ ТЕПЛОПЕРЕНОСА В ДВУХФАЗНОЙ СРЕДЕ

В настоящей работе исследуется устойчивость роста кристалла на численной модели задачи о фазовом переходе (задачи Стефана). В работе /I/ разработан метод решения задачи кристаллизации в обобщенной постановке не допускающей переохлаждения. Было доказано существование устойчивого решения задачи во всем диапазоне параметров. Решение определяло двухфазную зону в случае возникновения дендритного роста.

Однако, в классической постановке задачи, если допустить существование гладкого фронта кристаллизации (поверхности фазового перехода) возможно возникновение переохлаждения в жидкой фазе и как следствие - потеря устойчивости плоского фронта.

I. Прежде чем перейти к построению численного метода проведем локальное осреднение уравнений задачи кристаллизации в классической постановке.

Задачу кристаллизации описывает уравнение теплопереноса в двухфазной среде

$$c\frac{\partial u}{\partial t} = div(\lambda\, grad\, u) + f \qquad (I)$$

и условия на границе раздела фаз

$$[\lambda\, grad\, u]_{S_t} \cdot \vec{n} = \gamma v_n(t); \quad u(x,t) = u_n . \qquad (2)$$

Здесь c – удельная теплоемкость; γ – удельная скрытая теплота фазового перехода; u_n – температура фазового перехода; λ – коэффициент теплопроводности, терпящий разрыв при переходе из твердой в жидкую фазу; вводя функцию η, равную I в твердой фазе и 0 в жидкой, можем записать $\lambda(\eta)=\lambda_1\eta+\lambda_2(1-\eta)$. $[\Phi]_{S_t}$ – обозначает скачок величины Φ при переходе через границу S_t ; S_t – граница раздела фаз; $v_n(t)$ – скорость движения границы раздела фаз по направлению нормали $\vec{n}$, направленной в сторону жидкой фазы.

Для определения скорости $v_n(t)$ запишем известное кинетическое условие для нормального закона скорости роста /2/:

$$v_n(t)=\mathcal{K}\cdot\Delta u_{S_t}\ , \tag{3}$$

так что при $\mathcal{K}\to\infty$ $\Delta u_{S_t}\to 0$;

$\Delta u = u_n - u$ – переохлаждение.

Известно, что уравнения (I) и (2) можно записать в обобщенном виде в смысле теории распределений /3/:

$$c\,\frac{\partial u}{\partial t}=div(\lambda\, grad\, u)+\gamma v_n(t)\,\delta(S_t)+f\,, \tag{4}$$

где $\delta(S_t)$ – обобщенная функция Дирака, сосредоточенная на поверхности S_t. Численная реализация уравнения (4) вызывает большие трудности, т.к. требует выделения в явном виде неизвестной границы раздела фаз S_t и реализации δ-функции на ней. Введем локальное осреднение функций в произвольной точке x по локальному объему V_ρ :

$$\tilde{u}=\frac{1}{V_\rho}\int_{V_\rho} u(s,t)\,dv\ . \tag{5}$$

Если коэффициенты c, λ являются гладкими и непрерывными функциями по пространственным переменным, уравнение (4) можно осреднить непосредственно. Интегрируя (4) по указанному объему V_ρ, получаем:

$$\tilde{c}\,\frac{\partial\tilde{u}}{\partial t}=div(\tilde{\lambda}\, grad\,\tilde{u})+\gamma\tilde{v}_n(t)\,\frac{1}{V_\rho}\int_{V_\rho}\delta(S_t)\,dv+\tilde{f}\ . \tag{6}$$

По определению поверхностной δ -функции

$$\int_{V_\rho} \delta(s_t)\, dv = mes\ s_{t,\rho} \quad . \tag{7}$$

Кроме того, согласно (3), полагаем:

$$\tilde{v}_n(t) \approx \mathcal{K} \cdot \Delta \tilde{u} . \tag{8}$$

С учетом (7),(8) уравнение (6) можно записать в виде

$$\tilde{c}\, \frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} = div(\tilde{\lambda}\, grad\, \tilde{u}) + \gamma\beta\, \Delta\tilde{u} \cdot \theta_1(\rho - |x - x^*|) + \tilde{f} . \tag{9}$$

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

– единичные функции; x^* – точка на границе раздела фаз s_t ;

$$\beta = \frac{\mathcal{K} \cdot mes\ s_{t,\rho}}{V_\rho} \quad . \tag{10}$$

С другой стороны,

$$\frac{1}{V_\rho} \int_{V_\rho} \tilde{v}_n(t)\, \delta(s_t)\, dV = \frac{1}{V_\rho} \int_{S_{t\rho}} \tilde{v}_n(t)\, ds = \frac{\partial \tilde{\eta}^\rho}{\partial t} \ , \tag{11}$$

где $\tilde{\eta}^\rho$ – относительная доля твердой фазы в объеме V_ρ . Таким образом, осредненное уравнение (6) можно записать в виде

$$\tilde{c}\, \frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} = div(\tilde{\lambda}\, grad\, \tilde{u}) + \gamma\, \frac{\partial \tilde{\eta}^{\rho,\beta}}{\partial t} + \tilde{f} \ , \tag{12}$$

причем

$$\frac{\partial \tilde{\eta}^{\rho,\beta}}{\partial t} = \beta \cdot \Delta \tilde{u} \cdot \theta_1(\rho - |x - x^*|) . \tag{13}$$

Теперь к уравнению (12) можно применять разностные методы со сквозным счетом без выделения границы раздела фаз.

Покажем, что решение уравнения (12) $\tilde{u}^\beta$ сходится к решению исходной задачи при $\beta \to \infty$ в норме пространства $W_2^{1,0}(Q_T)$. Для этого получим соответствующую априорную оценку. Уравнение (12) умножим на $\tilde{u}^\beta$ и проинтегрируем по исходной области Q_T , приняв на границе области однородные условия первого рода. Тогда получим:

$$\frac{1}{2}\int\limits_{Q_T}\tilde{c}\,\frac{\partial(\tilde{u}^{\beta})^2}{\partial t}\,dvdt+\int\limits_{Q_T}\tilde{\lambda}\left(\frac{\partial\tilde{u}^{\beta}}{\partial x_i}\right)^2=\int\limits_{Q_T}\tilde{f}\cdot\tilde{u}^{\beta}dvdt-$$

$$-\gamma\beta\int\limits_{Q_T}(\tilde{u}^{\beta})^2\,\theta(\tilde{\eta}^{\rho,\beta})\theta(1-\tilde{\eta}^{\rho,\beta})\,dvdt\,. \tag{I4}$$

Используя неравенства Коши и Гронуола /4/, получим неравенство:

$$\frac{1}{2}\int\limits_{Q_T}(\tilde{u}^{\beta})^2dv\quad+\lambda_0\int\limits_{Q_T}\left(\frac{\partial\tilde{u}^{\beta}}{\partial x_i}\right)^2dvdt+\gamma\beta\int\limits_{Q_T}(\tilde{u}^{\beta})^2\theta(\tilde{\eta}^{\rho,\beta})\times$$

$$\times\theta(1-\tilde{\eta}^{\rho,\beta})dvdt\leq\frac{1}{2}\int\limits_{Q_T}(\tilde{u}^{\beta})^2\Big|_{t=0}dv+M_1\int\limits_{Q_T}\tilde{f}^2\,dvdt\,. \tag{I5}$$

Получаем оценку, равномерную по β в пространстве $W_2^{1,0}(Q_T)$ Указанная оценка позволяет перейти к пределу при $\beta\to\infty$ в интегральном тождестве, соответствующем уравнению (I2):

$$\int\limits_{Q_T}\Big[-\tilde{c}\tilde{u}^{\beta}\frac{\partial\psi}{\partial t}+\tilde{\lambda}\frac{\partial\tilde{u}^{\beta}}{\partial x_i}\cdot\frac{\partial\psi}{\partial x_i}+\gamma\,\tilde{\eta}^{\rho,\beta}\theta(\tilde{\eta}^{\rho,\beta})\theta(1-\tilde{\eta}^{\rho,\beta})\frac{\partial\psi}{\partial t}-\psi\tilde{f}\Big]dvdt=0 \tag{I6}$$

Действительно, функции $\dfrac{\partial\tilde{u}^{\beta}}{\partial x_i}$ сходятся слабо, а осредненные функции $\tilde{\eta}^{\rho,\beta}$ и $\tilde{\lambda}=\lambda_1\tilde{\eta}^{\rho,\beta}+\lambda_2(1-\tilde{\eta}^{\rho,\beta})$ – сильно в классе $L_2(Q_T)$ при $\beta\to\infty$. В пределе получаем тождество, соответствующее осредненному уравнению (6).

Ниже, при построении разностной схемы будем исходить из осредненного уравнения (I2) и условия (I3).

2. Рассмотрим задачу с фазовым переходом в следующей постановке. Цилиндрический слиток радиуса R движется со скоростью v_0 вдоль муфеля печи с заданной температурой $u_{\gamma}(x)$. Тогда осредненное уравнение (I2) в цилиндрической неподвижной системе координат (x , r) запишется в виде (знак осреднения спускаем):

$$c\frac{\partial u}{\partial t}=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial u}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda\frac{\partial u}{\partial x}\right)+cv_0\frac{\partial u}{\partial x}-\alpha_0(u-u_0)+\gamma\frac{\partial\eta}{\partial t}\,. \tag{I7}$$

На боковой поверхности выполняется условие излучения по закону Стефана-Больцмана:

$$\lambda \frac{\partial u}{\partial r}\Big|_{r=R} = -\alpha_3 \varepsilon \sigma_0 (u^4 - u_{\phi}^4(x)) . \qquad (18)$$

На торцах слитка потребуем выполнения условий:

$$\frac{\partial u}{\partial x}\Big|_{x=0} = \alpha_1 (u-u_1); \quad \frac{\partial u}{\partial x}\Big|_{x=\ell} = -\alpha_2 (u-u_2); \qquad (19)$$

$$u(x,r,0) = u_н(x,r) . \qquad (20)$$

Вводим неравномерную сетку в пространстве

$$\omega_h = \{(x_i, r_j): 1 \le i \le N, 1 \le j \le M, x_{i+1} - x_i = h_i , \\ r_{j+1} - r = g_j , x_1 = r_1 = 0, x_N = \ell , r_M = R\} \qquad (21)$$

и дифференциальное уравнение (17) заменяем разностным. В направлении t берем равномерный шаг τ, $t = t_0 + k\tau$:

$$\frac{c}{\lambda} \frac{u_{ij}^{k+1} - u_{ij}^{k}}{\tau} = \frac{u_{i+1j}^{k+1} - 2u_{ij}^{k+1} + u_{i-1j}^{k+1}}{h_i \cdot h_{i+1}} + \frac{u_{ij+1}^{k+1} - 2u_{ij}^{k+1} + u_{ij-1}^{k+1}}{g_j \cdot g_{j+1}} +$$

$$+ \frac{1}{r_j} \frac{u_{ij+1}^{k+1} - u_{ij-1}^{k+1}}{g_j + g_{j+1}} - \frac{c v_0}{\lambda} \frac{u_{i+1j}^{k+1} - u_{i-1j}^{k+1}}{h_i + h_{i+1}} - \alpha_0 (u_{ij}^{k+1} - u_0) + \qquad (22)$$

$$+ \frac{f}{\lambda} \left(\frac{\partial \eta}{\partial t}\right)^{k+\frac{1}{2}} .$$

Так как мы рассматриваем задачу в классической постановке, то скрытая теплота выделяется только на фронте кристаллизации, точнее в ρ -окрестности фронта. Соответственно разностную аппроксимацию члена $\frac{\partial \eta}{\partial t}$ в уравнении (22) записываем в виде

$$\left(\frac{\partial \eta}{\partial t}\right)_{ij}^{k+\frac{1}{2}} = \beta \cdot \Delta u_{ij}^{k+1} \Big[\theta(\Delta u_{ij}^{k}) \cdot \theta(1-\eta_{ij}^{k}) \cdot \theta_1(\eta_{i\pm1\, j\pm1}^{k} - 1) + \qquad (23)$$

$$+ \theta(\eta_{ij}^{k}) \cdot \theta(-\Delta u_{ij}^{k})\Big]$$

и функцию η определяем из уравнения

$$\frac{\eta_{ij}^{k+1} - \eta_{ij}^{k}}{\tau} = \beta \cdot \Delta u_{ij}^{k+1} \Big[\theta(\Delta u_{ij}^{k+1}) \theta(1-\eta_{ij}^{k}) \theta_1(\eta_{i\pm1 j\pm1}^{k} - 1) + \theta(-\Delta u_{ij}^{k+1}) \theta(\eta_{ij}^{k})\Big], \qquad (24)$$

где $\eta \pm 1$ - значения функции $\eta(x,r,t)$ в точках, сдвинутых на шаг аппроксимации в любом направлении по пространству. Граничные условия (I3)-(20) аппроксимировались обычным образом. Для расчетов применялся эффективный итерационный метод неполного LU -разложения сопряженных градиентов /5,6/.

3. Проведем еще дополнительный анализ устойчивости (по времени) в отдельной ячейке сетки. Для изучения вопроса об устойчивости границы раздела фаз во времени рассмотрим задачу кристаллизации отдельной ячейки (ρ - окрестности) границы раздела фаз, выделенной нами методом локального осреднения. Процесс кристаллизации этой ячейки начинается с некоторого переохлаждения Δu_0 . Полагая $\alpha_0 = 0$ и пренебрегая суммарным потоком на границе ячейки, процесс кристаллизации этой ячейки упрощенно можно описать как

$$c\frac{\partial u}{\partial t} = \gamma\frac{\partial \eta}{\partial t}, \qquad u\Big|_{t=0} = -\Delta u_0,$$
$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = \beta\cdot\Delta u, \qquad \eta\Big|_{t=0} = 0, \quad \Delta u = -u. \tag{25}$$

Прямым интегрированием получаем решение задачи (25) в виде

$$u = -\Delta u_0 e^{-\frac{\gamma}{c}\beta t}, \qquad \eta = \frac{c}{\gamma}\Delta u_0 (1 - e^{-\frac{\gamma}{c}\beta t}). \tag{26}$$

Из аналитического выражения (26) видим, что как температура $u(t)$, так и доля твердой фазы $\eta(t)$ во времени меняются монотонно. Соотношение параметров γ , c , β влияет только на скорость убывания температуры и роста функции η , но никак не влияет на монотонный характер их изменений, и тем самым на устойчивость движения границы раздела фаз во времени.

Доказанная только что устойчивость решения во времени приводит нас к ограничениям при выборе численного метода. Если использовать явную итерационную схему, то заведомо при $\frac{\gamma}{c}\beta\tau > 1$ получаем неустойчивое решение, т.е. выбор явной схемы требует ограничения шага τ . В то же время при выборе неявной схемы

$$\frac{u^{k+1}-u^k}{\tau} = -\frac{\gamma}{c}\beta u^{k+1}, \quad u^{k+1} = \frac{-\Delta u_0}{(1+\frac{\gamma}{c}\beta\tau)^{k+1}} \qquad (27)$$

видим, что решение устойчиво при любом τ.

4. В начале приведем результаты решения задачи о кристаллизации слитка, охлаждаемого с поверхности и имеющего внутренние объемные источники, т.е. $\alpha_3 = 1$ и $\alpha_0 \neq 0$. Также проводились расчеты и случая, когда на границе раздела фаз задаются конечные начальные возмущения. На рис.I представлена форма границы раздела фаз. Видим, что начальные возмущения сохраняют форму в процессе роста, но рост во всех случаях происходит устойчиво даже при $\beta \to \infty$. Далее рассмотрим результаты решения задачи с заданным начальным переохлаждением, $\alpha_0 = 0$, $u_H = -\Delta u_0$, и заданными начальными конечными возмущениями границы раздела фаз.

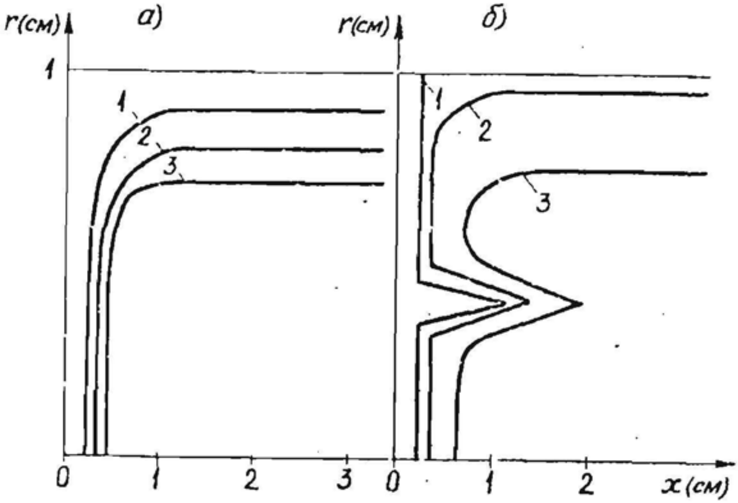

Рис.I. Граница раздела фаз решения задачи кристаллизации с внутренними источниками тепла
а) I - β=0.5, 2 - β=100, 3 - β = I000.
б) случай с начальными возмущениями, β =I000,
I- t=0, 2- t=I, 3- t=2.

На рис.2 представлено решение задачи без охлаждения боковой поверхности, $\alpha_3=0$, а на рис.3 - с охлаждением, $\alpha_3=1$. Из представленных результатов видим, что в этом случае начинается дендритный рост кристалла. В случае без охлаждения с боковой поверхности сильно разрастается внутренний дендрит, образовавшийся от начального возмущения. При охлаждении слитка с боковой поверхности активнее разрастается боковой дендрит, рост которого опережает и тормозит рост внутреннего дендрита. Отметим, что во всех указанных случаях численное решение отражает процесс устойчивого роста дендритов. Следует еще отметить устойчивость при любом τ неявной итерационной схемы (22), подтверждающей теоретический вывод (27).

Задача численно решалась при следующих значениях теплофизических констант:

$\lambda_1=0{,}173$ вт/(см.град), $\lambda_2=0{,}412$ вт/(см град),
$C_1=C_2=0{,}34$ вт $\cdot$ с/(г $\cdot$ град), $\rho_1=\rho_2=5{,}6$ г/см^3
$\varepsilon_1=0{,}6$, $\varepsilon_2=0{,}18$, $v_0=0{,}02$ см/с, $\ell=5$ см, $R=1$ см,
$\sigma_0=5{,}67\ 10^{-12}$ вт/(см$^2\cdot$ град), $\alpha_1=\alpha_2=0$, $u_0=-110^0$К,

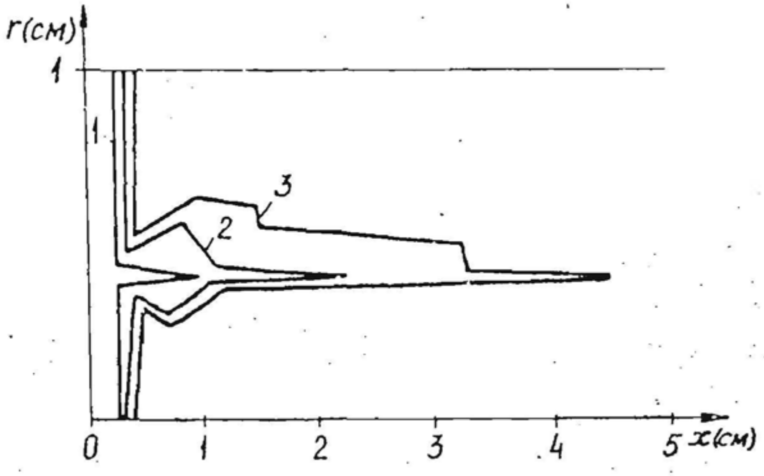

Рис.2 Граница раздела фаз случая с начальным переохлаждением без бокового охлаждения, $\beta=1000$, 1 - $t=0$, 2- $t=0.05$, 3- $t=0{,}15$

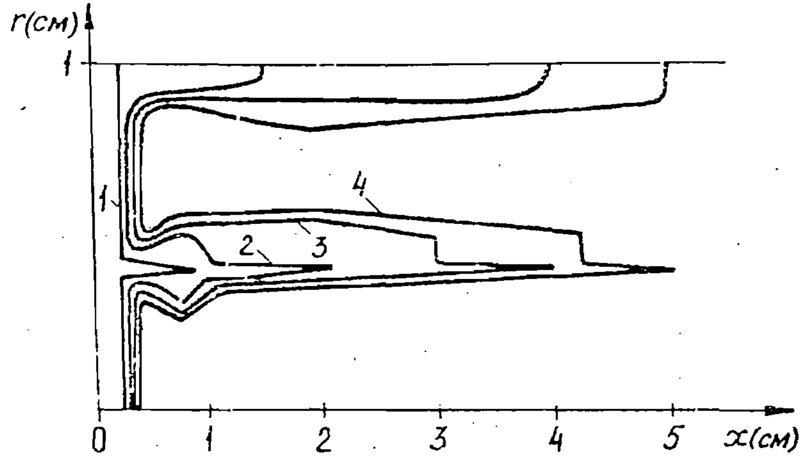

Рис.3. Граница раздела фаз случая с начальным переохлаждением и с боковым охлаждением, β = 1000, I- t=0, 2-t=0,05, 3-t=0,15, 4-t=0,25

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Авдонин Н.А. Математическое описание процессов кристаллизации.-Рига:Зинатне, 1980.- 175 с.
2. Борисов В.Т., Матвеев Ю.Е. Кристаллизация тонких слоев переохлажденного галлия //Кристаллография.-1969.-Т.15. - Вып.5.-С.895-899.
3. Владимиров В.С. Уравнения математической физики. - М.: Наука, 1971.- 512 с.
4. Ладыженская О.А., Солонников В.А., Уральцева Н.Н. Линейные и квазилинейные уравнения параболического типа. - М.:Наука, 1967. - 736 с.
5. 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-[illegible]
6. Гончаров А.Л. Реализация метода неполной LU-композиции сопряженных градиентов для решения сеточных уравнений на различных шаблонах // Препринт ИПМ им.М.В.Келдыша АН СССР - М. - 1984. № 174.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, вып.I
Рига: Латвийский университет, 1990

УДК 536.421.1+536.74

Н.А.АВДОНИН, М.Л.ГУЛБЕ
ИМИ ЛУ, Рига

МЕТОД ЛОКАЛЬНОГО ОСРЕДНЕНИЯ ПРИ ЧИСЛЕННОМ РЕШЕНИИ ЗАДАЧИ РОСТА КРИСТАЛЛА ИЗ БИНАРНОГО РАСПЛАВА

В работе /I/ разработан метод решения задачи кристаллизации бинарного расплава в обобщенной постановке, не допускающей переохлаждения. Было доказано существование устойчивого решения термодиффузионной задачи во всем диапазоне параметров. Это решение определяло двухфазную зону в случае возникновения дендритного роста. Однако в классической постановке задачи, если допустить существование гладкого фронта кристаллизации (поверхности фазового перехода), возможно возникновение переохлаждения в жидкой фазе и подход, использованный в /I/, введения обобщенного решения не пригоден.

Для численного решения задачи кристаллизации в классической постановке применим метод локального осреднения.

I. Задачу кристаллизации бинарного расплава описывают уравнение теплопереноса

$$\mathcal{L}\,\frac{\partial u}{\partial t} = \operatorname{div}(\lambda \operatorname{grad} u) + f\,, \qquad (1)$$

уравнение диффузии примеси

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \operatorname{div}(\mathcal{D} \operatorname{grad} C) \qquad (2)$$

и условия на границе раздела фаз :

$$[\lambda \operatorname{grad} u \cdot \vec{n}]_S = \gamma\, v_n(t)\,[\eta]_n\,, \qquad (3)$$

$$[\mathcal{D} \operatorname{grad} C \cdot \vec{n}]_S = (1-m)\,C\, v_n(t)\,[\eta]_n\,, \qquad (4)$$

$$\Delta u = u_e - u = -u - \alpha C = 0 \tag{5}$$

Здесь $\mathcal{L}$ – удельная теплоемкость, γ – удельная скрытая теплота плавления, λ – коэффициент теплопроводности, $\mathcal{D}$ – коэффициент диффузии соответствующей фазы; $[\Phi]_S$ – скачок величины Φ при переходе через поверхность S ; $\vec{n}$ – вектор нормали, направленный в сторону жидкой фазы, v_n – скорость движения границы раздела фаз в направлении нормали $\vec{n}$, Δu – переохлаждение, определяемое согласно диаграмме фазового состояния бинарной системы.

Запишем уравнения (I),(2) и условия (3),(4) в обобщенном виде в смысле теории распределений, /2/:

$$\mathcal{L}\frac{\partial u}{\partial t} = div\left(\lambda(s)\, grad\, u + \gamma v_n(t)\eta(s)\cdot\vec{n}\right) + f \tag{6}$$

$$\left(1-(1-m)\eta(s)\right)\frac{\partial C}{\partial t} = div\left(\mathcal{D}(s)\, grad\, C + \right.$$

$$\left. + (1-m)v_n(t)C\,\eta(s)\cdot\vec{n}\right), \tag{7}$$

здесь $\eta(s)$ – единичная функция, имеющая скачок на линии S .

$$\lambda(s) = \lambda_1\eta + \lambda_2(1-\eta)\,;\; \mathcal{D}(s) = \mathcal{D}_1 m\,\eta + \mathcal{D}_2(1-\eta) \tag{7'}$$

Проведем осреднение основных соотношений (6),(7) по локальным объемам V_ρ . Применяя операцию осреднения к уравнениям (6),(7) и учитывая, что функции u и C непрерывны на S , получим:

$$\mathcal{L}\frac{\partial u^\rho}{\partial t} = div(\vec{Q}_1^\rho) + \tilde{f}^\rho \tag{8}$$

$$\left(1-(1-m)\eta^\rho\right)\frac{\partial C^\rho}{\partial t} = div(\vec{Q}_2^\rho). \tag{9}$$

Здесь введены обозначения потоков тепла $\vec{Q}_1$ и массы $\vec{Q}_2$:

$$\vec{Q}_1 = \lambda(s)\,\mathrm{grad}\,u + \gamma v_n(t)\eta(s)\cdot\vec{n} \tag{I0}$$

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

Индекс ρ означает среднюю величину по объему V_ρ. Остается найти $\vec{Q}_1^\rho$, $\vec{Q}_2^\rho$. Прежде чем осреднить уравнения (I0),(II), перейдем к локальной системе координат (n, τ), оси которой направлены по нормали и по касательной к гиперповерхности S. Записав соотношение (I0),(II) в этой системе координат, увидим, что компоненты Q_{1n}, Q_{2n} векторов $\vec{Q}_1$, $\vec{Q}_2$ непрерывны согласно условиям (3),(4), а в направлении τ непрерывны $\mathrm{grad}_\tau u$ и $\mathrm{grad}_\tau C$, так как на линии S непрерывны сами функции u и C. Тогда записав соотношения (I0),(II) по компонентам в виде:

$$\frac{1}{\lambda(s)}Q_{1n} = \mathrm{grad}_n u + \gamma v_n(t)\eta(s)\frac{1}{\lambda(s)} \tag{I2}$$

$$\frac{1}{\mathcal{D}(s)}Q_{2n} = \mathrm{grad}_n C + (1-m)v_n(t)C(s)\eta(s)\frac{1}{\mathcal{D}(s)} \tag{I3}$$

$$Q_{1\tau} = \lambda(s)\,\mathrm{grad}_\tau u \tag{I4}$$

$$Q_{2\tau} = \mathcal{D}(s)\,\mathrm{grad}_\tau C, \tag{I5}$$

можем непосредственно применить операцию осреднения к соотношениям (I2)-(I5). Учитывая выражения (7') для $\lambda(s)$, $\mathcal{D}(s)$, получим:

$$(\lambda^{-1})^\rho Q_{1n}^\rho = \mathrm{grad}_n u^\rho + \gamma v_n(t)\frac{\eta^\rho}{\lambda_1} \tag{I6}$$

$$(\mathcal{D}^{-1})^\rho Q_{2n}^\rho = \mathrm{grad}_n C^\rho + (1-m)C^\rho v_n(t)\frac{\eta^\rho}{\mathcal{D}_1 m} \tag{I7}$$

$$Q_{1\tau}^\rho = \lambda^\rho\,\mathrm{grad}_\tau u^\rho \tag{I8}$$

$$Q_{2\tau}^\rho = \mathcal{D}^\rho\,\mathrm{grad}_\tau C^\rho \tag{I9}$$

причем

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

$$\lambda^{\rho}=\lambda_1\eta^{\rho}+\lambda_2(1-\eta^{\rho});\;\mathcal{D}^{\rho}=\mathcal{D}_1 m\eta^{\rho}+\mathcal{D}_2(1-\eta^{\rho}) \tag{20}$$

Подставляя в уравнения (8),(9) найденные из (I6)-(I9) значения потоков и возвращаясь к исходной системе координат, получим осредненные уравнения:

$$\mathcal{L}\frac{\partial u^{\rho}}{\partial t}=div(\hat{\lambda}^{\rho}\,grad\,u^{\rho})+f^{\rho}+\gamma v_n(t)\delta^{\rho}(s) \tag{2I}$$

$$(1-(1-m)\eta^{\rho})\frac{\partial C^{\rho}}{\partial t}=div(\hat{\mathcal{D}}^{\rho}\,grad\,C^{\rho})+(1-m)C^{\rho}v_n(t)\delta^{\rho}(s), \tag{22}$$

где $\hat{\lambda}^{\rho}$, $\hat{\mathcal{D}}^{\rho}$ – матрицы осредненных коэффициентов с элементами, определяемыми по формулам преобразования тензоров:

$$\lambda^{\rho}_{ij}=\alpha_{in}\alpha_{jm}\tilde{\lambda}_{nm}\;;\;\mathcal{D}^{\rho}_{ij}=\alpha_{in}\alpha_{jm}\tilde{\mathcal{D}}_{nm} \tag{23}$$

$\alpha_{in}=\cos(x_i,x'_n)$, x_i – исходная система координат; x'_n – преобразованная система координат; $\tilde{\lambda}_{nm}$, $\tilde{\mathcal{D}}_{nm}$ – – коэффициенты теплопроводности и диффузии в преобразованной системе координат:

$$\begin{pmatrix}\tilde{\lambda}_{11} & \tilde{\lambda}_{12}\\ \tilde{\lambda}_{21} & \tilde{\lambda}_{22}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{1}{(\lambda^{-1})^{\rho}} & 0\\ 0 & \lambda^{\rho}\end{pmatrix};\begin{pmatrix}\tilde{\mathcal{D}}_{11} & \tilde{\mathcal{D}}_{12}\\ \tilde{\mathcal{D}}_{21} & \tilde{\mathcal{D}}_{22}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{1}{(\mathcal{D}^{-1})^{\rho}} & 0\\ 0 & \mathcal{D}^{\rho}\end{pmatrix} \tag{24}$$

Для определения скорости $v_n(t)$ запишем известное кинетическое условие для нормального закона скорости роста /3/:

$$v_n(t)=\mathcal{K}\,\Delta u^{\rho} \tag{25}$$

Преобразуем последние слагаемые в правой части уравнений (2I),(22).

$$\delta^{\rho}(s)=\frac{1}{v_{\rho}}\int_{v_{\rho}}\delta(s)\,dv=\frac{mes\,S_{\rho}}{v_{\rho}} \tag{26}$$

$mes\, S_\rho$ – мера части поверхности S, содержащейся в объеме v_ρ. Учитывая выражение (25) для $v_n(t)$, запишем

$$v_n(t)\,\delta^\rho(s) = \mathcal{K}\,\frac{mes\, S_\rho}{v_\rho}\,\Delta u^\rho = \beta \Delta u^\rho\, \theta(\rho - |x - x^*|), \tag{27}$$

$\theta(\xi)$ – единичная функция, x^* – точка на границе раздела фаз S.

С другой стороны

$$v_n(t)\,\delta^\rho(s) = \frac{1}{v_\rho}\int_{v_\rho} v_n(t)\,\delta(s)\,dV = \frac{1}{v_\rho}\int_{S_\rho} v_n(t)\,dS = \frac{\partial \eta^\rho}{\partial t} \tag{28}$$

Таким образом уравнения (21),(22) можем записать в виде:

$$\mathcal{L}\,\frac{\partial u^\rho}{\partial t} = div(\hat{\lambda}^\rho\, grad\, u^\rho) + f^\rho + \gamma\,\frac{\partial \eta^\rho}{\partial t} \tag{29}$$

$$(1-(1-m)\eta^\rho)\,\frac{\partial C^\rho}{\partial t} = div(\hat{D}^\rho\, grad\, C^\rho) + (1-m)C^\rho\,\frac{\partial \eta^\rho}{\partial t} \tag{30}$$

причем

$$\frac{\partial \eta^\rho}{\partial t} = \beta \Delta u^\rho\, \theta(\rho - |x - x^*|)\,\theta(\Delta u^\rho). \tag{31}$$

уравнения (29)-(31) представляют собой замкнутую задачу, удобную для численного решения. Можно применять разностные методы со сквозным счетом без выделения границы раздела фаз.

Покажем, что решение задачи (29)-(31) сходится к решению исходной задачи (6),(7),(5) при $\beta \to \infty$, $\rho \to 0$. Для этого получим соответствующие априорные оценки. Уравнение (29),(30) умножим на u^ρ, C^ρ соответственно и проинтегрируем по исходной области Q_T, приняв на границе области Γ однородные граничные условия первого рода. Используя неравенства Коши и Гронуола /4/, получим неравенство:

$$\int\limits_{Q_T}\left(\mathcal{L}(u^\rho)^2+(1-(1-m)\eta^\rho)(C^\rho)^2\right)d\vartheta dt+\int\limits_{Q_T}\left(\lambda^\rho_{ij}\frac{\partial u^\rho}{\partial x_i}\frac{\partial u^\rho}{\partial x_j}+\right.$$

$$\left.+\mathcal{D}^\rho_{ij}\frac{\partial C^\rho}{\partial x_i}\frac{\partial C^\rho}{\partial x_j}\right)dx\,dt-\beta\int\limits_{Q_{T,\rho}}\Delta u^\rho(\gamma u^\rho+(1-m)(C^\rho)^2)dx\,dt\leq 0{,}5\mathcal{L}\int\limits_{Q}(u^\rho)^2\Big|_{t=0}dx+$$

$$+0{,}5\int\limits_{Q}(C^\rho)^2\Big|_{t=0}dx+\mathcal{K}_1\int\limits_{Q_T}(f^\rho)^2dx\,dt \tag{32}$$

Здесь $Q_{T,\rho}$ – часть области Q_T, занятая ρ – окрестностью границы раздела фаз S, в которой $\Delta u^\rho>0$. В области, где $\Delta u^\rho>0$, $u^\rho<-\alpha C^\rho$ и последнее слагаемое в левой части (32) можно оценить следующим образом:

$$\mathcal{J}=-\beta\int\limits_{Q_{T,\rho}}\Delta u^\rho(\gamma u^\rho+(1-m)(C^\rho)^2)dx\,dt>\beta\int\limits_{Q_{T,\rho}}\Delta u^\rho(\gamma\alpha-$$

$$-(1-m)C^\rho)C^\rho dx\,dt\geqslant\beta\int\limits_{Q_{T,\rho}}\Delta u^\rho(\gamma\alpha-(1-m))C^\rho dx\,dt>0,$$

$$\text{если } \gamma\alpha>1-m$$

Таким образом, в (32) получена оценка функций u^ρ, C^ρ и их производных по x_i в норме $\mathcal{L}_2(Q_T)$ равномерная по β и ρ. Указанная оценка позволяет перейти к пределу в интегральных тождествах, соответствующих уравнениям (29), (30) при $\beta\to\infty$, $\rho\to 0$:

$$\int\limits_{Q_T}\left(-\mathcal{L}u^\rho\frac{\partial\psi}{\partial t}+\lambda^\rho_{ij}\frac{\partial u^\rho}{\partial x_i}\frac{\partial\psi}{\partial x_j}+\right.$$

$$\left.+\gamma\eta^\rho\theta(\eta^\rho)\theta(\Delta u^\rho)\frac{\partial\psi}{\partial t}-f^\rho\psi\right)dx\,dt=0 \tag{33}$$

$$\int\limits_{Q_T}\left(-(1-(1-m)\eta^\rho)C^\rho\frac{\partial\psi}{\partial t}+\mathcal{D}^\rho_{ij}\frac{\partial C^\rho}{\partial x_i}\frac{\partial\psi}{\partial x_j}+\right.$$

$$\left.+(1-m)C^\rho\eta^\rho\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)dx\,dt=0 \tag{34}$$

Действительно, функции $\dfrac{\partial u^\rho}{\partial x_i}$, $\dfrac{\partial C^\rho}{\partial x_i}$ сходятся слабо в $\mathcal{L}_2$, а осредненные функции η^ρ, λ^ρ_{ij}, $\mathcal{D}^\rho_{ij}$ сильно. В пределе получаем тождества, соответствующие уравнениям (6), (7), при этом $\Delta u^\rho\to 0$ на S. Таким образом, получили решение исходной задачи (6), (7), (5).

2. Приведем пример численного решения поставленной задачи на следующей модели. Рассмотрим модель процесса кристаллизации бинарного сплава для цилиндрического образца прямоугольной формы. В этом случае осредненные уравнения (29),(30) запишем в виде (индекс осреднения ρ опускаем):

$$\mathcal{L}\frac{\partial u}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x}\left(\tilde{\lambda}_{11}\frac{\partial u}{\partial x}\right)+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\tilde{\lambda}_{22}\frac{\partial u}{\partial r}\right)-$$

$$-\alpha_0(u-u_0)+\gamma\frac{\partial\eta}{\partial t} \tag{35}$$

$$\left(1-(1-m)\eta\right)\frac{\partial C}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x}\left(\tilde{D}_{11}\frac{\partial C}{\partial x}\right)+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\tilde{D}_{22}\frac{\partial C}{\partial r}\right)+$$

$$+(1-m)C\frac{\partial\eta}{\partial t} \tag{36}$$

На торцах слитка и боковой поверхности потребуем выполнения условий:

$$\tilde{\lambda}_{11}\frac{\partial u}{\partial x}\Big|_{x=0}=\alpha_1(u-u_1);\quad \tilde{\lambda}_{11}\frac{\partial u}{\partial x}\Big|_{x=\ell}=-\alpha_2(u-u_2) \tag{37}$$

$$\tilde{\lambda}_{22}\frac{\partial u}{\partial r}\Big|_{r=R}=-\alpha_3\varepsilon\sigma_0\left(u^4-u_6^4(x)\right);\quad \frac{\partial u}{\partial r}\Big|_{r=0}=0 \tag{38}$$

$$\frac{\partial C}{\partial r}\Big|_{r=0}=\frac{\partial C}{\partial r}\Big|_{r=R}=0;\quad \frac{\partial C}{\partial x}\Big|_{x=0}=\frac{\partial C}{\partial x}\Big|_{x=\ell}=0 \tag{39}$$

$$u(x,r,0)=u_H(x,r);\quad C(x,r,0)=C_H \tag{40}$$

Уравнения (35),(36) аппроксимировались обычной консервативной разностной схемой на неравномерной сетке. Так как мы рассматриваем задачу в классической постановке, то скрытая теплота выделяется только на границе раздела фаз, а точнее в ρ - окрестности этой границы. Тогда разностную аппроксимацию членов, содержащих $\frac{\partial \eta}{\partial t}$ в уравнениях (35),(36) следует записать в таком виде:

$$\left(\frac{\partial \eta}{\partial t}\right)_{ij}^{k+\sigma} = \beta \Delta u_{ij}^{k+\sigma}\left(\theta(\Delta u_{ij}^{k+\sigma-1/2})\theta(1-\eta_{ij}^{k})\theta_1(\eta_{i\pm1 j\pm1}^{k}-1)+\right.$$
$$\left.+\theta(-\Delta u_{ij}^{k+\sigma-1/2})\theta(\eta_{ij}^{k})\right), \tag{41}$$

где $\sigma = 1/2$ для уравнения (35) и $\sigma = 1$ для уравнения (36).

$$\Delta u_{ij}^{k+1/2} = u_n - u_{ij}^{k+1} - \alpha C_{ij}^{k}, \quad \Delta u_{ij}^{k+1} = u_n - u_{ij}^{k+1} - \alpha C_{ij}^{k+1}.$$

Сама функция η определяется согласно уравнению (31) в следующей аппроксимации:

$$\eta_{ij}^{k+1} - \eta_{ij}^{k} = \tau \beta \Delta u_{ij}^{k+1}\left(\theta(\Delta u_{ij}^{k+1})\theta(1-\eta_{ij}^{k})\theta_1(\eta_{i\pm1 j\pm1}^{k}-1)+\right.$$
$$\left.+\theta(-\Delta u_{ij}^{k+1})\theta(\eta_{ij}^{k})\right). \tag{42}$$

При расчетах применяется эффективный итерационный метод неполного LU-разложения сопряженных градиентов /5/.

3. Численно решалась задача о кристаллизации слитка, охлаждаемого с поверхности имеющего внутренние объемные источники, т.е. $\alpha_3 = 1$ и $\alpha_0 \neq 0$. Результаты показали, что в этом случае происходит устойчивый рост кристалла с гладкой границей раздела фаз. Также проводились расчеты и случаев, когда на границе раздела фаз или объеме расплава задаются конечные начальные возмущения. В этих случаях предполагалось $\alpha_0 = \alpha_3 = 0$. На рис.1 показана динамика роста от подложки, т.е. случай, когда начальные конечные возмущения задаются на границе раздела фаз. На рис.2 отражена динамика роста кристалла от затравки, т.е. случая, когда начальное конечное возмущение задается в объеме расплава. Видим, что во всех случаях происходит устойчивый рост кристалла. Задача численно

решалась при следующих значениях физических констант: $\lambda_1 = 0{,}173$ вм/(см град), $\lambda_2 = 0{,}412$ вт/(см град), $\mathcal{L} = 0{,}34$ вт с/(см град), $u_л = 1210^0$K, $\varepsilon_1 = 0{,}6$, $\varepsilon_2 = 0{,}18$, $\sigma_0 = 5{,}67\ 10^{-12}$ вт/(см^2 град), $u_0 = 1100^0$K, $\mathcal{D}_1 = 2\ 10^{-11}$ см^2/с, $\mathcal{D}_2 = 10^{-5}$ см^2/с, $\gamma = 430$ дж/г, $\ell = 2$ см, $R = 1$ см.

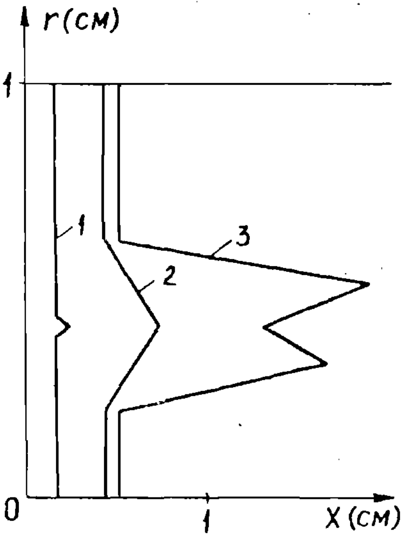

Рис.1. Динамика роста дендрита от подложки; 1 – $t = 0$ с; 2 – $t = 0{,}005$ с; 3 – $t = 0{,}01$ с

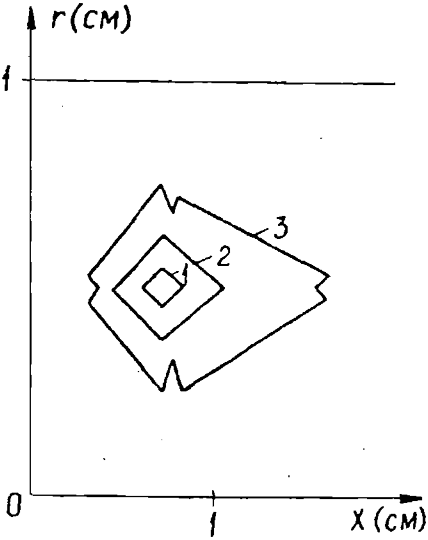

Рис.2. Динамика роста кристалла от затравки; 1 – $t = 0$ с; 2 – $t = 0{,}005$ с; 3 – $t = 0{,}01$ с.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Авдонин Н.А. Математическое описание процессов кристаллизации. - Рига: Зинатне, 1980. - 175 с.
2. Владимиров В.С. Уравнения математической физики. - М.: Наука, 1971. - 512 с.
3. Борисов В.Т., Матвеев Ю.Е. Кристаллизация тонких слоев переохлажденного галлия// Кристаллография. - 1969. - Т. 15. - Вып. 5. - С. 895-899.

4. Ладыженская О.А., Солонников В.А., Уральцева Н.Н. Линейные и квазилинейные уравнения параболического типа. - М.: Наука, 1967. - 736 с.

5. David S.Kersaw. The incomplete Cholesky-conjugate gradient method for the iterative solution of system of linear equations// J. of Comput. Phys. - 1978. - V. 26. - P. 43-65.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ПРИКЛАДНЫЕ ЗАДАЧИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ. Вып. 2
Рига: Латвийский университет, 1991

УДК 536.421.1+536.74

Н.А.АВДОНИН, М.Л.ГУЛБЕ
ИМИ ЛУ, , Рига
В.Н.ГОТИН, В.В.[illegible]
НИИ ЧЕРМЕТ, Москва

АНАЛИЗ ДВУХФАЗНОЙ ЗОНЫ В СЛИТКЕ В ПРОЦЕССЕ ЭЛЕКТРОШЛАКОВОГО ПЕРЕПЛАВА МЕТАЛЛА

Процесс электрошлакового переплава металла достаточно сложен (см. рис. 1), и при его математическом моделировании необходимо учитывать многие факторы – прохождение токов через шлаковую ванну, оплавление электрода, падение перегретых капель в ванну металла, дендритную кристаллизацию металла с образованием двухфазной зоны, гидродинамику в шлаковой ванне и жидкой зоне металла. Математическому моделированию электрошлакового переплава посвящен ряд работ, из которых отметим наиболее существенные, см. /1/-/3/. В работе /1/ ставится задача в полной неометрии, однако не учитывается гидродинамика в расплаве и шлаке и динамика образования двухфазной зоны. Фронт кристаллизации в наплавляемом слитке находится как изотерма ликвидуса при исходном содержании примеси в расплаве. В работе /3/ задача решается с учетом гидродинамики в шлаке, однако двухфазная зона находится при весьма упрощенном предположении, что доля твердой фазы пропорциональна температуре. Задача распределения примеси при этом не решается. Однако, известно, что двухфазная зона формируется под действием переохлаждения, которое определяется характером сегрегации примеси.

В настоящей работе приводятся расчеты и анализ кристаллизации слитков ЭШП с учетом формирования двухфазной зоны слитка на основе осредненной модели двухфазной зоны, предложенной в /4/.

Рассмотрим следующую схему электрошлакового переплава металлов. В начальный момент времени в водоохлаждаемом кристаллизаторе цилиндрической формы находятся начальный слой металла (теплет) высотой h и слой жидкого шлака высотой H, обладающего электрическим сопротивлением. В шлаковую ванну на определенную глубину опускается металлический электрод цилиндрической формы и включается электрическое питание. Ток, проходящий через шлаковую ванну, разогревает ее, и электрод начинает плавиться. Оплавляющийся металл проходит через шлаковую ванну, очищается от примесей, попадает на начальный слой металла и кристаллизуется. Кристаллизующийся слиток при движении вверх вытесняет шлаковую ванну.

В настоящей работе рассмотрим задачу тепломассопереноса в области занятой кристллизующимся металлом 3 (см.рис.I). Целью решения задачи является определение температурных полей металлического слитка, а также положения и формы двухфазной зоны, расположенной между линиями ликвидус и солидус кристаллизующегося металла. Процесс описывают следующие осредненные уравнения теплопереноса /4/:

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

$$-\alpha_0(T-T_0)+\gamma\frac{\partial\eta}{\partial t}$$

диффузии примеси

$$(1-(1-m)\eta)\frac{\partial C}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x}\left(\mathscr{D}\frac{\partial C}{\partial x}\right)+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\mathscr{D}\frac{\partial C}{\partial r}\right)+ \qquad (2)$$

$$+(1-m)C\frac{\partial\eta}{\partial t}$$

Доля твердой фазы $\eta(x,r,t)$ - определяется осредненным кинетическим соотношением:

$$\frac{\partial\eta}{\partial t}=\beta\cdot\Delta T(\vartheta(\Delta T)\cdot\theta(1-\eta)+\vartheta(-\Delta T)\cdot\theta(\eta)), \qquad (3)$$

где

$$\theta(\xi) = \begin{cases} 0, & \xi \leqslant 0 \\ 1, & \xi > 0 \end{cases} \quad , \quad \theta_1(\xi) = \begin{cases} 0, & \xi < 0 \\ 1, & \xi \geqslant 0 \end{cases} . \tag{4}$$

На поддоне и боковой поверхности слитка потребуем выполнения условий:

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial x}\bigg|_{x=\ell+h} = -\alpha_1 (T - T_{вн}) \tag{5}$$

$$\frac{\partial T}{\partial r}\bigg|_{r=0} = 0 \; ; \quad \frac{\partial T}{\partial r}\bigg|_{r=R} = -Q(x) \tag{6}$$

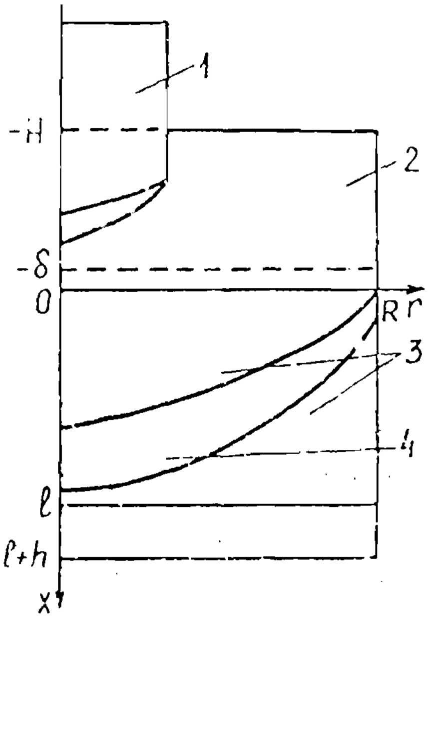

Рис. I. Схема электрошлаковой плавки:
I – оплавляющийся электрод;
2 – шлаковая ванна;
3 – кристаллизирующийся слиток;
4 – область, занятая двухфазной зоной.

$$\left.\frac{\partial C}{\partial x}\right|_{x=0} = \left.\frac{\partial C}{\partial x}\right|_{x=\ell+h} = 0\,; \quad \left.\frac{\partial C}{\partial r}\right|_{r=0} = \left.\frac{\partial C}{\partial r}\right|_{r=R} = 0\,; \tag{7}$$

$$T(x,r,0) = T_H(x,r)\,; \qquad C(x,r,0) = C_H \tag{8}$$

Для определения граничного условия на границе шлак-металл (рис. I) введем δ-слой, углубленный в шлаковую ванну и будем считать, что температура $T_1(r)$ при $x = -\delta$ задается из эксперимента. Тогда осредняя уравнение теплопроводности по этому слою δ, получаем следующее граничное условие третьего рода

$$\lambda \left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{x=0} = \left(\mathcal{L} v_0 + \frac{\lambda_{ш}}{\delta}\right)\left(T\Big|_{x=0} - T_1(r)\right) \tag{9}$$

Здесь $\mathcal{L}$ - удельная теплоемкость, γ - удельная скрытая теплота плавления (кристаллизации), λ - коэффициент теплопроводности, $\mathcal{D}$ - коэффициент диффузии, v_0 - скорость наплавления слитка, ΔT - переохлаждение, определяемое согласно диаграмме фазового состояния бинарной системы железо-углерод $\Delta T = T_n - T - \alpha C$, β - параметр, характеризующий скорость объемной кристаллизации, $Q(x)$ - экспериментально заданный поток тепла на боковой поверхности слитка, который определяется по показаниям термопар, расположенных в стенке медного кристаллизатора.

Уравнения (I), (2) аппроксимировались обычной консервативной разностной схемой на неравномерной сетке. Так как при использовании неявной схемы на $k+1$ слое все члены в правой части уравнения берутся с $k+1$ слоя, но при решении уравнения теплопроводности неизвестно значение C^{k+1} то члены, содержащие $\frac{\partial \eta}{\partial t}$ в уравнениях (I) и (2), аппроксимируются по-разному. В уравнении (I)

$$\left(\frac{\partial \eta}{\partial t}\right)_{ij}^{K+1} = \beta \cdot \Delta T_{ij}^{K+1/2} \left(\theta(\Delta T_{ij}^{K}) \cdot \theta(1-\eta_{ij}^{K}) + \theta(-\Delta T_{ij}^{K}) \cdot \theta(\eta_{ij}^{K})\right) \quad (10)$$

в уравнении (2) также испо: зуется полунеявная схема при аппроксимации соответствующих членов:

$$\left(C \frac{\partial \eta}{\partial t}\right)_{ij}^{K+1} = C_{ij}^{K} \left(\frac{\partial \eta}{\partial t}\right)_{ij}^{K+1} \quad (11)$$

$$\left(\frac{\partial \eta}{\partial t}\right)_{ij}^{K+1} = \beta \cdot \Delta T_{ij}^{K+1} \left(\theta(\Delta T_{ij}^{K+1/2}) \cdot \theta(1-\eta_{ij}^{K}) + \theta(-\Delta T_{ij}^{K+1/2}) \cdot \theta(\eta_{ij}^{K})\right) \quad (12)$$

где $\Delta T_{ij}^{K+1/2} = T_n - T_{ij}^{K+1} - \alpha C_{ij}^{K}$, $\Delta T_{ij}^{K+1} = T_n - T_{ij}^{K+1} - \alpha C_{ij}^{K+1}$

Сама функция η определяется суммированием соотношения (12):

$$\eta_{ij}^{K+1} = \eta_{ij}^{0} + \tau \sum_{S=0}^{K} \beta \cdot \Delta T_{ij}^{S+1} \left(\theta(\Delta T_{ij}^{S+1}) \theta(1-\eta_{ij}^{S}) + \theta(-\Delta T_{ij}^{S+1}) \cdot \theta(\eta_{ij}^{S})\right) \quad (13)$$

Для сравнения и оценки результатов, полученных методом, использованным в (I), также решается задача в классической посте : вке. Классическая постанс вка задачи к: исталлизации не допускает возникновения двухфазной зоны и скрытая теплота плавления (кристаллизации) выделяется только на границе раздела фаз. Методом локального осреднения (см. /5/) получаем следующее у: авнение для определения доли твердой фазы $\eta(x, r, t)$:

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = \beta \cdot \Delta T \cdot \theta(\Delta T) \cdot \theta(\rho - x) \, , \quad (14)$$

где ρ – радиус локального объема осреднения на границе раздела фаз. В этом случае разностную аппроксимацию членов, содержащих $\frac{\partial \eta}{\partial t}$ следует записать в уравнении (I)

$$\left(\frac{\partial \eta}{\partial t}\right)_{ij}^{k+1} = \beta \cdot \Delta T_{ij}^{k+1/2} \left(\theta(\Delta T_{ij}^{k}) \cdot \theta(1-\eta_{ij}^{k}) \cdot \theta_1(\eta_{i\pm1j\pm1}^{k}-1) + \right. \tag{I5}$$
$$\left. + \theta(-\Delta T_{ij}^{k}) \cdot \theta(\eta_{ij}^{k})\right),$$

в уравнении (2)

$$\left(\frac{\partial \eta}{\partial t}\right)_{ij}^{k+1} = \beta \cdot \Delta T_{ij}^{k+1} \left(\theta(\Delta T_{ij}^{k+1/2}) \cdot \theta(1-\eta_{ij}^{k}) \cdot \theta_1(\eta_{i\pm1j\pm1}^{k}-1) + \right. \tag{I6}$$
$$\left. + \theta(-\Delta T_{ij}^{k+1/2}) \cdot \theta(\eta_{ij}^{k})\right),$$

а сама функция η определяется аналогично, как и в (I3)

$$\eta_{ij}^{k+1} = \eta_{ij}^{0} + \tau \sum_{s=0}^{k} \beta \cdot \Delta T_{ij}^{s+1} \left(\theta(\Delta T_{ij}^{s+1}) \theta(1-\eta_{ij}^{s}) \cdot \theta_1(\eta_{i\pm1j\pm1}^{s}-1) \right. \tag{I7}$$
$$\left. + \theta(-\Delta T_{ij}^{s+1}) \theta(\eta_{ij}^{s})\right),$$

где $\eta_{i\pm1j\pm1}$ - значения функций $\eta(x, r, t)$ в точках, сдвинутых на шаг в любом направлении по пространству. Для сравнения проводились расчеты по методу, использованному в работе /3/. Этот метод, определяющий долю твердой фазы в интервале температур ликвидус-солидус в зависимости от температуры по линейному закону, т.е., функция $\eta(x, r, t)$ определяется следующим образом:

$$\eta = \frac{T_l - T}{T_l - T_s} \cdot \theta(T_l - T)\left(\theta(T - T_s) + \frac{T_l - T_s}{T_l - T} \cdot \theta_1(T_s - T)\right), \tag{I8}$$

а уравнение (I) принимает вид

$$\mathcal{L} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x}\right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}\left(\lambda r \frac{\partial T}{\partial r}\right) - \mathcal{L} v_0 \frac{\partial T}{\partial x} - \tag{I9}$$
$$- \alpha_0 (T - T_0) + \frac{\gamma}{T_l - T_s} \frac{\partial T}{\partial x} \theta(\eta) \theta(1-\eta)$$

В этом случае решается только задача теплопроводности.

При расчетах применяется эффективный итерационный метод неполного LU-разложения сопряженных градиентов /6/. Расчеты проводились на следующем варианте экспериментальной плавки углеродистой стали. Содержание углерода 0,5%.

γ = 247 дж/г; v_o = 0,02 см/сек; $\lambda_{ж}$ = 0,155 Вт/см °К;
$\lambda_{тв}$ = 0,314 Вт/см °К; $\lambda_{ш}$ = 0,005 Вт/см °К;
$\varkappa$ = 5,42 дж/см³ °К; δ = 0,1 см; T_ℓ = 1425 °С; T_s = 1375 °С;
ℓ = 20 см; R = 12,5 см; $T_n = 1500\,°C$.

Значения потока $Q(X)$ брались из экспериментальных данных, полученных в НИИ ЧЕРМЕТ, см. таблицу.

X (см)	0	0.6	I.2	I.[illegible]	2.4	3.	3.6	4.2	4.8	5.4	6.
$Q(x)$ (Вт/см²)	II5.	235.	I40.	65.	70.	60.	50.	35.	25.	20.	I5.

Для значений X от 6. до 20. задан постоянный поток Q = I5 Вт/см².

Приведем результаты расчетов по трем указанным выше методам и их сравнительную оценку. На рис. 2 представлены поля изотерм в кристаллизующемся слитке, на рис. 3 – изолинии доли твердой фазы η, характеризующие положение и форму двухфазной зоны в слитке.

Сравнение результатов расчетов по указанным трем методикам показывает их существенное различие. Так, расчеты без учета двухфазной зоны, рис. 3б приводят к слишком глубокой жидкой ванне металла, не говоря о том, что нет информации о размерах двухфазной зоны. Расчеты по методике работы /3/, (рис. 3в) дают более широкую двухфазную зону, расположенную ниже, чем по результатам расчетов с учетом кинетики образования двухфазной зоны, рис. 3а. Отметим еще, что во всех случаях при заданных тепловых условиях наблюдается выход жидкого металла на боковую поверхность кристаллизатора на узком участке (I,5–2 см).

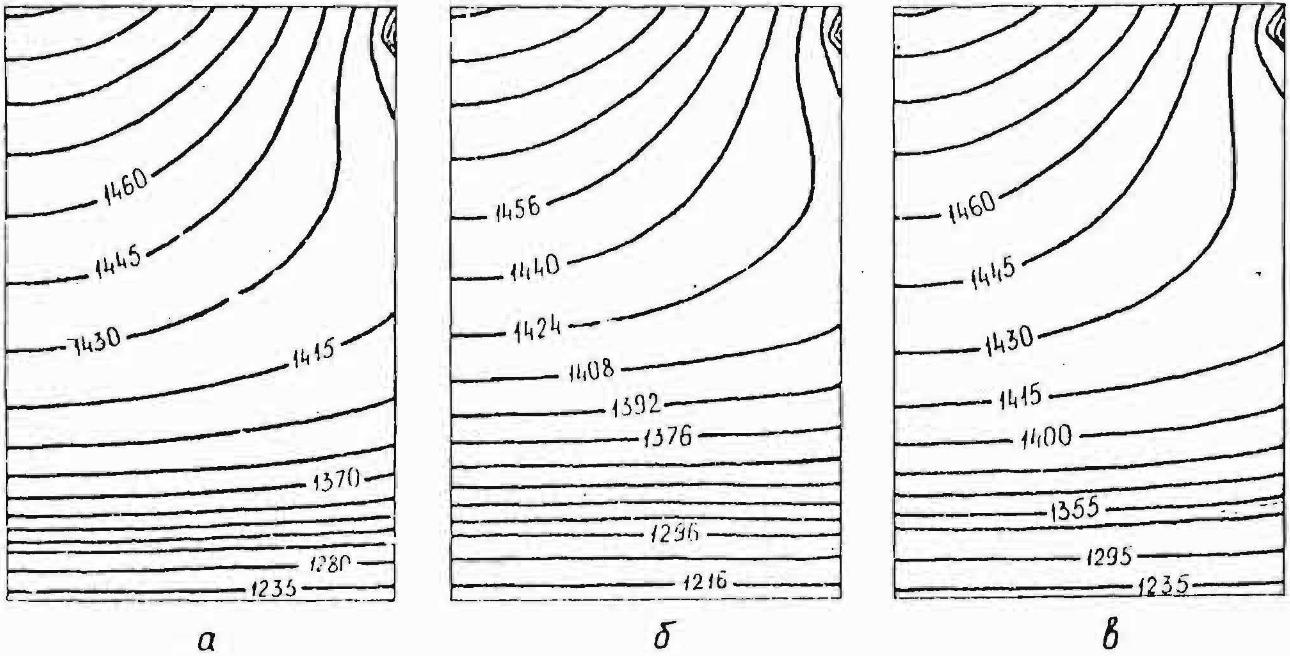

Рис. 2. Поля изотерм ($^{\circ}C$) в кристаллизующемся слитке. а) с учетом кинетики формирования двухфазной зоны; б) без учета двухфазной зоны; в) двухфазная зона определяется по интервалу температур ликвидус-солидус.

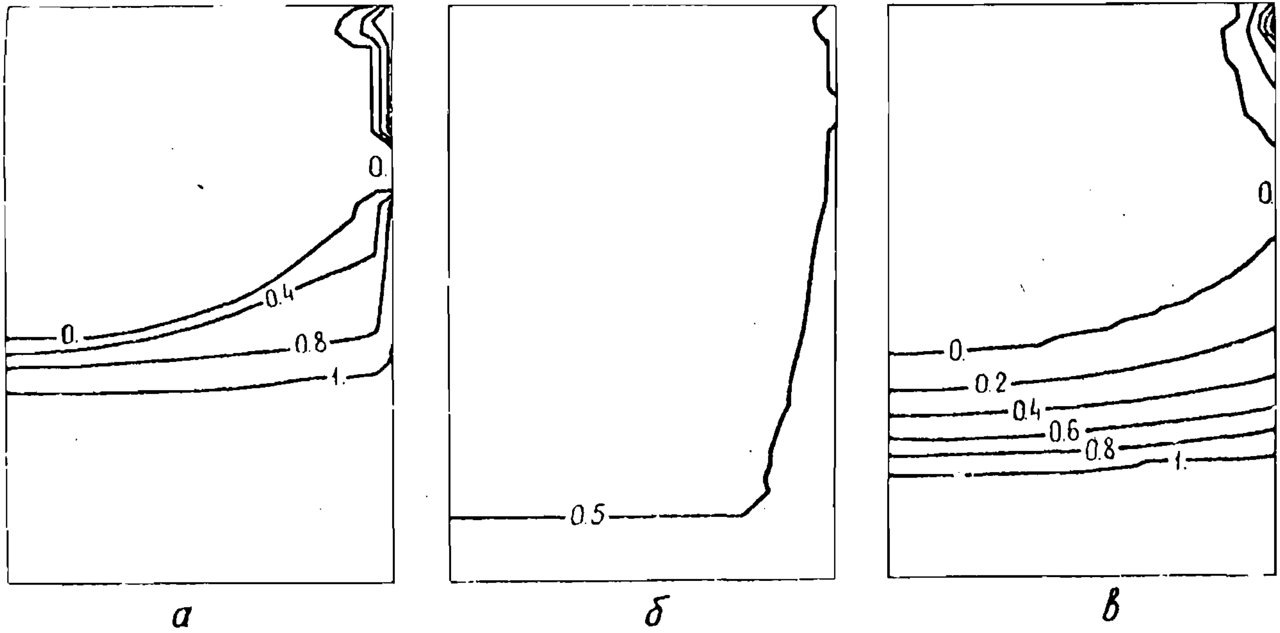

Рис. 3. Изолинии доли твердой фазы η . а) с учетом кинетики формирования двухфазной зоны; б) без учета двухфазной зоны; в) двухфазная зона определяется по интервалу температур ликвидус-солидус.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Иванова Г.Ф., Авдонин Н.А. Задача определения температурного поля и скорости плавления электрода в многофазной системе процесса электрошлаковой плавки// Инженерно-физический ж. 1971. Т. XX. № 1. С. 87-95.
2. Махненко В.И., Демченко В.Ф., Крикент И.В. Расчетная система для исследования токораспределения в шлаковой ванне// Проблемы специальной электрометаллургии. 1985. Вып. 1. С. 14-19.
3. M.Choudhary, J.Szekely. The Modeling of Pool Profiles, Temperature Profiles and Velocity Fields in ESR Systems // Met. Trans. B. 1980. Vol. 11B. P. 439-453.
4. Авдонин Н.А. Математическое описание процессов кристаллизации. Рига: Зинатне, 1980. 175 с.
5. Авдонин Н.А., Гулбе М.Л. Метод локального осреднения при численном решении задачи роста кристалла из бинарного расплаве// Прикладные задачи математической физики. Рига: ЛУ, 1990. С. 18-27.
6. David S.Kersaw. The incomplate Cholesky - conjugate gradient method for the iterative solutio of system of linear equations// J. of Comput. Phys. 1978. V. 26. P. 43-65.

МИНИСТЕРСТВО НАРОДНОГО ОБРАЗОВАНИЯ БССР

ЦК ЛКСМБ

БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ им. В.И.ЛЕНИНА

ПРИМЕНЕНИЕ ИНФОРМАТИКИ И ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ТЕХНИКИ ПРИ РЕШЕНИИ НАРОДНОХОЗЯЙСТВЕННЫХ ЗАДАЧ

Тезисы докладов Республиканской
конференции молодых ученых и
специалистов

(4 – 7 мая 1989 г.,Минск)

Минск 1989

ИССЛЕДОВАНИЕ УСТОЙЧИВОСТИ ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА ФАЗ НА МОДЕЛЬНОЙ ЗАДАЧЕ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ БИНАРНОГО СПЛАВА

М.Л.Гулбе

Вычислительный центр при ЛГУ (Рига)

Разработана аппроксимационная схема для задачи тепло-массопереноса в двухфазной системе в классической постановке, т.е., в случае, когда требуется существование гладкого фронта кристаллизации (поверхности фазового перехода) /I/. Процесс тепло-массопереноса и фазового перехода для цилиндрического образца описывается следующими уравнениями и условиями:

$$\operatorname{div}(\lambda(u)\operatorname{grad} u) = c_0\left(\frac{\partial u}{\partial t} + v_0\frac{\partial u}{\partial z}\right) + \alpha_0(u - u_0) \qquad (I)$$

$$\operatorname{div}(D(C)\operatorname{grad} C) = \frac{\partial C}{\partial t} + v_0\frac{\partial C}{\partial z} \qquad (2)$$

$$[\lambda \operatorname{grad} u]_{S_t}\cdot\vec{n} = \gamma v_n(t) \qquad (3)$$

$$[D \operatorname{grad} C]_{S_t}\cdot\vec{n} = (1-m)C v_n(t) \qquad (4)$$

После локального осреднения уравнений (I),(2) и построения разностной аппроксимации задачи, запишем скорость объемной кристаллизации в виде

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = \beta\cdot\Delta u\cdot\theta(\Delta u)\cdot\theta(1-\eta)\cdot\theta_1(\eta_{\pm 1} - 1), \qquad (5)$$

$$\Delta u = u_n - u - \alpha C,\quad \theta(s) = \begin{cases} 0, & s \le 0 \\ 1, & s > 0 \end{cases},\quad \theta_1(s) = \begin{cases} 0, & s < 0 \\ 1, & s \ge 0 \end{cases},$$

где $\eta_{\pm 1}$ - значения функции $\eta(z, r, t)$ (доли твердой фазы в расплаве) в точках, сдвинутых на шаг аппроксимации в любом направлении по пространству. Указанная аппроксимация уравнения с локальным выделением скрытой теплоты фазового перехода позволяет находить решения как в случае устойчивого роста кристаллов, так и в случае неустойчивой дендритной кристаллизации.

Литература

I. Авдонин Н.А. Математическое описание процессов кристаллизации. - Рига: Зинатне, 1980. - 175 с.

Академия наук БССР
Институт тепло- и массообмена имени А.В. Лыкова

ТЕПЛОМАССООБМЕН - ММФ
HEAT/MASS TRANSFER - MIF

Тезисы докладов

МИНСКИЙ МЕЖДУНАРОДНЫЙ ФОРУМ
(24 - 27 мая 1988 года)

Минск, СССР

Секция 9

Вычислительный эксперимент в задачах тепломассообмена

Минск 1988

УДК 536.421.1

М.Л. Гулбе, Н.А. Авдонин

ИССЛЕДОВАНИЕ УСТОЙЧИВОГО И НЕУСТОЙЧИВОГО РОСТА КРИСТАЛЛОВ НА РАСЧЕТНОЙ МОДЕЛИ ТЕПЛОПЕРЕНОСА В ДВУХФАЗНОЙ СРЕДЕ

Разработана расчетная схема для задачи теплопереноса в двухфазной системе в классической постановке. Процесс переноса тепла и фазового перехода для цилиндрического образца, охлаждаемого с поверхности, описывается следующим уравнением и условиями:

$$\frac{c\rho}{\lambda(u)}\frac{\partial u}{\partial t}=\frac{\partial^2 u}{\partial z^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial u}{\partial r}\right)-\frac{c\rho}{\lambda(u)}v_0\frac{\partial u}{\partial z}-\alpha_0(u-u_1), \qquad (1)$$

$$t>0,\quad 0\le r\le R,\quad 0\le z\le l,\quad u(r,z,0)=u_0(z), \qquad (2)$$

$$\left.\frac{\partial u}{\partial z}\right|_{z=0}=\left.\frac{\partial u}{\partial z}\right|_{z=l}=0, \qquad (3)$$

$$\left.\frac{\partial u}{\partial r}\right|_{r=0}=0,\quad \left.\frac{\partial u}{\partial r}\right|_{r=R}=-\varepsilon\sigma_0\left(u^4-u_н^4\right), \qquad (4)$$

$$\frac{\gamma\rho}{\lambda_1}\frac{\partial\varphi}{\partial t}=\left[\frac{\partial u}{\partial n}\right]_{\varphi(r,t)},\quad u=u_n. \qquad (5)$$

Здесь введена замена неизвестной функции

$$u=\int_0^T\frac{\lambda(s)}{\lambda_1}ds, \quad \text{где} \quad \lambda(u)=\begin{cases}\lambda_1, & u<u_n,\\ \lambda_2, & u>u_n.\end{cases} \qquad (6)$$

Учет условия Стефана (5), т.е., условия выделения скрытой теплоты фазового перехода, производится введением функции $\eta(u,r,z,t)$, определяющей д о л ю твердой фазы в каждой точке области. С введением $\eta(u,r,z,t)$ уравнение (1) принимает вид

$$\frac{c\rho}{\lambda(u)}\frac{\partial u}{\partial t}=\frac{\partial^2 u}{\partial z^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial u}{\partial r}\right)-\frac{c\rho}{\lambda(u)}v_0\frac{\partial u}{\partial z}-\alpha_0(u-u_1)+\gamma\rho\frac{\partial\eta}{\partial t}. \qquad (7)$$

газа "твердые шары", при отождествлении в ней величины h_y с длиной свободного пробега l. При этом эффективный коэффициент теплопроводности в пограничном слое

$$\lambda^* = \frac{h_y p C_p}{2V}$$

и число Прандтля $Pr = 1$.

Для более точного описания вязкого трения и тепловых потоков на границе газ – твердое тело в /3/ предложены кинетически согласованные схемы с коррекцией. Эти схемы отличаются от (1)-(4) тем, что члены

$$\left[\frac{h_y}{2V}(up)_{\bar{y}}\right]_y, \quad \left[\frac{h_y}{2V}(vp)_{\bar{x}}\right]_x$$

в уравнениях (2), (3) и соответствующие члены в уравнении энергии (4) могут быть уменьшены в α раз или вообще отброшены. В последнем случае анализ к.с.р.с. в приближении пограничного слоя приводит к уравнениям Прандтля с истинной вязкостью и теплопроводностью.

Литература

1. Елизарова Т.Г., Четверушкин Б.Н. Об одном вычислительном алгоритме для расчета газодинамических течений // Докл. АН СССР. 1984. – Т. 279, № 1. – С. 80-83.
2. Елизарова Т.Г. О классе кинетически согласованных разностных схем газовой динамики // ЖВМ и МФ. – 1987. – Т.27, № 11.
3. Граур И.А., Дородницын Л.В., Елизарова Т.Г., Четверушкин Б.Н. Кинетически согласованные схемы газовой динамики с неполной коррекцией. – М., 1987. – 21 с. – (Препринт / ИПМ им. М.В.Келдыша АН СССР, № 5).
4. Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газа. – М.: Наука, 1973. 736 с.

Институт прикладной математики
им. М.В. Келдыша АН СССР

Академия наук Латвийской ССР

Министерство народного образования Латвийской ССР
Латвийский ордена Трудового Красного Знамени
государственный университет им. П.Стучки
Вычислительный центр

I республиканская конференция ЛатвССР

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Тезисы докладов

Рига, 24-26 ноября 1989 года

Латвийский государственный университет им. П.Стучки
Рига 1989

УДК 536.421.I+ 536.24

М.Л.Гулбе, г.Рига

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РОСТА КРИСТАЛЛОВ ИЗ ПЕРЕОХЛАЖДЕННОГО БИНАРНОГО РАСПЛАВА

В настоящей работе исследуется устойчивость роста кристалла на численной модели задачи о фазовом переходе в процессе кристаллизации бинарных сплавов. Задача рассматривается в классической постановке, т.е. предполагается существование гладкого фронта кристаллизации (поверхности фазового перехода) и допускается возникновение переохлаждения в жидкой фазе. Задача кристаллизации бинарных сплавов описывается уравнениями

$$c\frac{\partial u}{\partial t} = div(\lambda\, grad\, u) + f \qquad (I)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = div(\mathcal{D}\, grad\, C) \qquad (2)$$

и условиями на границе раздела фаз

$$[\lambda\, grad\, u]_{S_t}\cdot\vec{n} = \gamma\, v_n(t);\quad u(x,t) = u_n \qquad (3)$$

$$[\mathcal{D}\, grad\, C]_{S_t}\cdot\vec{n} = (1-m)\, C_{S_t}\cdot v_n(t)\,. \qquad (4)$$

Методом локального осреднения вводится функция $\eta(x,t)$, равная I в твердой фазе и 0 в жидкой фазе, и определяемая на границе раздела фаз из уравнения

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = \beta\cdot\Delta u\,[\Theta(\Delta u)\cdot\Theta(1-\eta)\cdot\Theta_1(\eta_{\pm 1}) + \Theta(-\Delta u)\cdot\Theta(\eta)]\,, \qquad (5)$$

где $\Delta u = u_n - u - \alpha C$, $\eta \pm 1$ – значения функции $\eta(x,t)$ на границе области осреднения. После осреднения уравнений (I),(2) с условиями (3),(4) получаем уравнения

$$c\frac{\partial u}{\partial t} = div(\lambda\, grad\, u) + \gamma\frac{\partial \eta}{\partial t} + f \qquad (6)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = div(\mathcal{D}\, grad\, C) + (1-m)\, C\, \frac{\partial \eta}{\partial t} . \qquad (7)$$

Задача решалась конечно-разностным методом, для расчетов применялся эффективный итерационный метод неполного LU – разложения сопряженных градиентов /I,2/.

Результаты расчета показали случаи устойчивого роста кристалла с гладкой границей раздела фаз, а также устойчивого дендритного роста.

На рис.I показано развитие формы дендрита во времени в случае роста от подложки. На рис.2 – в случае точечной затравки в центре области расплава.

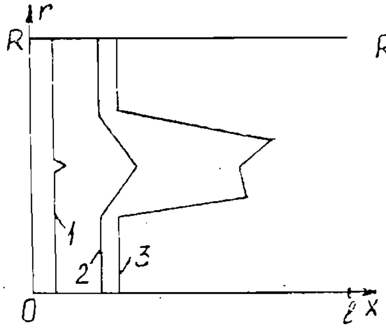

Рис.I. Динамика роста дендрита от подложки;
I - $t=0$; 2 - t =0,005,
3 - t = 0,0Iс

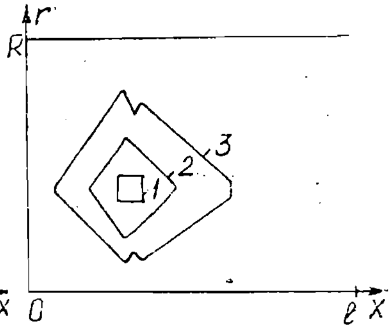

Рис.2. Динамика роста кристалла от затравки ;
I - $t=0$; 2 - $t=0.005$,
3 - $t=0.01$с

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. David S. Kershaw. The incomplete Cholesky - conjugate gradient method for the iterative solution of system of linear equations //J.of comput.Phys. – 1978. – V.26. P.43-65.
2. Гончаров А.Л. Реализация метода неполной LU– декомпозиции сопряженных градиентов для решения сеточных уравнений на различных шаблонах //Препринт ИПМ им.М.В. Келдыша АН СССР – М. – I984. – № 174.

Научный совет АН СССР
"Новые процессы получения и обработки металлических материалов"
Институт проблем литья АН УССР
Всесоюзный институт легких сплавов
Министерство металлургии СССР
Волгоградский Дом науки и техники

ПРОЦЕССЫ РАЗЛИВКИ, МОДИФИЦИРОВАНИЯ И КРИСТАЛЛИЗАЦИИ СТАЛИ И СПЛАВОВ

Часть 2

XI-я Всесоюзная конференция по проблемам слитка

Волгоград 1990

от периферии, достигая минимальных значений, затем увеличиваются и по мере приближения к центру слитка проходят через максимальные значения. Механические свойства литого металла убывают в направлении от поверхности к центру слитка. Средние значения предела прочности, условного предела текучести и относительного удлинения немонотонно зависят от параметров непрерывного литья и достигают максимальных значений при скорости литья, соответствующей минимальному размеру зерна в литом металле.

Результаты расчетов параметров кристаллической структуры и пористости удовлетворительно согласуются с полученными экспериментальными данными. Наиболее высокие механические свойства литой полосы наблюдаются при скорости непрерывного литья, по которой расчеты дают минимальные значения средних размеров зерна в металле. Предложенную методику можно использовать для прогнозирования структуры слитков при непрерывном литье.

Средний уровень механических свойств полученной литой полосы составляет 80–90% от среднего уровня механических свойств деформированного металла.

Авдонин Н.А., Гулбе М.Л.

ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ И ХИМИЧЕСКОЙ НЕОДНОРОДНОСТИ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СЛИТКОВ

Разработано программное обеспечение для расчета температурного поля, распределения концентрации химических компонентов, формы и размеров двухфазной зоны в кристаллизующихся металлических слитках (отливках). Программное обеспечение основано на постановке задачи, предложенной одним из авторов. Температурное поле находится из локально осредненного уравнения теплопереноса:

$$c\rho\left(\frac{\partial T}{\partial t} + v\frac{\partial T}{\partial z}\right) = div(\lambda\, grad\, T) + \gamma\rho\left(\frac{\partial \eta}{\partial t} + v\frac{\partial \eta}{\partial z}\right) \qquad (1)$$

концентрация примеси C из уравнения диффузии

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v\frac{\partial c}{\partial z} = div(D\, grad\, c) + (1-m)c\left(\frac{\partial \eta}{\partial t} + v\frac{\partial \eta}{\partial z}\right) \qquad (2)$$

где η – относительная доля твердой фазы в локальном объеме ΔV; $\tilde{\lambda} = \lambda_1\eta + \lambda_2(1-\eta)$; $\tilde{D} = D_1 \cdot m\eta + D_2(1-\eta)$ – осредненные по жидкой и твердой фазам коэффициенты теплопроводности и диффузии; v – скорость наплавления слитка; m – коэффициент равновесного распределения примесей; γ – удельная скрытая теплота плавления.

Величина η в случае квазиравновесной двухфазной зоны определяется выражением:

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = \beta \Delta T, \tag{3}$$

где $\Delta T = T_n - T - \alpha c$ – переохлаждение.

В случае неравновесной двухфазной зоны

$$\eta = \beta_1 \int_0^t J(\Delta T) \int_\tau^t \Delta T(s)\, ds\, d\tau , \tag{4}$$

причем число дендритов N^τ определяется по формуле

$$N = \left(\frac{A \Delta T}{0{,}5 \beta_1} \right)^{0,5}$$

На охлаждаемой поверхности слитка можно ставить комбинированные граничные условия излучения и теплообмена:

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial n} = -\varepsilon \sigma \left(T^4 - T_B^4\right) - \alpha_1 (T - T_B) + Q .$$

Коэффициент α_1 определяется из эксперимента или путем расчета теплового сопротивления стенок кристаллизатора. Расчетный алгоритм для решения задачи (1) – (5) построен на основе консервативной схемы с использованием эффективного итерационного метода неполного разложения Холецкого. Входными данными являются теплофизические константы, диаграмма фазового равновесия, начальное содержание химических элементов, перегрев жидкого металла, характеристики охлаждения кристаллизатора. Расчеты могут проводиться для процессов непрерывной разливки металлов, ЭШП, ВДП, затвердевания отливок в цилиндрической геометрии или в плоской декартовой системе координат.

Дмитриев А.М.

ФОРМИРОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ ЗОН В НЕПРЕРЫВНОЛИТОЙ ЗАГОТОВКЕ

Идентичность серных отпечатков, а также авторадиограмм, полученных с продольных темплетов заготовок МНЛЗ и слитков сталей с широким температурным интервалом затвердевания, позволяет сформулировать механизм образования зоны равноосных кристаллов в непрерывнолитой заготовке как результат осаждения и накопления в нижней части заготовки изолированных кристаллов, возникающих в