

Н. А. АВДОНИН

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ
ОПИСАНИЕ
ПРОЦЕССОВ
КРИСТАЛЛИЗАЦИИ

Н. А. АВДОНИН

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ
ОПИСАНИЕ
ПРОЦЕССОВ
КРИСТАЛЛИЗАЦИИ

ЛАТВИЙСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
ОРДЕНА ТРУДОВОГО КРАСНОГО ЗНАМЕНИ
УНИВЕРСИТЕТ им. П. СТУЧКИ

Н. А. АВДОНИН

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ
ОПИСАНИЕ
ПРОЦЕССОВ
КРИСТАЛЛИЗАЦИИ



РИГА «ЗИНАТНЕ» 1980

531.9
А 188
УДК 536.24+536.421

А в д о н и н Н. А. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ПРОЦЕССОВ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ.— Рига : Зинатне, 1980.—180 с.

Известно, насколько многообразны процессы кристаллизации, используемые в современной металлургии черных, цветных и редких металлов. Эти процессы далеко не во всех случаях могут быть описаны в рамках классической задачи Стефана.

В книге рассмотрены обобщенные модели процессов кристаллизации однокомпонентных и бинарных расплавов. При введении обобщенных постановок задач используется аппарат осреднения функций по элементарным объемам. Показано, что обобщенное решение описывает случаи возникновения дисперсной двухфазной зоны. Введено понятие обобщенного решения для системы термодиффузионных уравнений. Доказана теорема существования обобщенного решения задачи. Предложен алгоритм численного решения. Рассмотрена обобщенная постановка задачи кристаллизации из переохлажденного расплава с учетом кинетики объемной кристаллизации. Приведены примеры численного решения различных задач кристаллизации.

Ил. 30, табл. 13, библиогр. 100 назв.

Печатается по решению Редакционно-издательского совета Академии наук Латвийской ССР от 28 июня 1978 г.

А $\frac{20204-017}{\text{M811(11)-80}}$ 14.79.1702070000

© Латвийский государственный университет

ПРЕДИСЛОВИЕ

Академик А. Н. Тихонов неоднократно подчеркивал, что истинное развитие математической физики есть результат тесного научного сотрудничества математиков со специалистами-практиками. Ни те, ни другие в отдельности не могут достигнуть плодотворных результатов в этой области.

Предлагаемая читателю работа могла появиться лишь в результате взаимодействия и научных контактов автора с сотрудниками ГосНИИИ редкометаллической промышленности Центрального ордена Трудового Красного Знамени научно-исследовательского института черной металлургии имени И. П. Бардина, Института проблем литья АН УССР, Института физики АН ЛатвССР.

Основное внимание в монографии уделяется обобщенным (нестефановским) подходам к описанию процессов кристаллизации, наиболее полно отражающим реальный физический процесс. Глава 2, в которой даны примеры решения задачи Стефана в классической постановке, носит вспомогательный характер и лишь иллюстрирует необходимость введения обобщенных постановок задач.

Обобщенное решение единым образом описывает систему в целом, включая дисперсную двухфазную зону (в случае ее появления), как сплошную среду.

В начале шестидесятых годов О. А. Олейник была развита теория обобщенного решения задачи Стефана [68]. А. А. Самарским был разработан эффективный численный метод нахождения обобщенных решений [75]. Одновременно и независимо от этих работ В. Т. Борисовым была предложена теория квазиравновесной двухфазной зоны [20, 21, 23, 24].

Как показывает анализ (глава 3), решение задачи теории двухфазной зоны, примененной для случая кристаллизации однокомпонентного расплава, совпадает с обобщенным решением задачи в смысле работы [68]. При возникновении дисперсной двухфазной зоны классическое решение задачи перестает существовать, а обобщенное решение полностью описывает двухфазную зону. До последнего времени в литературе отсутствовало сопоставление указанных работ.

Для системы термодиффузионных уравнений, описывающих процессы кристаллизации бинарных систем, трудности возникают уже при попытке введения понятия обобщенных решений. Нет работ, в которых исследовались бы обобщенные решения подобных систем. Обобщенная постановка задачи нами введена путем осреднения исходных уравнений. Это дало возможность развить теорию обобщенных решений указанной задачи, а также сформулировать в замкнутом виде задачу кристаллизации переохлажденного бинарного сплава с учетом кинетики спонтанной объемной кристаллизации.

В последней главе монографии приводится расчетная часть работы, которая выполнена сотрудниками отдела физико-технических проблем Вычислительного центра Латвийского государственного университета Г. Ф. Ивановой, И. Э. Кояло, М. В. Кояло, Э. Н. Мартузана, а также А. Э. Бойтманисом из Института физики АН ЛатвССР.

Считаю приятным долгом выразить благодарность указанным сотрудникам, а также Б. Я. Мартузана за ценные советы и обсуждение при оформлении рукописи. Особую благодарность выражаю проф. В. Т. Борисову, по инициативе которого автор начал работу по обоснованию теории двухфазной зоны.

Автор

ОСНОВНЫЕ ПРИНЯТЫЕ ОБОЗНАЧЕНИЯ

- T — температура;
 T_e — равновесная температура;
 T_l — температура линии ликвидус;
 T_s — температура линии солидус;
 T_A — равновесная температура чистого компонента A ;
 T_B — равновесная температура чистого компонента B ;
 T_p — температура плавления;
 x, y, z — пространственные координаты;
 X_i — макрокоординаты ($i = 1, 2, 3$);
 t — время;
 C — концентрация компонента бинарной системы;
 C_l — концентрация на линии ликвидус;
 C_s — концентрация на линии солидус;
 v — скорость кристаллизации;
 v_0 — стационарная скорость кристаллизации;
 v_k — критическая скорость кристаллизации;
 λ — коэффициент теплопроводности;
 L — объемная теплоемкость;
 L_0 — удельная теплоемкость;
 ρ — плотность материала;
 γ — удельная скрытая теплота фазового перехода;
 ΔT — переохлаждение;
 ε — степень черноты;
 σ — постоянная Стефана — Больцмана;
 \mathbf{n} — вектор нормали к поверхности S ;
 $\frac{\partial T}{\partial n}$ — производная по направлению нормали \mathbf{n} ;
 v_n — скорость продвижения границы раздела фаз по направлению нормали \mathbf{n} ;
 $[f]$ — целая часть числа f ;
 $||f||_\varphi$ — разность предельных значений функции f на поверхности φ , взятых со стороны твердой и жидкой фаз;

- η — относительный суммарный объем твердой фазы в элементарном объеме V ;
 α — коэффициент теплообмена;
 $a^2 = \lambda/L$ — коэффициент температуропроводности;
 $\operatorname{erf} x = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-s^2} ds$ — интеграл вероятности;
 $u_i^n = u(x_i, t_n)$ — значения функции u в узлах сетки;
 $m = C_s/C_l$ — равновесный коэффициент распределения примеси;
 D — молекулярный коэффициент диффузии;
 u_{x_i} — компонента вектора скорости по координате x_i ;
 $I(\Delta T)$ — скорость объемного зарождения;
 N — общее число кристаллитов в единице объема расплава;
 k — константа Больцмана;
 k — температурный градиент;
 U — энергия активации;
 $\delta(x)$ — дельта-функция Дирака;
 $\operatorname{Re} x$ — действительная часть числа x .

Глава 1

ПОСТАНОВКА ПРОБЛЕМЫ

Общепринятой моделью, используемой при математическом описании многообразных процессов кристаллизации, является классическая постановка задачи, предложенная Й. Стефаном еще в 1889 г. [99].

Напомним основные физические предположения, принятые в классической постановке задачи Стефана:

1) температурное поле в жидкой и твердой фазах описывается уравнением теплопроводности с соответствующими теплофизическими характеристиками;

2) кристаллизация (плавление) происходит на границе раздела фаз, определяемой уравнением

$$z = \varphi(x, y, t), \quad \varphi(x, y, 0) = \varphi_0(x, y), \quad (1.0.1)$$

причем априори предполагается существование однозначной, достаточно гладкой поверхности раздела фаз;

3) фазовый переход происходит в равновесных условиях, т. е. на границе раздела фаз задана равновесная температура T_e (или температура плавления T_n в случае однокомпонентного расплава):

$$T = T_e \text{ при } z = \varphi(x, y, t); \quad (1.0.2)$$

4) скорость продвижения границы раздела фаз определяется условием теплоотвода скрытой теплоты фазового перехода (условие Стефана):

$$\gamma v_n = \lambda_T \frac{\partial T}{\partial n} - \lambda_{ж} \frac{\partial T}{\partial n}. \quad (1.0.3)$$

Задача Стефана в классической постановке хорошо изучена в теоретическом плане. Имеется обширная литература,

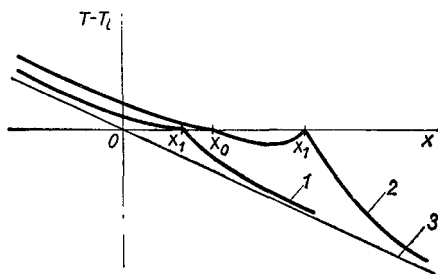
посвященная данному вопросу. Укажем основные работы. Вопросы теоретического обоснования задачи рассмотрены в [38—40, 50, 61, 81, 86, 90, 93, 95, 99]. Имеется ряд публикаций по численному решению задачи [10, 29—33, 52, 66, 68, 69, 75, 92, 94, 98], в том числе обзорная статья [52], в которой содержится подробная библиография. Большое число работ посвящено применению указанной задачи к описанию различных процессов кристаллизации расплавов [2, 5, 9, 11, 16, 17, 44, 45, 47, 48, 54, 55, 62—65, 71, 73, 76, 80, 82, 84, 88, 96, 97].

Однако указанная классическая постановка задачи не во всех случаях удовлетворительно описывает процесс кристаллизации. Например, она не применима к описанию кристаллизации объема расплава, переохлажденного в начальный момент времени или охлаждаемого во времени с внешней поверхности при условии отсутствия подложки. Если в расплав, переохлажденный в начальный момент, введена подложка или затравка (т. е. задано начальное положение границы раздела фаз), то процесс кристаллизации описывается в рамках задачи Стефана, однако такое описание будет неудовлетворительным. Действительно, при движении фронта кристаллизации (поверхности раздела фаз) в объеме расплава сохраняется переохлаждение, причем температурный градиент перед фронтом отрицательный. Но в этом случае возможен либо рост дендритов из-за потери устойчивости плоского фронта, либо спонтанное объемное зарождение кристаллов [59, 76]. Очевидно, что задача в классической постановке не может описывать отмеченные эффекты. Можно указать случаи, когда задача Стефана в классической постановке приводит к решению с переохлаждением в объеме расплава, возникающим в ходе процесса кристаллизации. (Примеры таких решений приводятся и подробно анализируются в главе 2.) Так, исследование модельной задачи направленной кристаллизации слитка в квазистационарном случае показало, что при скорости кристаллизации, превышающей некоторую критическую, в объеме расплава возникает переохлаждение, причем с возрастанием скорости кристаллизации увеличиваются переохлажденная зона x_0x_1 и переохлаждение (рис. 1).

Другой пример, показывающий возможность появления переохлаждения перед фронтом кристаллизации, — это автомодельное решение термодиффузионной задачи в поста-

Рис. 1. Схема распределения температуры вдоль оси тонкого слитка:

1 — $v < v_K$; 2 — $v > v_K$;
3 — температура на муфеле печи.



новке Стефана, проанализированное Г. П. Иванцовым [49].

Перечисленные примеры указывают на необходимость более точного, адекватного физическому процессу описания процессов кристаллизации, причем в постановке задачи следует учитывать физические факторы, снимающие переохлаждение. Обобщение постановки задачи Стефана с учетом указанных факторов дано в работах [20, 21, 60].

В работах В. Т. Борисова [20, 21] предложена теория квазиравновесной двухфазной зоны. Основная предпосылка этой теории состоит в следующем: если в объеме расплава возникает переохлаждение, то оно мгновенно снимается растущими дендритами. Таким образом, возникает двухфазная зона — дисперсная область, занятая дендритами, переохлаждение в которой должно быть равным нулю.

Автором работ [20, 21] классическими методами исследовано решение задачи Стефана на модельных примерах квазистационарной и автомодельной задач. При дополнительном предположении отсутствия диффузии в двухфазной зоне задача сводится к известной — решению уравнения теплопроводности с заданными нелинейными коэффициентами [22, 23].

В. Т. Борисовым предложен метод численного решения поставленной задачи, основанный на использовании явной разностной схемы [25]. Задача теории двухфазной зоны удовлетворительно описывает процессы массовой кристаллизации бинарных расплавов и в настоящее время широко используется для описания различных процессов получения слитков и отливок.

Более подробный обзор работ по теории квазиравновесной двухфазной зоны содержится в [24].

В работах [62, 63] предложен другой подход к обобщению задачи Стефана: вместо условия равновесия (1.0.2) на границе раздела фаз задается кинетическое уравнение

$$v = f(\Delta T). \quad (1.0.4)$$

Здесь v — скорость продвижения границы раздела фаз, $\Delta T = T_e - T$ — переохлаждение. Легко видеть, что такое изменение постановки задачи не снимает ни один из отмеченных выше недостатков постановки задачи Стефана. Скорость кристаллизации лимитируется условием теплоотвода скрытой теплоты фазового перехода (1.0.3), а не кинетическим условием (1.0.4) и в основном определяется именно условием (1.0.3). Поэтому достаточно решить задачу Стефана в классической постановке с условием (1.0.2) на фронте кристаллизации, а переохлаждение можно определить из (1.0.4) по уже найденному значению v . Действительно, в практически важных случаях скорость кристаллизации невелика и переохлаждение на фронте кристаллизации не превосходит сотых и даже тысячных долей градуса [5]. Так, если задать нормальный механизм роста кристалла $v = K\Delta T$, то для металлов $K \approx 0,1-0,4$ м/(с · °С) и переохлаждение ΔT на фронте кристаллизации не будет превосходить 10^{-2} °С при $v \leq 10^{-3}$ м/с и очевидно, что условие (1.0.4) практически не будет оказывать влияния на решение задачи. По оценкам автора работы [62], решение задачи с условием (1.0.4) отличается от соответствующего автомодельного решения задачи Стефана в классической постановке лишь в течение 10^{-6} с. Задать условие в виде (1.0.4) необходимо при механизме гранного роста кристалла или росте его на дислокациях. Но в этом случае вся трудность задачи будет заключаться в определении кинетики гранного роста, а не в решении задачи Стефана. Следует отметить, что задание условия (1.0.4) на фронте кристаллизации исключает обобщенные подходы к исследованию задачи Стефана, так как требует существования гладкой границы раздела фаз, хотя автор работы [62] называет такую постановку обобщенной задачей Стефана.

Построение обобщенной теории, описывающей процесс кристаллизации в целом, начнем с более простого случая кристаллизации однокомпонентного расплава. Классическую постановку задачи Стефана можно сформулировать

в несколько ином виде, заменяя условие (1.0.2) на следующее: неизвестная граница раздела фаз определяется как множество точек пространства, в которых

$$T(x, y, z, t) = T_e. \quad (1.0.5)$$

Отметим, что в литературе обычно не делается различия между заданием условий в виде (1.0.2) и (1.0.5) [63, 68, 86]. Однако задание условия (1.0.5) не допускает переохлаждения в объеме расплава, так как решение не может иметь точек, подобных точке $(x_0, 0)$ на рис. 1, ибо такая точка обязательно должна находиться на границе раздела фаз. Как будет видно из анализа, проведенного в главе 2, если $v \geq v_k$, классического решения задачи при задании условия (1.0.5) не существует. В таких случаях можно рассматривать лишь обобщенное решение. Анализ решения задачи на примере направленной кристаллизации слитка (глава 3) показал, что существует обобщенное решение задачи без переохлаждения, причем вместо переохлажденной зоны возникает переходная область (дисперсная зона), в которой температура тождественно равна равновесной температуре. В этой области задача определяет новую неизвестную величину η — долю твердой фазы в элементарном объеме расплава. Из сказанного следует, что необходимо строго различать *классическую постановку задачи Стефана*, когда условие (1.0.2) задается на границе раздела фаз, и постановку задачи, определяющей границу раздела фаз как множество точек пространства, в которых выполняется условие (1.0.5). Последнюю будем называть *обобщенной постановкой задачи*.

В главе 3 показано, что доказанные О. А. Олейник [68] теоремы существования и единственности обобщенного решения задачи легко переносятся на случаи существования двухфазной области, в которой $T \equiv T_e$, причем задача определяет единственным образом не только температуру и размеры указанной области, но и долю твердой фазы в каждой точке двухфазной зоны. Наличие таких случаев придает особую актуальность изучению обобщенных решений, которые могут дать качественно новую информацию об исследуемом физическом процессе без использования дополнительных физических данных.

Особые трудности возникают при попытке построения обобщенной теории задачи кристаллизации бинарного распла-

ва (термодиффузионная задача). Во-первых, нет работ, в которых было бы введено понятие обобщенного решения для системы термодиффузионных уравнений. Во-вторых, обобщенная постановка задачи приводит к сильнонелинейной системе, не исследованной в литературе. Теория обобщенного решения задачи кристаллизации бинарного сплава излагается в главах 4 и 5 настоящей работы.

Построение общей теории обобщенного решения термодиффузионной задачи начинается с вывода осредненных макромасштабных уравнений. Получены обобщенные уравнения, описывающие кристаллизующуюся систему как сплошную среду без выделения границ двухфазной области. Показано, что полученная система этих уравнений параболична лишь в смысле Петровского, но не является сильно параболической. Коэффициенты уравнений — нелинейные разрывные функции. Для доказательства теоремы существования решения неприменимы известные методы. Обобщенное решение поставленной задачи построено путем введения параметра, имеющего простой физический смысл и приводящего систему уравнений к сильно параболической системе. Полученные априорные оценки позволяют обосновать эффективные устойчивые разностные методы решения задачи.

Известно, что структура закристаллизовавшегося материала, его микро- и макронеоднородность в значительной степени зависят от первичной структуры двухфазной зоны. Для того чтобы задача описывала какие-то элементы структуры двухфазной среды, при ее постановке необходимо учитывать кинетику объемной кристаллизации. Такая постановка задачи должна включать дополнительные данные о скорости возникновения кристаллов (равновесных зерен, осей дендритов) и динамике их роста в зависимости от переохлаждения в двухфазной среде. В главе 6 дается обобщенная постановка задачи с учетом объемной кристаллизации. За основу приняты осредненные уравнения (4.2.24), (4.2.25).

Зависимость скорости объемного зарождения кристаллов от переохлаждения нами предлагается находить экспериментально. Скорость изменения суммарного объема твердой фазы определяется скоростью роста отдельных зародышей кристаллов с учетом лимитирующего влияния теплоотвода и диффузии. При описании процессов кристаллизации для вычисления относительного объема твердой фазы [35, 63]

часто используется формула Колмогорова [53]

$$\eta(t) = 1 - \exp\left(-\int_0^t J(\tau) v(t-\tau) d\tau\right), \quad (1.0.6)$$

где $J(t)$ — скорость зарождения кристаллов; $v(t-\tau)$ — объем единичного зародыша кристалла, появившегося в момент τ . Считается, что эта формула полностью описывает кинетику объемной кристаллизации [63]. Однако это неверно. Формула (1.0.6) выведена для постоянного заданного переохлаждения и в ней учитывается лишь геометрический фактор при разрастании зародышей кристаллов: с ростом отдельных зародышей не может быть занят объем, уже занятый твердой фазой. Согласно формуле (1.0.6) учет геометрического фактора начинает сказываться при $\eta \geq 0,35$ [51], в то время как учет теплоотвода и диффузии существенно влияет на скорость роста отдельных зародышей кристалла, когда их радиус $r = 10^{-6}$ м, т. е. практически это влияние сказывается начиная с $\eta = 0$. Формула (1.0.6) приводит к качественно неверному определению доли твердой фазы и в конце процесса затвердевания, так как при постоянном заданном переохлаждении η никогда не достигает значения 1.

Для определения доли твердой фазы в нашей работе используется приближенная формула (6.0.6), полученная при условии отсутствия взаимного влияния зародышей кристаллов при их росте. Эта формула соответствует первому члену разложения в ряд экспоненциальной функции в (1.0.6). Постановка задачи с учетом объемной кристаллизации обобщается на случай наличия дисперсных твердых частиц в объеме расплава. Приведенные примеры численных расчетов (глава 7) подтверждают эффективность разработанных численных методов решения обобщенных задач.

Глава 2

ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАДАЧИ СТЕФАНА В КЛАССИЧЕСКОЙ ПОСТАНОВКЕ

2.1. РЕШЕНИЕ ОДНОМЕРНОЙ КВАЗИСТАЦИОНАРНОЙ ЗАДАЧИ ПРОЦЕССА НАПРАВЛЕННОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ [2]

Анализ случаев решения задачи Стефана, допускающих переохлаждение в объеме расплава, начнем с наиболее простой модельной задачи, разрешимой в замкнутом виде.

При постановке задачи примем следующую схему процесса направленной кристаллизации слитка. Внутри цилиндрического муфеля 1 печи сопротивления, на поверхности которого поддерживается заданное стационарное распределение температуры $T_1(x)$, коаксиально расположен цилиндрический слиток 2 (рис. 2). Слиток движется с постоянной скоростью v_0 вдоль оси системы. Задача о кристаллизации слитка формулируется в классической постановке. Температурное поле $T(z, r, t)$ в слитке и граница раздела фаз $z = \varphi(r, t)$ описываются следующим уравнением и условиями:

$$L_{00} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda(T) r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda(T) \frac{\partial T}{\partial z} \right), \quad (2.1.1)$$
$$-l < z < l, \quad 0 < r < R, \quad t > 0, \quad z \neq \varphi(r, t);$$

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial r} = -\sigma \varepsilon (T^3 - T_1^4), \quad r = R; \quad (2.1.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} (T - T_1) = 0, \quad z = \pm l; \quad (2.1.3)$$

$$T(r, z, 0) = T_0(r, z); \quad (2.1.4)$$

$$\gamma v_{\pi} = \left[\lambda \frac{\partial T}{\partial n} \right]_{\varphi(r,t)}, \quad T = T_{\pi}, \quad z = \varphi(r, t). \quad (2.1.5)$$

Нелинейное условие (2.1.2) заменим линеаризованным

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial r} = -\alpha_0 (T - T_1), \quad (2.1.2')$$

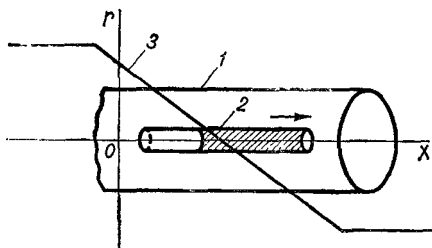


Рис. 2. Схема процесса направленной кристаллизации. 1 — стенки муфеля; 2 — цилиндрический слиток; 3 — температура на стенках муфеля.

где

$$\alpha_0 = \sigma \varepsilon (T^3 + T^2 T_1 + T_1^2 T + T_1^3) \approx 4\sigma \varepsilon T_{\text{п}}^3 \quad (2.1.6)$$

Расчеты, приведенные в [11], показали, что такая линеаризация дает незначительную погрешность и не меняет качественной картины решения.

Вводя осредненную по сечению слитка температуру

$$\tilde{T} = \frac{2}{R^2} \int_0^R T(r, z, t) r dr, \quad (2.1.7)$$

задачу (2.1.1)—(2.1.5) сведем к одномерной:

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda(\tilde{T}) \frac{\partial \tilde{T}}{\partial z} \right) + \frac{2}{R^2} \lambda(\tilde{T}) \left[r \frac{\partial T}{\partial r} \right]_0^R = L_0 \rho \frac{\partial \tilde{T}}{\partial t}. \quad (2.1.8)$$

При этом $r \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0$, а $\lambda r \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R}$ определим из условия (2.1.2). Заменяв в этом условии $T|_{r=R}$ на \tilde{T} , получим одномерное уравнение (знак осреднения функций опускаем)

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda(T) \frac{\partial T}{\partial z} \right) - \frac{2\sigma \varepsilon}{R} (T^4 - T_1^4) = L_0 \rho \frac{\partial T}{\partial t}. \quad (2.1.9)$$

В случае линейного условия (2.1.2') уравнение примет вид

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda(T) \frac{\partial T}{\partial z} \right) - \alpha_1 (T - T_1) = L_0 \rho \frac{\partial T}{\partial t}, \quad (2.1.10)$$

$$-l < z < l, \quad t > 0;$$

$$\alpha_1 = 2\alpha_0 R^{-1} = 8\sigma \varepsilon R^{-1} T_{\text{п}}^3, \quad (2.1.11)$$

а (2.1.5) —

$$\gamma \rho v(t) = \left[\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right]_{\varphi(t)}, \quad T = T_{\text{п}}, \quad z = \varphi(t), \quad (2.1.12)$$

причем $v(t) = d\varphi(t)/dt$. Условия (2.1.3), (2.1.4) остаются неизменными.

Введем неподвижные координаты x, t , связанные с мучелем печи:

$$x = z + v_0 t. \quad (2.1.13)$$

В этих координатах уравнение (2.1.10) и условия (2.1.12) перепишем в следующем виде:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right) - L_0 \rho v_0 \frac{\partial T}{\partial x} - \alpha_1 (T - T_1(x)) = L_0 \rho \frac{\partial T}{\partial t}; \quad (2.1.14)$$

$$\gamma \rho \left(\frac{dy^*}{dt} - v_0 \right) = \left[\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right]_{y(t)}, \quad T = T_{\text{п}}, \quad x = y^*(t). \quad (2.1.15)$$

Здесь $y^*(t) = \varphi(t) + v_0 t$ — положение границы раздела фаз в неподвижной системе координат.

Будем считать, что слиток достаточно длинный и нас интересует температурное поле на большом удалении от концов слитка. Тогда условия (2.1.3) выполняются при $z \rightarrow \pm \infty$ и в новой системе координат принимают вид

$$\lim_{x \rightarrow \pm \infty} \frac{\partial}{\partial x} (T - T_1(x)) = 0. \quad (2.1.16)$$

Рассмотрим установившееся температурное поле слитка. Предположим, что существует конечный предел $x_1 = \lim_{t \rightarrow \infty} y^*(t)$, следовательно, $\lim_{t \rightarrow \infty} y^{*'}(t) = 0$. Тогда, перейдя к пределу при $t \rightarrow \infty$ в уравнениях (2.1.14), (2.1.15), получим задачу определения квазистационарного температурного поля:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) - L_0 \rho v_0 \frac{\partial T}{\partial x} - \alpha_1 (T - T_1(x)) = 0, \quad (2.1.17)$$

$$-\infty < x < \infty;$$

$$-\gamma \rho v_0 = \left[\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right]_{x_1}, \quad T_{x=x_1+} = T_{x=x_1-} = T_e; \quad (2.1.18)$$

$$\lim_{x \rightarrow \pm \infty} \frac{\partial}{\partial x} (T - T_1) = 0. \quad (2.1.19)$$

Задачу (2.1.17) — (2.1.19) будем решать в предположении, что теплофизические константы λ, L_0, ρ постоянны и равны в твердой и жидкой фазах. Это предположение непри-

ципиально. Оно лишь упрощает решение задачи. С целью упрощения анализа решения распределение температуры на муфеле печи примем в виде

$$T_1(x) = T_{II} - kx, \quad (2.1.20)$$

где k — заданный температурный градиент.

Введя обозначения

$$\left. \begin{aligned} u &= T - T_e, \quad u_1 = T_1(x) - T_e, \quad \mu = 0,5L_0\rho\lambda^{-1}v_0; \\ \alpha &= \alpha_1\lambda^{-1} = 8\sigma\varepsilon R^{-1}T_e^3\lambda^{-1}, \quad \beta = \gamma\rho\lambda^{-1}, \end{aligned} \right\} \quad (2.1.21)$$

задачу перепишем в виде

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} - \alpha(u - u_1(x)) = 0, \quad -\infty < x < \infty; \quad (2.1.22)$$

$$-\beta v_0 = \left[\frac{\partial u}{\partial x} \right]_{x=x_1-}^{x=x_1+}, \quad u = 0, \quad x = x_1; \quad (2.1.23)$$

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \frac{\partial}{\partial x} (u - u_1(x)) = 0; \quad (2.1.24)$$

$$u_1(x) = -kx. \quad (2.1.25)$$

Как известно [56], уравнение (2.1.22) и первое условие (2.1.23) эквивалентны уравнению с сосредоточенным источником

$$\frac{d^2 u}{dx^2} - 2\mu \frac{du}{dx} - \alpha(u - u_1) = -\beta v_0 \delta(x - x_1), \quad (2.1.26)$$

$$-\infty < x < \infty.$$

Здесь $\delta(x)$ — дельта-функция Дирака.

Решение задачи (2.1.24), (2.1.26) легко найти посредством функции источника $G(x, \xi)$, которая для бесконечного пространства имеет вид

$$G(x, \xi) = \frac{1}{2\sqrt{\mu^2 + \alpha}} \exp(\mu(x - \xi) - \sqrt{\mu^2 + \alpha}|x - \xi|). \quad (2.1.27)$$

Если существует только одна точка фазового перехода $x = x_1$, то решение задачи запишется в виде

$$u(x) = \alpha \int_{-\infty}^{+\infty} u_1(\xi) G(x, \xi) d\xi + \beta v_0 G(x, x_1). \quad (2.1.28)$$

Положение границы раздела фаз x_1 определяется вторым условием (2.1.23):

$$u(x_1) = 0 = \alpha \int_{-\infty}^{+\infty} u_1(\xi) G(x_1, \xi) d\xi + \beta v_0 G(x_1, x_1). \quad (2.1.29)$$

Вычислив интегралы в выражениях (2.1.28), (2.1.29) с учетом (2.1.25), (2.1.27), найдем

$$u(x) = -kx + \frac{2\mu k}{\alpha} + \frac{\beta v_0}{2\sqrt{\mu^2 + \alpha}} \exp(\mu(x - x_1) - \sqrt{\mu^2 + \alpha}|x - x_1|); \quad (2.1.30)$$

$$x_1 = \frac{2\mu}{\alpha} + \frac{\beta v_0}{2k\sqrt{\mu^2 + \alpha}}. \quad (2.1.31)$$

Температура $u(x)$ монотонно убывает не при всех значениях параметров. Действительно, найдем производную $u'(x)$ слева от точки x_1 :

$$u'(x) = -k + \frac{\beta v_0 (\mu + \sqrt{\mu^2 + \alpha})}{2\sqrt{\mu^2 + \alpha}} \exp[(\mu + \sqrt{\mu^2 + \alpha}) \times (x - x_1)], \quad x \leq x_1. \quad (2.1.32)$$

Тогда

$$\lim_{x \rightarrow x_1^-} u'(x) = -k + \frac{\beta v_0 (\mu + \sqrt{\mu^2 + \alpha})}{2\sqrt{\mu^2 + \alpha}} > 0,$$

если

$$\frac{2\sqrt{\mu^2 + \alpha}}{\sqrt{\mu^2 + \alpha} + \mu} \frac{k}{\beta v_0} < 1.$$

Подставив в последнее выражение значение β из (2.1.21), получим условие, при котором $u'(x) > 0$ в точке x_1 :

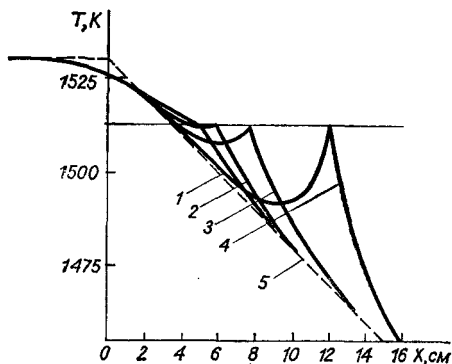
$$v_0 > \frac{2\sqrt{\mu^2 + \alpha}}{\mu + \sqrt{\mu^2 + \alpha}} \frac{k\lambda}{\gamma\rho}. \quad (2.1.33)$$

Условие (2.1.33) принимает простой вид, если $\mu^2 \alpha^{-1} \ll 1$. Оно выполняется для $v_0 \leq 10^{-4}$ м/с. В этом случае (2.1.33) приближенно можно записать в виде

$$v_0 > \frac{2\lambda k}{\gamma\rho} \equiv v_k. \quad (2.1.34)$$

Рис. 3. Осевое распределение температуры в слитке:

$k = 500^\circ \text{C}/\text{м}$; $v_k = 0,7 \times 10^{-5} \text{ м/с}$; 1 — $v_0 = 0,67 \times 10^{-5}$; 2 — $v_0 = 10^{-5}$; 3 — $v_0 = 1,67 \cdot 10^{-5}$; 4 — $v_0 = 3,33 \cdot 10^{-5} \text{ м/с}$; 5 — температура на муфеле печи.



Если выполняется (2.1.33), функция $u(x)$ в области $x < x_1$ имеет локальный минимум и, следовательно, точку $x_0 < x_1$, в которой $u(x_0) = 0$. Таким образом, $u(x)$ немонотонна и имеет две точки — x_0 и x_1 , в которых $u(x) = 0$. При этом x_0 не является точкой фазового перехода, так как решение получено в предположении, что выделение скрытой теплоты происходит только в точке x_1 . (Ниже будет строго доказано, что x_1 не может быть точкой фазового перехода.) Следовательно, участок x_0x_1 — переохлажденная зона в расплаве (рис. 3).

На рис. 3 показано расчетное распределение температуры в образце слитка при различных значениях v_0 , полученное по формулам (2.1.30), (2.1.31). При $v_0 < v_k$ температура вдоль образца монотонно убывает и кристаллизация происходит в точке x_1 без переохлаждения; при $v_0 > v_k$ возникает переохлажденная зона x_0x_1 , причем с возрастанием v_0 увеличиваются глубина переохлаждения ΔT_{\max} и длина переохлажденной зоны x_0x_1 . Как видно из рисунка, при $v_0 = 0,67 \cdot 10^{-5} \text{ м/с}$ переохлаждение отсутствует; при $v_0 = 10^{-5} \text{ м/с}$ $\Delta T_{\max} \approx 1^\circ \text{C}$, $x_0x_1 = 0,015 \text{ м}$; при $v_0 = 1,67 \cdot 10^{-5} \text{ м/с}$ $\Delta T_{\max} = 6^\circ \text{C}$, $x_0x_1 = 0,04 \text{ м}$. Расчеты проведены при следующих значениях параметров, взятых для образца арсенида галлия: $\lambda = 0,21 \cdot 10^2 \text{ Вт}/(\text{м} \cdot ^\circ\text{C})$, $L_0 = 0,42 \cdot 10^3 \text{ Дж}/(\text{кг} \cdot ^\circ\text{C})$, $\rho = 5 \cdot 10^3 \text{ кг}/\text{м}^3$, $\gamma = 6 \times 10^5 \text{ Дж}/\text{кг}$, $T_{\text{н}} = 1513 \text{ К}$. Температура на муфеле печи

$$T_1(x) = \begin{cases} 1530, & x < 0; \\ 1530 - kx, & x > 0. \end{cases}$$

Решение задачи (2.1.30), (2.1.31) получено в предположении, что существует лишь одна точка фазового перехода. Существование большого числа таких точек противоречит принципу максимума. Действительно, точки фазового перехода могут быть расположены только при $x > 0$ там, где $u_1(x) < 0$. Но тогда распределение температур, подобное представленному на рис. 4, невозможно, так как наличие участков кривой x_2x_3 , где $u > 0$, противоречит принципу максимума.

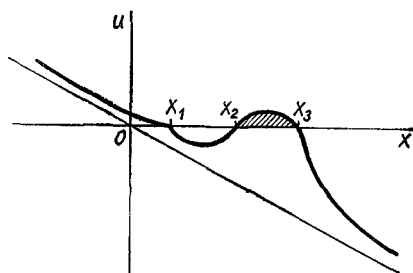


Рис. 4. Возможный вид функции $u(x)$ при наличии нескольких границ раздела фаз.

Однако если допустить «частичную кристаллизацию» в точках фазового перехода, то решение допускает наличие двух, трех и более фронтов кристаллизации. Рассмотрим подробнее возможность существования нескольких фронтов с частичной кристаллизацией. Пусть существуют три точки $x_1 \geq x_2 \geq x_3$ с относительной долей кристаллизации материала η_1, η_2, η_3 , причем

$$\eta_1 + \eta_2 + \eta_3 = 1. \quad (2.1.35)$$

В этом случае вместо (2.1.26) будем иметь уравнение

$$\frac{d^2u}{dx^2} - 2\mu \frac{du}{dx} - \alpha(u - u_1(x)) = -\beta v_0 \eta_1 \delta(x - x_1) - \beta v_0 \eta_2 \delta(x - x_2) - \beta v_0 \eta_3 \delta(x - x_3). \quad (2.1.36)$$

Решение этого уравнения с условием (2.1.24) находится аналогично решению уравнения (2.1.26):

$$u(x) = -kx + 2\mu k \alpha^{-1} + \beta v_0 \sum_{i=1}^3 \eta_i G(x, x_i). \quad (2.1.37)$$

Уравнения для определения неизвестных x_1, x_2, x_3 получим

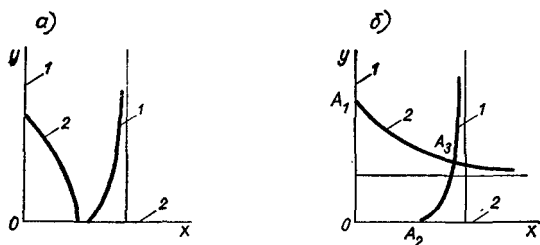


Рис. 5. К анализу корней системы (2.1.40):

1 — решения первого уравнения системы; 2 — решения второго уравнения системы $a - a_0 \sqrt{\alpha} (\eta_2 - \eta_3) - \eta_3 < 1$; б — $a_0 \sqrt{\alpha} (\eta_2 - \eta_3) > 1$.

из условий равенства нулю функции $u(x)$ в точках $x = x_1, x_2, x_3$:

$$\left. \begin{aligned} -kx_1 + 2\mu k\alpha^{-1} + \beta v_0 \sum_{i=1}^3 \eta_i G(x_1, x_i) &= 0, \\ -kx_2 + 2\mu k\alpha^{-1} + \beta v_0 \sum_{i=1}^3 \eta_i G(x_2, x_i) &= 0, \\ -kx_3 + 2\mu k\alpha^{-1} + \beta v_0 \sum_{i=1}^3 \eta_i G(x_3, x_i) &= 0. \end{aligned} \right\} (2.1.38)$$

Введем новые неизвестные:

$$x = x_1 - x_2, \quad y = x_2 - x_3, \quad z = x_1 - x_3 = x + y. \quad (2.1.39)$$

Вычитая одно уравнение из другого в системе (2.1.38) и учитывая значение $G(x, \xi)$, получаем систему двух уравнений относительно x, y :

$$\left. \begin{aligned} x &= a_0 [\eta_1 (1 - e^{-\alpha_1 x}) - (\eta_2 + \eta_3 e^{-\alpha_2 y}) (1 - e^{-\alpha_2 x})], \\ y &= a_0 [(\eta_1 e^{-\alpha_1 x} + \eta_2) (1 - e^{-\alpha_1 y}) - \eta_3 (1 - e^{-\alpha_2 y})]; \end{aligned} \right\} (2.1.40)$$

$$\mu_1 = \mu + \sqrt{\mu^2 + \alpha}, \quad \mu_2 = \sqrt{\mu^2 + \alpha} - \mu, \quad a_0 = \frac{\gamma \rho v_0}{2k\lambda \sqrt{\mu^2 + \alpha}}. \quad (2.1.41)$$

Исследуем корни системы (2.1.40). Так как в реальных случаях $\mu^2 \alpha^{-1} \ll 1$, для упрощения анализа примем $\mu = 0$. Отметим, что это упрощение не является принципиальным — анализ можно провести и при $\mu \neq 0$. Качественное пове-

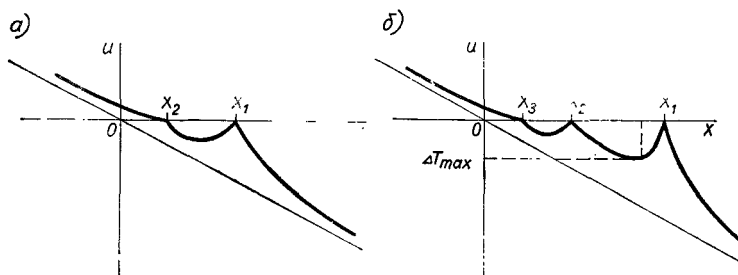


Рис. 6. Распределение температуры при частичной кристаллизации: а — частичная кристаллизация в двух точках; б — частичная кристаллизация в трех точках.

дение кривых, являющихся решениями первого и второго уравнений системы (2.1.40), представлено на рис. 5. Координаты точек пересечения кривых 1 и 2 являются корнями системы. При выполнении условия

$$a_0 \sqrt{\alpha} (\eta_1 - \eta_2 - \eta_3) > 1 \quad (2.1.42)$$

существуют три корня системы. Это координаты точек $O(0, 0)$, $A_1(0, y_a)$, $A_2(x_a, 0)$ (рис. 5). Анализируя исходную систему (2.1.38), легко заметить, что $x = y = 0$ совпадает с решением, полученным выше [см. (2.1.30), (2.1.31)]. Решение $x = x_a, y = 0$ совпадает с $x = 0, y = y_a$. Это решение с частичной кристаллизацией в точке x_2 (рис. 6, а). Если кроме (2.1.42) выполняется еще условие

$$a_0 \sqrt{\alpha} (\eta_2 - \eta_3) > 1, \quad (2.1.43)$$

то помимо описанных выше решений система имеет еще решение $A_3(x_b, y_b)$ (рис. 5, б). В общем случае наличие точки A_3 означает возможность существования решения с частичной кристаллизацией в трех точках — x_1, x_2, x_3 (рис. 6, б). Следует отметить, что неравенства (2.1.42), (2.1.43) влекут за собой условия

$$\eta_1 - \eta_2 - \eta_3 > 0, \quad \eta_2 - \eta_3 > 0. \quad (2.1.44)$$

Это значит, что упомянутое решение с частичной кристаллизацией возможно при условии, что в точке x_3 материала кристаллизуется меньше, чем в x_2 , а в x_3 и x_2 , вместе взятых, доля кристаллизующегося материала меньше, чем в x_1 .

В рассмотренной постановке задачи доля кристаллизующегося материала в точках x_2 , x_3 остается не определенной. Для однозначного определения величин η_2 , η_3 следует использовать дополнительные физические данные.

Будем считать, что частичная кристаллизация начинается лишь при достижении заданной глубины переохлаждения ΔT_{\max} , причем переохлаждение остается ограниченным. Тогда η_2 и η_3 определяются однозначно. Действительно, при $\Delta T < \Delta T_{\max}$ $\eta_2 = \eta_3 = 0$. Если же переохлаждение достигает ΔT_{\max} , то η_2 можно найти из условия $\Delta T = \Delta T_{\max}$ ($\eta_3 = 0$), т. е.

$$-u(x_m) = kx_m + 2\mu k\alpha^{-1} + \beta v_0 \sum_{i=1}^2 \eta_i G(x_m, x_i) = \Delta T_{\max}, \quad (2.1.45)$$

где x_m — точка локального минимума функции $u(x)$, определяемая уравнением

$$u'(x_m) = 0 = -k + \beta v_0 \sum \eta_i G'_x(x_m, x_i). \quad (2.1.46)$$

При дальнейшем увеличении v_0 , если выполняется условие (2.1.43), появляется второй локальный минимум функции $u(x)$ и η_3 определяется по второму минимуму так же, как в предыдущем случае (рис. 6, б).

Полученные результаты можно суммировать следующим образом. Если скорость кристаллизации меньше критической, кристаллизация слитка происходит без переохлаждения. Когда v_0 увеличивается, перед фронтом кристаллизации возникает переохлажденная зона x_2x_1 , причем переохлаждение увеличивается с возрастанием v_0 . При предельном значении глубины переохлаждения начинается частичная кристаллизация в точке x_2 . Дальнейшее возрастание v_0 вызывает кристаллизацию в точке x_3 , причем доля кристаллизующегося материала увеличивается с возрастанием v_0 и т. д. Из сказанного следует, что при скорости кристаллизации, большей критического значения, возможна спонтанная объемная кристаллизация или появление дендритов на поверхности расплава. Очевидно, что в таких случаях задача Стефана в классической постановке не может удовлетворительно описать процесс кристаллизации.

2.2. РЕШЕНИЕ НЕСТАЦИОНАРНОЙ ЛИНЕАРИЗОВАННОЙ ЗАДАЧИ [1]

Решение квазистационарной задачи было получено в предположении существования конечного предела $x_1 = \lim_{t \rightarrow \infty} y(t)$, $u(x) = \lim_{t \rightarrow \infty} u(x, t)$. Однако наличие такого предела далеко не очевидно. Не исключена возможность колебания решения нестационарной задачи, когда не существует определенного предела при $t \rightarrow \infty$. Для решения этих вопросов необходимо исследовать нестационарную задачу и, в частности, асимптотическое поведение решения при $t \rightarrow \infty$.

Рассмотрим линейную нестационарную задачу в постановке (2.1.4), (2.1.14) — (2.1.16). Для решения задачи перейдем к координатам, связанным с положением границы раздела фаз $\varphi(t)$:

$$y = z - \varphi(t) = x - y^*(\tau), \quad \tau = a^2 t. \quad (2.2.1)$$

Здесь $a^2 = \lambda/L_0\rho$ — коэффициент температуропроводности (λ, L_0 считаем постоянными величинами).

В переменных y, τ задача запишется в следующем виде:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial y^2} - v(t) a^{-2} \frac{\partial T}{\partial y} - \alpha [T - T_1(y - y^*(\tau))] = \frac{\partial T}{\partial \tau},$$

$$-\infty < y < \infty, \quad t > 0, \quad T \neq T_{\pi}; \quad (2.2.2)$$

$$-\gamma\rho\lambda^{-1}v(t) = \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{y=0+} - \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{y=0-}; \quad (2.2.3)$$

$$T|_{y=0+} = T|_{y=0-} = T_{\pi}; \quad (2.2.4)$$

$$\lim_{y \rightarrow \pm\infty} \frac{\partial}{\partial y} (T - T_1) = 0; \quad (2.2.5)$$

$$T(y, 0) = T_0(y). \quad (2.2.6)$$

Здесь

$$v(t) = v_0 - \frac{dy^*(t)}{dt}, \quad (2.2.7)$$

$T_1(x)$ задается в виде (2.1.20). Пренебрегая в уравнении (2.2.2) конвективным членом $v(t) a^{-2} \frac{\partial T}{\partial y}$, получим линейную задачу (напомним, что функция $T_1(x)$ — линейна). Основанием для такого пренебрежения служит малость коэффи-

циента $v(t) a^{-2}$ в диапазоне скоростей, близких к v_k . Действительно, оценим, например, разность решений при $\mu = 0$ и $\mu \neq 0$ в квазистационарном случае [см. (2.1.30), (2.1.31)]:

$$\delta u \approx 2\mu k \alpha^{-1}, \quad \delta x_1 \approx 2\mu \alpha^{-1}.$$

Оценивая значения констант [см. (2.1.21)]

$$2\mu \approx 7v_0, \quad \alpha \approx 0,15,$$

находим $\delta u \approx 50kv_0$, $\delta x_1 \approx 50v_0$. При v_0 порядка $v_k \approx \approx 10^{-5}$ м/с и при $k \leq 10^3 \cdot ^\circ\text{C}/\text{м}$ получим

$$\delta u \leq 0,5^\circ\text{C}, \quad \delta x_1 \leq 0,5 \cdot 10^{-3} \text{ м}.$$

Как видим, решения с учетом и без учета конвективного члена в уравнении мало отличаются друг от друга.

Итак, будем решать линеаризованную задачу:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} - \alpha [u - u_1(y + y^*(\tau))] = \frac{\partial u}{\partial \tau}; \quad (2.2.8)$$

$$-\beta v(\tau) = \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{y=0+} - \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{y=0-}; \quad (2.2.9)$$

$$u \Big|_{y=0+} = u \Big|_{y=0-} = 0; \quad (2.2.10)$$

$$\lim_{y \rightarrow \pm\infty} \frac{\partial}{\partial y} (u - u_1(y)) = 0; \quad (2.2.11)$$

$$u(y, 0) = u_0(y) = u_1(y); \quad (2.2.12)$$

$$u_1(y) = -ky. \quad (2.2.13)$$

Здесь введены следующие обозначения:

$$u = T - T_e, \quad u_1 = T_1 - T_e, \quad \beta = a^2 \gamma \rho \lambda^{-1} = \gamma L_0^{-1}. \quad (2.2.14)$$

Для простоты за начальное состояние принимаем температуру муфеля печи $u_1(y)$; для решения линейной задачи применяем преобразование Лапласа — Карсона [42]. Переходя в задаче (2.2.8), (2.2.12) к изображениям функций $u(y, \tau)$, $y^*(\tau)$:

$$F(y, p) = p \int_0^\infty e^{-p\tau} u(y, \tau) d\tau, \quad f(p) = p \int_0^\infty e^{-p\tau} y^*(\tau) d\tau, \quad (2.2.15)$$

получим систему для определения F и f :

$$\frac{d^2 F}{dy^2} - \alpha [F - u_1(y + f(p))] = \rho(F - u_1(y)), \quad (2.2.16)$$

$$-\infty < y < \infty;$$

$$-\beta(v_0 - pf) = \left. \frac{dF}{dy} \right|_{y=0+} - \left. \frac{dF}{dy} \right|_{y=0-}; \quad (2.2.17)$$

$$F|_{y=0+} = F|_{y=0-} = 0; \quad (2.2.18)$$

$$\lim_{y \rightarrow \pm\infty} \frac{d(F - u_1)}{dy} = 0. \quad (2.2.19)$$

Решением уравнения (2.2.16) будет

$$F(y, \rho) = 0,5\beta V(\rho)(\rho + \alpha)^{-1/2} \exp(-\sqrt{\rho + \alpha}|y|) + u_1(y) + \frac{\alpha}{\rho + \alpha} u_1(f(\rho)), \quad (2.2.20)$$

где $V(\rho)$ — изображение функции $v(\tau)$. Тогда, учитывая, что

$$f(\rho) = (v_0 - V(\rho))\rho^{-1}, \quad (2.2.21)$$

из условия (2.2.17) находим

$$V(\rho) = \sigma v_0 (\rho \sqrt{\rho + \alpha} + \sigma)^{-1}, \quad \sigma = 2k\alpha\beta^{-1}. \quad (2.2.22)$$

Преобразуем $V(\rho)$:

$$V(\rho) = \frac{\sigma v_0}{(\rho + \alpha)\sqrt{\rho + \alpha} - \alpha\sqrt{\rho + \alpha} + \sigma} = \sigma v_0 \frac{1}{\rho} \frac{\rho}{\rho + \alpha} \times \\ \times \frac{s^2}{s^3 - \alpha s + \sigma} = \sigma v_0 \frac{1}{\rho} \frac{\rho}{\rho + \alpha} \frac{s^2}{(s + s_1)(s + s_2)(s + s_3)}, \quad (2.2.22')$$

где $s = \sqrt{\rho + \alpha}$; s_1, s_2, s_3 — корни кубического уравнения

$$s^3 - \alpha s + \sigma = 0. \quad (2.2.23)$$

Известно, что, если

$$D = \left(\frac{\sigma}{2}\right)^2 - \left(\frac{\alpha}{3}\right)^3 < 0, \quad (2.2.24)$$

все корни действительны, причем

$$s_n = -2\sqrt{\frac{\alpha}{3}} \cos \frac{\varphi + 2n\pi}{3}, \quad \cos \varphi = -\frac{\sigma}{2} \sqrt{\left(\frac{3}{\alpha}\right)^{3/2}}, \\ n = 1, 2, 3; \quad (2.2.25)$$

если же $D > 0$, два корня будут комплексно-сопряженными и их можно выразить следующим образом (см.

[71, с. 198]):

$$s_1 = 2a; \quad s_{2,3} = -(a \pm bi); \quad a = \sqrt{\frac{\alpha}{3}} \operatorname{ch} \frac{\varphi}{3};$$

$$b = \sqrt{\alpha} \operatorname{sh} \frac{\varphi}{3}; \quad \operatorname{ch} \varphi = \frac{\sigma}{2} \sqrt{\left(\frac{3}{\alpha}\right)^3}. \quad (2.2.26)$$

Для нахождения оригинала изображения $V(p)$ достаточно воспользоваться правилами (20.5), (20.6), (20.26) и формулой (21.60) операционного исчисления из работы [43]. Произведя необходимые вычисления, получим

$$v(\tau) = \sigma v_0 \int_0^\tau (\pi z)^{-1/2} e^{-\alpha z} \int_0^\infty e^{-\frac{x^2}{4z}} \sum_{n=1}^3 A_n e^{-s_n x} dz dx. \quad (2.2.27)$$

Здесь

$$A_1 = -\frac{s_1}{(s_1 - s_2)(s_1 - s_3)}; \quad A_2 = -\frac{s_2}{(s_2 - s_1)(s_2 - s_3)};$$

$$A_3 = -\frac{s_3}{(s_3 - s_1)(s_3 - s_2)}. \quad (2.2.28)$$

Вычисляя интегралы в выражении (2.2.27), имеем

$$v(\tau) = \sigma v_0 \int_0^\tau e^{-\alpha z} \sum_{n=1}^3 A_n e^{s_n^2 z} \operatorname{erfc}(s_n \sqrt{z}) dz =$$

$$= \sigma v_0 \sum_{n=1}^3 \left[\frac{A_n s_n}{s_n^2 - \alpha} \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \operatorname{erf} \sqrt{\alpha t} - \frac{A_n}{s_n^2 - \alpha} + \right.$$

$$\left. + \frac{A_n}{s_n^2 - \alpha} e^{s_n^2 t - \alpha t} \operatorname{erfc}(s_n \sqrt{t}) \right], \quad (2.2.29)$$

или, учитывая, что

$$\sum_{n=1}^3 \frac{A_n s_n}{s_n^2 - \alpha} = 0, \quad \sum_{n=1}^3 \frac{A_n}{s_n^2 - \alpha} = -\frac{1}{\sigma} \sum_n A_n s_n = -\frac{1}{\sigma},$$

$$(2.2.30)$$

окончательно получим

$$v(\tau) = v_0 \left(1 - \sigma e^{-\alpha t} \sum_n \frac{A_n}{s_n^2 - \alpha} e^{s_n^2 t} \operatorname{erfc}(s_n \sqrt{t}) \right). \quad (2.2.31)$$

Оригинал изображения $F(y, \rho)$ легко найти с помощью теоремы о свертке и простых операционных правил [43]:

$$u = u_1(y + y^*(\tau)) + \frac{kv_0}{\alpha}(1 - e^{-\alpha\tau}) - k \int_0^\tau e^{-\alpha(\tau-s)}v(s) ds + \\ + \frac{\beta}{2\sqrt{\pi}} \int_0^\tau \exp\left(-\alpha(\tau-s) - \frac{y^2}{4(\tau-s)}\right) \frac{v(s) ds}{\sqrt{\tau-s}}. \quad (2.2.32)$$

Исследуем поведение решения (2.2.31), (2.2.32). Прежде всего выясним, при каком условии возникает переохлаждение. Найдем производную u' перед фронтом кристаллизации. Эту величину легко найти из выражения (2.2.20) или (2.2.32):

$$\lim_{y \rightarrow 0-} \frac{\partial u(y, \tau)}{\partial y} = 0,5\beta v(\tau) - k. \quad (2.2.33)$$

Так как $u = 0$ при $y = 0$, то для появления переохлаждения перед фронтом кристаллизации необходимо, чтобы эта производная была больше нуля. Учитывая значение β из (2.2.14) и переходя снова к переменной $t = a^{-2} \tau$, находим условие

$$v(t) > \frac{2\lambda k}{\gamma\rho} \equiv v_k, \quad (2.2.34)$$

при котором возникает переохлаждение в объеме расплава. Легко видеть, что если $t \rightarrow \infty$, то $v(t) \rightarrow v_0$. Тогда при $v_0 > v_k$ найдется такой момент времени t_0 , что в случае $t > t_0$ выполняется неравенство (2.2.34) и, следовательно, существует переохлаждение.

Более подробно исследуем асимптотическое поведение скорости $v(\tau)$. Для этого в (2.2.31) заменим функцию $\operatorname{erfc} x$ на асимптотическое выражение при больших x [36]. Так как $s_1 > 0$ в любом случае, то

$$\operatorname{erfc}(s_1 \sqrt{\tau}) \approx \frac{1}{\sqrt{\pi\tau} s_1} e^{-s_1^2 \tau}. \quad (2.2.35)$$

При $D < 0$ $s_2, s_3 < 0$, а в случае $D > 0$ $\operatorname{Re} s_2, \operatorname{Re} s_3 < 0$, так что аргумент s_2, s_3 всегда больше $0,5\pi$. Тогда справедливо следующее асимптотическое разложение [36]:

$$\operatorname{erfc}(s_n \sqrt{\tau}) = 2 - \operatorname{erfc}(-s_n \sqrt{\tau}) \approx 2 + \frac{1}{\sqrt{\pi\tau} s_n} e^{-s_n^2 \tau}, \quad n = 2, 3. \quad (2.2.35')$$

Подставив найденные значения erfc в (2.2.31), получим асимптотическое выражение для $v(\tau)$:

$$v(\tau) \approx v_0 \left(1 - \frac{\sigma}{\sqrt{\pi\tau}} e^{-\alpha\tau} \sum_{n=1}^3 \frac{A_n}{(s_n^2 - \alpha) s_n} - 2\sigma \sum_{n=2,3} \frac{A_n}{s_n^2 - \alpha} e^{(s_n^2 - \alpha)\tau} \right), \quad (2.2.36)$$

но

$$(s_n^2 - \alpha) s_n = -\sigma; \quad A_n (s_n^2 - \alpha)^{-1} = -\sigma^{-1} A_n s_n, \quad (2.2.37)$$

поэтому

$$v(\tau) \approx v_0 \left[1 - \frac{2}{s_3 - s_2} \left(\frac{s_2^2}{s_1 - s_2} e^{\sigma s_2^{-1}\tau} - \frac{s_3^2}{s_1 - s_3} e^{\sigma s_3^{-1}\tau} \right) \right]. \quad (2.2.38)$$

В случае $D < 0$, $s_2, s_3 < 0$ и $v(\tau)$ монотонно стремится к v_0 при $\tau \rightarrow \infty$. Если $D > 0$, то $s_2 = -a - bi$, $s_3 = -a + bi$ и после простых вычислений получим

$$v(\tau) \approx v_0 \left[1 - \frac{2}{9a^2 + b^2} e^{-(\alpha + b^2 - a^2)\tau} \frac{a}{b} \sin 2ab\tau + (5a^2 + b^2) \cos 2ab\tau \right]. \quad (2.2.39)$$

В этом случае $v(\tau)$ имеет вид затухающих колебаний и при $\tau \rightarrow \infty$ также стремится к v_0 .

Предельное значение $u(y, \tau)$ при $\tau \rightarrow \infty$ можно легко найти, воспользовавшись теоремами Таубера [42]. Переходя к пределу при $p \rightarrow 0$ в выражении (2.2.20) для F , получаем

$$F(y, 0) \doteq u(y) = \frac{0,5\beta v_0}{\sqrt{\alpha}} e^{-\sqrt{\alpha}|y|} + u_1(y + x_1), \quad (2.2.40)$$

что совпадает с решением соответствующей стационарной задачи (2.1.30) при $\mu = 0$. Тем самым полностью исследована асимптотика линеаризованной нестационарной задачи.

Следует отметить, что поведение скорости кристаллизации $v(t)$ носит характер затухающих колебаний, если $D > 0$, или

$$L_0 \gamma^{-1} k > 0,2 \sqrt{\alpha}, \quad (2.2.41)$$

т. е. при больших градиентах температуры на муфеле печи. Наличие таких колебаний несмотря на их затухание может означать неустойчивость плоской границы раздела фаз в процессе кристаллизации.

2.3. АНАЛИЗ НЕСТАЦИОНАРНОЙ НЕЛИНЕЙНОЙ ЗАДАЧИ

Так как задача в полной постановке нелинейна, не исключена возможность ветвления решения в некоторый момент времени t_1 . Это могло бы означать существование ветви решения при отсутствии переохлаждения. Поэтому необходимо проанализировать решение полной нелинейной задачи. Проведем анализ решения нелинейной задачи вблизи точки $t = t_1$, когда вероятно появление переохлаждения (в этот момент возможно ветвление решения). За начальное состояние возьмем решение квазистационарной задачи при $v = v_k$ [см. (2.1.30), (2.1.31)]:

$$u(x, 0) = u_k(x) = -kx + \frac{2\mu_k k}{\alpha} + \frac{\beta v_k}{2\sqrt{\mu_k^2 + \alpha}} \exp[\mu_k(x - x_k) - \sqrt{\mu_k^2 + \alpha}|x - x_k|]; \quad (2.3.1)$$

$$x_k = 2\mu_k \alpha^{-1} + \frac{\beta v_k}{2k\sqrt{\mu_k^2 + \alpha}}, \quad \beta = \gamma\rho\lambda^{-1}. \quad (2.3.2)$$

Напомним, что при $v_0 > v_k$ стационарная задача дает переохлаждение. Нестационарную задачу рассмотрим в постановке (2.1.14) — (2.1.16). Ее можно записать в виде

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) - 2\mu \frac{\partial T}{\partial x} - \alpha_1(T - T_1(x)) = L_0 \rho \frac{\partial T}{\partial t} + \gamma\rho \left(\frac{dy^*}{dt} - v_0 \right) \delta(x - y^*); \quad (2.3.3)$$

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \frac{\partial}{\partial x} (T - T_1) = 0. \quad (2.3.4)$$

Полагая λ , L_0 постоянными, введем безразмерное время t и новую функцию u :

$$t = a^2 t_p; \quad u = T - T_1(x). \quad (2.3.5)$$

Тогда (2.3.3), (2.3.4) принимают вид

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} - \alpha u = \frac{\partial u}{\partial t} - 2\mu k + \beta_0 \left(\frac{dy^*}{dt} - v \right) \delta(x - y^*); \quad (2.3.6)$$

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \frac{\partial u}{\partial x} = 0. \quad (2.3.7)$$

Здесь использованы следующие обозначения:

$$\alpha = \alpha_1 \lambda^{-1}; \quad \beta_0 = \beta a^2 = \gamma L_0^{-1}; \quad v = a^{-2} v_0; \quad v_k = a^{-2} v_k; \\ a^2 = \lambda / L_0 \rho. \quad (2.3.8)$$

Чтобы найти функцию источника $G(x, \xi, t - \tau)$ уравнения (2.3.6) для бесконечного пространства, к уравнению, определяющему G ,

$$\frac{\partial^2 G}{\partial x^2} - 2\mu \frac{\partial G}{\partial x} - \alpha G = \frac{\partial G}{\partial t} - \delta(x - \xi) \delta(t - \tau) \quad (2.3.9)$$

применим преобразование Лапласа — Карсона [42]. Получим уравнение для изображения F :

$$\frac{d^2 F}{dx^2} - 2\mu \frac{dF}{dx} - \alpha F = pF - pe^{-p\tau} \delta(x - \xi), \quad -\infty < x < \infty. \quad (2.3.10)$$

Решение (2.3.10) имеет вид

$$F = \frac{p}{2\sqrt{\mu^2 + \alpha + p}} e^{-p\tau} e^{\mu(x-\xi) - \sqrt{\mu^2 + \alpha + p}|x-\xi|}. \quad (2.3.11)$$

Находим оригинал изображения F [43, формула (23.133)]:

$$G(x, \xi, t - \tau) = \frac{1}{2\sqrt{\pi(t-\tau)}} \exp \left[\mu(x - \xi) - \frac{(x - \xi)^2}{4(t - \tau)} - (\mu^2 + \alpha)(t - \tau) \right]. \quad (2.3.12)$$

Зная функцию источника G , легко найти решение задачи (2.3.6), (2.3.7):

$$u(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} [u_k(\xi) - u_1(\xi)] G(x, \xi, t) d\xi + \\ + \int_0^t dt \int_{-\infty}^{+\infty} [2\mu k - \beta_0 (\dot{y}(\tau) - v) \delta(\xi - y^*)] G(x, \xi, t - \tau) d\xi, \quad (2.3.13)$$

ИЛИ

$$\begin{aligned}
 u(x, t) = & \beta_0 \int_0^t (v - y) G(x, x^*(\tau), t - \tau) d\tau + \\
 & + 2\mu k \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \int_0^t G(x, \xi, t - \tau) d\tau + \\
 & + \int_{-\infty}^{+\infty} [u_k(\xi) - u_1(\xi)] G(x, \xi, t) d\xi. \quad (2.3.13')
 \end{aligned}$$

Вычислим интегралы, входящие в (2.3.13'):

$$\begin{aligned}
 J_1 = & \int_0^t d\tau \int_{-\infty}^{+\infty} G(x, \xi, t - \tau) d\xi = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \int_0^t d\tau \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \times \\
 & \times \left[-(\mu^2 + \alpha)(t - \tau) + \mu(x - \xi) - \frac{(x - \xi)^2}{4(t - \tau)} \right] \times \\
 & \times \frac{d\tau}{\sqrt{t - \tau}} = \alpha^{-1} (1 - e^{-\alpha t}); \\
 J_2 = & \int_{-\infty}^{+\infty} (u_k - u_1) G(x, \xi, t) d\xi = \\
 = & \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ 2\mu_k k \alpha^{-1} + \frac{\beta_0 v_k}{2\sqrt{\mu_k^2 + \alpha}} \exp(\mu_k(\xi - x_k) - \right. \\
 & \left. - \sqrt{\mu_k^2 + \alpha} |\xi - x_k|) \exp \left[-(\mu^2 + \alpha)t + \mu(x - \xi) - \frac{(x - \xi)^2}{4t} \right] \right\} \times \\
 & \times \frac{d\xi}{2\sqrt{\pi t}} = 2\mu_k k \alpha^{-1} e^{-\alpha t} + \frac{\beta_0 v_k}{4\sqrt{\mu_k^2 + \alpha}} e^{-(\mu^2 + \alpha)t} \times \\
 & \times \left[e^{\mu_1(x - x_k) + (\mu_1 - \mu)^2 t} \operatorname{erfc} \left((\mu_1 - \mu) \sqrt{t} + \frac{x - x_k}{2\sqrt{t}} \right) + \right. \\
 & \left. + e^{\mu_2(x - x_k) + (\mu_2 - \mu)^2 t} \operatorname{erfc} \left((\mu - \mu_2) \sqrt{t} - \frac{x - x_k}{2\sqrt{t}} \right) \right].
 \end{aligned}$$

Подставив значения интегралов и функции G в (2.3.13'), получим

$$u(x, t) = F(x, t) + \frac{\beta_0}{2\sqrt{\pi}} I(x, t); \quad (2.3.14)$$

$$\begin{aligned}
 F(x, t) = & -kx + \frac{2\mu}{\alpha} k(1 - e^{-\alpha t}) + \frac{2\mu_k}{\alpha} k e^{-\alpha t} + \\
 & + \frac{\beta_0 \nu_k}{4 \sqrt{\mu_k^2 + \alpha}} e^{-(\mu^2 + \alpha)t} \left[\exp(\mu_1(x - x_k) + \right. \\
 & \left. + (\mu - \mu)^2 t) \operatorname{erfc} \left((\mu_1 - \mu) \sqrt{t} + \frac{x - x_k}{2 \sqrt{t}} \right) + \right. \\
 & \left. + \exp(\mu_2(x - x_k) + (\mu_2 - \mu)^2 t) \operatorname{erfc} \left((\mu - \mu_2) \sqrt{t} - \frac{x - x_k}{2 \sqrt{t}} \right) \right]; \quad (2.3.15)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 I(x, t) = & \int_0^t (v - \dot{y}(\tau)) \exp \left[-\frac{(x - x^*(\tau))^2}{4(t - \tau)} + \mu(x - y^*(\tau)) - \right. \\
 & \left. - (\mu^2 + \alpha)(t - \tau) \right] \frac{d\tau}{\sqrt{t - \tau}}. \quad (2.3.16)
 \end{aligned}$$

Чтобы выяснить поведение решения (2.3.14) при малых t в окрестности точки $x = y^*(t)$, преобразуем интеграл (2.3.16). Пусть

$$x = y^*(t) + \Delta x = x_k + y(t) + \Delta x. \quad (2.3.17)$$

Будем считать, что функция $y(t)$ представима в виде

$$y(t) = \sum_{i=1}^{\infty} \gamma_i t^{q_i}, \quad (2.3.18)$$

где $q_i = m_i/n_i$ — рациональные возрастающие числа. Тогда

$$\begin{aligned}
 x - y^*(\tau) = & y(t) - y(\tau) + \Delta x = \sum_{i=1}^{\infty} \gamma_i (t^{q_i} - \tau^{q_i}) + \Delta x = \\
 = & \sum_{i=1}^{\infty} \gamma_i \left(t^{\frac{1}{n_i}} - \tau^{\frac{1}{n_i}} \right) \left(t^{\frac{m_i-1}{n_i}} + t^{\frac{m_i-2}{n_i}} \tau^{\frac{1}{n_i}} + \dots + \tau^{\frac{m_i-1}{n_i}} \right) + \Delta x \quad (2.3.19)
 \end{aligned}$$

и выражение $\varphi(t, \tau) = \frac{y(t) - y(\tau)}{t - \tau}$ можно записать в виде

$$\varphi(t, \tau) = \sum_{i=1}^{\infty} \gamma_i \frac{t^{\frac{m_i-1}{n_i}} + t^{\frac{m_i-2}{n_i}} \tau^{\frac{1}{n_i}} + \dots + \tau^{\frac{m_i-1}{n_i}}}{t^{\frac{1}{n_i}} + t^{\frac{m_i-2}{n_i}} \tau^{\frac{1}{n_i}} + \dots + \tau^{\frac{m_i-1}{n_i}}}. \quad (2.3.20)$$

Интеграл I представим в виде

$$I(x, t) = e^{\mu x} \int_0^t (v - \dot{y}(\tau)) \exp \left[- \left(\frac{1}{4} \left(\varphi(t, \tau) + \frac{\Delta x}{t - \tau} \right)^2 - \mu \varphi(t, \tau) + (\mu^2 + \alpha) (t - \tau) \right) \right] \frac{d\tau}{\sqrt{t - \tau}}. \quad (2.3.16')$$

Так как значение t мало, в последнем выражении $\dot{y}(\tau)$ заменим на $\dot{y}(t)$, а $\varphi(t, \tau)$ — на минорирующую или мажорирующую функцию $\hat{\varphi}(t)$. После такой замены вычислим приближенное значение $I(x, t)$ (из последующего текста будет видно, что для интересующих нас членов разложения принятые допущения не внесли существенной погрешности):

$$I(x, t) \approx e^{\mu x} \int_0^t (v - \dot{y}(t)) \exp \left[- \frac{\left(\hat{\varphi}(t) + \frac{\Delta x}{t - \tau} \right)^2}{4} - \mu \hat{\varphi}(t) + (\mu^2 + \alpha) (t - \tau) \right] \frac{d\tau}{\sqrt{t - \tau}} = (v - \dot{y}(t)) \exp \times \\ \times (\mu - 0,5\hat{\varphi}) \Delta x \int_0^t \exp \left[- A(t - \tau) - \frac{\Delta x^2}{4(t - \tau)} \right] \frac{d\tau}{\sqrt{t - \tau}}; \quad (2.3.21)$$

$$A = \left(\frac{1}{2} \hat{\varphi} - \mu \right)^2 + \alpha. \quad (2.3.22)$$

В (2.3.21) интеграл типа свертки легко вычисляется:

$$I(x, t) \approx (v - \dot{y}(t)) e^{(\mu - 0,5\hat{\varphi})\Delta x} \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{A}} \times \\ \times \left[2e^{-\sqrt{A}|\Delta x|} - e^{-\sqrt{A}\Delta x} \operatorname{erfc} \left(\sqrt{A}t - \frac{\Delta x}{2\sqrt{t}} \right) - \right. \\ \left. - e^{\sqrt{A}\Delta x} \operatorname{erfc} \left(\sqrt{A}t + \frac{\Delta x}{2\sqrt{t}} \right) \right]. \quad (2.3.23)$$

Нас интересует поведение решения $u(x, t)$ в окрестности границы раздела фаз при малых значениях t . Будем счи-

тать, что x и $y(t)$ даны выражениями (2.3.17), (2.3.18), причем Δx представима в виде $\Delta x = \epsilon t^{q+1/2}$, $q > 0$. Кроме того, можно показать, что при малых значениях t $y(t) \approx \approx t^{q_1}$, где $q_1 \geq 1$ ($q_1 < 1$ означало бы, что в начальный момент времени происходит плавление, а это, как легко показать, невозможно при $v > v_k$). Имея это в виду, сделаем разложение функций $F(x, t)$, I при малых x :

$$\begin{aligned}
 F(x, t) = & -k(x_k + y(t) + \Delta x) + 2\mu_k \alpha^{-1} (1 - e^{-\alpha t}) + \\
 & + 2\mu_k k \alpha^{-1} e^{-\alpha t} + \frac{\beta_0 v_k}{4\sqrt{\mu_k^2 + \alpha}} \exp(-(\mu^2 + \alpha)t) \times \\
 & \times \left[\exp(\mu_1(y + \Delta x) + (\mu_1 - \mu)^2 t) \operatorname{erfc} \times \right. \\
 & \times \left((\mu_1 - \mu)\sqrt{t} + \frac{y + \Delta x}{2\sqrt{t}} \right) + \exp(\mu_2(y + \Delta x) + \\
 & \left. + (\mu_2 - \mu)^2 t) \operatorname{erfc} \left((\mu - \mu_2)\sqrt{t} - \frac{y + \Delta x}{2\sqrt{t}} \right) \right] = \\
 = & -k(x_k + y(t) + \Delta x) + 2\mu_k \alpha^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n-1} \frac{(\alpha t)^n}{n!} + \\
 & + 2\mu_k k \alpha^{-1} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{(\alpha t)^n}{n!} + \frac{\beta_0 v_k}{4\sqrt{\mu_k^2 + \alpha}} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \times \\
 \times & \frac{((\mu^2 + \alpha)t)^n}{n!} \left[\sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{1}{n!} (\mu_1(y + \Delta x) + (\mu_1 - \mu)^2 t)^n \times \right. \\
 \times & \left(1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} \frac{\left((\mu_1 - \mu)\sqrt{t} + \frac{y + \Delta x}{2\sqrt{t}} \right)^{2n+1}}{n!(2n+1)} \right) + \\
 & + \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{1}{n!} (\mu_2(y + \Delta x) + (\mu - \mu_2)^2 t)^n \times \\
 \times & \left(1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} \frac{\left((\mu - \mu_2)\sqrt{t} - \frac{y + \Delta x}{2\sqrt{t}} \right)^{2n+1}}{n!(2n+1)} \right) \Big];
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 I(x, t) = & \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{A}} (v - \dot{y}(t)) \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (\mu - 0,5\hat{\varphi})^n \Delta x^n \right) \times \\
 \times & \left[2 \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n A^{n/2} |\Delta x|^n \frac{1}{n!} - \left(\sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n A^{n/2} \Delta x^n \frac{1}{n!} \right) \times \right. \\
 & \times \left(1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} \frac{\left(\sqrt{At} - \frac{\Delta x}{2\sqrt{t}} \right)^{2n+1}}{(2n+1)n!} \right) - \\
 & - \left(\sum_{n=0}^{\infty} A^{n/2} \Delta x^n \frac{1}{n!} \right) \times \\
 & \left. \times \left(1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} \frac{\left(\sqrt{At} + \frac{\Delta x}{2\sqrt{t}} \right)^{2n+1}}{(2n+1)n!} \right) \right].
 \end{aligned}$$

Оставляя в разложениях F и I члены до порядка t^2 , $(y + \Delta x)^2$, Δx^2 и делая соответствующие вычисления, получаем приближенное выражение для $u(x, t)$:

$$\begin{aligned}
 u(x, t) = & -\frac{\beta_{v_k}}{2} (y + \Delta x) + \frac{\beta_0}{\sqrt{\pi}} (v - v_k) t^{1/2} + \\
 + & (\mu - \mu_k) \beta_0 v_k t + \frac{\beta_0 v_k}{4\sqrt{\mu_k^2 + \alpha}} \left[\frac{4}{3\sqrt{\pi}} \sqrt{\mu_k^2 + \alpha} ((\mu^2 + \alpha) - \right. \\
 & - 4(\mu_k - \mu)(2\mu_k - \mu)) t^{3/2} - \frac{4}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\mu_k^2 + \alpha} \times \\
 & \times (2\mu_k - \mu) t^{1/2} (y + \Delta x) - \frac{\sqrt{\mu_k^2 + \alpha}}{\sqrt{\pi}} t^{-1/2} (y + \Delta x)^2 + \\
 & + (2\mu_k^2 + \alpha) (y + \Delta x)^2 + (2\mu_k(4\mu_k^2 + \mu + 3\alpha) - \\
 & - 4\mu(2\mu_k^2 + \alpha)) t (y + \Delta x) - (2\mu_k(\mu - \mu_k) + \\
 & + (\mu^2 + \alpha)(1 - \mu^2 - \alpha)) t^2 \left. \right] - \alpha k (\mu - \mu_k)^2 t^2 + \\
 + & \frac{\beta_0}{2\sqrt{\pi}} (v - \dot{y}) (-\sqrt{\pi} |\Delta x| - 2At^{3/2} - 0,5t^{-1/2}\Delta x^2 + \\
 + & 2(\mu - 0,5\hat{\varphi}) t^{1/2}\Delta x - 2(\mu - 0,5\hat{\varphi}) \Delta x |\Delta x|) - \frac{\beta_0}{\sqrt{\pi}} t^{1/2} \dot{y}(t).
 \end{aligned}$$

(2.3.24)

Подставляя в (2.3.24) $x = y^*(t)$ (т. е. $\Delta x = 0$), будем иметь уравнение для определения $y(t)$. Учитывая, что $y(t)$ представлена в виде (2.3.18), получаем

$$\begin{aligned} u(x^*, t) = 0 = & -0,5\beta_0 v_k \sum_{i=1}^{\infty} \gamma_i t^{q_i} - \frac{\beta_0}{\sqrt{\pi}} \sum_{i=1}^{\infty} \gamma_i q_i t^{q_i-1/2} - \\ & - \frac{\beta_0 v_k}{\sqrt{\pi}} (2\mu_k - \mu) \sum_{i=1}^{\infty} \gamma_i t^{q_i+1/2} - \frac{\beta_0 v_k}{4\sqrt{\pi}} \left(\sum_{i=1}^{\infty} \gamma_i t^{q_i} \right)^2 t^{-1/2} + \\ & + \frac{\beta_0 A}{3\sqrt{\pi}} \sum_{i=1}^{\infty} \gamma_i q_i t^{q_i+1/2} + \frac{\beta_0}{\sqrt{\pi}} (v - v_k) t^{1/2} + \beta_0 v_k (\mu - \mu_k) t + \\ & + \left(\frac{\beta_0 v_k}{3\sqrt{\pi}} (\mu^2 + \alpha - 4(\mu_k - \mu)(2\mu_k - \mu)) - \frac{\beta_0 v A}{3\sqrt{\pi}} \right) t^{3/2}. \end{aligned} \quad (2.3.25)$$

Методом неопределенных коэффициентов находим $y(t)$. Приравнявая низшие степени $t\left(\frac{1}{2} \text{ и } q_1 - \frac{1}{2}; \frac{3}{2} \text{ и } q_2 - \frac{1}{2}\right)$, вычисляем $q_1 = 1$, $q_2 = 2$. Неопределенные коэффициенты γ_1 , γ_2 находим, приравнявая к нулю коэффициенты при степенях $t^{1/2}$ и $t^{3/2}$ соответственно:

$$\gamma_1 = v - v_k, \quad \gamma_2 = 0. \quad (2.3.26)$$

Таким образом, имеем единственное решение:

$$y(t) \approx (v - v_k) t + O(t^3). \quad (2.3.27)$$

Подставляя $y(t)$ в выражение (2.3.24) для $u(x, t)$ и учитывая, что все члены разложения, кроме членов, содержащих $t\Delta x$ и Δx^2 , равны нулю, находим

$$\begin{aligned} u(x, t) = & \frac{\beta_0 v_k \mu_k (\mu^2 + \alpha)}{2\sqrt{\mu_k^2 + \alpha}} t \Delta x + \frac{\beta_0 v_k}{2\sqrt{\pi}} \times \\ & \times \left(2\mu_k + \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{\mu_k^2 + \alpha}} \right) \Delta x^2. \end{aligned} \quad (2.3.28)$$

Легко видеть, что $u < 0$ при малых значениях $\Delta x < 0$, т. е. расплав переохлаждается при любом $t > 0$. Тем самым доказано, что задача Стефана в классической постановке имеет единственное решение, причем при $v_0 > v_k$ в объеме расплава непременно возникает переохлаждение.

Классическую задачу Стефана часто формулируют как задачу, не допускающую переохлаждения в объеме расплава [38—40, 86], требуя, чтобы условие Стефана выполнялось на любой поверхности $T(x, y, z, t) = T_c$. Проведенный выше анализ показывает, что задача в такой постановке не имеет классического решения в критических случаях, когда $v_0 > v_k$. В этих случаях имеет смысл рассматривать лишь обобщенное решение задачи (см. главу 3).

2.4. ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ СТЕФАНА В КЛАССИЧЕСКОЙ ПОСТАНОВКЕ

Приведем примеры численного решения задачи Стефана в тех случаях, когда возможно появление переохлаждения в объеме расплава. Хорошо известный эффективный численный метод решения задачи Стефана, разработанный применительно к решению задачи в обобщенной постановке [68, 75], неприменим для решения задачи в классической постановке в тех случаях, когда возможно возникновение переохлаждения. Действительно, при решении задачи в обобщенной постановке граница раздела фаз априори не выделяется и все точки с температурой $T = T_c$ должны быть точками фазового перехода.

Для того чтобы получить классическое решение с переохлажденной зоной, необходимы численные методы с предварительной заменой переменных, переводящей неизвестную границу раздела фаз в известную фиксированную поверхность. Например, если поверхность раздела фаз выражена в виде функции $z = \varphi(x, y, t)$, задачу следует решать в координатах x, y, s , где

$$s = z - \varphi(x, y, t). \quad (2.4.1)$$

Такой метод был предложен в работах [29, 30] под названием метода «выпрямления фронта».

Ниже приводим примеры численного решения задачи направленной кристаллизации слитка в одномерном и двумерном (осесимметрическом) случаях.

Одномерную нестационарную задачу будем решать в постановке (2.2.2)—(2.2.6). В системе координат y, τ положение границы раздела фаз фиксировано ($y = 0$), что позволяет аппроксимировать условие Стефана (2.2.3) с наперед задан-

ной точностью. Условие (2.2.5) реализуется на конечном, достаточно большом расстоянии $y = \pm L$. Для решения задачи использовалась неявная разностная схема при аппроксимации v (τ) на предыдущем слое [9]:

$$T_{i,y\bar{y}}^{n+1} - v^n a^{-2} T_{i,y}^{n+1} - \alpha [T_i^{n+1} - T_1(y_i - (y^*)^n)] = T_{i,t}^n,$$

$$n = 1, 2, 3, \dots, i = -(N_1 - 1), N_1 - 2, \dots, -1, 1, 2, \dots \\ \dots, N_1 - 1; \quad (2.4.2)$$

$$- \gamma \rho \lambda^{-1} v^n = T_{0,y}^n - T_{0,\bar{y}}^n; \quad (2.4.3)$$

$$T_0^{n+1} = T_e; \quad (2.4.4)$$

$$T_{-N,y}^{n+1} - (T_1(y))_{-N,y} = T_{N,\bar{y}}^{n+1} - (T_1(y))_{N,\bar{y}} = 0; \quad (2.4.5)$$

$$T_i^0 = T_0(y_i); \quad (2.4.6)$$

$$(y^*)^n = v_0 - v^n. \quad (2.4.7)$$

При написании разностной схемы (2.4.2) — (2.4.7) использованы общепринятые обозначения [74]:

$$T_i^n = T(y_i, t_n); \quad y_i = ih; \quad t_n = n\Delta t; \quad h = y_{i+1} - y_i;$$

$$\Delta t = t_{n+1} - t_n; \quad T_{i,x}^n = h^{-1} (T_{i+1}^n - T_i^n); \quad T_{i,x}^n =$$

$$= h^{-1} (T_i^n - T_{i-1}^n) \text{ и т. д.} \quad (2.4.8)$$

Реализация разностной схемы сводится к двум прогонкам в интервалах $-L < y < 0$ и $0 < y < L$ и расчету v^n и $(y^*)^n$ из соотношений (2.4.3), (2.4.7). Указанная разностная схема позволяет получить устойчивое решение вплоть до выхода на установившийся режим. Полученное численное решение описывает возникновение и развитие переохлажденной зоны при $v_0 > v_k$. Приведем пример расчета для процесса направленной кристаллизации слитка при следующих исходных данных: $k = 10^3 \cdot \text{°C/м}$; $v_0 = 3,3 \times 10^{-5} \text{ м/с}$; $\lambda = 0,42 \cdot 10^2 \text{ Вт/(м} \cdot \text{°C)}$, $L_0 = 0,42 \times 10^3 \text{ Дж/(кг} \cdot \text{°C)}$, $\rho = 5,3 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$; $\gamma = 6 \cdot 10^5 \text{ Дж/кг}$; $v_k = 1,3 \cdot 10^{-5} \text{ м/с}$; $T_1 = T_e - kx$; $T_e = 1513 \text{ К}$; $R = 0,01 \text{ м}$. На рис. 7 представлены результаты численного решения задачи. Приводится температура для различных моментов времени, включая выход на установившийся режим ($t = 10^4 \text{ с}$). Для сравнения представлен результат аналитического решения квазистационарной задачи (2.1.30),

(2.1.31). Расчетные данные хорошо иллюстрируют возникновение и развитие переохлажденной зоны перед фронтом кристаллизации и подтверждают аналитические результаты, полученные выше.

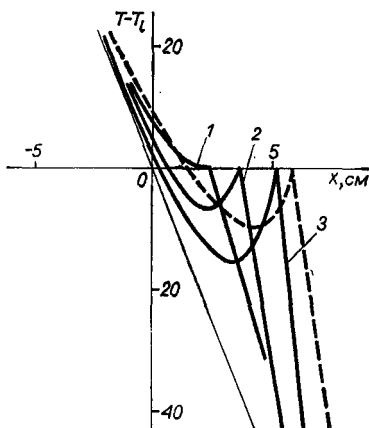


Рис. 7. Осовое распределение температуры в слитке в различные моменты времени:

1 — $t = 1,8 \cdot 10^3$ с; 2 — $t = 5,4 \times 10^3$ с; 3 — $t = 10,8 \cdot 10^3$ с (установившийся режим); ---- — аналитическое решение.

В пространственном случае при отсутствии внутренних источников, когда охлаждение расплава идет с поверхности, вопрос о возникновении переохлаждения становится далеко не очевидным. Например, в случае направленной кристаллизации осесимметрического тела при охлаждении с поверхности принцип максимума допускает наличие переохлажденной области, однако аналитических оценок, подтверждающих наличие переохлаждения (подобных указанным выше для одномерной задачи), получить не удалось. Ниже приведем численное решение двумерной осесимметрической задачи, когда возможно возникновение переохлаждения [55].

Задачу рассмотрим в постановке (2.1.1) — (2.1.5) с заменой граничного условия (2.1.2) на линеаризованное (2.1.2'). Пусть уравнение, определяющее поверхность раздела фаз, $T(r, z, t) = T_c$ разрешено относительно z :

$$z = \varphi(r, t) = s(r, t) - v_0 t. \quad (2.4.9)$$

Произведем замену переменных:

$$x = z - s(r, t) + v_0 t, \quad r = r, \quad t = t. \quad (2.4.10)$$

В новых переменных задачу (2.1.1), (2.1.2'), (2.2.3) — (2.2.5) перепишем в виде (λ — кусочно-постоянна)

$$\begin{aligned} & \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \left[1 + \left(\frac{\partial s}{\partial r} \right)^2 \right] \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) - \\ & - 2\lambda \frac{\partial s}{\partial r} \frac{\partial^2 T}{\partial x \partial r} - \left(\lambda \frac{\partial^2 s}{\partial r^2} + \frac{\lambda}{r} \frac{\partial s}{\partial r} + L_{00} v_0 - L_{01} \rho \frac{\partial s}{\partial t} \right) \frac{\partial T}{\partial x} = \\ & = L_{00} \rho \frac{\partial T}{\partial t}; \end{aligned} \quad (2.4.11)$$

$$-\lambda \left(\frac{\partial T}{\partial r} - \frac{\partial s}{\partial r} \frac{\partial T}{\partial x} \right) = \alpha_0 (T - T_1(x+s)), \quad r = R; \quad (2.4.12)$$

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \frac{\partial}{\partial x} (T - T_1(x+s)) = 0; \quad (2.4.13)$$

$$T(r, x+s(r, 0), 0) = T_0(r, x); \quad (2.4.14)$$

$$\gamma \rho \left(\frac{\partial s}{\partial t} - v_0 \right) = \left[1 + \left(\frac{\partial s}{\partial r} \right)^2 \right] \left[\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right]_{x=0-}^{x=0+}; \quad (2.4.15)$$

$$T(r, 0, t) = T_e. \quad (2.4.16)$$

В принятых переменных граница раздела фаз становится плоской ($x = 0$) и условие (2.4.15) имеет простой вид, аналогичный условию Стефана в одномерном случае, так как $\partial T / \partial r \equiv 0$ при $x = 0$. Однако значительно усложнились коэффициенты уравнения и граничное условие (2.4.12). Что касается коэффициентов уравнения (2.4.11), то при условии существования и ограниченности второй производной по r и первой производной по t функции $s(r, t)$ можно получить априорные оценки, гарантирующие устойчивость соответствующих разностных схем. В то же время обычная разностная аппроксимация условия (2.4.12) с косой производной приводит к неустойчивому разностному счету. Для преодоления этой трудности в уравнение (2.4.12) был введен регуляризирующий член $\varepsilon \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$ с малым параметром ε [55]. Таким образом, вместо (2.4.12) реализуется условие типа «сосредоточенной емкости»:

$$\varepsilon \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \lambda \frac{\partial \varphi}{\partial r} \frac{\partial T}{\partial x} - \lambda \frac{\partial T}{\partial r} = \alpha_0 (T - T_1), \quad r = R. \quad (2.4.17)$$

Не останавливаясь на описании разностной схемы (подробности см. в работе [55]), отметим лишь, что при расчетах был использован локально-одномерный разностный метод

решения многомерных задач [74] с прогонками на линиях, включающих границу $r = R$.

Приведем результаты расчетов для случая направленной кристаллизации слитка. Если за начальное распределение температуры принять $T|_{t=0} = T_1(x)$, а скорость протягивания слитка v_0 взять больше v_k , то с течением времени можно ожидать появления переохлаждения. В табл. 1 представлен фрагмент температурного поля вблизи границы раздела фаз в момент появления переохлаждения, а именно даны расчетные значения отклонения температуры от T_e , т. е. значения $u = T - T_e$, и положение фронта кристаллизации $s(r, t)$. Ось x направлена в сторону твердой фазы. Расчеты проведены при тех же значениях параметров, что и в одномерной задаче (см. с. 41). Как видим, переохлаждение возникает у поверхности и распространяется в глубь расплава. Следует отметить, что при расчете по принятой методике не удается выйти на установившийся режим. При больших значениях t неизбежно появляется неустойчивость, которую не удастся устранить. Чтобы избежать расчетов при

ЗНАЧЕНИЯ ОТКЛОНЕНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ ОТ T_e

$10^2 \cdot x, \text{ м}$			
	0,1	0,2	0,3
	При		
-0,4	1,2	1,1	1,1
-0,2	0,4	0,4	0,3
+0,0	0,0	0,0	0,0
0,2	-3,3	-3,3	-3,3
$10^2 \cdot s, \text{ м}$	1,37	1,37	1,37
	При		
-0,6	0,9	0,8	0,8
-0,4	0,2	0,1	0,1
-0,2	-0,2	-0,2	-0,2
0,0	0,0	0,0	0,0
0,2	-3,7	-3,8	-3,8
$10^2 \cdot s, \text{ м}$	1,58	1,57	1,56

большой длительности процесса, был исследован режим охлаждения, при котором можно ожидать появления переохлаждения уже в начальный период процесса. С этой целью было задано начальное распределение температуры, полученное из решения одномерной квазистационарной задачи при $v_0 = v_k$ [см. (2.1.30), (2.1.31)]. В начальный момент граница раздела фаз находится в холодной части печи ($s = x_k$) и поверхность образца интенсивно охлаждается. На рис. 8 показано положение изотермы $T = T_e$, не являющейся границей раздела фаз, в различные моменты времени. Ось Or является границей раздела фаз. Таким образом, зона переохлаждения находится между осью Or и соответствующей изотермой. Как показывают результаты расчета, в данном случае сразу же появляется переохлажденная зона, но через некоторое время переохлаждение начинает уменьшаться, локализуясь вблизи поверхности слитка.

Следует отметить, что в описанном выше случае направленной кристаллизации ситуация чрезвычайно сложна и приведенный пример численного решения вряд ли точно опи-

Таблица 1

$10^2 \cdot r, \text{ м}$						
0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	1,0
$t = 500 \text{ с}$						
1,0	1,0	0,8	0,7	0,5	0,3	0,1
0,3	0,2	0,2	0,1	0,0	-0,1	-0,4
0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
-3,4	-3,4	-3,5	-3,6	-3,6	-3,7	-3,6
1,35	1,34	1,33	1,30	1,28	1,24	1,19
$t = 575 \text{ с}$						
0,7	0,5	0,3	0,1	0,0	0,0	0,0
0,0	-0,2	-0,3	-0,5	-0,6	-0,7	-0,9
-0,3	-0,4	-0,4	-0,5	-0,6	-0,7	-1,0
0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
-3,9	-4,0	-4,2	-4,2	-3,9	-3,5	-3,4
1,55	1,53	1,51	1,48	1,44	1,39	1,33

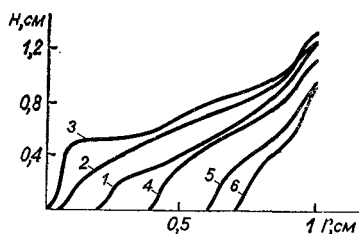


Рис. 8. Развитие переохлажденной зоны во времени (в с):

1 — 0,36; 2 — 0,72; 3 — 1,08; 4 — 8,64; 5 — 18; 6 — 21.

сывает классическое решение задачи. Действительно, если на поверхности расплава вблизи границы раздела фаз развивается переохлаждение, то фронт кристаллизации становится неустойчивым и вдоль поверхности могут расти дендриты, снимающие переохлаждение. В таком случае граница раздела фаз становится весьма сложной поверхностью, не обладающей достаточной гладкостью ($\partial s/\partial r \rightarrow \infty$ при $r \rightarrow R$), так что использованный выше метод расчета перестает «работать». Подробно обсужден этот вопрос в главе 3 после введения обобщенного решения задачи.

2.5. ТЕРМОДИФФУЗИОННАЯ ЗАДАЧА В КЛАССИЧЕСКОЙ ПОСТАНОВКЕ

В работе [49] приведены два случая кристаллизации бинарного сплава, когда в объеме расплава имеется переохлаждение. Это модельные примеры автомодельной и квазистационарной задач. Приведем здесь анализ этих случаев, сделанный автором указанной выше работы.

2.5.1. РЕШЕНИЕ АВТОМОДЕЛЬНОЙ ЗАДАЧИ

Постановка задачи следующая:

$$\frac{\partial T_1}{\partial t} = a_1 \frac{\partial^2 T_1}{\partial x^2}, \quad 0 < x < \xi, \quad t > 0; \quad (2.5.1)$$

$$\frac{\partial T_2}{\partial t} = a_2 \frac{\partial^2 T_2}{\partial x^2}, \quad x > \xi, \quad t > 0; \quad (2.5.2)$$

$$\frac{\partial C_1}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 C_1}{\partial x^2}, \quad 0 < x < \xi, \quad t > 0; \quad (2.5.3)$$

$$\frac{\partial C_2}{\partial t} = D_2 \frac{\partial^2 C_2}{\partial x^2}, \quad \xi > 0, \quad t > 0; \quad (2.5.4)$$

$$\begin{aligned} \lambda_1 \frac{\partial T_1}{\partial x} - \lambda_2 \frac{\partial T_2}{\partial x} &= \gamma \rho \frac{d\xi}{dt}; \quad D_1 \frac{\partial C_1}{\partial x} - D_2 \frac{\partial C_2}{\partial x} = \\ &= (C_l - C_s) \frac{d\xi}{dt}, \quad x = \xi; \end{aligned} \quad (2.5.5)$$

$$T_1 = T_2 = T_l = \varphi(C_l); \quad C_s/C_l = f(C_l), \quad x = \xi; \quad (2.5.6)$$

$$T_1 = T_0; \quad \frac{\partial C_1}{\partial x} = 0, \quad x = 0; \quad (2.5.7)$$

$$T_2 = T_H; \quad C_2 = C_H, \quad x = \infty. \quad (2.5.8)$$

Индекс 1 относится к жидкой фазе, 2 — к твердой. Функции $\varphi(C_l)$ и $f(C_l)$ определяются диаграммой фазового равновесия. D_1, D_2 — коэффициенты диффузии твердой и жидкой фаз соответственно; $a_i = \lambda_i/L_i\rho$ — температуропроводность твердой ($i = 1$) и жидкой ($i = 2$) фаз.

Решение задачи ищем в виде $\xi = \beta\sqrt{t}$, а функции T и C — в виде комбинации функций $\operatorname{erf}\left(b \frac{x}{2\sqrt{t}}\right)$. Тогда

$$T_1 = T_0 + (T_l - T_0) \frac{\operatorname{erf} v_1 \frac{x}{2\sqrt{t}}}{\operatorname{erf} \frac{v_1 \beta}{2}}; \quad (2.5.9)$$

$$T_2 = T_H - (T_H - T_l) \frac{\operatorname{erfc} v_2 \frac{x}{2\sqrt{t}}}{\operatorname{erfc} v_2 \frac{\beta}{2}}; \quad (2.5.10)$$

$$C_1 = C_s; \quad C_2 = C_H - (C_H - C_l) \frac{\operatorname{erfc} w_2 \frac{x}{2\sqrt{t}}}{\operatorname{erfc} w_2 \frac{\beta}{2}}; \quad (2.5.11)$$

$$v_i = a_i^{-\frac{1}{2}}; \quad w_i = D_i^{-\frac{1}{2}}, \quad i = 1, 2, \quad \operatorname{erfc} x = 1 - \operatorname{erf} x. \quad (2.5.12)$$

Константы C_s , C_l , T_l , β определяются условиями (2.5.5), (2.5.6):

$$\frac{C_l - C_H}{C_l - C_s} = \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{D_2}} \beta \exp\left(\frac{\beta^2 \omega_2^2}{4}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{\beta \omega_2}{2}\right); \quad (2.5.13)$$

$$\begin{aligned} \frac{T_l - T_0}{T_l - T_H} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{\gamma \rho}{\sqrt{\lambda_1}} e^{\frac{(v_1 \beta)^2}{4}} \operatorname{erfc} \frac{\beta v_1}{2} - \\ - \sqrt{\frac{\lambda_2}{\lambda_1}} e^{\left(\frac{v_1 \beta}{2}\right)^2 - \left(\frac{v_2 \beta}{2}\right)^2} \frac{\operatorname{erf} \frac{v_1 \beta}{2}}{\operatorname{erfc} \frac{v_2 \beta}{2}}. \end{aligned} \quad (2.5.14)$$

Легко заметить, что функция, стоящая в правой части уравнения (2.5.13), изменяется от 0 до 1 при изменении β от 0 до ∞ . В то же время $\frac{C_l - C_H}{C_l - C_s} \leq 1$, так как из интегрального баланса сохранения массы следует, что всегда $C_s \leq C_H$. Следовательно, уравнение (2.5.13) всегда имеет единственный корень β .

Проанализируем случаи возможного появления переохлаждения в расплаве. Рассмотрим функцию

$$u = T_2 - \varphi(C_2). \quad (2.5.15)$$

При $x = \xi$ $u = 0$, и если при каком-либо $x > \xi$ $u < 0$ или $\frac{\partial u}{\partial x} < 0$ при $x = \xi$, то расплав будет переохлажден.

Вычислив производную $\frac{\partial u}{\partial x}$ при $x = \xi$, найдем, что ее знак определяется знаком выражения

$$F = \frac{\partial \varphi}{\partial C_2} + \frac{T_H - T_l}{C_l - C_s} \frac{2D_2 v_2}{\sqrt{\pi} \beta} \frac{\exp\left(-\frac{v_2^2 \beta^2}{4}\right)}{\operatorname{erfc} \frac{v_2 \beta}{2}}. \quad (2.5.16)$$

Теперь проанализируем выражение (2.5.16) в случае диаграммы фазового равновесия, представленной на рис. 9. Ясно, что при малых β $F > 0$ и переохлаждения не будет. При больших β , воспользовавшись асимптотическим разложением $\operatorname{erfc} x$, найдем

$$F \approx \frac{\partial \varphi}{\partial C_2} + \frac{4}{\sqrt{\pi}} \frac{D_2}{a_2} \frac{T_H - T_l}{C_l - C_s}, \quad (2.5.16')$$

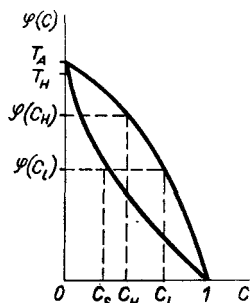


Рис. 9. Вид диаграммы фазового равновесия.

НО

$$\frac{T_H - T_l}{C_l - C_s} = \frac{\delta T_H}{C_l - C_s} - \frac{\varphi(C_l) - \varphi(C_H)}{C_l - C_s}, \quad (2.5.17)$$

где δT_H — начальный перегрев расплава. Вторая дробь в правой части (2.5.17) сравнима с $\frac{\partial \varphi}{\partial C_2}$ (рис. 9). Если учесть, что для металлов $D_2 a_2^{-1} \approx 5 \cdot 10^{-4}$, а для неметаллических веществ $D_2 a_2^{-1} \approx 10^{-2}$, то становится ясным, что при не очень больших δT_H и не очень малых начальных концентрациях $C_H F < 0$, т. е. расплав будет переохлажден.

2.5.2. РЕШЕНИЕ КВАЗИСТАЦИОНАРНОЙ ЗАДАЧИ

Постановка задачи следующая:

$$a_1 \frac{d^2 T_1}{dx^2} + v_0 \frac{dT_1}{dx} = 0; \quad D_1 \frac{d^2 C_1}{dx^2} + v_0 \frac{dC_1}{dx} = 0, \quad (2.5.18)$$

$$-L < x < 0;$$

$$a_2 \frac{d^2 T_2}{dx^2} + v_0 \frac{dT_2}{dx} = 0; \quad D_2 \frac{d^2 C_2}{dx^2} + v_0 \frac{dC_2}{dx} = 0, \quad x > 0; \quad (2.5.19)$$

$$\lambda_1 \frac{dT_1}{dx} = q; \quad \frac{dC_1}{dx} = 0, \quad x = -L; \quad (2.5.20)$$

$$T_2 = T_H; \quad C_2 = C_H, \quad x \rightarrow \infty; \quad (2.5.21)$$

$$\lambda_1 \frac{dT_1}{dx} - \lambda_2 \frac{dT_2}{dx} = \gamma \rho v_0; \quad T_l = \varphi(C_l), \quad x = 0; \quad (2.5.22)$$

$$D_1 \frac{dC_1}{dx} - D_2 \frac{dC_2}{dx} = (C_l - C_s) v_0; \quad C_s = C_{lf}(C_l), \quad x = 0. \quad (2.5.23)$$

Решение задачи имеет вид

$$\left. \begin{aligned} T_1 &= T_l + \frac{a_1}{v_0} \frac{q}{\lambda_1} e^{-\frac{v_0}{a_1} L} (1 - e^{-\frac{v_0}{a_1} x}); \quad C_1 = C_s = C_{\text{н}}; \\ T_2 &= T_{\text{н}} + (T_l - T_{\text{н}}) e^{-\frac{v_0}{a_2} x}; \quad C_2 = C_{\text{н}} + (C_l - C_{\text{н}}) e^{-\frac{v_0}{D_2} x}. \end{aligned} \right\} \quad (2.5.24)$$

Скорость v_0 можно найти из первого условия (2.5.22):

$$v_0 [\gamma\rho + (T_{\text{н}} - T_l) L_2 \rho] = q \exp\left(-\frac{v_0}{a_1} L\right). \quad (2.5.25)$$

Легко видеть, что v_0 определяется однозначно при любых $q > 0$, $T_{\text{н}} > T_l$. Значения C_l и T_l на фронте кристаллизации определяются вторыми условиями (2.5.22), (2.5.23).

Условие появления переохлаждения определяется знаком функции

$$u = T_2 - \varphi(C_2) \quad (2.5.26)$$

при $x > 0$. Если $u < 0$ или $u'_x(0) < 0$, расплав будет переохлажден. Найдем u'_x при $x = 0 +$:

$$\frac{du}{dx} \Big|_{x=0+} = \frac{v_0}{D_2} (C_l - C_{\text{н}}) \left[\frac{\partial \varphi}{\partial C_2} + \frac{D_2}{a_2} \frac{\delta T_{\text{н}} + \varphi(C_l) - \varphi(C_{\text{н}})}{C_l - C_{\text{н}}} \right]. \quad (2.5.27)$$

Как видим, знак u'_x не зависит от v_0 и $u'_x < 0$, как и в предыдущем случае, при не очень больших $\delta T_{\text{н}}$ и не очень малых $C_{\text{н}}$:

$$\frac{D_2}{a_2} \frac{\delta T_{\text{н}}}{C_l - C_{\text{н}}} < -\frac{d\varphi}{dC_2}. \quad (2.5.28)$$

Таким образом, при любой скорости кристаллизации расплав будет переохлажден, если выполняется неравенство (2.5.28).

Последний модельный пример носит несколько искусственный характер, хотя бы потому, что осуществить процесс кристаллизации с постоянной скоростью при условии теп-

лоотвода через кристалл практически очень трудно или даже невозможно. Ниже приведем анализ модельной задачи, более близкой к реальному физическому процессу.

2.5.3. НАПРАВЛЕННАЯ КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ СЛИТКА

Рассмотрим одномерную модель процесса направленной кристаллизации бинарного расплава в следующей постановке:

$$\frac{d^2T}{dx^2} - 2\mu \frac{dT}{dx} - \alpha(T - T_1(x + x_1)) = 0, \quad x \neq 0; \quad (2.5.29)$$

$$\frac{d^2C}{dx^2} - v \frac{dC}{dx} = 0, \quad -\delta < x < 0; \quad (2.5.30)$$

$$\left. \frac{dT}{dx} \right|_{x=0+} - \left. \frac{dT}{dx} \right|_{x=0-} = -\gamma\rho\lambda^{-1}v_0; \quad T = T_1 = \varphi(C_l); \quad x = 0; \quad (2.5.31)$$

$$\frac{dC}{dx} = (C_l - C_s)v; \quad C_s = C_l m(C_l); \quad x = 0; \quad (2.5.32)$$

$$\frac{d}{dx}(T - T_1) = 0, \quad x \rightarrow \pm \infty; \quad C = C_0, \quad x = -\delta; \quad (2.5.33)$$

$$T_1(x) = T_A - kx; \quad (2.5.34)$$

$$2\mu = L_0\lambda^{-1}\rho v_0; \quad v = D^{-1}v_0; \quad \alpha = \alpha_0\lambda^{-1}; \quad \lambda_1 = \lambda_2 = \lambda; \quad (2.5.35)$$

$$D_1 = 0; \quad D_2 = D.$$

Напомним, что здесь k — температурный градиент на муфеле печи сопротивления, x_1 — положение границы раздела фаз относительно неподвижных координат. Концентрация C описывается уравнением диффузии в пределах пограничного концентрационного слоя δ , который определяется характером конвективного движения в расплаве. Концентрация в твердой фазе должна быть постоянной. Решение задачи имеет вид

$$T = T_1(x + x_1) + 2\mu k\alpha^{-1} + \frac{\gamma\rho v_0}{2\lambda\sqrt{\mu^2 + \alpha}} \exp(\mu x - \sqrt{\mu^2 + \alpha}|x|); \quad (2.5.36)$$

$$C = C_0 \frac{1 + (m^{-1} - 1) \exp(vx)}{1 + (m^{-1} - 1) \exp(-v\delta)}. \quad (2.5.37)$$

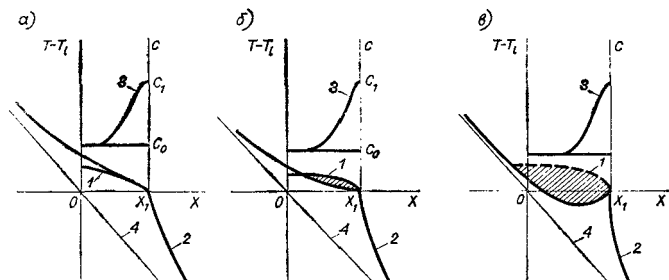


Рис. 10. Осевое распределение температуры и концентрации: 1 — равновесная температура; 2 — температура в образце; 3 — распределение концентрации в пределах δ -слоя; 4 — температура печи. $a - v_0 < v_k$; $b - v_0 > v_k$; $c - v_0 > v_k^0 = \frac{2\lambda k}{\rho\gamma}$.

Положение границы раздела фаз определится условием (2.5.31):

$$x_1 = \frac{2\mu}{\alpha} + \frac{\gamma\rho v_0}{2\lambda k \sqrt{\mu^2 + \alpha}} - \frac{1}{k} \varphi(C_l). \quad (2.5.38)$$

Найдем условие возникновения переохлаждения в объеме расплава. Если обозначить

$$u = T - \varphi(C), \quad (2.5.39)$$

то

$$\left. \frac{du}{dx} \right|_{x=0-} = -k + \frac{\gamma\rho v_0}{2\lambda} \frac{\mu + \sqrt{\mu^2 + \alpha}}{\sqrt{\mu^2 + \alpha}} - \frac{d\varphi}{dC} \frac{(m^{-1} - 1) v C_0}{1 + (m^{-1} - 1) \exp(-v\delta)}. \quad (2.5.40)$$

Условие $du/dx = 0$ при $x = 0$ — определяет критическое значение скорости кристаллизации:

$$v_k = k \left(\frac{\gamma\rho}{2\lambda} \frac{\mu + \sqrt{\mu^2 + \alpha}}{\sqrt{\mu^2 + \alpha}} - \frac{(m^{-1} - 1) \varphi' C_0}{D [1 + (m^{-1} - 1) \exp(-v\delta)]} \right)^{-1}. \quad (2.5.41)$$

При $v_0 > v_k$ возникает переохлаждение. Если $\mu^2 \alpha^{-1} \ll 1$, а δ достаточно велико (пренебрежение конвекцией в расплаве), выражение для v_k упрощается:

$$v_k = k \left(\frac{\gamma\rho}{2\lambda} - (m^{-1} - 1) \varphi' C_0 D^{-1} \right)^{-1}. \quad (2.5.42)$$

В случае кристаллизации однокомпонентного расплава $v_k^0 = 2\lambda k/\gamma\rho$. При кристаллизации бинарного сплава v_k значительно меньше v_k^0 и во многих случаях будет определяться вторым слагаемым в (2.5.42), т. е. диффузионным членом. На рис. 10 представлено качественное поведение полученного решения. При $v_0 < v_k$ процесс направленной кристаллизации протекает без переохлаждения. В случае $v_0 > v_k$ возникает переохлаждение, которое можно назвать «диффузионным». Если же $v_0 > v_k^0$, то перед фронтом кристаллизации существует обширная зона переохлаждения, причем температура в расплаве опускается даже ниже фактической равновесной температуры на фронте кристаллизации.

Глава 3

ОБОБЩЕННАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ В СЛУЧАЕ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ОДНОКОМПОНЕНТНОГО РАСПЛАВА

3.1. ОБОБЩЕННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ В ОБОБЩЕННОЙ ПОСТАНОВКЕ

Примеры, приведенные в предыдущей главе, указывают на необходимость обобщения постановки задачи, описывающей кристаллизацию. Возникновение переохлаждения в объеме расплава может привести к неустойчивости фронта кристаллизации и росту дендритов либо к зарождению новых кристаллов в объеме расплава. Классическая запись уравнений и условий в этом случае теряет смысл уже потому, что для выполнения условия Стефана (2.1.5) требуется существование достаточно гладкой поверхности фазового перехода.

Обобщенная постановка задачи должна исключать возможность появления переохлаждения в объеме расплава. Для этого, как было отмечено в главе 1, достаточно сформулировать условия Стефана следующим образом: граница раздела фаз отыскивается как множество точек, в которых $T = T_c$, причем на этом множестве выполняется условие (1.0.3). При такой формулировке задача не будет иметь классического решения с гладкой границей раздела фаз, если $v > v_k$. В этом случае следует допустить наличие дисперсной области, занятой как твердой, так и жидкой фазами. Решение задачи надо понимать лишь в обобщенном смысле. Для изучения обобщенного решения прежде всего необходимо ввести обобщенную запись уравнения энергетического баланса [41, 68, 81]. Она может быть получена путем введения осредненных величин по элементарным объемам. Для упрощения записи рассмотрим одномерный случай*.

В обобщенной постановке, не допускающей переохлаж-

* Подробный вывод осредненных уравнений в пространственном случае для более общей системы термодиффузионных уравнений сделан в параграфе 4.2.

дения, уравнение и условия Стефана записываются в виде

$$L(T) \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right) + F(x, t), \quad T \neq T_e; \quad (3.1.1)$$

$$\gamma \rho \frac{d\xi}{dt} = \left[\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right]_{T=T_e+}^{T=T_e-}, \quad (3.1.2)$$

где $x = \xi(t)$ — уравнение изотермы $T(x, t) = T_e$, разрешенное относительно x ,

$$L(T) = \begin{cases} L_1, & T < T_e; \\ L_2, & T > T_e; \end{cases} \quad \lambda(T) = \begin{cases} \lambda_1, & T < T_e; \\ \lambda_2, & T > T_e. \end{cases} \quad (3.1.3)$$

Здесь $L_1, L_2, \lambda_1, \lambda_2$ — коэффициенты объемной теплоемкости и теплопроводности твердой и жидкой фаз соответственно. Разобьем ось Ox на элементарные интервалы Δx так, что $x_{i+1} - x_i = \Delta x$, $i = 1, 2, 3, \dots$, и проинтегрируем уравнение (3.1.1) по интервалу (x_i, x_{i+1}) . Получим

$$L(T) \frac{\partial}{\partial t} \int_{x_i}^{x_{i+1}} T dx = \left[\lambda(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right]_{x=x_i}^{x=x_{i+1}} + \int_{x_i}^{x_{i+1}} F(x, t) dx, \quad \xi \in (x_i, x_{i+1}); \quad (3.1.4)$$

$$\int_{x_i}^{\xi(t)} L_1 \frac{\partial T}{\partial t} dx + \int_{\xi(t)}^{x_{i+1}} L_2 \frac{\partial T}{\partial t} dx = \lambda_2 \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=x_{i+1}} - \lambda_1 \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=x_i} + \int_{x_i}^{x_{i+1}} F(x, t) dx + \lambda_1 \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=\xi-} - \lambda_2 \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=\xi+}, \quad (3.1.5)$$

$$\xi \in (x_i, x_{i+1}),$$

НО

$$\left. \begin{aligned} \int_{x_i}^{\xi(t)} L_1 \frac{\partial T}{\partial t} dx &= L_1 \frac{\partial}{\partial t} \int_{x_i}^{\xi(t)} T dx - L_1 T_e \frac{d\xi}{dt}, \\ \int_{\xi(t)}^{x_{i+1}} L_2 \frac{\partial T}{\partial t} dx &= L_2 \frac{\partial}{\partial t} \int_{\xi(t)}^{x_{i+1}} T dx + L_2 T_e \frac{d\xi}{dt}. \end{aligned} \right\} \quad (3.1.6)$$

Перепишем (3.1.5) с учетом (3.1.6) и (3.1.2):

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \int_{x_i}^{x_{i+1}} L(T) T dx + |(L_2 - L_1) T_e - \gamma \rho| \frac{d\xi}{dt} = \\ & = \lambda_2 \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=x_{i+1}} - \lambda_1 \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=x_i} + \int_{x_i}^{x_{i+1}} F(x, t) dx. \end{aligned} \quad (3.1.5')$$

Функцию $\xi'(t)$ представим в виде

$$\frac{d\xi}{dt} = \Delta x \frac{d}{dt} \left(\frac{\xi(t) - x_i}{\Delta x} \right) = \Delta x \frac{\partial \eta}{\partial t}, \quad (3.1.7)$$

где η — доля твердой фазы в интервале Δx . Введем осредненные по интервалу Δx величины:

$$T_i = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_i}^{x_{i+1}} T dx, \quad F_i = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_i}^{x_{i+1}} F(x, t) dx. \quad (3.1.8)$$

Если $\xi \in (x_i, x_{i+1})$, то осредненный коэффициент теплопроводности в этом интервале равен обратному значению суммы тепловых сопротивлений твердой и жидкой частей интервала Δx :

$$\lambda_i = \left(\frac{\eta}{\lambda_1} + \frac{1 - \eta}{\lambda_2} \right)^{-1}. \quad (3.1.9)$$

Выражая приближенно значения производных и потоков в (3.1.4), (3.1.5') через средние величины

$$\frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=x_i} \approx \Delta x^{-1} (T_i - T_{i-1}); \quad \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=x_{i+1}} = \Delta x^{-1} (T_{i+1} - T_i);$$

$$\lambda_2 \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=x_{i+1}} = \lambda_i (T_{i+1} - T_i) \Delta x^{-1};$$

$$\lambda_1 \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=x_i} = \lambda_{i-1} (T_i - T_{i-1}) \Delta x^{-1};$$

$$\begin{aligned} \Delta x^{-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} L(T) T dx & \approx T_i \Delta x^{-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} L(T) dx = T_i (L_1 \eta + \\ & + L_2 (1 - \eta)) \end{aligned}$$

и деля обе части этих уравнений на Δx , получаем уравне-

ния для осредненных величин:

$$L(T_i) \frac{\partial T_i}{\partial t} = \left(\lambda_{i+1} \frac{T_{i+1} - T_i}{\Delta x} - \lambda_i \frac{T_i - T_{i-1}}{\Delta x} \right) \Delta x^{-1} + F_i, \quad (3.1.10)$$

$$\xi \in (x_i, x_{i+1});$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} [(L_1 \eta + (1 - \eta) L_2) T_i + ((L_2 - L_1) T_e - \gamma \rho) \eta] = \\ & = \left(\lambda_i \frac{T_{i+1} - T_i}{\Delta x} - \lambda_{i-1} \frac{T_i - T_{i-1}}{\Delta x} \right) \Delta x^{-1} + F_i, \quad \xi \in (x_i, x_{i+1}). \end{aligned} \quad (3.1.11)$$

В (3.1.11), строго говоря, нельзя перейти к пределу при $\Delta x \rightarrow 0$, так как η не имеет определенного предела, хотя для любого конечного Δx она определяется однозначно:

$$0 < \eta = (\xi(t) - x_i) \Delta x^{-1} < 1.$$

В данном случае особенно четко проявляется противоречие между дифференциальной и конечно-разностной формами записи осредненных уравнений. В точном смысле верны лишь уравнения (3.1.10), (3.1.11) при конечном Δx . Для записи их будем пользоваться дифференциальной формой, понимая производные в обобщенном смысле или приближенно как соответствующие конечные разности*. Уравнения (3.1.10), (3.1.11) можно записать в едином виде для любого интервала (x_i, x_{i+1}) :

$$\frac{\partial a}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda(\eta) \frac{\partial T}{\partial x} \right) + F(X, t); \quad (3.1.12)$$

$$\eta(T) = \begin{cases} 1, & T < T_e, \\ 0, & T > T_e; \end{cases} \quad (3.1.13)$$

$$a = (L_1 \eta + (1 - \eta) L_2) T + [(L_2 - L_1) T_e - \gamma \rho] \eta; \quad (3.1.14)$$

$$\lambda(\eta) = [\lambda_1 \eta^{-1} + \lambda_2 (1 - \eta)^{-1}]^{-1}, \quad (3.1.15)$$

где a — энтальпия, или теплосодержание элемента Δx ; X — макрокоордината вдоль оси Ox . Получили так называемую энтальпийную форму записи уравнения теплового баланса [68, 81]. Можно показать, что обобщенная запись уравнения в виде (3.1.12) справедлива и в случае дисперсной границы раздела фаз.

* В работе [70] дано строгое обоснование предельного перехода для одномерного случая.

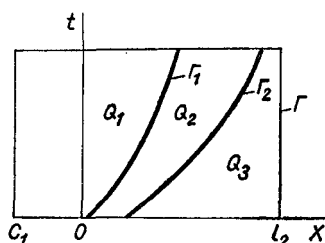


Рис. 11. Область определения обобщенного решения:

Q_1 — область, занятая твердой фазой; Q_2 — двухфазная область; Q_3 — область, занятая жидкой фазой; Γ_1, Γ_2 — границы двухфазной зоны.

В общем случае, когда существует дисперсная зона, функция η будет иметь вид

$$\eta(T, x, t) = \begin{cases} 1, & T < T_e; \\ \bar{\eta}(x, t), & T \equiv T_e; \\ 0, & T > T_e. \end{cases} \quad (3.1.16)$$

При существовании гладкой границы раздела фаз обобщенное уравнение (3.1.12) эквивалентно классическому уравнению (3.1.1) и условию (3.1.2). Рассмотрим, чему соответствует обобщенная запись (3.1.12), (3.1.14) — (3.1.16) в том случае, когда существует двухфазная зона. После введения осредненных величин T, F, η можно ожидать, что будет существовать классическое (гладкое) решение задачи. Допустим существование гладких границ $x_1^-(t), x_2^-(t)$ двухфазной области Q_2 и гладкой функции $0 < \bar{\eta}(x, t) < 1$ в этой области. Тогда в каждой из областей Q_1, Q_2, Q_3 (рис. 11) уравнение (3.1.12) соответственно примет вид

$$L_1 \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_1 \frac{\partial T}{\partial x} \right) + F(x, t), \quad (x, t) \in Q_1; \quad (3.1.17)$$

$$\gamma \rho \frac{\partial \bar{\eta}}{\partial t} + F(x, t) = 0, \quad T \equiv T_e, \quad (x, t) \in Q_2; \quad (3.1.18)$$

$$L_2 \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_2 \frac{\partial T}{\partial x} \right) + F(x, t), \quad (x, t) \in Q_3. \quad (3.1.19)$$

На границах двухфазной области Q_2 возможны разрывы первого рода функции η . В таком случае необходимо записать условия баланса на этих границах:

$$\gamma \rho (1 - \eta_1) \frac{dx_1(t)}{dt} = \lambda_1 \frac{\partial T}{\partial x}, \quad T = T_e, \quad x = x_1(t) -; \quad (3.1.20)$$

$$\gamma \rho \eta_2 \frac{dx_2(t)}{dt} = -\lambda_2 \frac{\partial T}{\partial x}, \quad T = T_e, \quad x = x_2(t) +. \quad (3.1.21)$$

Уравнения (3.1.17), (3.1.19) и условия (3.1.20), (3.1.21) при заданных начальных и граничных условиях определяют температуру T во всей области Q_1 , а также границы $x_1(t)$, $x_2(t)$ двухфазной зоны. Уравнение (3.1.18) определяет функцию η в пределах двухфазной области Q_2 . Однако значения η_1 , η_2 остаются не определенными. После замены переменной в уравнении (3.1.18)

$$y = x - x_2(t), \quad (3.1.22)$$

переводящей начало координат на границу $x_2(t)$ начала двухфазной зоны, получим квазилинейное уравнение первого порядка

$$\gamma\rho \left(\frac{\partial \bar{\eta}}{\partial t} - \frac{dx_2}{dt} \frac{\partial \bar{\eta}}{\partial y} \right) + F(y + x_2(t), t). \quad (3.1.23)$$

Теперь ясно, что для однозначного определения функции $\bar{\eta}$ необходимо задать ее значение при $y = 0$. Значение же η_2 пока остается не определенным. Покажем, что в случае $dx_2/dt > 0$ η_2 не может отличаться от нуля. Действительно, если $\eta_2 > 0$, то из условия (3.1.21) получаем $\partial T/\partial x < 0$, т. е. перед началом двухфазной зоны в расплаве имеется переохлаждение, чего не может быть согласно постановке задачи, не допускающей переохлаждения. В случае $dx_2/dt < 0$ η_2 задается как значение функции $\bar{\eta}(x, t)$ при $x = x_2(t)$.

Отметим, что в конце двухфазной зоны функция $\bar{\eta}$ однозначно определяется уравнением (3.1.23). Следовательно, при $x = x_1(t)$ возможно скачкообразное изменение функции η от η_1 до 1. Таким образом, в случае кристаллизации на границах двухфазной зоны выполняются условия (3.1.20) и

$$\frac{\partial T}{\partial x} = 0, \quad x = x_2(t) +. \quad (3.1.21')$$

О п р е д е л е н и е 3.1. Классическим решением задачи кристаллизации в случае существования двухфазной зоны назовем функции T , η , имеющие непрерывные производные $\partial T/\partial t$ и $\partial^2 T/\partial x^2$ внутри областей Q_1 , Q_3 и $\partial \bar{\eta}/\partial t$, $\partial \bar{\eta}/\partial x$ внутри области Q_2 , удовлетворяющие уравнениям (3.1.17) — (3.1.19), а также условиям (3.1.20), (3.1.21') (или (3.1.21) в случае плавления) и соответствующим начальным и граничным условиям.

Изучение классического решения задачи сильно осложняется требованием выделения границы раздела фаз или границ двухфазной области. Поэтому трудно получить эффективные методы решения. Задача поддается решению, по-видимому, лишь на модельных примерах. Следует напомнить, что до сих пор не доказано существование классического решения задачи Стефана в пространственном случае, а стало быть, нет и эффективного алгоритма решения. В то же время весьма эффективным оказался аппарат обобщенных решений. Теория обобщенного решения задачи Стефана была предложена и развита в [68, 69, 75]. В этих работах доказаны теоремы существования и единственности обобщенного решения задачи, а также предложены эффективные методы ее решения. Покажем ниже, что эти теоремы без существенных изменений распространяются на случай возникновения и наличия двухфазной области [4].

С целью упрощения записи будем рассматривать одномерное уравнение. Для (3.1.12) зададим граничные условия первого рода*:

$$T(l_1, t) = f_1(t), \quad T(l_2, t) = f_2(t). \quad (3.1.24)$$

Начальные условия следует задать в виде

$$T(x, 0) = T_0(x), \quad \bar{\eta}(x, 0) = \eta_0(x), \quad a|_{t=0} = a_0(x). \quad (3.1.25)$$

Рассмотрим обобщенные решения в соболевских пространствах $W_2^{p,q}(Q_t)$ функций, имеющих обобщенные производные по x (по t) до p -го (q -го) порядка, суммируемые с квадратом**.

О п р е д е л е н и е 3.2. Обобщенным решением задачи (3.1.12), (3.1.16), (3.1.24), (3.1.25) называются функция T пространства $W_2^{1,0}$ (или пространства $V_2^{1,0}(Q_t)$), принимающая значения (3.1.24) на границах L_1, L_2 , и измеримая ограниченная функция $\bar{\eta}(x, t)$, удовлетворяющие интегральному тождеству

* Аналогично изучаются вторая и третья краевые задачи.

** Будем придерживаться обозначений пространств, принятых в работе [58].

$$\int_{Q_{t_1}} \left[a \frac{\partial \varphi}{\partial t} - \lambda \frac{\partial T}{\partial x} \frac{\partial \varphi}{\partial x} + F(x, t) \varphi \right] dx dt = \\ = \int_{t_1}^{t_2} a_0(x) \varphi(x, 0) dx \quad (3.1.26)$$

для произвольной функции φ класса $W_2^{1,1}(Q_{t_1})$, обращающейся в нуль при $x = l_1, l_2$ и $t = t_1$.

Здесь $Q_{t_1} = (l_1, l_2) \times (0, t_1)$. Тождество (3.1.26) получено умножением уравнения (3.1.12) на функцию φ и интегрированием по области Q_{t_1} с последующим интегрированием по частям соответствующих интегралов.

Покажем, что классическое решение задачи (3.1.17) — (3.1.20), (3.1.21'), (3.1.24), (3.1.25), если оно существует, является обобщенным. Для этого уравнения (3.1.17) — (3.1.19) умножим на функцию φ , проинтегрируем их по областям Q_1, Q_2, Q_3 соответственно и сложим полученные тождества. После интегрирования по частям имеем

$$- \int_{Q_1} L_1 T \frac{\partial \varphi}{\partial t} dx dt - \int_{Q_2} \gamma \rho \bar{\eta} \frac{\partial \varphi}{\partial t} dx dt - \int_{Q_3} L_2 T \frac{\partial \varphi}{\partial t} dx dt + \\ + \int_{Q_1} \lambda_1 \frac{\partial T}{\partial x} \frac{\partial \varphi}{\partial x} dx dt + \int_{Q_3} \lambda_2 \frac{\partial T}{\partial x} \frac{\partial \varphi}{\partial x} dx dt - \\ - \int_{Q_{t_1}} F(x, t) dx dt = - \int_{S_1} L_1 T \varphi \cos(n, t) ds - \\ - \int_{S_2} \gamma \rho \bar{\eta} \varphi \cos(n, t) ds - \int_{S_3} L_2 T \varphi \cos(n, t) ds + \\ + \int_{S_1} \lambda_1 \frac{\partial T}{\partial x} \varphi \cos(n, x) ds + \int_{S_3} \lambda_2 \frac{\partial T}{\partial x} \varphi \cos(n, x) ds, \quad (3.1.27)$$

где S_1, S_2, S_3 — границы областей Q_1, Q_2, Q_3 соответственно; \mathbf{n} — направление внешней нормали к соответствующему контуру, по которому ведется интегрирование. Вычисляя интегралы по контурам, найдем

$$\int_{S_1} T \varphi \cos(n, t) ds = \int_{t_1}^{x_1(0)} T_0 \varphi(x, 0) dx + \int_0^{t_1} T_0 \varphi(x_1, t) \frac{dx_1}{dt} dt;$$

$$\int_{S_2} \eta \varphi \cos(n, t) ds = \int_{x_1(0)}^{x_2(0)} \eta_0(x) \varphi(x, 0) dx + \int_0^{t_1} \eta_1 \varphi(x_1, t) \frac{dx_1}{dt} dt;$$

$$\int_{S_5} T \varphi \cos(n, t) ds = \int_{x_2'(0)}^{t_2} T_0 \varphi(x, 0) dx - \int_0^{t_1} T_e \varphi(x_2, t) \frac{dx_2}{dt} dt;$$

$$\int_{S_1} \lambda_1 \frac{\partial T}{\partial x} \varphi \cos(n, x) ds = \int_0^{t_1} \lambda_1 \frac{\partial T_1}{\partial x} \varphi(x_1, t) dt;$$

$$\int_{S_3} \lambda_2 \frac{\partial T}{\partial x} \varphi \cos(n, x) ds = \int_0^{t_1} \lambda_2 \frac{\partial T}{\partial x} \varphi(x_2, t) dt,$$

НО

$$\int_{Q_1} \frac{\partial \varphi}{\partial t} dx dt = - \int_0^{t_1} \frac{dx_1}{dt} \varphi(x_1, t) dt + \int_{t_1}^{x_1(0)} \varphi(x, 0) dx;$$

$$\int_{Q_2} \frac{\partial \varphi}{\partial t} dx dt = - \int_0^{t_1} \frac{dx_2}{dt} \varphi(x_2, t) dt + \int_{x_2(0)}^{t_2} \varphi(x, 0) dx;$$

$$\int_{Q_3} \frac{\partial \varphi}{\partial t} dx dt = \int_0^{t_1} \left[\frac{dx_1}{dt} \varphi(x_1, t) - \frac{dx_2}{dt} \varphi(x_2, t) \right] dt + \\ + \int_{x_1(0)}^{x_2(0)} \varphi(x, 0) dx.$$

Подставляя найденные значения интегралов в (3.1.27) и используя условия (3.1.20), (3.1.21'), получаем

$$- \int_{Q_1} L_1(T - T_e) \frac{\partial \varphi}{\partial t} dx dt + \int_{Q_2} \gamma \bar{\eta} \frac{\partial \varphi}{\partial t} dx dt - \\ - \int_{Q_3} L_2(T - T_e) \frac{\partial \varphi}{\partial t} dx dt + \int_{Q_1} \lambda_1 \frac{\partial T}{\partial x} \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \\ + \int_{Q_3} \lambda_2 \frac{\partial T}{\partial x} \frac{\partial \varphi}{\partial x} dx dt - \int_{Q_{t_1}} F(x, t) dx dt =$$

$$\begin{aligned}
= & - \int_{I_1}^{x_1(0)} L_1 (T_0 - T_e) \varphi (x, 0) dx - \int_{x_1(0)}^{x_2(0)} \gamma \rho \eta_0 (x) \varphi (x, 0) dx - \\
& - \int_{x_2(0)}^{I_2} L_2 (T_0 - T_e) \varphi (x, 0) dx. \quad (3.1.28)
\end{aligned}$$

Учитывая, что с точностью до постоянной $L_2 T_e$ выражение (3.1.14) для a принимает значения

$$a = \begin{cases} L_1 (T - T_e), & (x, t) \in Q_1, \\ -\gamma \rho \bar{\eta}, & (x, t) \in Q_2, \\ L_2 (T - T_e), & (x, t) \in Q_3, \end{cases} \quad (3.1.29)$$

и добавляя к тождеству (3.1.28) интеграл

$$\int_{Q_2} [\lambda_1 \eta + \lambda_2 (1 - \eta)] \frac{\partial T}{\partial x} \frac{\partial \varphi}{\partial x} dx dt \equiv 0,$$

получаем тождество

$$\begin{aligned}
\int_{Q_1} \left(-a \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \lambda (\eta) \frac{\partial T}{\partial x} \frac{\partial \varphi}{\partial x} - F \right) dx dt + \\
+ \int_{I_1}^{I_2} a_0 (x) \varphi (x, 0) dx = 0,
\end{aligned}$$

совпадающее с тождеством (3.1.26), определяющим обобщенное решение.

Доказательство теоремы единственности, приведенное в работе [68] для достаточно общего вида уравнения, справедливо и в случае существования области Q_2 не нулевой меры, где $T \equiv T_e$. Из доказанной в [68] единственности функции a вытекает единственность функций T и $\bar{\eta}(x, t)$ в области, где $T \equiv T_e$. Доказанная в той же работе теорема существования обобщенного решения методом сглаживания коэффициентов уравнения справедлива и при существовании области Q_2 . В нашем случае достаточно сгладить функцию η . Вводя сглаженные по T функции η^n , получаем равномерно сходящуюся последовательность решений $T^n(x, t)$, причем последовательность $\eta^n(T^n(x, t))$ слабо сходится к пределу $\bar{\eta}(T(x, t))$. Предельные функции $\bar{T}(x, t)$, $\bar{\eta}(T(x, t))$ удовлетворяют тождеству (3.1.26), т. е. являются решением исходной задачи в обобщенном смысле. Отметим, что метод

сглаживания коэффициентов является эффективным методом решения задачи, так как к квазилинейному уравнению (3.1.12) с гладкими коэффициентами применимы обычные разностные методы.

3.2. АНАЛИЗ ОБОБЩЕННОЙ ПОСТАНОВКИ ЗАДАЧИ НА МОДЕЛЬНОМ ПРИМЕРЕ НАПРАВЛЕННОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ

Модельная задача о направленной кристаллизации слитка является наиболее простым и наглядным примером, на котором можно проследить возникновение и развитие двухфазной зоны.

Как было показано в предыдущей главе, при классической постановке задачи в объеме расплава должно возникать переохлаждение, если скорость кристаллизации v превосходит критическое значение v_k . Проанализируем решение этой задачи в обобщенной постановке, не допускающей переохлаждения. Ниже приведем полное аналитическое решение модельной задачи.

Задачу ставим в упрощающих предположениях, принятых в параграфе 2.1. Температурное поле слитка в неподвижной системе координат описывается уравнением

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial u}{\partial x} \right) - \alpha_0 (u - u_1(x)) &= L \left(\frac{\partial u}{\partial t} + v_0 \frac{\partial u}{\partial x} \right) - \\ &- \gamma \rho \left(\frac{\partial \eta}{\partial t} + v_0 \frac{\partial \eta}{\partial x} \right), \quad (3.2.1) \\ -\infty < x < \infty, \quad t > 0. \end{aligned}$$

Начальные и граничные условия:

$$u(x, 0) = \varphi(x), \quad \bar{\eta}(x, 0) = \eta_0(x), \quad \lim_{x \rightarrow \pm \infty} \frac{\partial (u - u_1)}{\partial x} = 0. \quad (3.2.2)$$

В общем случае η имеет вид

$$\eta(x, t, u) = \begin{cases} 1, & u < 0; \\ \bar{\eta}(x, t), & u = 0; \\ 0, & u > 0. \end{cases} \quad (3.2.3)$$

Здесь $u = T - T_e$, $u_1 = T_1 - T_e$.

Для упрощения анализа $u_1(x)$ зададим в виде

$$u_1(x) = -kx, \quad (3.2.4)$$

где k — градиент температуры на муфеле печи. Найдем установившееся температурное поле $u(x)$. Величины λ , L будем считать постоянными. Итак, надо решить уравнение

$$\frac{d^2u}{dx^2} - 2\mu \frac{du}{dx} - \alpha u + \gamma\rho\lambda^{-1}v_0 \frac{d\eta}{dx} = -\alpha u_1(x), \quad (3.2.5)$$

где

$$2\mu = a^{-2}v_0 = L\lambda^{-1}v_0, \quad \alpha = \alpha_0\lambda^{-1}, \quad (3.2.6)$$

причем η определяется выражением (3.2.3).

Будем также считать, что существует двухфазная область (x_1, x_2) , в которой $u \equiv 0$. Запишем уравнение (3.2.5) для каждой области отдельно:

$$\frac{d^2u}{dx^2} - 2\mu \frac{du}{dx} - \alpha(u - u_1(x)) = 0, \quad -\infty < x < x_1, \\ x_2 < x < \infty; \quad (3.2.7)$$

$$\gamma\rho\lambda^{-1}v_0 \frac{d\eta}{dx} = -\alpha u_1(x), \quad x_1 < x < x_2. \quad (3.2.8)$$

На границах двухфазной области должны выполняться условия сопряжения температуры и потоков с учетом возможных скачкообразных изменений функции η . Как было показано выше, на границе x_1 начала двухфазной области такое изменение η невозможно. С учетом сказанного выше условия на границах x_1 , x_2 запишутся в виде

$$\frac{du}{dx} \Big|_{x=x_1-} = 0, \quad u|_{x=x_1-} = u|_{x=x_1+} = 0; \quad (3.2.9)$$

$$-\lambda \frac{du}{dx} \Big|_{x=x_2+} = \gamma\rho v_0(1 - \eta_2), \quad u|_{x=x_2+} = u|_{x=x_2-} = 0. \quad (3.2.10)$$

Выпишем решение задачи (3.2.7) — (3.2.10), (3.2.2), (3.2.4):

$$u(x) = u_1(x) + 2\mu k\alpha^{-1} + k(x_1 - 2\mu\alpha^{-1}) \exp\{\mu_1(x - x_1)\},$$

$$x < x_1; \quad (3.2.11)$$

$$u(x) = u_1(x) + 2\mu k \alpha^{-1} + k(x_2 - 2\mu \alpha^{-1}) \exp[\mu_2(x - x_2)],$$

$$x > x_2; \quad (3.2.12)$$

$$x_1 = 2\mu \alpha^{-1} + \mu_1^{-1}; \quad (3.2.13)$$

$$x_2 = 2\mu \alpha^{-1} + \mu_2^{-1} [1 - 2\omega(1 - \eta_2)]; \quad (3.2.14)$$

$$\bar{\eta}(x) = \frac{\alpha}{4\omega} (x^2 - x_1^2). \quad (3.2.15)$$

Здесь

$$\omega = \frac{v_0}{v_\kappa} = \frac{\gamma\rho}{2\lambda k} v_0, \quad \mu_1 = \mu + \sqrt{\mu^2 + \alpha}, \quad \mu_2 =$$

$$= \mu - \sqrt{\mu^2 + \alpha}. \quad (3.2.16)$$

Значение η_2 определяется выражением (3.2.15) при $x = x_2$:

$$\eta_2 = \frac{\alpha}{4\omega} (x_2^2 - x_1^2). \quad (3.2.17)$$

Решая совместно уравнения (3.2.14), (3.2.16), находим x_2 , η_2 в явном виде:

$$x_2 = \alpha^{-1} \left(\sqrt{4\omega\alpha + x_1^2\alpha^2 - \mu_2^2} + \mu_2 \right); \quad (3.2.18)$$

$$\eta_2 = 1 + \frac{\mu_2}{2\alpha\omega} \sqrt{4\omega\alpha + x_1^2\alpha^2 - \mu_2^2}. \quad (3.2.19)$$

Выражения (3.2.11) — (3.2.13), (3.2.15), (3.2.18), (3.2.19) представляют собой полное решение задачи.

Проанализируем полученное решение. В случае $\mu^2 \ll \alpha$ можно положить $\mu \approx 0$ и решение приобретет особенно простой вид. Тогда

$$\mu_1 = \sqrt{\alpha}, \quad \mu_2 = -\sqrt{\alpha}, \quad x_1 = \frac{1}{\sqrt{\alpha}}, \quad x_2 = \frac{2\sqrt{\omega} - 1}{\sqrt{\alpha}},$$

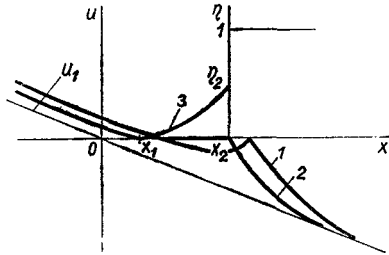
$$x_2 - x_1 = \frac{2(\sqrt{\omega} - 1)}{\sqrt{\alpha}}; \quad (3.2.20)$$

$$\eta_2 = 1 - \frac{1}{\sqrt{\omega}}. \quad (3.2.21)$$

Отметим, что, если $\mu = 0$, значение $v_\kappa = \frac{2\lambda k}{\gamma\rho}$, определенное выражением (3.2.16), совпадает с критическим значе-

Рис. 12. Схема осевого распределения температуры и функции η в слитке:

1 — решение задачи в классической постановке; 2 — решение задачи в обобщенной постановке; 3 — распределение функции $\eta(x)$ в двухфазной зоне.



нием скорости, при котором возникает переохлаждение в расплаве [см. (3.1.34)]. Как видим, при $\omega = 1$ (т. е. $v_0 = v_k$) $x_2 - x_1 = 0$ (ширина двухфазной зоны равна нулю). Естественно, что $x_2 = x_1$ и при $\omega < 1$. Таким образом, при $\omega \leq 1$ ($v_0 \leq v_k$) двухфазная зона отсутствует и решение совпадает с решением задачи Стефана в классической постановке. При $\omega > 1$ (т. е. $v_0 > v_k$) появляется двухфазная зона, причем с возрастанием ω ширина этой зоны увеличивается, а скачок плотности твердой фазы уменьшается. Качественное поведение решения задачи представлено на рис. 12.

Выясним поведение решения задачи в том случае, когда ω имеет большие значения. Для этого рассмотрим асимптотику при $\omega \rightarrow \infty$ ($v_0 \rightarrow \infty$). Приближенно получим

$$\begin{aligned} \mu_1 &\approx 2\mu; & \mu_2 &\approx -\frac{\alpha}{2\mu}; \\ x_2 - x_1 &\approx \frac{\omega\alpha}{2\mu^2} \approx \frac{1}{0,5a^{-4} v_k v_0} \approx 0 \left(\frac{1}{v_0} \right); & (3.2.22) \\ 1 - \eta_2 &\approx \frac{1}{2\omega}. \end{aligned}$$

Интересно отметить, что при больших v_0 ширина двухфазной зоны уменьшается и стремится к нулю при $v_0 \rightarrow \infty$. Значение скачка плотности твердой фазы также стремится к нулю.

3.3. ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ В ОБОБЩЕННОЙ ПОСТАНОВКЕ

Как было показано выше, теорема существования обобщенного решения задачи Стефана остается справедливой и в случае наличия двухфазной зоны. Метод сглажи-

вания коэффициентов, предложенный О. А. Олейник [68] для доказательства теоремы существования, может быть использован при численном решении задачи в сочетании с хорошо обоснованной устойчивой разностной схемой [10, 11, 75]. Покажем, что данный метод применим и для решения задачи при наличии двухфазной зоны. Проиллюстрируем это на примере задачи направленной кристаллизации слитка.

Уравнение (3.2.1) запишем в обобщенном виде:

$$\frac{\partial (Lu - \gamma\eta)}{\partial t} + v_0 \frac{\partial (Lu - \gamma\eta)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial u}{\partial x} \right) - \alpha_0 (u - u_1(x)), \quad (3.3.1)$$

$$-L < x < L, \quad t > 0;$$

$$L = L_1\eta + L_2(1 - \eta), \quad \lambda = \lambda_1\eta + \lambda_2(1 - \eta). \quad (3.3.2)$$

В рассматриваемом случае достаточно сгладить функцию η . Вводя тем или иным способом сглаженную функцию η_δ , получаем квазилинейное уравнение с гладкими коэффициентами:

$$\frac{\partial (L_\delta u - \gamma\eta_\delta)}{\partial u} \left[\frac{\partial u}{\partial t} + v_0 \frac{\partial u}{\partial x} \right] = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_\delta \frac{\partial u}{\partial x} \right) - \alpha_0 (u - u_1(x)). \quad (3.3.3)$$

Для практического решения задачи достаточно принять простейшую аппроксимацию функции η :

$$\eta_\delta = \begin{cases} 1, & u < 0; \\ \frac{\delta - u}{\delta}, & 0 < u < \delta; \\ 0, & u > \delta. \end{cases} \quad (3.3.4)$$

Чтобы решить уравнение (3.3.3), применим неявную разностную схему, являющуюся наиболее эффективной при решении подобного класса задач [10]. Вводя обозначение

$$b_\delta(u) = \frac{\partial (L_\delta u - \gamma\eta_\delta)}{\partial u}, \quad (3.3.5)$$

запишем разностную аппроксимацию уравнения (3.3.3) в виде

$$(b_\delta)_i^{n-1} [(u_i^n)_i + v_0 (u_i^n)_x] = (\lambda_\delta)_i^{n-1} (u_i^n)_x - \alpha_0 (u_i^n - u_1(x_i)). \quad (3.3.6)$$

Здесь введены обозначения: $u_i^n = u(x_i, t_n)$; $x_i = hi$; $t_n = \tau n$; $i = 1, 2, \dots, N$; $n = 1, 2, 3, \dots$, $(u_i^n)_x = h^{-1}(u_{i+1}^n - u_i^n)$; $(u_i^n)_x = h^{-1}(u_i^n - u_{i-1}^n)$; $(u_i^n)_t = \tau^{-1} \times (u_i^n - u_i^{n-1})$. Значения нелинейных коэффициентов берутся с предыдущего временного слоя. Отметим, что член,

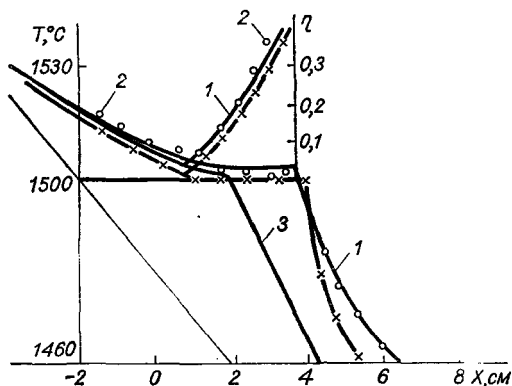


Рис. 13. Распределение температуры T и функции η вдоль образца при $v_0 = 2v_k$:

— × — × — × — аналитическое решение;
 — — — численный расчет при различных значениях δ (в $^{\circ}\text{C}$); 1 — $\delta = 4$; 2 — $\delta = 2$; 3 — $\delta = 1$.

содержащий du/dx , необходимо аппроксимировать разностью «назад» в соответствии со схемой Годунова для уравнения гиперболического типа первого порядка. Это связано с тем, что при $\delta \rightarrow 0$ уравнение (3.3.3) вырождается в двухфазной области в уравнение первого порядка [см. (3.1.23)] и разностная схема будет устойчива лишь при указанной аппроксимации.

Приведем пример расчета задачи направленной кристаллизации при $v_0 = 2v_k$. Такая скорость обеспечивает существование двухфазной зоны. При расчетах были приняты следующие значения параметров: $\gamma = 4,2 \cdot 10^5$ Дж/кг; $L = 2,1 \cdot 10^3$ Дж/($\text{м}^3 \cdot ^{\circ}\text{C}$); $\lambda = 30$ Вт/($\text{м} \cdot ^{\circ}\text{C}$); $\alpha_0 = 0,42 \cdot 10^6$ Вт/($\text{м}^3 \cdot ^{\circ}\text{C}$); $T_e = 1500^{\circ}\text{C}$; $v_k = 2\lambda k/\gamma\rho = 0,28 \cdot 10^{-4}$ м/с; $k = 10^3 \cdot ^{\circ}\text{C}/\text{м}$.

На рис. 13 представлено распределение температуры T и функции η вдоль образца. Решение дано при различных

значениях интервала сглаживания δ ; для сравнения приведено аналитическое решение, рассчитанное по формулам (3.2.11) — (3.2.13), (3.2.18), (3.2.19). Функция η находится как предел сглаженных функций $\eta_\delta(u_\delta(x))$ при $\delta \rightarrow 0$. Как видим, численное решение дает хорошее приближение к точному решению уже при $\delta = 2^\circ \text{C}$. Наблюдаемое на рисунке ухудшение точности решения при дальнейшем уменьшении интервала δ связано с конечным значением шага по пространству. С уменьшением интервала δ необходимо дальнейшее дробление шага сетки h , иначе на границе x_2 не будет улавливаться скрытая теплота фазового перехода, соответствующая значению $1 - \eta_2$. Следует отметить высокую точность определения функции $\eta(x)$ и значения $1 - \eta_2$. При $\delta = 2$ погрешность в определении η не превосходит 4% от номинала несмотря на «размазывание» скрытой теплоты.

Особые трудности возникают при рассмотрении обобщенной постановки задачи в двумерном или пространственном случае, когда нет внутренних источников (стоков) тепла, а образец охлаждается с поверхности. (Ниже будет показано, что в этом случае двухфазная зона отсутствует.) Характерным примером является осесимметрическая задача, описывающая процесс направленной кристаллизации слитка. Обобщенная постановка задачи в двумерном случае следующая:

$$\frac{\partial a}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda(\eta) \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda(\eta) r \frac{\partial T}{\partial r} \right), \quad (3.3.7)$$

$$-\infty < x < \infty, \quad 0 < r < R, \quad t > 0;$$

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial r} = -\alpha (T - T_1(z + v_0 t)), \quad r = R; \quad (3.3.8)$$

$$a = [L_1 \eta + L_2(1 - \eta)] T + [(L_2 - L_1) T_e - \gamma \rho] \eta. \quad (3.3.9)$$

Предположим, что существует двухфазная область, в которой $T \equiv T_e$, а уравнение (3.3.7) определяет функцию η и имеет вид

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = 0. \quad (3.3.10)$$

Пусть существует гладкая граница Γ_2 начала двухфазной зоны: $t_2 = \varphi(r, z)$. Интегрируя уравнение (3.3.10) от t_2

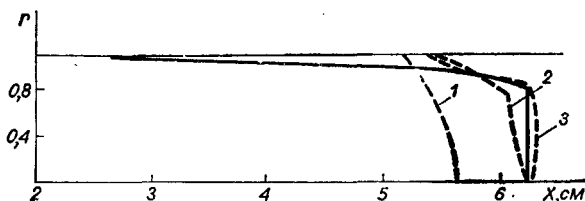


Рис. 14. Положение границы раздела фаз при большой скорости вытягивания слитка, $v_0 = 3v_k$:
 — по расчетам одномерной задачи; --- численный расчет двумерной задачи при различных значениях δ (в °C); 1 — $\delta = 5$; 2 — $\delta = 1,25$; 3 — $\delta = 0,6$.

до t , получаем

$$\eta(r, z, t) = \eta(r, z, \varphi(r, z)) = \eta_2(r, z), \quad (3.3.11)$$

т. е. η не зависит от t в пределах двухфазной области и равно значению $\eta_2(r, z)$ на границе Γ_2 двухфазной зоны. Запишем условие теплового баланса на этой границе:

$$\gamma v_n \eta_2(r, z) = -\lambda_2 \frac{\partial T}{\partial n} \Big|_{T_e+}, \quad (3.3.12)$$

где \mathbf{n} — нормаль к границе Γ_2 , направленная в сторону возрастания T ; v_n — скорость движения границы Γ_2 по направлению нормали. Но в жидкой фазе не должно быть переохлаждения, т. е. $\frac{\partial T}{\partial n} \Big|_{T_e+} \geq 0$. Тогда при $v_n > 0$ должно быть $\eta_2(r, z) = 0$, а следовательно, и

$$\eta(r, z, t) = 0. \quad (3.3.11')$$

Это значит, что двухфазной зоны не существует. Таким образом, остается предположить наличие резкой границы фазового перехода и существование классического решения.

Чтобы выяснить вопрос о конфигурации фронта кристаллизации при больших скоростях кристаллизации, обратимся к усредненной одномерной задаче, исследованной в параграфе 3.2. Из решения (3.2.11) — (3.2.19) видно, что при $v > v_k$ существует двухфазная зона длиной $x_2 - x_1$. Если граница раздела фаз гладкая, ее форма восстанавливается по решению одномерной задачи. В этом случае сечение твердой фазы $\bar{\eta}(x)$ можно выразить через координату $r^*(x)$

границы раздела фаз:

$$\bar{\eta}(x) = \frac{\pi R^2 - \pi (r^*)^2}{\pi R^2} = 1 - \left(\frac{r^*}{R}\right)^2, \quad (3.3.13)$$

так что

$$r^*(x) = R \sqrt{1 - \bar{\eta}(x)}. \quad (3.3.14)$$

Построим границу раздела фаз исходя из формул (3.2.15), (3.2.20), (3.2.21), (3.3.14). На рис. 14 представлена форма границы раздела фаз для конкретного случая кристаллизации слитка арсенида галлия при следующих значениях параметров: $\omega = 3$; $k = 500^\circ \text{C}/\text{м}$; $\gamma = 6 \cdot 10^5 \text{ Дж}/\text{кг}$; $L = 2 \cdot 10^6 \text{ Дж}/(\text{м}^3 \cdot ^\circ\text{C})$; $\lambda = 1,6 \text{ Вт}/(\text{м} \cdot ^\circ\text{C})$; $\alpha_0 = 0,25 \times 10^5 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot ^\circ\text{C})$; $R = 0,011 \text{ м}$.

Можно считать, что в этом случае вдоль поверхности образца растут дендриты вытянутой формы. Суммируя полученные результаты, можно сделать вывод: *при кристаллизации чистого (однокомпонентного) расплава, охлаждаемого с поверхности, дендриты растут лишь вдоль поверхности, не проникая в глубину расплава.*

Следует отметить, что граница раздела фаз в рассматриваемом случае имеет сложную форму. Производная $r^{*'}(x)$ меняется почти от нуля вблизи поверхности слитка до бесконечности. Это обстоятельство делает практически невозможным расчет задачи Стефана в классической постановке (см. параграф 2.4).

При использовании метода сглаживания [11] для решения задачи в обобщенной постановке также возникают существенные затруднения. Приведем некоторые результаты расчета этим методом двумерной задачи направленной кристаллизации слитка. На рис. 14 показана конфигурация фронта кристаллизации при различных значениях интервала сглаживания δ . При $\delta = 0,6^\circ \text{C}$ расчетная форма фронта хорошо согласуется с аналитическим решением в центральной части слитка, однако имеется участок фронта, вытянутый в сторону жидкой фазы, который не обнаруживается при численном решении задачи. Дальнейшее уменьшение δ приводит к неустойчивости решения.

Глава 4

ОБОБЩЕННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ БИНАРНОГО СПЛАВА

Задачу кристаллизации бинарного сплава в постановке, не допускающей переохлаждения, впервые рассмотрел В. Т. Борисов в работе [20]. Им была предложена и развита теория двухфазной зоны [20—25], основная предпосылка которой заключается в следующем: если в объеме жидкого сплава возникает переохлаждение, то там образуются дендриты, причем их рост мгновенно снимает переохлаждение. Таким образом, появляется двухфазная зона — дендритная область, состоящая как из твердой, так и из жидкой фаз, причем температура в этой области равна равновесной. Задачу двухфазной зоны В. Т. Борисов исследовал классическими методами, выделяя границы начала и конца двухфазной зоны в предположении достаточной гладкости этих границ [20]. Им также изучена упрощенная задача теории двухфазной зоны при условии отсутствия диффузии в жидкой фазе [22], предложен численный метод решения этой задачи, основанный на использовании явной разностной схемы [25]. Однако полное математическое обоснование теории двухфазной зоны в указанных работах отсутствует. Трудности возникают уже при введении обобщенной постановки задачи и понятия обобщенного решения. Как нам известно, в литературе не введено понятие обобщенного решения задачи Стефана для термодиффузионной системы уравнений. Ниже изложим полную теорию обобщенного решения термодиффузионной задачи согласно работам [4, 6]. Начнем с вывода обобщенных макромасштабных уравнений и введения понятия обобщенного решения. Далее качественно исследуем полученную систему уравнений и построим обобщенное решение поставленной задачи.

Аналізу теорії обобщеного рішення предпошлем краткое изложение теории квазиравновесной двухфазной зоны по работам В. Т. Борисова [20, 21].

4.1. ТЕОРИЯ КВАЗИРАВНОВЕСНОЙ ДВУХФАЗНОЙ ЗОНЫ [20]

Допустим, что между жидкой и твердой фазами имеется переходная двухфазная область, которая находится в состоянии равновесия. Вводя функцию $\eta(x, t)$ — относительный объем, занятый твердой фазой, можно написать уравнения теплового и массового баланса в двухфазной области:

$$\lambda \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = L \frac{\partial T}{\partial t} - \gamma \rho \frac{\partial \eta}{\partial t}; \quad (4.1.1)$$

$$D \frac{\partial}{\partial z} \left((1 - \eta) \frac{\partial C}{\partial z} \right) = \frac{\partial ((1 - \eta) C)}{\partial t} + mC \frac{\partial \eta}{\partial t}. \quad (4.1.2)$$

Здесь под T следует понимать среднюю температуру, под C — среднюю концентрацию в жидкой фазе; $\lambda_r = \lambda_{\text{ж}} = \lambda = \text{const}$. Уравнение (4.1.2) написано в предположении, что средняя концентрация в жидкой фазе равновесна концентрации в твердой фазе на границе раздела фаз.

Кроме того, в двухфазной зоне выполняется условие равновесия

$$T = \varphi(C) = T_A - \alpha C. \quad (4.1.3)$$

Здесь $T = \varphi(C)$ — уравнение линии ликвидус на диаграмме фазового равновесия, которая в (4.1.3) принята в виде прямой. Система уравнений (4.1.1) — (4.1.3) определяет функции T, C, η в двухфазной области. Вне этой области выполняется обычное уравнение теплопроводности, а в области, занятой жидкой фазой, — и уравнение диффузии.

Исследуем указанную задачу в наиболее простом случае кристаллизации с постоянной скоростью v . Вводя подвижную систему координат, связанную, например, с началом двухфазной зоны

$$x = z - vt, \quad t = t, \quad (4.1.4)$$

записываем уравнения для квазистационарного случая:

$$\lambda \frac{d^2 T}{dx^2} + Lv \frac{dT}{dx} - \gamma \rho v \frac{d\eta}{dx} = 0, \quad -x_1 < x < 0; \quad (4.1.5)$$

$$D \frac{d}{dx} \left((1 - \eta) \frac{dC}{dx} \right) + v \frac{d((1 - \eta)C)}{dx} + vmC \frac{d\eta}{dx} = 0, \\ -x_1 < x < 0; \quad (4.1.6)$$

$$\lambda \frac{d^2 T}{dx^2} + Lv \frac{dT}{dx} = 0, \quad -l < x < -x_1, \quad x > 0; \quad (4.1.7)$$

$$D \frac{d^2 C}{dx^2} + v \frac{dC}{dx} = 0, \quad x > 0. \quad (4.1.8)$$

Функция η может скачкообразно меняться при переходе через границы двухфазной области. В таком случае на границах двухфазной зоны должны выполняться условия

$$\left[\lambda \frac{dT}{dx} \right]_{x=-x_1+}^{x=-x_1-} = \gamma \rho v (1 - \eta_1); \quad (4.1.9)$$

$$D \frac{dC}{dx} \Big|_{x=-x_1+} = -(1 - m) Cv (1 - \eta_1); \quad (4.1.10)$$

$$\left[\lambda \frac{dT}{dx} \right]_{x=0+}^{x=0-} = \gamma \rho v \eta_2; \quad (4.1.11)$$

$$D(1 - \eta_2) \frac{dC}{dx} \Big|_{x=0-} - D \frac{dC}{dx} \Big|_{x=0+} = (1 - m) Cv \eta_2. \quad (4.1.12)$$

В качестве условий на бесконечности в жидкой зоне можно задать значения температуры и концентрации, равные их начальным значениям:

$$T = T_0, \quad C = C_0, \quad x \rightarrow \infty. \quad (4.1.13)$$

При $x = -L$ достаточно задать какое-либо условие теплоотвода, например

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial x} = q, \quad x = -l. \quad (4.1.14)$$

Система уравнений и условий (4.1.3), (4.1.5) — (4.1.14) полностью определяет функции T , C , η , а также значения v и x_1 . Посмотрим, как определяются значения плотности твердой фазы η_1 , η_2 . Пользуясь соотношением (4.1.3), преобразуем систему (4.1.5), (4.1.6), исключив из нее T :

$$\left[\frac{\gamma \rho D v}{\lambda \alpha} + (1 - m) v C + DC' \right] \eta' - (1 - DL\lambda^{-1}) \times \\ \times v C' (1 - \eta) = 0; \quad (4.1.15)$$

$$\gamma \rho v \eta' + \lambda \alpha C'' - L \alpha v C' = 0. \quad (4.1.16)$$

Система (4.1.15), (4.1.16) определяет функции C и η в пределах двухфазной зоны, причем для однозначного определения функции η необходимо задать ее значение лишь в одной точке. Если задать значение функции η в начале двухфазной зоны при $x = 0$, то во всех остальных точках области, включая $x = -x_1$ (конец двухфазной зоны), η будет определяться однозначно. Следовательно, уравнения двухфазной зоны определяют скачок функции η от η_1 до единицы в конце двухфазной зоны. Однако значение η в начале двухфазной зоны остается не определенным.

Покажем, что при любом $\eta_2 > 0$ в жидкой зоне существует переохлаждение. Рассмотрим функцию

$$u = T - T_A + \alpha C. \quad (4.1.17)$$

Используя уравнения (4.1.7), (4.1.8) и условия (4.1.13), находим

$$u' = T' + \alpha C' = \frac{v}{a^2} (\Delta T_0 + \alpha (C_l - C_0)) e^{-va^{-2}x} - \frac{v}{D} \alpha (C_l - C_0) e^{-vD^{-1}x}, \quad (4.1.18)$$

где $\Delta T_0 = T_0 - (T_A - \alpha C_0)$ — начальное переохлаждение в расплаве; T_l, C_l — значения температуры и концентрации при $x = 0$ соответственно. Легко заметить, что функция $u'(x)$ возрастает, так что если $u'(0) \geq 0$, то $u'(x) \geq 0$ при $x > 0$. Поэтому достаточно исследовать знак $u'(x)$ при $x = 0$. Так как $u(0) = 0$, то при $u'(0) \geq 0$ переохлаждение в жидкой зоне отсутствует. Имеем

$$u'(0) = va^{-2} [\Delta T_0 - (a^2 D^{-1} - 1) \alpha (C_l - C_0)], \quad (4.1.19)$$

так что $u'(0) = 0$, если

$$C_l - C_0 = \frac{\Delta T_0}{\alpha (a^2 D^{-1} - 1)}, \quad (4.1.20)$$

причем при возрастании C_l функция $u'(0)$ становится отрицательной. Используя условия (4.1.11), (4.1.12), находим зависимость C_l от η_2 :

$$C_l = \frac{\gamma_0 D \eta_2 (1 - \eta_2) + \lambda \alpha C_0 - \lambda D a^{-2} (T_A - T_0) (1 - \eta_2)}{\alpha \lambda [1 - (1 - m) \eta_2 - D a^{-2} (1 - \eta_2)]}. \quad (4.1.21)$$

Легко заметить, что при $\eta_2 = 0$ значения C_l , определенные выражениями (4.1.21), (4.1.20), совпадают и C_l возрастает

с увеличением η_2 . Итак, при любом $\eta_2 > 0$ $u'(0) < 0$, т. е. расплав переохлажден. Остается принять $\eta_2 = 0$, так как переохлаждение исключается при постановке задачи.

Таким образом, показано, что система уравнений и условий (4.1.5) — (4.1.14) теории двухфазной зоны однозначно

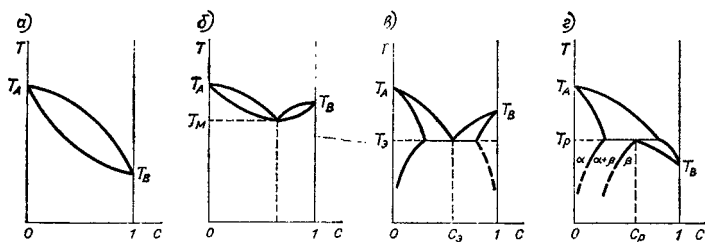


Рис. 15. Вид характерных диаграмм фазового равновесия:

а — сигарообразная; б — с точкой минимума; в — с эвтектикой; г — с перитектикой.

определяет температурное и концентрационное поля и относительную долю твердой фазы η в двухфазной зоне, причем в начале двухфазной зоны $\eta_2 = 0$, а в конце ее функция η скачком меняется от η_1 до единицы.

В. Т. Борисов рассмотрел упрощенный вариант теории двухфазной зоны при дополнительном допущении отсутствия диффузионного переноса в междендритной области [22, 23]. Если в уравнении (4.1.6) положить $D = 0$, то оно разрешается относительно η :

$$\eta = 1 - \exp\left(-\int_{C_0}^C \frac{ds}{(1-m(C))C}\right). \quad (4.1.22)$$

Можно считать, что η является заданной функцией от T , так как в двухфазной области выполняется условие равновесия (4.1.3). Тем самым задача сводится к решению лишь одного уравнения (4.1.1) при заданных соотношениями (4.1.3), (4.1.22) нелинейной функции $\eta(T)$.

Однако задача в такой постановке остается незамкнутой, так как не определено значение концентрации, а следовательно, и функций T и η в конце двухфазной зоны. В. Т. Борисов предлагает принимать температуру конца двухфазной зоны равной температуре перитектики T_P , эвтектики T_E ,

точки минимума T_m или плавления T_B чистого компонента B в соответствующих случаях диаграмм фазового равновесия (рис. 15). При этом заданные таким образом значения температуры определяют скачкообразное изменение функции $\eta(T)$ в конце двухфазной зоны [23].

После таких предположений задача становится замкнутой и состоит в решении уравнения (4.1.1) при заданной функции $\eta(T)$:

$$\eta(T) = \begin{cases} 0, & T > 0; \\ 1 - \exp\left(-\int_{C_0}^C \frac{ds}{(1-m)C}\right), & T_i < T < T_0; \\ 1, & T < T_i, \quad i = 1, 2, 3, 4. \end{cases} \quad (4.1.23)$$

Здесь $T_0 = \varphi(C_0)$, $T_1 = T_p$, $T_2 = T_3$, $T_3 = T_m$, $T_4 = T_B$. Тем самым данная задача от случая кристаллизации чистого расплава отличается лишь видом функции η . Естественно, что для задачи в такой постановке остается справедливой теория обобщенного решения [68]. В частности, остаются в силе методы численного решения задачи, основанные на предварительном сглаживании функции $\eta(T)$. Произведя сглаживание функции $\eta(T)$ в окрестности точки T_i , для гладкой функции $\eta_e(T)$ уравнение (4.1.1) можно записать в виде

$$\lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = [L - \gamma r \eta'_e(T)] \frac{\partial u}{\partial t}. \quad (4.1.24)$$

Для решения (4.1.24) применимы обычные устойчивые разностные схемы (см., например, [74]). Все сказанное, без всяких изменений, распространяется на двух- и трехмерные задачи.

Следует отметить, что допущение, принятое в упрощенной теории двухфазной зоны, оправданно далеко не во всех случаях. Действительно, в задаче должен быть задан температурный интервал (T_i, T_0), в котором происходит кристаллизация, но тогда ширина двухфазной области, а также значения функции η в конце двухфазной зоны в значительной степени предопределяются.

Неудовлетворительность приближенной задачи особенно очевидна, если необходимо проследить за возникновением и развитием двухфазной зоны во времени в зависимости от скорости кристаллизации, как, например, при направле-

ной кристаллизации слитка (см. параграф 2.5). В этом случае решение приближенной задачи не описывает двухфазную зону даже качественно, так как всегда при любой скорости кристаллизации существует двухфазная зона значительных размеров, в то время как решение полной задачи теории двухфазной зоны описывает момент возникновения двухфазной зоны и ее развитие во времени.

Перечисленные недостатки говорят о необходимости построения общей теории двухфазной зоны. Построение обобщенного решения задачи кристаллизации бинарной системы начнем с вывода осредненных уравнений. Целью осреднения является получение обобщенных уравнений, единообразно описывающих кристаллизующуюся систему как сплошную среду (см., например, [18, 19]). Преимущество таких уравнений заключается в том, что они обеспечивают выполнение всех необходимых балансов в среднем и не требуют выделения каких-либо внутренних границ. Кроме того, решение осредненных обобщенных уравнений остается устойчивым и в закритической области, когда обычные уравнения приводят к неустойчивым решениям.

4.2. ВЫВОД ОСРЕДНЕННЫХ УРАВНЕНИЙ

Выведем осредненные макромасштабные уравнения для двухфазной среды. Для простоты рассмотрим двухкомпонентный расплав. В случае многокомпонентной системы вывод уравнений делается аналогично, если считать заданными равновесные коэффициенты распределения m_i для каждого компонента. Пусть область Q трехмерного пространства занята бинарным раствором, причем в любом элементарном объеме V могут находиться как твердые, так и жидкие частицы. Например, объем V пронизывают дендриты или в нем растут равноосные зерна (рис. 16). Будем считать, что существует кусочно-гладкая граница раздела фаз Γ_r . Температура T и концентрация C компонента в области, занятой каждой из фаз, удовлетворяют обычным микромасштабным уравнениям теплопроводности и диффузии с известными коэффициентами теплопроводности, объемной теплоемкости и диффузии λ_p , L_p , D_p ($p = 1, 2$), которые будем считать постоянными в каждой фазе. Запишем эти уравнения с учетом конвективных членов в жидкой

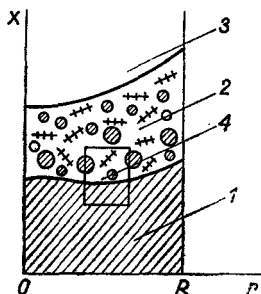


Рис. 16. Схема объемной кристаллизации: 1 — зона твердой фазы; 2 — двухфазная зона; 3 — зона жидкой фазы; 4 — элементарный объем.

фазе:

$$L_p \frac{\partial T}{\partial t} = L_p u_{x_i, p} \frac{\partial T}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda_p \frac{\partial T}{\partial x_i} \right)^* ; \quad (4.2.1)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = u_{x_i, p} \frac{\partial C}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_p \frac{\partial C}{\partial x_i} \right), \quad x \in Q, \quad (4.2.2)$$

$$t > 0, \quad p = 1, 2.$$

Здесь $u_{x_i, 2}$ — компоненты вектора скорости движения в жидком расплаве, а $u_{x_i, 1} = 0$.

Будем считать, что на границе раздела фаз выполняются условия фазового равновесия. Существенное отклонение от равновесия наблюдается лишь при очень больших переохлаждениях и скоростях роста. Однако в большинстве случаев характерная скорость кристаллизации невелика и принятое предположение не вносит большой погрешности. Равновесные условия на границе раздела фаз запишем в следующем виде:

$$\lambda_1 \frac{\partial T}{\partial x_i} n_i - \lambda_2 \frac{\partial T}{\partial x_i} n_i = \gamma \rho v_n ; \quad (4.2.3)$$

$$D_1 \frac{\partial C}{\partial x_i} n_i - D_2 \frac{\partial C}{\partial x_i} n_i = (C_l - C_s) v_n ; \quad (4.2.4)$$

$$T_l = T_A - f_l(C_l), \quad (4.2.5)$$

где $T_l = T_A - f_l(C)$ — уравнение линии ликвидус на диаграмме фазового равновесия; $n_i = \cos(\mathbf{n}, x_i)$ — косинусы углов между нормалью \mathbf{n} к поверхности Γ_t , направленной

* Здесь и далее подразумевается суммирование по повторяющимся индексам i от 1 до 3 и p от 1 до 2.

в сторону жидкой фазы, и осью x_i ; v_n — скорость продвижения границы раздела фаз в направлении нормали n .

Уравнения (4.2.1), (4.2.2) проинтегрируем по твердой (V_1) и жидкой (V_2) частям элементарного объема V , сложив полученные результаты:

$$\begin{aligned} \sum_{p=1,2} \int_{V_p} L_p \frac{\partial T}{\partial t} dv &= L_2 \sum_{i=1}^3 \langle u_{x_i,2} \rangle \left(\int_{S_{2,i+}} T ds - \int_{S_{2,i-}} T ds \right) + \\ &+ \sum_{i=1}^3 \sum_{p=1}^2 \left(\int_{S_{p,i+}} \lambda_p \frac{\partial T}{\partial x_i} ds - \int_{S_{p,i-}} \lambda_p \frac{\partial T}{\partial x_i} ds \right) + \\ &+ \int_{\Gamma_t} \left(\lambda_1 \frac{\partial T}{\partial x_i} - \lambda_2 \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) n_i ds; \end{aligned} \quad (4.2.6)$$

$$\begin{aligned} \sum_{p=1,2} \int_{V_p} \frac{\partial C}{\partial t} dv &= \sum_{i=1}^3 \langle u_{x_i,2} \rangle \left(\int_{S_{2,i+}} C ds - \int_{S_{2,i-}} C ds \right) + \\ &+ \sum_{i=1}^3 \sum_{p=1}^2 \left(\int_{S_{p,i+}} D_p \frac{\partial C}{\partial x_i} ds - \int_{S_{p,i-}} D_p \frac{\partial C}{\partial x_i} ds \right) + \\ &+ \int_{\Gamma_t} \left(D_1 \frac{\partial C}{\partial x_i} - D_2 \frac{\partial C}{\partial x_i} \right) n_i ds, \end{aligned} \quad (4.2.7)$$

где $S_{p,i+}$, $S_{p,i-}$ — площади противоположных граней объема V , занятые твердой ($p = 1$) и жидкой ($p = 2$) фазами; $\langle u_{x_i,2} \rangle$ — компонента средней скорости в жидкой части элементарного объема. Преобразуем отдельные слагаемые в уравнениях (4.2.6), (4.2.7):

$$\begin{aligned} \int_{V_p} \frac{\partial T}{\partial t} dv &= \frac{\partial}{\partial t} \left(\int_{V_p} T dv \right) - T_i \frac{\partial V_p}{\partial t} = \\ &= \frac{\partial}{\partial t} (V_p \langle T \rangle_p) - T_i \frac{\partial V_p}{\partial t}; \end{aligned} \quad (4.2.8)$$

$$\begin{aligned} \int_{V_p} \frac{\partial C}{\partial t} dv &= \frac{\partial}{\partial t} \left(\int_{V_p} C dv \right) - C_p \frac{\partial V_p}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} (V_p \langle C \rangle_p) - \\ &- C_p \frac{\partial V_p}{\partial t}, \end{aligned} \quad (4.2.9)$$

$$\begin{aligned}
 C_p &= \begin{cases} C_s, & p = 1, \\ C_l, & p = 2; \end{cases} \\
 \int_{S_{p,i}} \frac{\partial C}{\partial x_i} ds &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\int_{S_{p,i}} C ds \right) - C_p \frac{\partial S_{p,i}}{\partial x_i} = \\
 &= \frac{\partial}{\partial x_i} (S_{p,i} \langle C \rangle_{S_{p,i}}) - C_p \frac{\partial S_{p,i}}{\partial x_i} = S_{p,i} \frac{\partial \langle C \rangle_{S_{p,i}}}{\partial x_i} + \\
 &+ (\langle C \rangle_{S_{p,i}} - C_p) \frac{\partial S_{p,i}}{\partial x_i}. \quad (4.2.10)
 \end{aligned}$$

И аналогично

$$\int_{S_{p,i}} \frac{\partial T}{\partial x_i} ds = S_{p,i} \frac{\partial \langle T \rangle_{S_{p,i}}}{\partial x_i} + (\langle T \rangle_{S_{p,i}} - T_l) \frac{\partial S_{p,i}}{\partial x_i}. \quad (4.2.11)$$

Здесь введены осредненные величины по твердой и жидкой частям объема V и по твердой и жидкой частям грани S_i :

$$\langle T \rangle_p = \frac{1}{V_p} \int_{V_p} T dv, \quad \langle C \rangle_p = \frac{1}{V_p} \int_{V_p} C dv, \quad p = 1, 2; \quad (4.2.12)$$

$$\langle T \rangle_{S_{p,i}} = \frac{1}{S_{p,i}} \int_{S_{p,i}} T ds, \quad \langle C \rangle_{S_{p,i}} = \frac{1}{S_{p,i}} \int_{S_{p,i}} C ds. \quad (4.2.13)$$

Вводя обозначения

$$\eta_p = V_p/V, \quad p = 1, 2, \quad (4.2.14)$$

предварительно разделив все части уравнений (4.2.6), (4.2.7) на $V = \Delta X_i S_i$, преобразуем их с учетом выражений (4.2.8) — (4.2.12) и условий (4.2.3), (4.2.4):

$$\begin{aligned}
 &\sum_{p=1,2} \frac{\partial}{\partial t} (L_p \eta_p \langle T \rangle_p) - (L_1 - L_2) T_l \frac{\partial \eta_1}{\partial t} = \\
 &= L_2 \sum_{i=1}^3 \langle u_{x_i,2} \rangle \frac{\langle T \rangle_{S_{2,i}^+} - \langle T \rangle_{S_{2,i}^-}}{\Delta X_i} \frac{S_{2,i}}{S_i} + \\
 &+ \sum_{i=1}^3 \sum_{p=1,2} \left[\left(\lambda_p \frac{S_{p,i}^+}{S_i} \frac{\partial \langle T \rangle_{S_{p,i}^+}}{\partial x_i} - \lambda_p \frac{S_{p,i}^-}{S_i} \frac{\partial \langle T \rangle_{S_{p,i}^-}}{\partial x_i} \right) \times \right. \\
 &\quad \times \frac{1}{\Delta X_i} + \frac{1}{\Delta X_i} \lambda_p \left((\langle T \rangle_{S_{p,i}^+} - T_l) \frac{1}{S_i} \frac{\partial S_{p,i}^+}{\partial x_i} - \right.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \left(\langle T \rangle_{S_{p,i-}} - T_l \right) \frac{1}{S_l} \frac{\partial S_{p,i-}}{\partial x_i} \Bigg] + \gamma \rho \int_{\Gamma_l} v_n ds; \quad (4.2.15) \\
& \sum_{p=1,2} \frac{\partial}{\partial t} (\eta_p \langle C \rangle_p) - (C_s - C_l) \frac{\partial \eta_1}{\partial t} = \\
& = \sum_{i=1}^3 \langle u_{x_i,2} \rangle \frac{S_{2,i}}{S_i} \frac{\langle C \rangle_{S_{2,i+}} - \langle C \rangle_{S_{2,i-}}}{\Delta X_i} + \\
& + \sum_{i=1}^3 \sum_{p=1,2} D_p \left[\left(\frac{S_{p,i+}}{S_i} \frac{\partial \langle C \rangle_{S_{p,i+}}}{\partial x_i} - \frac{S_{p,i-}}{S_i} \frac{\partial \langle C \rangle_{S_{p,i-}}}{\partial x_i} \right) \times \right. \\
& \times \frac{1}{\Delta X_i} + \left(\frac{1}{S_i} (\langle C \rangle_{S_{p,i+}} - C_p) \frac{\partial S_{p,i+}}{\partial x_i} - \right. \\
& \left. \left. - \frac{1}{S_i} (\langle C \rangle_{S_{p,i-}} - C_p) \frac{\partial S_{p,i-}}{\partial x_i} \right) \frac{1}{\Delta X_i} \right] + \\
& + (C_l - C_s) \int_{\Gamma_l} v_n ds. \quad (4.2.16)
\end{aligned}$$

Будем считать, что любое сечение $S_{p,i}$ является представительным, т. е. верно отражает долю твердой (жидкой) части. Это предположение оправдано в том случае, когда оси дендритов полностью разориентированы и нельзя выбрать их характерное направление. Тогда

$$\frac{S_{p,i}}{S_i} \approx \frac{V_p}{V} = \eta_p. \quad (4.2.17)$$

Кроме того, в уравнениях (4.2.15), (4.2.16) приближенно заменим осредненные величины по граням осредненными величинами по объему и перейдем к пределу при $V \rightarrow 0$, считая, что конечные разности стремятся к соответствующим производным*. Получим следующие макромасштабные уравнения:

$$\frac{\partial}{\partial t} (L_p \eta_p \langle T \rangle_p) - ((L_1 - L_2) T_l + \gamma \rho) \frac{\partial \eta_1}{\partial t} =$$

* Имеется ряд работ, посвященных строгому обоснованию предельных переходов, например [70, 91].

$$= L_2 \eta_2 \langle u_{x_i,2} \rangle \frac{\partial \langle T \rangle_2}{\partial X_i} + \frac{\partial}{\partial X_i} \left(\lambda_p \eta_p \frac{\partial \langle T \rangle_p}{\partial X_i} \right) + \frac{\partial}{\partial X_i} \left(\lambda_p (\langle T \rangle_p - T_i) \frac{\partial \eta_p}{\partial X_i} \right); \quad (4.2.18)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\eta_p \langle C \rangle_p) = \eta_2 \langle u_{x_i,2} \rangle \frac{\partial \langle C \rangle_2}{\partial X_i} + \frac{\partial}{\partial X_i} \left(D_p \eta_p \frac{\partial \langle C \rangle_p}{\partial X_i} \right) + \frac{\partial}{\partial X_i} \left(D_p (\langle C \rangle_p - C_p) \frac{\partial \eta_p}{\partial X_i} \right). \quad (4.2.19)$$

Чтобы система уравнений (4.2.18), (4.2.19) стала замкнутой, необходимо установить какую-либо связь между осредненными величинами по твердой и жидкой фазам. Так как температура T непрерывна на границе раздела фаз, введем общую среднюю величину для обеих фаз $\langle T \rangle = \langle T \rangle_1 = = \langle T \rangle_2$. Кроме того, примем предположение, что средние значения концентраций $\langle C \rangle_1$ и $\langle C \rangle_2$ меняются скачкообразно так же, как и локальные величины на границе раздела фаз:

$$\langle C \rangle_1 = m \langle C \rangle_2 \equiv m \langle C \rangle. \quad (4.2.20)$$

Тогда уравнения (4.2.18), (4.2.19) принимают вид

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\langle L \rangle \langle T \rangle) - (T_i (L_1 - L_2) + \gamma \rho) \frac{\partial \eta_1}{\partial t} = \\ & = \frac{\partial}{\partial X_i} \left(\langle \lambda \rangle \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial X_i} \right) + \frac{\partial}{\partial X_i} \left[(\lambda_1 - \lambda_2) (\langle T \rangle - T_i) \frac{\partial \eta_1}{\partial X_i} \right] + \\ & + L_2 (1 - \eta_1) \langle u_{x_i,2} \rangle \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial X_i}; \quad (4.2.21) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} ((1 - \eta_1 + m \eta_1) \langle C \rangle) = \frac{\partial}{\partial X_i} \left(\langle D \rangle \frac{\partial \langle C \rangle}{\partial X_i} \right) + \\ & + \frac{\partial}{\partial X_i} \left[(D_1 m - D_2) (\langle C \rangle - C_i) \frac{\partial \eta_1}{\partial X_i} \right] + \\ & + (1 - \eta_1) \langle u_{x_i,2} \rangle \frac{\partial \langle C \rangle}{\partial X_i}, \quad (4.2.22) \end{aligned}$$

причем

$$\left. \begin{aligned} \langle L \rangle &= \langle L_1 \rangle \eta_1 + \langle L_2 \rangle \eta_2, \\ \langle \lambda \rangle &= \langle \lambda_1 \rangle \eta_1 + \langle \lambda_2 \rangle \eta_2, \\ \langle D \rangle &= \langle D_1 \rangle (m + \langle C \rangle m' (\langle C \rangle)) \eta_1 + D_2 \eta_2. \end{aligned} \right\} \quad (4.2.23)$$

Проведенное осреднение справедливо и в том случае, когда двухфазная зона не находится в состоянии равновесия. В этом случае $\langle T \rangle \neq T_l$, $\langle C \rangle \neq C_l$ и в уравнениях присутствуют члены, содержащие вторые производные по пространственным переменным от функции η_1 . В условиях теории равновесной двухфазной зоны указанные члены исчезают, так как $\langle T \rangle = T_l$, $\langle C \rangle = C_l$, и уравнения (4.2.21), (4.2.22) принимают более простой вид:

$$\langle L \rangle \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial t} - \gamma \rho \frac{\partial \eta_1}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial X_i} \left(\langle \lambda \rangle \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial X_i} \right) + \\ + L_2 (1 - \eta_1) \langle u_{x_i} \rangle \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial X_i}; \quad (4.2.24)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} [(1 - (1 - m) \eta_1) \langle C \rangle] = \frac{\partial}{\partial X_i} \left(\langle D \rangle \frac{\partial \langle C \rangle}{\partial X_i} \right) + \\ + (1 - \eta_1) \langle u_{x_i} \rangle \frac{\partial \langle C \rangle}{\partial X_i}. \quad (4.2.25)$$

Относительная доля твердой фазы η_1 в этом случае определяется как функция переохлаждения $\langle \Delta T \rangle$:

$$\eta_1 (\langle \Delta T \rangle) = \begin{cases} 1, & \langle \Delta T \rangle > 0, \\ 0, & \langle \Delta T \rangle \leq 0; \end{cases} \quad (4.2.26)$$

$$\langle \Delta T \rangle = \langle T \rangle_l - \langle T \rangle = T_A - f_l(\langle C \rangle) - \langle T \rangle. \quad (4.2.27)$$

Двухфазная зона здесь определяется как область, в которой переохлаждение тождественно равно нулю. В этой области η_1 определяется, как было показано в параграфе 4.1, системой уравнений (4.2.24), (4.2.25) и условием

$$\langle \Delta T \rangle \equiv 0, \quad (4.2.28)$$

причем $0 < \eta_1 < 1$. Однако обобщенная постановка задачи (4.2.24) — (4.2.26) не требует выделения указанной области. Двухфазная зона и функция η_1 в ней определяются в процессе решения задачи.

З а м е ч а н и е 4.2.1. Сравним систему уравнений (4.2.24), (4.2.25) с уравнениями баланса теории двухфазной зоны [см. (4.1.1), (4.1.2)]. Уравнение (4.1.2) записано для случая отсутствия диффузии в твердой фазе. Запишем (4.2.25) при $\langle D_1 \rangle = 0$ и без учета конвективных членов:

$$\frac{\partial ((\eta_2 + m\eta_1) \langle C \rangle)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial X} \left(\eta_2 \langle D_2 \rangle \frac{\partial \langle C \rangle}{\partial X} \right), \quad (4.2.29)$$

или

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\eta_2 \langle C \rangle) + m \langle C \rangle \frac{\partial \eta_1}{\partial t} + m \eta_1 \frac{\partial \langle C \rangle}{\partial t} = \\ = \frac{\partial}{\partial X} \left(\eta_2 \langle D_2 \rangle \frac{\partial \langle C \rangle}{\partial X} \right). \end{aligned} \quad (4.2.29')$$

Последнее уравнение отличается от соответствующего ему уравнения (4.1.2) наличием дополнительного слагаемого $m \eta_1 \frac{\partial \langle C \rangle}{\partial t}$. Выясним причину этого отличия, для чего преобразуем левую часть уравнения (4.2.29) следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\eta_2 \langle C \rangle_2 + \eta_1 \langle C \rangle_1) = \frac{\partial}{\partial t} \left(\eta_2 \langle C \rangle_2 + \int_{\eta_1} C_1 dv \right) = \\ = \frac{\partial}{\partial t} (\eta_2 \langle C \rangle_2) + C_1 |_{\Gamma_t} \frac{\partial \eta_1}{\partial t}, \end{aligned} \quad (4.2.30)$$

так как C_1 не зависит от t в случае $D_1 = 0$. Теперь ясно, что уравнение (4.2.29') совпадает с (4.1.2), если примем, что

$$C_1 |_{\Gamma_t} = C_s = m \langle C \rangle_2. \quad (4.2.31)$$

Таким образом, в теории двухфазной зоны принято предположение: локальная концентрация твердой фазы на границе раздела фаз равновесна осредненной концентрации жидкой фазы, в то время как при выводе осредненных уравнений предполагалось, что в равновесии находятся осредненные концентрации по жидкой и твердой фазам [см. (4.2.20)]. Можно показать, что первое из этих предположений приводит к значительному завышению концентрации в жидкой фазе. Предположение (4.2.20) несколько компенсирует данное завышение.

З а м е ч а н и е 4.2.2. Отметим, что в случае $D_1 = 0$ по известному значению $\langle C \rangle_1$ можно восстановить истинный состав твердой фазы, несмотря на то что в задаче определяются только средние значения $\langle C \rangle_2$, $\langle C \rangle_1$. Действительно, определение (4.2.12) можно записать в виде

$$\langle C \rangle_1 \eta_1 = \int_{\eta_1} C_1 dv. \quad (4.2.32)$$

Дифференцируя последнее соотношение по η_1 , получаем

истинное значение концентрации в твердой фазе:

$$C_1(\eta_1) = \langle C \rangle_1 + \eta_1 \frac{\partial \langle C \rangle_1}{\partial \eta_1}. \quad (4.2.33)$$

З а м е ч а н и е 4.2.3. Строго говоря, в уравнениях (4.2.15), (4.2.16) нельзя переходить к пределу, если $V \rightarrow 0$, так как такой предельный переход возможен только при бесконечно большой дисперсности твердой фазы в малом элементарном объеме [19, 70].

Если же интересоваться размерами макромасштабных включений твердой фазы, то в уравнениях (4.2.15), (4.2.16) следует оставить конечные разности. В этом случае под производными по макрокоординатам X_i в уравнениях (4.2.18), (4.2.19) следует понимать соответствующие отношения конечных разностей, например

$$\frac{\partial \langle C \rangle}{\partial X_i} \doteq \frac{\Delta \langle C \rangle}{\Delta X_i}, \quad (4.2.34)$$

причем элементарный объем должен выбираться так, чтобы он содержал в себе достаточное количество включений твердой фазы.

4.3. ОБОБЩЕННАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ. ОБОБЩЕННОЕ РЕШЕНИЕ

Система макромасштабных осредненных уравнений (4.2.24), (4.2.25) описывает кристаллизующуюся систему, включая случаи появления двухфазной зоны, как сплошную среду. Эти уравнения имеют дивергентный вид и не требуют отдельной записи баланса массы и энергии на внутренних границах раздела фаз. Система (4.2.24), (4.2.25) является обобщенной системой уравнений задачи теории двухфазной зоны. Для замыкания обобщенной постановки задачи остается задать граничные условия на внешней границе рассматриваемой области и начальные условия. На внешней границе области задаются обычные условия первого, второго или третьего рода:

$$\langle T \rangle|_s = \varphi_1, \quad \langle C \rangle|_s = \varphi_2; \quad (4.3.1)$$

$$\lambda \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial X_i} \cos(\mathbf{n}, X_i) + v_1 \langle T \rangle = f_1, \quad D \frac{\partial \langle C \rangle}{\partial X_i} \cos(\mathbf{n}, X_i) + v_2 \langle C \rangle = f_2, \quad (4.3.2)$$

где \mathbf{n} — направление внешней нормали к границе S области Q . Начальные условия должны включать задание функций $\langle T \rangle$, $\langle C \rangle$ и η_1 :

$$\langle T \rangle = T_0(X), \quad \langle C \rangle = C_0(X), \quad \eta_1 = \eta_0(X) \quad \text{при } t = 0. \quad (4.3.3)$$

Решение обобщенной задачи (4.2.24) — (4.2.27), (4.3.1), (4.3.3) естественно изучать в классе обобщенных функций. Дадим определение обобщенного решения первой краевой задачи в пространстве обобщенных функций $W_2^{1,0}(Q_t)$ или $V_2^{1,0}(Q_t)$ [58]. Для этого умножим уравнения (4.2.24), (4.2.25) на произвольные функции $\Psi_1, \Psi_2 \in W_2^{1,1}(Q_t)$, обращаемые в нуль на границе S и при $t = t_1$, и проинтегрируем эти уравнения по области Q_t . Беря соответствующие интегралы по частям (будем считать $\langle L \rangle = \text{const}$), получим

$$\int_{Q_{t_1}} \left[(LT - \gamma \rho \eta_1) \frac{\partial \Psi_1}{\partial t} - \lambda \frac{\partial T}{\partial X_i} \frac{\partial \Psi_1}{\partial X_i} + \right. \\ \left. + L(1 - \eta_1) u_{x_i} \frac{\partial T}{\partial X_i} \Psi_1 \right] dXd t = \int_Q (LT_0 - \gamma \rho \eta_0) \times \\ \times \Psi_1(X, 0) dX; \quad (4.3.4)$$

$$\int_{Q_{t_1}} \left[(1 - (1 - m) \eta_1) C \frac{\partial \Psi_2}{\partial t} - D \frac{\partial C}{\partial X_i} \frac{\partial \Psi_2}{\partial X_i} + (1 - \eta_1) \times \right. \\ \left. \times u_{x_i} \frac{\partial C}{\partial X_i} \Psi_2 \right] dXd t = \int_Q (1 - (1 - m) \eta_0) C_0 \Psi_2(X, 0) dX. \quad (4.3.5)$$

Напомним, что $Q_{t_1} = Q \times [0, t_1]$; Q — заданная область пространства. Здесь и ниже знаки осреднения функций опущены.

О п р е д е л е н и е 4.3.1. Обобщенным решением задачи (4.2.24) — (4.2.27), (4.3.1), (4.3.3) назовем функции T и C пространства $W_2^{1,0}(Q_t)$ (или $V_2^{1,0}(Q_t)$), принимающие значения (4.3.1) на границе S , и измеримую ограниченную функцию $\eta_1(\Delta T, X, t)$, которые удовлетворяют интегральным тождествам (4.3.4), (4.3.5) при произвольных функциях Ψ_1, Ψ_2 класса $W_2^{1,1}(Q_t)$, обращаемых в нуль на границе S и при $t = t_1$.

Прежде чем перейти к построению обобщенного решения, изучим качественное поведение системы уравнений (4.2.24), (4.2.25).

4.4. ПАРАБОЛИЧНОСТЬ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ ПО ПЕТРОВСКОМУ

Система (4.2.24), (4.2.25) является системой уравнений с нелинейными разрывными коэффициентами. Сгладим разрывную функцию $\eta_l(\Delta T) \equiv \eta$, обозначив сглаженную функцию через $\tilde{\eta}$. Учитывая, что в силу (4.2.27)

$$\frac{\partial \tilde{\eta}}{\partial t} = \frac{\partial \tilde{\eta}}{\partial \Delta T} \frac{\partial \Delta T}{\partial t} = - \frac{\partial \tilde{\eta}}{\partial \Delta T} \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \dot{f}_i(C) \frac{\partial C}{\partial t} \right), \quad (4.4.1)$$

преобразуем уравнения (4.2.24), (4.2.25) для случая $m = \text{const}$ к виду

$$a_1 \frac{\partial T}{\partial t} + a_2 \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial X_i} \left(\tilde{\lambda} \frac{\partial T}{\partial X_i} \right) + L(1 - \eta) u_{x_i} \frac{\partial T}{\partial X_i}; \quad (4.4.2)$$

$$a_3 \frac{\partial T}{\partial t} + a_4 \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial X_i} \left(\tilde{D} \frac{\partial C}{\partial X_i} \right) + (1 - \eta) u_{x_i} \frac{\partial T}{\partial X_i}, \quad (4.4.3)$$

где $\tilde{\lambda} = \lambda(\tilde{\eta})$, $\tilde{D} = D(\tilde{\eta})$;

$$\left. \begin{aligned} a_1 &= L + \gamma \rho \tilde{\eta}'(\Delta T), & a_2 &= \gamma \rho \dot{f}_i(C) \tilde{\eta}'(\Delta T), \\ a_3 &= (1 - m) C \tilde{\eta}'(\Delta T), & a_4 &= 1 - (1 - m) \tilde{\eta} + \\ & & & + (1 - m) C \dot{f}_i(C) \tilde{\eta}'(\Delta T). \end{aligned} \right\} \quad (4.4.4)$$

Разрешая систему уравнений (4.4.2), (4.4.3) относительно $\frac{\partial T}{\partial t}$, $\frac{\partial C}{\partial t}$ и выделяя главные члены, преобразуем ее к виду

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial X_i} \left(a_{11} \frac{\partial T}{\partial X_i} \right) + \frac{\partial}{\partial X_i} \left(a_{12} \frac{\partial C}{\partial X_i} \right) + F_1(T, C, T_x, C_x); \quad (4.4.5)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial X_i} \left(a_{21} \frac{\partial T}{\partial X_i} \right) + \frac{\partial}{\partial X_i} \left(a_{22} \frac{\partial C}{\partial X_i} \right) + F_2(T, C, T_x, C_x), \quad (4.4.6)$$

где F_1, F_2 — функции, включающие в себя все члены с производными низших порядков;

$$\left. \begin{aligned} a_{11} &= \tilde{\lambda} a_4 P^{-1}, \quad a_{12} = -\tilde{D} a_2 P^{-1}, \\ a_{21} &= -\tilde{\lambda} a_3 P^{-1}, \quad a_{22} = \tilde{D} a_1 P^{-1}, \quad P = a_1 a_4 - a_2 a_3. \end{aligned} \right\} \quad (4.4.7)$$

Систему уравнений запишем в векторной форме:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial X_i} \left(A \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial X_i} \right) + \mathbf{F}, \quad (4.4.8)$$

где

$$\mathbf{u} = (T, C), \quad \mathbf{F} = (F_1, F_2), \quad A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}. \quad (4.4.9)$$

Система (4.4.8) в общем случае не является сильно параболической. Действительно, она будет сильно параболической тогда, когда главная часть соответствующего эллиптического оператора удовлетворяет условию (см., например, [57, с. 244])

$$\int_Q \left(A \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial X_i}, \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial X_i} \right) dX \geq \nu \int_Q \sum_i \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial X_i} \right)^2 dX - \mu \int_Q \mathbf{u} dX. \quad (4.4.10)$$

В нашем случае

$$\begin{aligned} \int_Q \left(A \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial X_i}, \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial X_i} \right) dX &= \int_Q \left[\sum_i \left(a_{1i} \left(\frac{\partial T}{\partial X_i} \right)^2 + a_{22} \left(\frac{\partial C}{\partial X_i} \right)^2 \right) + \right. \\ &\left. + (a_{12} + a_{21}) \frac{\partial T}{\partial X_i} \frac{\partial C}{\partial X_i} \right] dX, \end{aligned} \quad (4.4.11)$$

и для выполнения неравенства (4.4.10) с положительной константой необходимо, чтобы было

$$4a_{11}a_{22} - (a_{12} + a_{21})^2 > 0 \quad (4.4.12)$$

или

$$4\tilde{D}\tilde{\lambda}a_1a_4 > \tilde{\lambda}^2a_3^2 + \tilde{D}^2a_2^2 + 2\tilde{\lambda}\tilde{D}a_2a_3. \quad (4.4.13)$$

Учитывая выражения (4.4.4), для a_1, a_2, a_3, a_4 получим

$$4\tilde{\lambda}\tilde{D}(L + \gamma\rho\tilde{\eta}') |1 - (1 - m)\tilde{\eta} + (1 - m)Cf'_i(C)\tilde{\eta}'| -$$

$$\begin{aligned}
 & - 2\tilde{\lambda}\tilde{D}(1-m)C\gamma f'_c(C)(\tilde{\eta}')^2 - \tilde{\lambda}^2(1-m)^2C^2(\tilde{\eta}')^2 - \\
 & \quad - \tilde{D}^2(f'_i(C))^2(\tilde{\eta}')^2 > 0. \quad (4.4.14)
 \end{aligned}$$

Упростив последнее неравенство, найдем

$$\begin{aligned}
 & 4\tilde{\lambda}\tilde{D}[(L + \gamma\rho\tilde{\eta}')(1 - (1-m)\tilde{\eta}) + (1-m)Cf'_i\tilde{\eta}'] - \\
 & \quad - (\tilde{\eta}')^2(\tilde{\lambda}(1-m)C - \tilde{D}f'_i\gamma\rho)^2 > 0. \quad (4.4.14')
 \end{aligned}$$

В нашем случае $\tilde{\eta}'$ может возрасти до бесконечности, так как η имеет разрывы первого рода. Но при больших $\tilde{\eta}'$ последнее неравенство не будет выполняться. Следовательно, система уравнений (4.4.5), (4.4.6) не является сильно параболической. Она будет параболической по Петровскому, если корни σ_1, σ_2 уравнения

$$\begin{vmatrix} a_{11} + \sigma & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} + \sigma \end{vmatrix} = 0 \quad (4.4.15)$$

имеют отрицательные действительные части (см. [72, с. 352]). В нашем случае для этого достаточно, чтобы выполнялись неравенства

$$\left. \begin{aligned} \sigma_1 + \sigma_2 &= -(a_{11} + a_{22}) < 0, \\ \sigma_1 \sigma_2 &= a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} > 0. \end{aligned} \right\} \quad (4.4.16)$$

Будем считать, что диаграмма фазового равновесия такова, что $f'_i(C) \geq 0$, $m < 1$. Тогда, принимая во внимание $\tilde{\eta}'(\Delta T) > 0$, легко показать, что a_{11}, a_{22}, P положительны, а a_{12}, a_{21} отрицательны. Итак, первое неравенство (4.4.16) выполняется очевидным образом. Покажем, что выполняется второе неравенство (4.4.16). Действительно,

$$a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} = \tilde{\lambda}\tilde{D}P^{-2}(a_1a_4 - a_2a_3) = \tilde{\lambda}\tilde{D}P^{-1} > 0 \quad (4.4.17)$$

при любых значениях параметров. Итак, система уравнений (4.4.5), (4.4.6), а следовательно, (4.2.24) и (4.2.25), являются параболическими по Петровскому.

Глава 5

ПОСТРОЕНИЕ ОБОБЩЕННОГО РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ [6]

Отсутствие свойства сильной параболичности системы (4.2.24), (4.2.25) не позволяет обычными методами получить априорные оценки, необходимые для доказательства существования обобщенного решения задачи. Это же обстоятельство сильно затрудняет построение устойчивых разностных схем непосредственно для системы, подобной (4.2.24), (4.2.25).

Ниже будет показан способ сведения системы (4.2.24), (4.2.25) к сильно параболической путем введения параметра β .

В уравнениях (4.2.24), (4.2.25) выделим члены, содержащие $\partial\eta/\partial t$, и положим, что скорость объемной кристаллизации пропорциональна переохлаждению ΔT , а именно:

$$\frac{\partial\eta}{\partial t} = \beta\Delta T\theta(1 - J). \quad (5.0.1)$$

Здесь введены обозначения

$$J = \beta \int_0^t \Delta T d\tau; \quad (5.0.2)$$

$\theta(x)$ — единичная функция;

$$\theta(x) = \begin{cases} 0, & x < 0; \\ 1, & x \geq 0; \end{cases} \quad (5.0.3)$$
$$\theta_1(x) = \begin{cases} 0, & x \leq 0; \\ 1, & x > 0. \end{cases}$$

Тогда η определится выражением

$$\eta = J\theta(1 - J) + \theta_1(J - 1) \quad (5.0.4)$$

так, что в твердой фазе $\eta = 1$.

$$\Delta T = T_l - T = T_A - f_l(C) - T. \quad (5.0.5)$$

β — параметр, определяющий скорость объемной кристаллизации. Тогда система (4.2.24), (4.2.25) переписывается в следующем виде (для упрощения записи знаки осреднения функций опускаются):

$$L \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial X_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial X_i} \right) + L_2 (1 - \eta) u_{x_i} \frac{\partial T}{\partial X_i} + \gamma_0 \beta \Delta T \theta (1 - J); \quad (5.0.6)$$

$$(1 - (1 - m) \eta + C m'(C) \eta) \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial X_i} \left(D \frac{\partial C}{\partial X_i} \right) + (1 - \eta) u_{x_i} \frac{\partial C}{\partial X_i} + \beta (1 - m) C \Delta T \theta (1 - J). \quad (5.0.7)$$

Если скорость кристаллизации стремится к бесконечности ($\beta \rightarrow \infty$), то система (5.0.6), (5.0.7), (5.0.4) переходит в систему (4.2.24) — (4.2.26). Соображения физического характера подсказывают, что предельное решение системы (5.0.6), (5.0.7), по-видимому, должно совпадать с решением исходной задачи (4.2.24) — (4.2.26). Однако это необходимо строго обосновать.

Ниже получим априорные оценки решений T_β , C_β , η_β задачи (5.0.6), (5.0.7), (5.0.4), не зависящие от параметра β . На основании их докажем существование предельных функций T , C , η , которые и являются обобщенным решением исходной задачи. Для сильно параболической системы (5.0.6), (5.0.7) будет построена устойчивая разностная схема.

Доказательству разрешимости задачи в общем случае предположим модельный пример, на котором проанализируем характер сходимости приближенных решений к точному решению при $\beta \rightarrow \infty$.

5.1. АНАЛИЗ МОДЕЛЬНОГО ПРИМЕРА

Рассмотрим задачу направленной кристаллизации слитка в квазистационарном режиме для случая кристаллизации чистого расплава. Задачу поставим в предположениях, изложенных в параграфе 3.2:

$$\frac{d^2u}{dx^2} - 2\mu \frac{du}{dx} - \alpha (u - u_1(x)) = -\gamma\rho\lambda^{-1}v \frac{d\eta}{dx}; \quad (5.1.1)$$

$$u|_{x=x_1} = 0, \quad u|_{x=x_2} = -\Delta u_2; \quad (5.1.2)$$

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \frac{d(u - u_1(x))}{dx} = 0; \quad (5.1.3)$$

$$u_1(x) = -kx. \quad (5.1.4)$$

Кроме того, на границах x_1, x_2 выполняются условия согласования потоков и температуры.

Положим приближенно

$$\frac{\partial\eta}{\partial t} = v \frac{\partial\eta}{\partial x} = \begin{cases} \beta\Delta u, & x_1 < x < x_2; \\ 0, & x < x_1, \quad x > x_2, \end{cases} \quad (5.1.5)$$

где v — скорость кристаллизации; $\Delta u = T_e - T = -u$ — переохлаждение. Покажем, что приближенное решение u_β, η_β задачи (5.1.1) — (5.1.5) при $\beta \rightarrow \infty$ стремится к точному решению задачи (3.2.3) — (3.2.5). Задача (5.1.1) — (5.1.5) легко решается аналитически. В областях, где $x < x_1, x > x_2$, имеем простое уравнение

$$\frac{d^2u}{dx^2} - 2\mu \frac{du}{dx} - \alpha (u - u_1(x)) = 0. \quad (5.1.6)$$

В области $x_1 < x < x_2$, где $\Delta u > 0$, уравнение (5.1.1) с учетом выражения (5.1.5) и того, что $\Delta u = -u$, запишется в виде

$$\frac{d^2u}{dx^2} - 2\mu \frac{du}{dx} - \alpha (u - u_1(x)) = \beta\gamma\rho\lambda^{-1}u, \quad (5.1.7)$$

или

$$\frac{d^2u}{dx^2} - 2\mu \frac{du}{dx} - \omega u - \alpha kx = 0. \quad (5.1.7')$$

Здесь

$$\omega = \alpha + \gamma\rho\lambda^{-1}\beta, \quad \mu = 0,5a^{-2}v, \quad \alpha = \alpha_0\lambda^{-1}. \quad (5.1.8)$$

Выпишем решение уравнений (5.1.6), (5.1.7') в соответствующих областях:

$$u = C_1 e^{\mu_1 x} + u_1(x) + 2\mu k\alpha^{-1}, \quad x < x_1; \quad (5.1.9)$$

$$u = C_2 e^{\mu_2 x} + u_1(x) + 2\mu k\alpha^{-1}, \quad x > x_2; \quad (5.1.10)$$

$$u = C_3 e^{v_1 x} + C_4 e^{v_2 x} + \frac{\alpha}{\omega} u_1(x) + \frac{2\mu k \alpha}{\omega^2}, \quad x_1 < x < x_2. \quad (5.1.11)$$

Из условий (5.1.2) при $x = x_1, x_2$ можно определить константы C_1, C_2, C_3, C_4 :

$$\left. \begin{aligned} C_1 &= (kx_1 - 2\mu k \alpha^{-1}) \exp(-\mu_1 x_1); \\ C_2 &= (kx_2 - 2\mu k \alpha^{-1} - \Delta u_2) \exp(-\mu_2 x_2); \\ C_3 &= \frac{\alpha}{\omega Q} [(kx_1 - 2\mu k \omega^{-1}) \exp(-v_1 x_1 - 2\sqrt{\mu^2 + \omega} x_2) - \\ &\quad - (kx_2 - 2\mu k \omega^{-1} - \omega \alpha^{-1} \Delta u_2) \exp(-v_1 x_2)]; \\ C_4 &= \frac{\alpha}{\omega Q} [(kx_1 - 2\mu \omega^{-1} k) \exp(-v_2 x_1) - (kx_2 - 2\mu k \omega^{-1} - \\ &\quad - \omega \alpha^{-1} \Delta u_2) \exp(-v_2 x_2 + 2\sqrt{\mu^2 + \omega} x_1)]. \end{aligned} \right\} \quad (5.1.12)$$

Здесь введены следующие обозначения:

$$\left. \begin{aligned} \mu_1 &= \mu + \sqrt{\mu^2 + \alpha}; & \mu_2 &= \mu - \sqrt{\mu^2 + \alpha}; \\ v_1 &= \mu + \sqrt{\mu^2 + \omega}; & v_2 &= \mu - \sqrt{\mu^2 + \omega}; \\ Q &= 1 - \exp[-2\sqrt{\mu^2 + \omega}(x_2 - x_1)]. \end{aligned} \right\} \quad (5.1.13)$$

Неизвестные величины x_1, x_2 определяются условиями сопряжения потоков на границах $x = x_1, x_2$:

$$\left. \begin{aligned} \mu_1 (kx_1 - 2\mu k \alpha^{-1}) &= k(1 - \alpha \omega^{-1}) + \\ &+ C_3 v_1 e^{v_1 x_1} + C_4 v_2 e^{v_2 x_1}; \\ \mu_2 (kx_2 - 2\mu k \alpha^{-1}) &= k \left(1 - \frac{\alpha}{\omega}\right) + \\ &+ C_3 v_1 e^{v_1 x_2} + C_4 v_2 e^{v_2 x_2}. \end{aligned} \right\} \quad (5.1.14)$$

Функция η выражается через u в области $x_1 \leq x \leq x_2$ согласно определению (5.1.5):

$$\eta = \frac{\beta}{v} \int_{x_1}^x \Delta u ds = - \frac{\beta}{v} \int_{x_1}^x u ds. \quad (5.1.15)$$

Переохлаждение Δu_2 в конце двухфазной зоны определяется

условием $\eta = 1$:

$$-\frac{\beta}{v} \int_{x_1}^{x_2} u ds = 1. \quad (5.1.16)$$

Полученное решение значительно упрощается при достаточно больших β . Если β велико, то

$$\omega \approx \gamma \rho \lambda^{-1} \beta; \quad v_1 \approx V \bar{\omega}; \quad v_2 = -V \bar{\omega}. \quad (5.1.17)$$

Будем считать, что ширина двухфазной зоны не вырождается: $x_2 - x_1 \geq \varepsilon > 0$. Тогда, пренебрегая членами высшего порядка малости, имеем

$$C_3 \approx \frac{\alpha}{\omega} (kx_2 - \omega \alpha^{-1} \Delta u_2) e^{-V \bar{\omega} x_2}; \quad C_4 = \frac{\alpha}{\omega} kx_1 e^{V \bar{\omega} x_1}. \quad (5.1.18)$$

Учитывая это, получим приближенное решение

$$u(x) = \frac{\alpha}{\omega} [(kx_2 - \omega \alpha^{-1} \Delta u_2) e^{-V \bar{\omega} (x_2-x)} + kx_1 e^{-V \bar{\omega} (x-x_1)} + u_1(x) + 2\mu k \omega^{-1}], \quad x_1 < x < x_2; \quad (5.1.19)$$

$$\eta(x) = \frac{\alpha}{2\omega} \left[\frac{x^2 - x_1^2}{2} - \frac{x_2 - \frac{\omega}{k\alpha} \Delta u_2}{V \bar{\omega}} e^{-V \bar{\omega} (x_2-x)} - \frac{x_1}{V \bar{\omega}} (1 - e^{-V \bar{\omega} (x-x_1)}) \right]; \quad (5.1.20)$$

$$\Delta u_2 = \frac{k\alpha}{V \bar{\omega}} \left(\frac{2\omega}{\alpha} - \frac{x_2^2 - x_1^2}{2} \right); \quad (5.1.21)$$

$$x_1 = \frac{1 + 2\mu \mu_1 \alpha^{-1}}{\mu_1 + \frac{\alpha}{V \bar{\omega}}}; \quad x_2 = \frac{1 + 2\mu \mu_2 \alpha^{-1} - V \bar{\omega} k^{-1} \Delta u_2}{\mu_2 - \frac{\alpha}{V \bar{\omega}}}. \quad (5.1.22)$$

Здесь

$$\omega = v/v_{\kappa}. \quad (5.1.23)$$

Исключая Δu_2 из соотношений (5.1.21), (5.1.22), найдем значение x_2 :

$$x_2 = \alpha^{-1} \left(\mu_2 - \frac{\alpha}{V \bar{\omega}} \right) + \sqrt{4\omega \alpha + \alpha^2 x_1^2 - \mu_2^2 - \frac{2\alpha \mu_2}{V \bar{\omega}} + \frac{\alpha^2}{\omega}}, \quad (5.1.24)$$

так как $\mu_2^2 - \alpha - 2\mu \mu_2 = 0$.

Выражения (5.1.9), (5.1.10), (5.1.19) — (5.1.24) представляют собой асимптотику решения поставленной задачи при больших β . Переходя в этих выражениях к пределу при $\beta \rightarrow \infty$, получаем

$$\left. \begin{aligned} u(x) &= u_1(x) + 2\mu k \alpha^{-1} + k(x_1 - 2\mu \alpha^{-1}) e^{\mu_1(x-x_1)}, \quad x < x_1; \\ u(x) &= u_1(x) + 2\mu k \alpha^{-1} + k(x_2 - 2\mu \alpha^{-1}) e^{\mu_2(x-x_2)}, \quad x > x_2; \\ x_1 &= 2\mu \alpha^{-1} + \mu_1^{-1}; \quad x_2 = \alpha^{-1} \left(\mu_2 + \sqrt{4\omega \alpha + \alpha^2 x_1^2 - \mu_2^2} \right); \\ \eta(x) &= \frac{\alpha}{4\omega} (x^2 - x_1^2); \quad \eta_2 = \frac{\alpha}{4\omega} (x_2^2 - x_1^2), \end{aligned} \right\} \quad (5.1.25)$$

$u \equiv 0$ в области $x_1 \leq x \leq x_2$, т. е. найденный предел совпадает с решением задачи двухфазной зоны (3.2.11) — (3.2.15). Отметим, что предельная функция $\eta(x)$ имеет разрыв при $x = x_2$, изменяясь от η_2 до 1, хотя при конечном β она была непрерывной согласно постановке задачи.

Далее исследуем термодиффузионную задачу (4.2.24), (4.2.25) в общем случае.

5.2. ВЫВОД АПРИОРНЫХ ОЦЕНОК

Получим априорные оценки для первой краевой задачи с однородными граничными условиями в классе обобщенных функций $V_2^{1,0}(Q_t)$. С этой целью уравнение (5.0.6) умножим на T , а (5.0.7) — на C , проинтегрируем по области Q_t и сложим полученные результаты. Беря соответствующие интегралы по частям и используя граничные условия, получаем

$$\begin{aligned} & \int_{Q_t} \left[0,5L \frac{\partial T^2}{\partial t} + 0,5(1 - (1 - m)\eta) \frac{\partial C^2}{\partial t} + \right. \\ & \left. + \eta C^2 m'(C) \frac{\partial C}{\partial t} \right] dx dt + \int_{Q_t} \left[\sum_i \lambda \left(\frac{\partial T}{\partial x_i} \right)^2 + D \left(\frac{\partial C}{\partial x_i} \right)^2 \right] \times \\ & \times dx dt = \int_{Q_t} \left(L_2 (1 - \eta) T u_{x_i} \frac{\partial T}{\partial x_i} + (1 - \eta) C u_{x_i} \frac{\partial C}{\partial x_i} \right) \times \\ & \times dx dt + \int_{Q_t} (\gamma \rho T + (1 - m) C^2) \beta \Delta T \Theta (1 - J) dx dt. \quad (5.2.1) \end{aligned}$$

Первый интеграл в формуле (5.2.1) преобразуем:

$$\begin{aligned}
 J_1 = \int_{Q_{t_1}} \left[0,5 L \frac{\partial T^2}{\partial t} + (0,5 + (1 - (1 - m) \eta)) \frac{\partial C^2}{\partial t} + \right. \\
 \left. + C^2 \eta m' (C) \frac{\partial C}{\partial t} \right] dx dt = \int_Q 0,5 [LT^2 + (1 - \\
 - (1 - m) \eta) C^2]_{t=0}^{t=t_1} dx + 0,5 \int_{Q_{t_1}} [(1 - m) C^2 + (L_2 - L_1) T^2] \times \\
 \times \frac{\partial \eta}{\partial t} dx dt + 0,5 \int_{Q_{t_1}} \eta C^2 m' (C) \frac{\partial C}{\partial t} dx dt. \quad (5.2.2)
 \end{aligned}$$

Введя функцию

$$\varphi (C) = \int_0^C C^2 m' (C) dC, \quad (5.2.3)$$

преобразуем последний интеграл в (5.2.2):

$$\begin{aligned}
 \int_{Q_{t_1}} \eta C^2 m' (C) \frac{\partial C}{\partial t} dx dt = \int_{Q_{t_1}} \eta \frac{\partial \varphi}{\partial t} dx dt = \\
 = \int_Q [\varphi \eta]_{t=0}^{t=t_1} dx - \int_{Q_{t_1}} \varphi \frac{\partial \eta}{\partial t} dx dt. \quad (5.2.4)
 \end{aligned}$$

С учетом преобразований (5.2.3), (5.2.4) равенство (5.2.1) перепишем:

$$\begin{aligned}
 0,5 \int_Q [LT^2 + (1 - (1 - m) \eta) C^2]_{t=0}^{t=t_1} dx + \int_{Q_{t_1}} \left[\sum_i \lambda \left(\frac{\partial T}{\partial x_i} \right)^2 + \right. \\
 \left. + D \left(\frac{\partial C}{\partial x_i} \right)^2 \right] dx dt = \int_{Q_{t_1}} \left(L_2 (1 - \eta) T u_{x_i} \frac{\partial T}{\partial x_i} (1 - \eta) \times \right. \\
 \left. \times C u_{x_i} \frac{\partial C}{\partial x_i} \right) dx dt + 0,5 \int_Q \{ [LT^2 + (1 - (1 - m) \eta) C^2]_{t=0} + \\
 + [\varphi \eta]_{t=0}^{t=t_1} \} dx + \int_{Q_{t_1}} (\gamma \rho T - 0,5 (L_2 - L_1) T^2 + \\
 + 0,5 (1 - m) C^2 + 0,5 \varphi) \beta \Delta T dx dt. \quad (5.2.5)
 \end{aligned}$$

Оценим сверху последний интеграл в формуле (5.2.5). Диаграмму фазового равновесия дополним следующим образом:

$$\bar{f}_l(C) = \begin{cases} 0, & C \leq 0; \\ f_l(C), & 0 < C < 1; \\ T_A - T_B, & C \geq 1, \end{cases} \quad (5.2.6)$$

причем линия солидус совпадает с линией ликвидус при $C \leq 0$ и $C \geq 1$. Таким образом, $m(C) = 1$, $m'(C) = 0$, $\varphi(C) = \text{const}$, если $C \leq 0$ или $C \geq 1$. Пусть для определенности $L_1 \geq L_2$, $m'(C) \geq 0$. Тогда функция

$$F = \gamma \rho T + (L_1 - L_2) T^2 + 0,5(1 - m) C^2 + 0,5\varphi \quad (5.2.7)$$

неотрицательна там, где $\Delta T < 0$ (так как $T > T_B$), и ограничена сверху числом

$$M_1 = \gamma \rho T_A + (L_1 - L_2) T_A^2 + \\ + 0,5 \max_{0 \leq C \leq 1} [(1 - m) C^2 + 0,5\varphi] \quad (5.2.8)$$

в области, в которой $\Delta T > 0$ (при $\Delta T > 0$ $T < T_A$). Имея это в виду, последний интеграл в равенстве (5.2.5) оценим следующим образом:

$$J_2 = \int_Q \int_0^{t_1} (\gamma \rho T + (L_1 - L_2) T^2 + 0,5(1 - m) C^2 + 0,5\varphi) \times \\ \times \beta \Delta T dx dt \leq \int_Q M_1 \sum_{n=0}^N \int_{t_{2n}}^{t_{2n+1}} \beta \Delta T dt dx = \int_Q M_1 \sum_{n=0}^N (\eta(t_{2n+1}) - \\ - \eta(t_{2n})) dx \leq \int_Q M_1 N dx \leq M_1 N \text{mes } Q = M. \quad (5.2.9)$$

Здесь (t_{2n+1}, t_{2n}) — промежуток, в котором $\Delta T > 0$, причем N — конечное число, так как η — функция ограниченной вариации и, следовательно, ΔT может менять знак лишь конечное число раз. Оценивая первый интеграл в правой части равенства (5.2.5) по неравенству Коши и учитывая оценку (5.2.9), получаем

$$0,5L_0 \int_Q T^2 dx + 0,5m_0 \int_Q C^2 dx + \lambda_0 \int_{Q_t} \sum_i \left(\frac{\partial T}{\partial x_i} \right)^2 dx dt +$$

$$\begin{aligned}
 & + D_0 \int_{Q_{t_1}} \sum_i \left(\frac{\partial C}{\partial x_i} \right)^2 dxdt \leq 0,5L_0 \int_Q T^2(x, 0) dx + \\
 & + \int_Q C^2(x, 0) dx + \max |\varphi| \text{mes } Q + M + L_2 \max |u_{x_i}| \times \\
 & \times \int_{Q_{t_1}} \left[\frac{\varepsilon_1}{2} \sum_i \left(\frac{\partial T}{\partial x_i} \right)^2 + \frac{1}{2\varepsilon_1} T^2 \right] dxdt + \max |u_{x_i}| \times \\
 & \times \int_{Q_{t_1}} \left(\frac{\varepsilon_2}{2} \sum_i \left(\frac{\partial C}{\partial x_i} \right)^2 + \frac{1}{2\varepsilon_2} C^2 \right) dxdt. \quad (5.2.10)
 \end{aligned}$$

Здесь*

$$\left. \begin{aligned}
 L_0 &= \max_Q L; & m_0 &= \max_Q (1 - (1 - m) \eta); \\
 \lambda &= \max_{Q_{t_1}} \lambda; & D_0 &= \max_{Q_{t_1}} D.
 \end{aligned} \right\} (5.2.11)$$

Произвольные постоянные $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ выберем следующим образом:

$$\varepsilon_1 = \lambda_0 (L_2 \max |u_{x_i}|)^{-1}, \quad \varepsilon_2 = D_0 (\max |u_{x_i}|)^{-1}. \quad (5.2.12)$$

На входные данные задачи накладываем требования:

$$\max_Q |u|^2 \leq v_1, \quad \int_Q (T^2 + C^2)|_{t=0} dx \leq v_2. \quad (5.2.13)$$

Тогда неравенство (5.2.10) можно преобразовать:

$$\begin{aligned}
 & 0,5L_0 \int_Q T^2 dx + 0,5m_0 \int_Q C^2 dx + 0,5\lambda_0 \int_{Q_{t_1}} \sum_i \left(\frac{\partial T}{\partial x_i} \right)^2 dxdt + \\
 & + 0,5D_0 \int_{Q_{t_1}} \sum_i \left(\frac{\partial C}{\partial x_i} \right)^2 dxdt \leq M_0 + 0,5L_2 v_1 \varepsilon_1^{-1} \int_{Q_{t_1}} T^2 dxdt + \\
 & + 0,5v_1 \varepsilon_2^{-1} \int_{Q_{t_1}} C^2 dxdt, \quad (5.2.14)
 \end{aligned}$$

где

$$M_0 = \max \{0,5L_0, 1\} v_2 + \max |\varphi| \text{mes } Q + M. \quad (5.2.15)$$

* Напомним, что осредненные величины L, λ, D определяются выражениями (4.2.23).

Воспользуемся теперь неравенством Гронуола [58, с. 112]

$$y(t) \leq e^{C_0 t} \int_0^t F(\tau) d\tau, \quad (5.2.16)$$

если

$$y'(t) \leq C_0 y(t) + F(t), \quad (5.2.17)$$

где

$$C_0 \geq 0, \quad F(t) \geq 0, \quad y(t) \geq 0.$$

Неравенство (5.2.14) можно свести к (5.2.17), если ввести следующие обозначения:

$$\left. \begin{aligned} y(t) &= \int_{Q_{t_1}} (T^2 + C^2) dx dt; \\ C_0 &= \frac{\max \{0,5L_2 v_1 \varepsilon_1^{-1}, 0,5v_1 \varepsilon_2^{-1}\}}{0,5 \min \{L_0, m_0\}}; \quad F(t) = \frac{M_0}{0,5 \min \{L_0, m_0\}}. \end{aligned} \right\} \quad (5.2.18)$$

Тогда

$$\int_{Q_{t_1}} (T^2 + C^2) dx dt \leq e^{C_0 t_1} \frac{M_0 t_1}{0,5 \min \{L_0, m_0\}} = K(t_1). \quad (5.2.19)$$

Таким образом, получаем априорную оценку

$$\begin{aligned} L_0 \int_Q T^2 dx + m_0 \int_Q C^2 dx + \lambda_0 \int_{Q_{t_1}} \sum_i \left(\frac{\partial T}{\partial x_i} \right)^2 dx dt + \\ + D_0 \int_{Q_{t_1}} \sum_i \left(\frac{\partial C}{\partial x_i} \right)^2 dx dt \leq M_0 + K(t_1), \end{aligned} \quad (5.2.20)$$

или

$$\begin{aligned} L_0 \max_{0 < t < t_1} \int_Q T^2 dx + m_0 \max_{0 < t \leq t_1} \int_Q C^2 dx + \lambda_0 \int_{Q_{t_1}} \sum_i \left(\frac{\partial T}{\partial x_i} \right)^2 dx dt + \\ + D_0 \int_{Q_{t_1}} \sum_i \left(\frac{\partial C}{\partial x_i} \right)^2 dx dt \leq N(t_1). \end{aligned} \quad (5.2.20')$$

Итак, получена оценка в классе функций $V_2^{1,0}(Q_t)$, которые имеют обобщенные производные по x_i , суммируемые

с квадратом непрерывных по t в среднем. Эта оценка позволяет из последовательности функций $T_\beta, C_\beta, \eta_\beta$ выбрать сходящуюся подпоследовательность $T_{\beta_n}, C_{\beta_n}, \eta_{\beta_n}$, причем $T_{\beta_n}, C_{\beta_n}, \eta_{\beta_n}$ сильно сходятся к некоторым функциям \tilde{T}, \tilde{C} в норме $L_2(Q_t)$, $\partial T_{\beta_n}/\partial x_i, \partial C_{\beta_n}/\partial x_i$ слабо сходятся к $\partial \tilde{T}/\partial x_i, \partial \tilde{C}/\partial x_i$ в $L_2(Q_t)$, соответствующая последовательность η_{β_n} также слабо сходится к $\tilde{\eta}$ в $L_2(Q_t)$.

Такой сходимости достаточно, чтобы перейти к пределу под знаком интеграла в тождествах (4.3.4), (4.3.5), записанных для функций $T_{\beta_n}, C_{\beta_n}, \eta_{\beta_n}$. Тем самым будет доказано, что найденные предельные функции $\tilde{T}, \tilde{C}, \tilde{\eta}$ удовлетворяют тождествам (4.3.4), (4.3.5) и, следовательно, являются обобщенным решением исходной задачи. Существование решения задачи (5.0.6), (5.0.7), (5.0.4) при конечном значении β можно было бы доказать, основываясь на принципе Лере — Шаудера.

Ниже приведем доказательство существования обобщенного решения задачи (5.0.6), (5.0.7), (5.0.4) конечно-разностным методом.

5.3. КОНЕЧНО-РАЗНОСТНЫЙ МЕТОД

Докажем существование решения первой красной задачи для системы (5.0.6), (5.0.7). С этой целью построим устойчивую разностную схему. Чтобы избежать громоздких записей, разностную схему рассмотрим для следующей одномерной задачи с постоянной L (в многомерном случае и для переменного L выкладки аналогичны):

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

$$+ L(1 - \eta) u \frac{\partial T}{\partial x} + \gamma \beta \Delta T \theta (\Delta T) \theta (1 - J); \quad (5.3.1)$$

$$(1 - (1 - m)\eta + Cm'(C)\eta) \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right) + (1 - \eta) u \times \\ \times \frac{\partial C}{\partial x} + (1 - m) C \beta \Delta T \theta (\Delta T) \theta (1 - J); \quad (5.3.2)$$

$$T = C = 0; \quad x = l_1, l_2; \quad (5.3.3)$$

$$T(x, 0) = \varphi_1(x); \quad C(x, 0) = \varphi_2(x); \quad \eta(x, 0) = \bar{\eta}(x). \quad (5.3.4)$$

Здесь принято

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = \beta \Delta T \theta (\Delta T) \theta (1 - J), \quad (5.3.5)$$

так что $\partial \eta / \partial t$ неотрицательна.

Систему (5.3.1), (5.3.2) аппроксимируем неявной разностной схемой:

$$LT_i = (\lambda_i^n T_x^{n+1})_{\bar{x}} + L(1 - \eta_i^n) u_i^n T_x^{n+1} + \gamma \rho \eta_i^n; \quad (5.3.6)$$

$$(1 - (1 - m_i^n) \eta_i^n + C_i^{n+1} m' (C_i^n) \eta_i^n) C_i = (D_i^n C_x^{n+1})_{\bar{x}} + \\ + (1 - \eta_i^n) u_i^n C_x^{n+1} + (1 - m_i^n) C_i^{n+1} \eta_i^n; \quad (5.3.7)$$

$$\eta_i^n = J_i^n \theta (1 - J_i^n) + \theta (J_i^n - 1); \quad (5.3.8)$$

$$J_i^n = \beta \sum_{m=1}^n \Delta T_i^m \theta (\Delta T_i^m) \tau \quad (5.3.9)$$

[см. (5.0.2), (5.0.4)]. Тогда для сохранения баланса разностное отношение η_i необходимо аппроксимировать следующим образом:

$$\eta_i = (\eta_i^n - \eta_i^{n-1}) \tau^{-1} = \begin{cases} \beta \Delta T_i^n \theta (\Delta T_i^n), & J_i^n, J_i^{n-1} \leq 1; \\ (1 - J_i^{n-1}) \tau^{-1}, & J_i^n > 1, J_i^{n-1} < 1; \\ 0, & J_i^n, J_i^{n-1} \geq 1. \end{cases} \quad (5.3.10)$$

Здесь и далее использованы общепринятые обозначения сеточных функций [74]:

$$\left. \begin{aligned} u_i^n &= u(x_i, t_n); & u_x^n &= (u_{i+1}^n - u_i^n) h^{-1}; \\ u_x^n &= (u_i^n - u_{i-1}^n) h^{-1}; & u_t^n &= (u_i^{n+1} - u_i^n) \tau^{-1}; \\ u_t^n &= (u_i^n - u_i^{n-1}) \tau^{-1}; & m_C &= (m_i^{n+1} - m_i^n) / (C_i^{n+1} - C_i^n); \\ x_i &= h_i, & t &= 0, 1, 2, \dots, N; & t_n &= \tau n, & n &= \\ & & & & & = 0, 1, 2, \dots, M, \dots, \end{aligned} \right\} \quad (5.3.11)$$

где h , τ — равномерные шаги сетки по x и t .

З а м е ч а н и е 5.3.1. При аппроксимации уравнений (5.3.1), (5.3.2) все нелинейные члены и коэффициенты,

кроме $C_i^{n+1} m' (C_i^n) \eta_i^n$ при C_i , аппроксимируются на предыдущем временном слое. Указанная аппроксимация требуется для последующего осуществления предельного перехода в соответствующем интегральном тождестве при $\tau, h \rightarrow 0$. Нелинейный коэффициент можно проитерировать обычным образом. Из полученной ниже равномерной оценки будет следовать, в частности, сходимость итерационного процесса. В случае $m' (C) \equiv 0$ система (5.3.6), (5.3.7) линейна. Отметим, что при аппроксимации конвективных членов уравнений принималось $u \geq 0$.

Для решения разностной задачи (5.3.1) — (5.3.5) получим априорную оценку, аналогичную (5.2.20') в классе сеточных функций $V_2^{1,0}(Q^{h,\tau})$, где $Q^{h,\tau}$ — разностный аналог области Q_t . Для этого помножим уравнения (5.3.6), (5.3.7) на $h\tau$ и T_i^{n+1} , C_i^{n+1} соответственно и просуммируем по i от 0 до $N - 1$. С помощью формул суммирования по частям и однородных граничных условий (5.3.3) получаем

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^{N-1} [LT_i T_i^{n+1} + (1 - (1 - m_i^n) \eta_i^n + C_i^{n+1} m' (C_i^n)) C_i^{n+1} C_i] h\tau + \\ & + \sum_{i=1}^{N-1} [\lambda_i^n (T_x^{n+1})^2 + D_i^n (C_x^{n+1})^2] h\tau = \sum_{i=1}^{N-1} [L (1 - \eta_i^n) \times \\ & \times u_i^n T_x^{n+1} T_i^{n+1} + (1 - \eta_i^n) u_i^n C_x^{n+1} C_i^{n+1}] h\tau + \\ & + \sum_{i=1}^{N-1} [(\gamma \rho T_i^{n+1} + (1 - m_i^n) (C_i^{n+1})^2) \eta_i^n] h\tau. \end{aligned} \quad (5.3.12)$$

Далее, используя тождества [74, с. 46] типа

$$\left. \begin{aligned} T_i T_i^{n+1} &= 0,5 [(T_i^n)_i^2 + \tau (T_i)^2], \\ f_i^n (C_i)_i &= (f_i^n C_i)_i - (f_i^n)_i C_i^{n+1}, \end{aligned} \right\} \quad (5.3.13)$$

проделаем следующие преобразования в первой сумме равенства (5.3.12):

$$\begin{aligned} & LT_i T_i^{n+1} + (1 - (1 - m_i^n) \eta_i^n) C_i^{n+1} C_i + m' (C_i^n) (C_i^{n+1})^2 C_i = \\ & = 0,5 [L (T_i^n)_i^2 + \tau L (T_i)^2 + ((1 - (1 - m) \eta) C^2)_i + \\ & + (1 - (1 - m) \eta) \tau (C_i)^2 + (1 - m_i^{n+1}) (C_i^{n+1})^2 \eta_i + \\ & + (C_i^{n+1})^2 m' (C_i^n) C_i \eta_i^n]. \end{aligned} \quad (5.3.14)$$

Будем считать, что $m(C)$ имеет такой вид, что существует функция $\varphi_i^n \geq 0$, которая определяется условием

$$\frac{\varphi_i^{n+1} - \varphi_i^n}{C_i^{n+1} - C_i^n} = 0,5 (C_i^{n+1})^2 m'(C_i^n). \quad (5.3.15)$$

Тогда последнее слагаемое в (5.3.14) можно преобразовать к виду

$$(C_i^{n+1})^2 m'(C_i^n) C_i \eta_i^n = \varphi_i \eta_i^n = (\varphi \eta)_i - \varphi_i^{n+1} \eta_i. \quad (5.3.16)$$

Суммируя равенство (5.3.12) по n от 0 до M с учетом сделанных преобразований, получаем

$$\begin{aligned} & 0,5 \sum_{i=1}^{N-1} [L(T_i^M)^2 + (1 - (1 - m_i^M) \eta_i^M) (C_i^M)^2] h + \\ & + 0,5 \tau \sum_{n=0}^M \sum_{i=1}^{N-1} [L(T_i)^2 + (1 - (1 - m_i^n) \eta_i^n) (C_i)^2 + \\ & + \lambda_i^n (T_x^{n+1})^2 + D_i^n (C_x^{n+1})^2] h \tau = 0,5 \sum_{i=1}^{N-1} [L(T_i^0)^2 + \\ & + (1 - (1 - m_i^0) \eta_i^0) (C_i^0)^2] h + \sum_{i=1}^{N-1} [(\varphi \eta)_i^M - (\varphi \eta)_i^0] h + \\ & + \sum_{n=0}^M \sum_{i=1}^{N-1} (1 - \eta_i^n) (u_i^n T_x^{n+1} T_i^{n+1} L_0 + C_x^{n+1} C_i^{n+1}) h \tau + \\ & + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{n=0}^M [\gamma \rho T_i^{n+1} \eta_i + (1 - m_i^n) (C_i^{n+1})^2 \eta_i - \\ & - (0,5 (1 - m_i^{n+1}) (C_i^{n+1})^2 - \varphi_i^{n+1}) \eta_i] h \tau. \quad (5.3.17) \end{aligned}$$

Последнюю двойную сумму (обозначим ее I) в равенстве (5.3.17) можно оценить сверху следующим образом. Так как $m_i^n = 1$, $\varphi_i^n = 0$ при $C_i^n < 0$, $C_i^n > 1$ и $\varphi_i^n > 0$, то существует $\max \varphi_i^n = \varphi_0$. Кроме того, $T_i^n \leq T_A$, $\eta_i^n \leq 1$ при $\Delta T_i^n \geq 0$. Тогда

$$\begin{aligned} I & \leq [\gamma \rho T_A + \max_{0 \leq C_i^n \leq 1} ((1 - m_i^n) (C_i^{n+1})^2)] \sum_{i=1}^{N-1} (\eta_i^M - \eta_i^0) h + \\ & + 0,5 \max_{0 \leq C_i^n \leq 1} \varphi_i^{n+1} \sum_{i=1}^{N-1} (\eta_i^{M+1} - \eta_i^0) h \leq M_1. \quad (5.3.18) \end{aligned}$$

Вводя обозначения норм сеточных функций

$$\|u_i^n\|_{2,Q_h}^2 = \sum_{i=1}^{N-1} (u_i^n)^2 h, \quad \|u_i^n\|_{2,Q_h,\tau}^2 = \sum_{n=0}^M \sum_{i=1}^{N-1} (C_i^n)^2 h\tau, \quad (5.3.19)$$

переходим к неравенству

$$\begin{aligned} & 0,5L \|T_i^M\|_{2,Q_h}^2 + 0,5m_0 \|C_i^M\|_{2,Q_h}^2 + \lambda_0 \|T_x^{n+1}\|_{2,Q_h,\tau}^2 + \\ & + D_0 \|C_x^{n+1}\|_{2,Q_h,\tau}^2 \leq 0,5L \|T_i^0\|_{2,Q_h}^2 + 0,5m_0 \|C_i^0\|_{2,Q_h}^2 + \\ & + \max_i |\varphi_i \eta_i| \operatorname{mes} Q_h + M_1 + 0,5\lambda_0 \|T_x^{n+1}\|_{2,Q_h,\tau}^2 + \\ & + 0,5D_0 \|C_x^{n+1}\|_{2,Q_h,\tau}^2 + \frac{(L_0 \max |u_i^n|)^2}{2\lambda_0} \|T_i^{n+1}\|_{2,Q_h,\tau}^2 + \\ & + \frac{(\max |u_i^n|)^2}{2D_0} \|C_i^{n+1}\|_{2,Q_h,\tau}^2, \end{aligned} \quad (5.3.20)$$

где

$$\lambda_0 = \min_{n,i} \lambda_i^n, \quad D_0 = \min_{n,i} D_i^n, \quad m_0 = \min_{n,i} (1 - (1 - m_i^n) \eta_i^n). \quad (5.3.21)$$

Воспользовавшись неравенством, аналогичным неравенству Гронуола для сеточных функций, получим необходимую равномерную оценку

$$\begin{aligned} & L \max_n \|T_i^n\|_{2,Q_h}^2 + m_0 \max \|C_i^n\|_{2,Q_h}^2 + \\ & + \lambda_0 \|T_x^n\|_{2,Q_h,\tau}^2 + D_0 \|C_x^n\|_{2,Q_h,\tau}^2 \leq M_2(t_M). \end{aligned} \quad (5.3.22)$$

Из (5.3.22) следуют разрешимость и устойчивость линеаризованной системы, соответствующей (5.3.6), (5.3.7), а также сходимость итерационного процесса для нелинейной системы (5.3.6), (5.3.7). Кроме того, решения системы (5.3.6), (5.3.7) \tilde{T}_i^n , \tilde{C}_i^n , соответствующим образом продолженные на всю область Q_i , слабо сходятся к некоторому пределу \tilde{T} , \tilde{C} по норме пространства функций $V_2^{1,0}(Q_i)$, причем $\tilde{\eta}_i^n$ также слабо сходятся к некоторому пределу $\tilde{\eta}$ по норме $L_2(Q_i)$. Остается показать, что предельные функции являются обобщенным решением исходной задачи (5.3.1) — (5.3.5).

Для этого левую часть равенства (5.3.7) преобразуем:

$$\begin{aligned} & (1 - (1 - m_i^n) \eta_i^n + C_i^n {}^{-1} m' (C_i^n) \eta_i^n) C_i = \\ & = ((1 - (1 - m_i^n) \eta_i^n) C_i^n)_i + (1 - m_i^n) C_i^n \eta_i + \tau (1 - \\ & \quad - (1 - m_i^n) C_i^n \eta_i)_i. \end{aligned} \quad (5.3.23)$$

Запишем теперь суммарные тождества с произвольными функциями φ_i^n , Ψ_i^n , соответствующие уравнениям (5.3.6), (5.3.7):

$$\begin{aligned} & \sum_{n=0}^M \sum_{i=1}^{N-1} [LT_i^n(\varphi)_i - \gamma \rho \eta_i^n \varphi_i - \lambda_i^n T_x^{n+1} \varphi_x^n + \\ & + L_0 (1 - \eta_i^n) u_i^n T_x^{n+1} \varphi_i^n] h \tau = \sum_{i=1}^{N-1} (LT_i^0 - \gamma \rho \eta_i^0) \varphi_i^0 h; \end{aligned} \quad (5.3.24)$$

$$\begin{aligned} & \sum_{n=0}^M \sum_{i=1}^{N-1} [(1 - (1 - m_i^n) \eta_i^n) C_i^n \Psi_i^n - D_i^n C_x^{n-1} \Psi_x^n + \\ & + (1 - \eta_i^n) u_i^n C_x^{n+1} \Psi_i^n] h \tau = \sum_{i=1}^{N-1} (1 - (1 - m_i^0) \eta_i^0) C_i^0 \Psi_i^0 h + \\ & + \tau \sum_{n=0}^M \sum_{i=1}^{N-1} (1 - m_i^n) C_i^n \eta_i^n \Psi_i^n h \tau. \end{aligned} \quad (5.3.25)$$

В последних тождествах суммы можно заменить интегралами, если функции считать продолженными на всю область Q_i . Переходя к пределу в этих тождествах при $h, \tau \rightarrow 0$, для предельных функций получаем тождества, совпадающие с (4.3.4), (4.3.5), так как последняя сумма в (5.3.25) стремится к 0 при $\tau \rightarrow 0$. Действительно,

$$\begin{aligned} |J| &= \tau \left| \sum_{n=0}^M \sum_{i=0}^{N-1} (1 - m_i^n) C_i^n \eta_i^n \Psi_i^n h \tau \right| \leq \\ & \leq \tau \max_{i,n} ((1 - m_i^n) \Psi_i^n) \|C_i^n\|_{2, Q_{h,\tau}} \|\eta_i^n\|_{2, Q_{h,\tau}} \leq \\ & \leq \tau M_1 \|C_i^n\|_{2, Q_{h,\tau}} \beta \|\Delta T_i^n\|_{2, Q_{h,\tau}} \leq \beta M \tau \end{aligned} \quad (5.3.26)$$

и, следовательно, $|J| \rightarrow 0$, если $\tau \rightarrow 0$, при любом конечном β .

Таким образом, получено решение исходной задачи при конечном значении β .

Рассмотренный разностный алгоритм может быть использован как эффективный метод решения исходной задачи. Отметим, что требования (5.2.3), (5.3.15), наложенные на коэффициент равновесного распределения $m(C)$, легко выполнимы, так как согласно диаграмме фазового равновесия всегда можно построить функцию $m(C)$ требуемого вида. Для численного решения задачи в многомерном случае применяется один из методов расщепления многомерного оператора [74]. Примеры численного решения задачи приведены в главе 7.

Глава 6

ЗАДАЧА С УЧЕТОМ КИНЕТИКИ СПОНТАННОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ В ОБЪЕМЕ РАСПЛАВА

В главе 4 при постановке общей задачи было принято допущение, что в любом объеме двухфазной зоны переохлаждение равно нулю. Такое допущение хотя определяет относительную долю твердой фазы η в двухфазной зоне, но не позволяет ввести в рассмотрение какие-либо характеристики первичной структуры двухфазной зоны. Чтобы поставить задачу, определяющую элементы структуры двухфазной зоны, необходимо ввести в рассмотрение переохлаждение и кинетику структурообразования дисперсной среды.

Наиболее подходящей основой для описания процессов кристаллизации в рассматриваемом случае является система осредненных уравнений (4.2.21), (4.2.22). Эти уравнения справедливы и в том случае, когда $\Delta T \neq 0$ в двухфазной области. Так как отклонения средней температуры и средней концентрации от равновесных значений T_i и C_i малы в пределах двухфазной зоны, то в уравнениях (4.2.21), (4.2.22) будем пренебрегать слагаемыми, содержащими $\langle T \rangle - T_i$, $\langle C \rangle - C_i$. Запишем эти уравнения, выделив члены, содержащие $\partial\eta/\partial t$ (знаки осреднения функций опускаем и вместо η_i пишем η):

$$L \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial X_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial X_i} \right) + L_2 (1 - \eta) u_{x_i} \frac{\partial T}{\partial X_i} + \gamma \rho \frac{\partial \eta}{\partial t}; \quad (6.0.1)$$

$$(1 - (1 - m) \eta + C m' (C) \eta) \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial X_i} \left(D \frac{\partial C}{\partial X_i} \right) + (1 - \eta) u_{x_i} \frac{\partial C}{\partial X_i} + C (1 - m) \frac{\partial \eta}{\partial t}. \quad (6.0.2)$$

Напомним, что здесь T , C , η — осредненные по элементарным объемам V функции; L , λ , D — осредненные коэффициенты, определяемые выражениями (4.2.23).

В системе (6.0.1), (6.0.2) неопределенной остается функция η . Для ее определения следует рассмотреть кинетику объемной кристаллизации в пределах элементарного объема. Пусть будут известны скорость J (ΔT) возникновения спонтанных кристаллов в единице объема как функция переохлаждения и объем отдельного кристаллита $W(t, \tau)$, возникающего в момент времени τ . Тогда число кристаллитов, возникших за время $d\tau$, в элементарном объеме будет

$$dN \approx J(\tau)(V - V_\tau) d\tau, \quad (6.0.3)$$

а суммарный объем их в момент t

$$dV_\tau \approx J(\tau)(V - V_\tau) W(t, \tau) d\tau. \quad (6.0.4)$$

Суммируя эти объемы в интервале времени от 0 до t , получаем

$$V_\tau = \int_0^t J(\tau)(V - V_\tau) W(t, \tau) d\tau. \quad (6.0.5)$$

Разделив последнее выражение на V , имеем относительный суммарный объем твердой фазы

$$\eta = \int_0^t J(\tau)(1 - \eta) W(t, \tau) d\tau. \quad (6.0.6)$$

Формула (6.0.6) получена в предположении независимости роста отдельных зародышей. Можно воспользоваться более точной формулой Колмогорова [53], учитывающей геометрический фактор при разрастании отдельных зародышей:

$$\eta = 1 - \exp\left(-\int_0^t J(\tau) W(t - \tau) d\tau\right). \quad (6.0.6')$$

Переход двухфазной области в область, занятую твердой фазой, будем определять условием $\eta = 1$, если используется формула (6.0.6). В случае определения η по формуле (6.0.6') $\eta = 1$ не достигается ни при каком значении времени. Приближенно можно считать, что переход к твердой

фазе определяется значением

$$\eta = 1 - \delta (\delta > 0).$$

Остается определить зависимость J и W от переохлаждения ΔT .

6.1. ОПРЕДЕЛЕНИЕ СКОРОСТИ ЗАРОЖДЕНИЯ В СЛУЧАЕ СПОНТАННОЙ ГОМОГЕННОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ

Наиболее полное описание кинетики объемной кристаллизации в случае гомогенного зарождения дает кинетическая теория Френкеля — Зельдовича [46, 85], которая применима и к описанию зародышеобразования в расплавах [100]. Согласно этой теории функция $f(n, t)$ — число зародышей размером n в элементарном объеме — удовлетворяет кинетическому уравнению [63]

$$\frac{\partial f}{\partial t} = - \frac{\partial j}{\partial n}, \quad (6.1.1)$$

$$j = - \left(P(n) \frac{\partial f}{\partial n} - nf \right), \quad (6.1.2)$$

где j — поток зародышей кристаллов в пространстве размеров n ; $P(n)$ — коэффициент, определяемый термодинамическими флуктуациями атомов вблизи поверхности зародышей размером n :

$$P(n) = \omega \exp \left(- \frac{U}{kT} \right) n^{i/s} = P_0 n^{i/s}, \quad (6.1.3)$$

где ω — частота колебаний атомов у поверхности зародышей.

Скорость роста зародыша \dot{n} определяется законом нормального роста кристалла с учетом сил поверхностного натяжения:

$$n = P(n) \left(\frac{q\Delta T}{kT^2} - \frac{2}{3} \frac{(36\pi v_0^2)^{1/3}}{kT} \frac{\nu}{n^{1/3}} \right), \quad (6.1.4)$$

где n — число атомов в одном зародыше;

v_0 — объем одной частицы;

ν — поверхностное натяжение;

q — скрытая теплота фазового перехода на одну частицу;

ΔT — переохлаждение вблизи поверхности зародыша.

Определим граничные условия для уравнения (6.1.1). Будем считать, что это уравнение справедливо в широкой области изменения n от n_0 до n_1 , где n_0 — размер, который намного меньше критического ($n_0 \ll n_k$); n_1 — достаточно большое число, сравнимое с числом атомов N_1 в элементарном объеме. Положим

$$f(n_0, t) = f_e(n_0), \quad (6.1.5)$$

где $f_e(n)$ — равновесное распределение зародышей докритических размеров, которое находится из условия равенства нулю потока j :

$$P(n) \frac{\partial f}{\partial n} - \dot{n}f = 0. \quad (6.1.6)$$

Решая (6.1.6), находим f_e :

$$f_e(n) = N_1 \exp\left(\frac{q\Delta T}{kT^2} - \frac{(36\pi v_0^2)^{1/3}}{kT} v n^{2/3}\right). \quad (6.1.7)$$

Другое условие при $n = n_1$ следует из того, что для больших n «диффузионная» часть потока j пренебрежимо мала по сравнению с частью потока, определяемой ростом зародышей. Таким образом,

$$\frac{\partial f}{\partial n} = 0 \text{ при } n = n_1. \quad (6.1.8)$$

В качестве начального условия можно принять

$$f(n, 0) = 0. \quad (6.1.9)$$

Задача (6.1.1), (6.1.5), (6.1.8), (6.1.9) полностью определяет число зародышей любых размеров. Зная функцию $j(n, t)$, можно найти суммарный объем твердой фазы:

$$\eta = N_1^{-1} \int_{n_0}^{n_1} f(n, t) n dn. \quad (6.1.10)$$

Однако такой способ определения функции η значительно затрудняет решение исходной задачи (6.0.1), (6.0.2), так как дополнительно необходимо численно решить задачу (6.1.1), (6.1.5), (6.1.8), (6.1.9). Чтобы определить η в замкнутом виде, дадим приближенную оценку скорости образования зародышей закрытых размеров. Для этого найдем распреде-

ление зародышей в стационарном случае. Уравнение (6.1.1) в стационарном случае можно записать следующим образом:

$$\frac{d}{dn} \left[P(n) f_e(n) \frac{d}{dn} (f/f_e) \right] = 0. \quad (6.1.11)$$

Решением этого уравнения с учетом условий (6.1.5), (6.1.8) будет

$$f(n) = f_e(n) \frac{\Phi(n) + \left(P(n_1) \frac{df_e(n_1)}{dn} \right)^{-1}}{\Phi(n_0) + \left(P(n_1) \frac{df_e(n_1)}{dn} \right)^{-1}}, \quad (6.1.12)$$

$$\Phi(n) = \int_n^{n_1} \frac{dn}{P(n) f_e(n)}. \quad (6.1.13)$$

Функция $f_e(n)$ определена выражением (6.1.7), которое можно записать в виде

$$f_e(n) = N_1 \exp \left(an_k^{2/3} \left(x - \frac{3}{2} x^{2/3} \right) \right), \quad (6.1.14)$$

$$n_k^{1/3} = \frac{akT^2}{q\Delta T}, \quad a = \frac{2}{3} \frac{(36\pi v_0^2)^{1/3} v}{kT}, \quad x = \frac{n}{n_k}. \quad (6.1.15)$$

Для больших значений n (будем считать, что $n, n_k \gg 10^2$) интеграл (6.1.13) оценивается асимптотически (исключаются значения n , близкие к n_k):

$$\left. \begin{aligned} \Phi(n) &\approx \frac{2\sqrt{\pi}}{P_0 \sqrt{a} \cdot f_e(n_k)}, \quad n \leq n_k; \\ \Phi(n) &= [P_0 a n_k^{1/3} x^{1/3} (x^{1/3} - 1) f_e(n)]^{-1}, \quad n > n_k. \end{aligned} \right\} \quad (6.1.16)$$

Тогда распределение зародышей по размерам определяется выражением

$$\left. \begin{aligned} f(n) &\approx f_e(n), \quad n < n_k; \\ f(n) &\approx \frac{f_e(n_k)}{2\sqrt{\pi a} \cdot n^{1/3} (x^{1/3} - 1)} \times \\ &\quad \times \frac{1 + \frac{n^{1/3} (x^{1/3} - 1) f_e(n)}{n_1^{1/3} (x_1^{1/3} - 1) f_e(n_1)}}{1 + \frac{f_e(n_k)}{2\sqrt{\pi a} \cdot n_1^{1/3} (x_1^{1/3} - 1) f_e(n_1)}}, \quad n > n_k. \end{aligned} \right\} \quad (6.1.17)$$

При значениях n_1 , намного больших n_k , вторая дробь в выражении (6.1.17) изменяется в пределах от 1 до 2. Поэтому приближенно можно считать, что

$$f(n) \approx \frac{f_c(n_k)}{2\sqrt{\pi a} \cdot n^{1/3} (x^{1/3} - 1)} = \frac{N_1 \exp(-0,5an_k^{2/3})}{2\sqrt{\pi a} \cdot n^{1/3} (x^{1/3} - 1)}, \quad n > n_k. \quad (6.1.18)$$

Условие (6.1.8) приближенно выполняется не только при $n = n_1$, но и для всех n , больших некоторого n_2 , причем согласно работе [44]

$$n_2 \approx n_k \left(1 + \frac{3}{v_0^{1/3} n_k^{1/3}} \left(\frac{kT}{v} \right)^{1/2} \right) \approx n_k (1 + 0,01), \quad (6.1.19)$$

т. е. оно выполняется для значений n , несколько больших n_k . Для таких значений поток определяется выражением

$$j(n) \approx n f(n). \quad (6.1.20)$$

В принятых обозначениях \dot{n} можно преобразовать к виду

$$\begin{aligned} \dot{n} &= P_0 n^{2/3} \left(\frac{q\Delta T}{kT^2} - \frac{a}{n^{1/3}} \right) = P_0 n^{2/3} \frac{q\Delta T}{kT^2} \left(1 - \frac{1}{x^{1/3}} \right) = \\ &= P_0 a n^{1/3} (x^{1/3} - 1). \end{aligned} \quad (6.1.21)$$

Подставив найденные значения $f(n)$ и \dot{n} в выражение (6.1.20), будем иметь значение потока для зародышей критических размеров:

$$j(n) \approx P_0 N_1 \frac{1}{a} (2\sqrt{\pi})^{-1} \exp(-0,5an_k^{2/3}), \quad n > n_2, \quad (6.1.22)$$

или

$$j(n) \approx A \exp(-B\Delta T^{-2}), \quad (2.1.22')$$

где

$$A = P_0 N_1 \frac{\sqrt{a}}{2\sqrt{\pi}}; \quad B = \frac{16\pi v_0^2 T v^3}{kq^2}. \quad (6.1.23)$$

Как видим, полученное значение потока не зависит от размера зародышей. Оно совпадает со значением скорости образования зародышей критических размеров J .

По найденному значению скорости образования зародышей общее число N кристаллитов в единице объема опреде-

лится равенством

$$N = \int_0^t J(\tau)(1 - \eta(\tau)) d\tau. \quad (6.1.24)$$

Следует отметить, что равенство (6.1.22') для j отличается от известного выражения для стационарного потока [78] лишь значением константы A . Это отличие несущественно, так как значения A и B теоретически можно определить лишь весьма приближенно.

6.2. УЧЕТ ВЛИЯНИЯ ТЕПЛОТВОДА И ДИФФУЗИИ НА СКОРОСТЬ РОСТА ЗАРОДЫША

Объем отдельного зародыша кристалла можно подсчитать по формуле (6.1.4), определяющей скорость его роста в зависимости от переохлаждения. Однако для этого следует знать значение локального переохлаждения ΔT на поверхности зародыша. В общей же постановке задачи фигурирует лишь среднее значение переохлаждения $\tilde{\Delta T}$ в элементарном объеме. Чтобы в формуле (6.1.4) можно было использовать среднее значение переохлаждения, необходимо установить связь между локальным переохлаждением на границе зародыша и средним переохлаждением, для чего достаточно рассмотреть динамику роста отдельного зародыша с учетом лимитирующего влияния теплоотода и диффузии у поверхности раздела фаз.

Итак, рассмотрим рост отдельного зародыша в элементарной ячейке расплава, размер которой R определяется общим числом зародышей в единице объема расплава.

В случае роста кристаллов сферической, цилиндрической или плоской формы размер ячейки определяется соответственно выражениями

$$R \approx 0,5N^{-1/3}, \quad R \approx 0,5N^{-1/2}, \quad R \approx 0,5N^{-1}. \quad (6.2.1)$$

Рассмотрим сначала рост зародыша в чистом однокомпонентном расплаве. В случае сферической, цилиндрической или плоской формы зародыша его рост описывается уравнением теплопроводности для расплава в соответствующей системе координат:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{i}{r} \frac{\partial T}{\partial r} = a^{-2} \frac{\partial T}{\partial t}, \quad r_1(t) < r < R, \quad t > 0. \quad (6.2.2)$$

Здесь $a^2 = \lambda/L$ — коэффициент температуропроводности расплава. Значение коэффициента $i = 2$ соответствует сфере, $i = 1$ — цилиндру, $i = 0$ — пластине.

Изменением температуры внутри зародыша можно пренебречь. Тогда условие тепловыделения на поверхности зародыша запишется в виде

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial r} = -\gamma_0 r_1(t), \quad r = r_1(t). \quad (6.2.3)$$

На границе элементарной ячейки можно задать условие симметрии

$$\partial T / \partial r = 0, \quad r = R. \quad (6.2.4)$$

Начальная температура должна быть равна средней температуре \tilde{T} в элементарном объеме:

$$T(r, 0) = \tilde{T}, \quad r_1(0) = r_0, \quad (6.2.5)$$

где r_0 — характерный размер критического зародыша. Полная постановка задачи должна включать условие (6.1.4) на поверхности зародыша. Решив задачу (6.2.2) — (6.2.5), температуру поверхности зародыша $T(r_1(t), t)$ можно выразить через среднюю температуру \tilde{T} в элементарном объеме расплава и, следовательно, $\Delta T(r_1(t), t)$ — через $\Delta \tilde{T}$. Подставив значение $\Delta T(r_1(t), t)$ в выражение (6.1.4), найдем необходимую поправку для скорости роста отдельного зародыша.

Решение задачи (6.2.2) — (6.2.5) нельзя выразить в замкнутой аналитической форме. Имеется ряд работ по приближенным решениям указанной задачи [45, 48, 50, 80, 81], однако приведенные в них решения либо громоздки и неудобны для использования, либо получены при значительных упрощениях. Ниже найдем решение в удобной замкнутой форме, решив задачу методом смены стационарных состояний. Введем координату, связанную с поверхностью растущего кристалла:

$$s = \frac{r - r_0}{r_1(t) - r_0}. \quad (6.2.6)$$

Будем считать, что температурное влияние распространяется от фронта кристаллизации на расстояние R_1 , пропорцио-

нальное $r_1(t)$:

$$R_1 = b(r_1(t) - r_0) + r_0, \quad (6.2.7)$$

причем температура при $r \geq R_1$ остается равной начальной температуре \tilde{T} . По имеющимся теоретическим оценкам, $b \approx 5-6$, что хорошо согласуется с экспериментальными данными [87]. Будем считать, что в координатах s, t температурное поле описывается квазистационарным уравнением в области $r_1(t) \leq r \leq R_1$. Тогда, переходя в уравнении (6.2.2) к координатам (6.2.6), получаем

$$\frac{d^2 T}{ds^2} + \left(\frac{(r_1 - r_0) i}{(r_1 - r_0) s + r_0} + a^{-2} (r_1 - r_0) \dot{r}_1 s \right) \times \\ \times \frac{dT}{ds} = 0, \quad 1 < s < b. \quad (6.2.8)$$

Согласно сделанным предположениям на границах области выполняются условия

$$\lambda \frac{dT}{ds} = -\gamma \rho (r_1 - r_0) \dot{r}_1, \quad s = 1; \quad T = \tilde{T}, \quad s = b. \quad (6.2.9)$$

Если в уравнении (6.2.8) и условиях (6.2.9) пренебрегаем малым размером r_0 , то получаем простую задачу

$$\frac{d^2 T}{ds^2} + \left(\frac{i}{s} + a^{-2} r_1 \dot{r}_1 s \right) \frac{dT}{ds} = 0, \quad 1 < s < b; \quad (6.2.8')$$

$$\frac{dT}{ds} = -\gamma \rho \lambda^{-1} r_1 \dot{r}_1, \quad s = 1; \quad T = \tilde{T}, \quad s = b. \quad (6.2.9')$$

Интегрируя уравнение (6.2.8') по s от 1 до s и используя первое условие (6.2.9'), находим

$$\frac{dT}{ds} = \gamma \rho \lambda^{-1} r_1 \dot{r}_1 \exp \left(-a^{-2} r_1 \dot{r}_1 \frac{s^2 - 1}{2} \right) \frac{1}{s^i}. \quad (6.2.10)$$

Далее, интегрируя по s от s до b и используя второе условие (6.2.9'), получаем решение в виде

$$T = \tilde{T} + \gamma \rho \lambda^{-1} r_1 \dot{r}_1 \int_s^b \exp \left(-a^{-2} r_1 \dot{r}_1 \frac{s^2 - 1}{2} \right) \frac{ds}{s^i}. \quad (6.2.11)$$

Теперь $\Delta T = T_l - T(r_1(t))$ можно выразить через $\Delta \tilde{T} = T_l - \tilde{T}$:

$$\Delta T = \Delta \tilde{T} - \gamma \rho \lambda^{-1} r_1 \dot{r}_1 \int_1^b \exp \left(-a^{-2} r_1 \dot{r}_1 \frac{s^2 - 1}{2} \right) \frac{ds}{s^i}. \quad (6.2.12)$$

Применяя теорему о среднем, находим

$$\Delta T = \Delta \tilde{T} - \gamma \rho \lambda^{-1} r_1 \dot{r}_1 \int_1^{s_1} \frac{ds}{s^2}, \quad (6.2.13)$$

или, полагая приближенно $s_1 = 0,5 b$,

$$\Delta T \approx \Delta \tilde{T} - \gamma \rho \lambda^{-1} b_1 r_1 \dot{r}_1, \quad b_1 = \int_1^{0,5b} s^{-2} ds. \quad (6.2.13')$$

Выразим приближенно радиус зародыша r_1 через число атомов в одном зародыше:

$$r_1 = \left(\frac{3}{4\pi} v_0 n \right)^{1/3}, \quad \dot{r}_1 = \frac{1}{3} \left(\frac{3}{4\pi} v_0 \right)^{1/3} n^{-2/3} \dot{n}. \quad (6.2.14)$$

Тогда

$$\Delta T \approx \Delta \tilde{T} - \gamma \rho \lambda^{-1} b_1 \frac{1}{3} \left(\frac{3}{4\pi} v_0 \right)^{2/3} n^{-1/3} \dot{n}, \quad (6.2.15)$$

Подставив найденное значение ΔT в (6.1.4), получим значение для скорости роста \dot{n} , выраженное через $\Delta \tilde{T}$:

$$\dot{n} = \frac{(a_1 \Delta \tilde{T} - a_2 n^{-1/3}) n^{2/3}}{1 + a_3 n^{1/3}}, \quad (6.2.16)$$

где

$$a_1 = \frac{P_0 q}{kT^2}; \quad a_2 = \frac{2P_0 (36\pi v_0^2)^{1/3}}{3kT} v; \quad a_3 = \frac{\gamma \rho}{\lambda} \frac{1}{3} \left(\frac{3v_0}{4\pi} \right)^{2/3} b_1. \quad (6.2.17)$$

Оценим вклад поправки $(1 + a_3 n^{1/3})^{-1}$, приняв характерные значения параметров:

$$\begin{aligned} (1 + a_3 n^{1/3})^{-1} &= \left(1 + a_3 \left(\frac{4\pi}{v_0} \right)^{1/3} r_1 \right)^{-1} \approx \\ &\approx (1 + 0,5 \cdot 10^4 r_1)^{-1}. \end{aligned} \quad (6.2.18)$$

Полученная оценка показывает, что для зародыша радиусом $r_1 > 5 \cdot 10^{-6}$ м найденная поправка качественно меняет скорость роста, которая существенно понижается и становится пропорциональной $n^{1/3}$.

З а м е ч а н и е 6.2.1. Выражение (6.2.13') справедливо для переохлаждения как при сферической, так и цилиндри-

ческой и плоской формах кристалла. Вычисляя соответствующие значения b_1 , получаем

$$b_1 = \begin{cases} 1 - (0,5b)^{-1}, & i = 2; \\ \ln 0,5b, & i = 1; \\ 0,5b - 1, & i = 0. \end{cases} \quad (6.2.19)$$

Если $b \approx 5-6$, то во всех случаях значения b_1 незначительно отличаются друг от друга ($b_1 = 0,6$, $b_1 = 0,9$ и $b_1 = 1,5$). Можно считать, что поправка скорости роста (6.2.13') будет одной и той же для кристалла любой формы.

З а м е ч а н и е 6.2.2. Если пренебречь влиянием сил поверхностного натяжения на кинетику роста зародыша, то закон нормального роста последнего можно записать в виде, не зависящем от его формы:

$$\dot{r}_1 = P\Delta T, \quad P = \frac{P_0 q}{\kappa T^2} \frac{1}{3} \left(\frac{4\pi}{3v_0} \right)^{1/3}. \quad (6.2.20)$$

Используя (6.2.13'), получаем поправку скорости роста кристалла любой формы:

$$\dot{r}_1 = \frac{P\Delta\tilde{T}}{1 + P\gamma\rho\lambda^{-1}b_1r_1}. \quad (6.2.21)$$

Согласно оценке (6.2.18) в знаменателе выражения (6.2.21) второе слагаемое намного больше единицы уже при $r_1 > > 5 \cdot 10^{-6}$ м. Для скорости роста зародышей таких размеров справедливо выражение

$$\frac{d(r_1^2)}{dt} = \frac{2\lambda}{\gamma\rho b_1} \Delta\tilde{T}. \quad (6.2.21')$$

Полученные оценки скорости роста позволяют определить объем $W(t, \tau)$ отдельного зародыша и тем самым найти выражение для суммарного объема при массовой кристаллизации [см. формулу (6.0.6)]. Проинтегрировав уравнение (6.2.21') от τ до t , найдем $r_1(t)$:

$$r_1(t) = \left(r_1^2(\tau) + \beta \int_{\tau}^t \Delta\tilde{T} ds \right)^{1/2}, \quad \beta = \frac{2\lambda}{\gamma\rho b_1}. \quad (6.2.22)$$

Теперь объем зародыша в зависимости от его формы можно выразить следующим образом:

$$W(t, \tau) = \frac{4\pi}{3} \left(r_1^2(\tau) + \beta \int_{\tau}^t \Delta\tilde{T} ds \right)^{3/2}, \quad i = 2; \quad (6.2.23)$$

$$W(t, \tau) = \pi l \left(r_1^2(\tau) + \beta \int_{\tau}^t \Delta \tilde{T} ds \right), \quad i = 1; \quad (6.2.24)$$

$$W(t, \tau) = S \left(r_1^2(\tau) + \beta \int_{\tau}^t \Delta \tilde{T} ds \right)^{1/2}, \quad i = 0. \quad (6.2.25)$$

Здесь l — характерная длина кристалла цилиндрической формы; S — характерная площадь пластины в пределах элементарного объема.

Теперь получим аналогичную оценку для скорости в случае роста кристалла из бинарного сплава. Для этого необходимо решить систему термодиффузионных уравнений

$$\frac{\partial^2 r_1}{\partial r^2} + \frac{i}{r} \frac{\partial T}{\partial r} = \alpha^{-2} \frac{\partial T}{\partial t}, \quad r_1(t) < r < \infty, \quad t > 0; \quad (6.2.26)$$

$$\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{i}{r} \frac{\partial C}{\partial r} = D^{-1} \frac{\partial T}{\partial t}, \quad r_1(t) < r < \infty, \quad t > 0. \quad (6.2.27)$$

при условиях на поверхности кристалла:

$$\frac{\partial T}{\partial r} = -\gamma \rho \lambda^{-1} \dot{r}_1, \quad r = r_1(t); \quad (6.2.28)$$

$$\frac{\partial C}{\partial r} = -(1-m) D^{-1} C \dot{r}_1, \quad r = r_1(t); \quad (6.2.29)$$

$$\dot{r}_1 = P \Delta T, \quad \Delta T = T_l - T = T_A - f_e(C) - T, \quad (6.2.30)$$

$$r = r_1(t).$$

В качестве начальных условий следует задать среднюю температуру и концентрацию в элементарном объеме:

$$T(r, 0) = \tilde{T}, \quad C(r, 0) = \tilde{C}, \quad r_1(0) = r_0. \quad (6.2.31)$$

Будем считать, что возмущение температурного и концентрационного полей распространяется на определенные расстояния R_1 и R_2 от поверхности кристаллов, пропорциональные $r_1 - r_0$:

$$R_1 = b_1(r_1 - r_0) + r_0, \quad R_2 = b_2(r_1 - r_0) + r_0. \quad (6.2.32)$$

Значение b_1 определено выше, значение b_2 можно выразить через b_1 по условиям подобия:

$$\delta = (b_2 - 1) = D \alpha^{-2} (b_1 - 1). \quad (6.2.33)$$

В пределах указанных областей в системе координат s, t , связанной с поверхностью роста [см. формулу (6.2.6)], рассмотрим задачу в квазистационарном случае:

$$\frac{d^2T}{ds^2} + \left(\frac{(r_1 - r_0)t}{(r_1 - r_0)s + r_0} + a^{-2}(r_1 - r_0)r_1s \right) \frac{dT}{ds} = 0, \quad 1 < s < b_1; \quad (6.2.34)$$

$$\frac{d^2C}{ds^2} + \left(\frac{(r_1 - r_0)t}{(r_1 - r_0)s + r_0} + D^{-1}(r_1 - r_0)r_1s \right) \frac{dC}{ds} = 0, \quad 1 < s < b_2; \quad (6.2.35)$$

$$\frac{dT}{ds} = -\gamma\rho\lambda^{-1}(r_1 - r_0)r_1, \quad s = 1; \quad (6.2.36)$$

$$\frac{dC}{ds} = -(1 - m)D^{-1}C(r_1 - r_0)r_1, \quad s = 1; \quad (6.2.37)$$

$$T = \tilde{T}, \quad s = b_1, \quad C = \tilde{C}, \quad s = b_2. \quad (6.2.38)$$

Пренебрегая малым размером r_0 критического зародыша, можно выписать решение (6.2.34) — (6.2.38) аналогично тому, как это было сделано выше при решении тепловой задачи. Опуская подробные выкладки, приведем значения температуры и концентрации на поверхности кристалла ($r = r_1$):

$$T = \tilde{T} + \gamma\rho\lambda^{-1}r_1r_1 \int_1^{b_1} \exp\left(-a^{-2}r_1r_1 \frac{s^2 - 1}{2}\right) \frac{ds}{s^t}; \quad (6.2.39)$$

$$C = \tilde{C} \left(1 - D^{-1}(1 - m)r_1r_1 \int_1^{b_2} \exp\left(-D^{-1}r_1r_1 \frac{s^2 - 1}{2}\right) \frac{ds}{s^i} \right)^{-1}. \quad (6.2.40)$$

Оценку T получим (как и выше), взяв приближенно интеграл согласно теореме о среднем:

$$T \approx \tilde{T} + \gamma\rho\lambda^{-1}b_1^t r_1 r_1, \quad b_1^t = \int_1^{0.5b_1} s^{-t} ds. \quad (6.2.41)$$

Интервал интегрирования $\delta = b_2 - 1$ в (6.2.40) мал. Поэтому интеграл в этом выражении можно оценить следую-

щим образом:

$$\begin{aligned}
 J &= \int_1^{1+\delta} \exp\left(-D^{-1}r_1\dot{r}_1 \frac{s^2-1}{2}\right) \frac{ds}{s^2} = \int_0^\delta \exp\left(-D^{-1}r_1\dot{r}_1 \left(1 + \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + \frac{u}{2}\right)u\right) \frac{du}{(1+u)^2} \approx \int_0^\delta \exp(-D^{-1}r_1\dot{r}_1 u) du = \\
 &= \frac{D}{r_1\dot{r}_1} (1 - \exp(-D^{-1}r_1\dot{r}_1\delta)) \approx D (r_1\dot{r}_1)^{-1} \times \\
 &\quad \times [1 - \exp(-a^{-2}r_1\dot{r}_1(b_1 - 1))]. \quad (6.2.42)
 \end{aligned}$$

Учитывая полученную оценку, находим приближенное значение концентрации C на поверхности кристалла:

$$\begin{aligned}
 C &= \tilde{C}\Delta^{-1}, \quad \Delta = 1 - (1 - m)(1 - \exp(-a^{-2} \times \\
 &\quad \times (b_1 - 1)r_1\dot{r}_1)). \quad (6.2.43)
 \end{aligned}$$

Подставляя найденные значения T и C в выражение (6.2.30) для переохлаждения, получаем искомое выражение переохлаждения ΔT на поверхности кристалла через среднее значение переохлаждения $\Delta\tilde{T}$ в элементарном объеме расплава:

$$\Delta T = \Delta\tilde{T} - [f_l(\Delta^{-1}\tilde{C}) - f_l(\tilde{C})] - \gamma_0\lambda^{-1}b_1r_1\dot{r}_1. \quad (6.2.44)$$

Это дает необходимую поправку для скорости роста \dot{r}_1 :

$$\dot{r}_1(t) = \frac{P[\Delta\tilde{T} - f_l(\Delta^{-1}\tilde{C}) + f_l(\tilde{C})]}{1 + P\gamma_0\lambda^{-1}b_1r_1}. \quad (6.2.45)$$

Сравнивая выражения (6.2.21) и (6.2.45), можно отметить что они различаются только тем, что в случае термодиффузионной задачи вместо $\Delta\tilde{T}$ имеем величину

$$\Delta\tilde{T}_{\text{эф}} = \Delta\tilde{T} - (f_l(\Delta^{-1}\tilde{C}) - f_l(\tilde{C})), \quad (6.2.46)$$

которую можно назвать эффективным переохлаждением. Учет влияния диффузии вблизи поверхности кристалла сводится к уменьшению эффективного переохлаждения

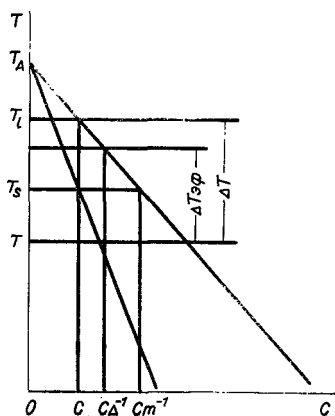


Рис. 17. Схема к определению $\Delta T_{эфф}$

на величину $f_l(\Delta^{-1}\tilde{C}) - f_l(\tilde{C})$ (рис. 17). В выражение для $\Delta\tilde{T}_{эфф}$ входит \tilde{r}_1 , поэтому точно оценить влияние диффузии трудно и при расчете по формуле (6.2.45) необходимы итерации. Однако можно проанализировать пределы влияния указанной поправки. При малых значениях r_1 или \tilde{r}_1 приближенно можно считать, что $\exp(-a^{-2}(b_1 - 1)r_1\tilde{r}_1) = 1$ и, следовательно, $\Delta = 1$. В этом случае влияние диффузии вблизи фронта кристаллизации пренебрежимо мало. Если же значения r_1 и \tilde{r}_1 велики, то, пренебрегая слагаемым, содержащим \exp в выражении (6.2.43), получаем $\Delta = m$. Тогда согласно рис. 17

$$\begin{aligned} \Delta\tilde{T}_{эфф} &= \Delta\tilde{T} - f_l(m^{-1}\tilde{C}) + f_l(\tilde{C}) = T_A - \tilde{T} - \\ &- f_s(C) = T_s - \tilde{T}. \end{aligned} \quad (6.2.47)$$

Таким образом, известно максимально возможное влияние диффузии у поверхности раздела фаз, когда эффективное переохлаждение уменьшается на

$$T_l(\tilde{C}) - T_s(\tilde{C}).$$

Объем отдельного зародыша определяется аналогично предыдущему формулами (6.2.23) — (6.2.25), в которых $\Delta\tilde{T}$ следует заменить на величину $\Delta\tilde{T}_{эфф}$, выраженную формулой (6.2.46).

Итак, получена полная постановка задачи. Задача, описывающая кристаллизацию бинарного расплава, состоит из системы уравнений (6.0.1), (6.0.2), соотношения (6.0.6), определяющего η как функцию переохлаждения. Значение скорости возникновения объемных кристаллов J определяется формулами (6.1.22'), (6.1.23), $W(t, \tau)$ — выражениями (6.2.23) — (6.2.25), причем в случае учета диффузии вместо $\Delta\tilde{T}$ следует брать величину $\Delta\tilde{T}_{эф}$, определенную формулой (6.2.46). Выпишем здесь полную постановку задачи для случая роста кристаллов цилиндрической формы:

$$L \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial X_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial X_i} \right) + L_2 (1 - \eta) u_{x_i} \frac{\partial T}{\partial X_i} + \gamma \rho \frac{\partial \eta}{\partial t}; \quad (6.2.48)$$

$$(1 - (1 - m)\eta + Cm'(C)\eta) \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial X_i} \left(D \frac{\partial C}{\partial X_i} \right) + (1 - \eta) u_{x_i} \frac{\partial C}{\partial X_i} + (1 - m) C \frac{\partial \eta}{\partial t}, \quad (6.2.49)$$

причем

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = \pi \beta [\Delta T - f_l(Cm^{-1}) + f_l(C)] \int_0^t J(\tau) (1 - \eta) d\tau; \quad (6.2.50)$$

$$\eta = \pi l \int_0^t J(\tau) (1 - \eta) \left[r_l^2(\tau) + \beta \int_{\tau}^t [\Delta T - f_l(Cm^{-1}) + f_l(C)] ds \right] d\tau; \quad (6.2.51)$$

$$J = A \exp[-B(\Delta T - f_l(Cm^{-1}) + f_l(C))^{-2}], \quad (6.2.52)$$

константы A , B , β определены выражениями (6.1.23), (6.2.22), (6.2.13');

$$\left. \begin{aligned} L &= L_1 \eta + L_2 (1 - \eta), \quad \lambda = \lambda_1 \eta + \lambda_2 (1 - \eta); \\ D &= D_1 (m + Cm'(C)) \eta + D_2 (1 - \eta). \end{aligned} \right\} \quad (6.2.53)$$

Система (6.2.48), (6.2.49) является сильно параболической системой квазилинейных уравнений. Для такой системы можно получить априорные оценки и построить устойчивые разностные схемы аналогично тому, как это было сделано в главе 5.

6.3. ОПРЕДЕЛЕНИЕ КИНЕТИЧЕСКИХ КОЭФФИЦИЕНТОВ ПО ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМ ДАННЫМ

Полученное теоретически выражение (6.1.22) для скорости объемного зарождения не дает удовлетворительного совпадения с экспериментальными данными [78]. Принципиальные трудности возникают при теоретическом определении константы P_0 и коэффициента поверхностного натяжения ν . Надежное определение этих констант можно получить лишь по экспериментальным данным. Проведение экспериментов, позволяющих непосредственно определить скорость зарождения в зависимости от переохлаждения, весьма затруднительно. Известен лишь один такой эксперимент по определению скорости гетерогенного зарождения кристаллов арсенида галлия на подложке [28]. Однако зависимость типа (6.1.22') можно определить из более грубых экспериментов по косвенным опытным данным. Такие эксперименты имеются [15, 67, 79] и их можно провести для любого материала. Покажем, как можно определить зависимость типа (6.1.22'), например, по экспериментальным данным Д. Е. Овсиенко и Г. А. Алфинцева [67]. В работе [67] приведены данные о максимальном переохлаждении расплава никеля и структура закристаллизовавшихся образцов, полученная при различных переохлаждениях.

При переохлаждениях выше 120°C в структуре наблюдаются разориентированные глобулярные зерна, что может указывать на механизм спонтанного объемного зарождения. В этом случае кинетика зарождения описывается зависимостью вида (6.1.22'). Тогда число зародышей, возникших в расплаве с заданным переохлаждением ΔT , можно определить следующим образом.

Будем считать, что первичная структура полностью сформировалась к моменту, когда доля твердой фазы η достигает 5—10% ($\eta_0 \approx 0,1$). До этого момента температура расплава практически не изменится. При заданном переохлаждении ΔT функции N и η согласно выражениям (6.1.24), (6.0.6), (6.2.23) определяются следующим образом:

$$N = J(\Delta T)t; \quad (6.3.1)$$

$$\eta = \frac{4\pi}{3} \beta^{3/2} \Delta T J(\Delta T) t^2. \quad (6.3.2)$$

Исключая время t из полученных выражений, найдем число N , характеризующее структуру закристаллизовавшегося образца при переохлаждении ΔT :

$$N = \left(\frac{3\eta_0 A}{2\pi\dot{\rho}^{3/2}\Delta T} \right)^{1/2} \exp\left(-\frac{B}{2\Delta T^2}\right). \quad (6.3.3)$$

По данным эксперимента [67] наблюдается следующая зависимость среднего диаметра D зерен и числа N от ΔT :

ΔT , °C	D , см	N , см ⁻³
140	0,037	$0,2 \cdot 10^5$
170	0,013	$0,5 \cdot 10^5$
210	0,005	$8 \cdot 10^5$

Учитывая значение (6.2.22) для β , по указанным данным можно определить константы A и B :

$$A = 2 \cdot 10^{20}; \quad B = 0,8 \cdot 10^6.$$

Механизм образования дендритных ветвей не описывается зависимостью (6.1.22). В случае дендритного роста будем считать, что существует критическое переохлаждение ΔT_k , при котором расплав активизируется. В таком расплаве скорость образования кристаллитов (ветвей дендритов, глобулярных зерен) есть функция текущего переохлаждения ΔT в данном объеме расплава:

$$J = \begin{cases} 0, & \Delta T < \Delta T_k; \\ f(\Delta T), & \Delta T \geq \Delta T_k. \end{cases} \quad (6.3.4)$$

Вид зависимости (6.3.4) можно определить, зная ΔT и параметры структуры слитка из эксперимента. Действительно, допустим, что существенная часть кристаллизации происходит при постоянном переохлаждении ΔT . Тогда аналогично предыдущему

$$N = f(\Delta T)(t - t_k). \quad (6.3.5)$$

Для дендритов цилиндрической формы η определяется согласно (6.0.6), (6.2.24):

$$\eta = \beta_2 \int_0^t J(\Delta T(\tau)) \int_{\tau}^t \Delta T ds, \quad \beta_2 = 2\pi\lambda_2 l / \gamma\rho, \quad (6.3.6)$$

или при постоянном ΔT :

$$\eta = 0,5\beta_2 f(\Delta T) \Delta T (t - t_k)^2. \quad (6.3.7)$$

Из условия (6.3.7) находим время $t - t_k$ начальной стадии кристаллизации, чему соответствует $\eta \approx 0,1$. Подставляя найденное значение времени в формулу (6.3.5), получаем

$$N = (0,5\beta_2 \Delta T)^{-0,5} (f(\Delta T))^{0,5}. \quad (6.3.8)$$

Покажем, как можно определить вид зависимости $f(\Delta T)$ по экспериментальным данным. В работе [15] приводятся фотографии микроструктуры слитков кремнистого железа, полученные после различных переохлаждений. По этим фотографиям можно определить средние расстояния между осями дендритов. Считая, что структура образца состоит из дендритов цилиндрической формы с плотной упаковкой и что их оси направлены перпендикулярно к плоскости шлифа, можно определить число дендритов в 1 см^3 . По данным работы [15], $N \sim \sqrt{\Delta T}$. Следовательно, можно принять

$$f(\Delta T) = A \Delta T^2.$$

Тогда

$$N = (0,5\beta_2)^{-0,5} (A \Delta T)^{0,5}. \quad (6.3.9)$$

Сопоставляя расчеты по формуле (6.3.9) с данными эксперимента, определяем константу A . Если принять в расчетах $\lambda_2 = 23 \text{ Вт/(м} \cdot \text{°C)}$, $\gamma = 2,7 \cdot 10^5 \text{ Дж/кг}$, $\rho = 7 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$, $l = 10^{-3} \text{ м}$, то $A \approx 2 \cdot 10^5$. При этом получится следующая корреляция экспериментальных данных с расчетными:

$\Delta T, \text{ °C}$	$N_{\text{эксп}}$	$N_{\text{расч}}$
20	$0,3 \cdot 10^5$	$0,7 \cdot 10^5$
35	$0,7 \cdot 10^5$	$0,9 \cdot 10^5$
100	$1,5 \cdot 10^5$	$1,5 \cdot 10^5$
170	$2,5 \cdot 10^5$	$2,1 \cdot 10^5$

Учитывая пределы точности экспериментальных данных, полученную корреляцию можно считать удовлетворительной. Определенную таким образом зависимость $J(\Delta T)$ можно использовать для расчетов процессов кристаллизации.

Глава 7

ПРИМЕРЫ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ

В настоящей главе приведены примеры численного расчета процессов кристаллизации в различных режимах и условиях. На конкретных модельных задачах проверены сходимость и устойчивость разностных методов. При возможности численные расчеты сравниваются с точными аналитическими решениями. Анализируется влияние различных физических параметров на характер решения.

7.1. ОДНОМЕРНАЯ МОДЕЛЬ ПРОЦЕССА НАПРАВЛЕННОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ СЛИТКА

Проведем численную проверку метода расчета обобщенной задачи, предложенного в главе 5, на одномерной модели процесса направленной кристаллизации однокомпонентного расплава [8]. В этом случае имеется аналитическое решение, описывающее двухфазную зону в квазистационарном режиме (см. параграф 3.2), и численные расчеты можно сравнить с аналитическими.

Модельную задачу рассмотрим в той же постановке, что и в параграфе 2.1. Уравнение, определяющее функцию $u = T - T_c$, запишем в виде

$$\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} - \alpha(u - u_1(z + v_0 t)) = a^{-2} \frac{\partial u}{\partial t} - \gamma_0 \lambda^{-1} \frac{\partial \eta}{\partial t}, \quad -\infty < z < \infty, \quad t > 0. \quad (7.1.1)$$

Граничные и начальные условия:

$$\lim_{z \rightarrow \pm \infty} \frac{\partial (u - u_1)}{\partial z} = 0; \quad u(z, 0) = \varphi(z); \quad (7.1.2)$$

$$u_1(x) = -kx. \quad (7.1.3)$$

Согласно методике, изложенной в главе 5, полагаем

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = \beta \Delta u \theta(\Delta u) \theta(1 - \eta), \quad \Delta u = -u. \quad (7.1.4)$$

Обобщенное решение находится как предел решений задачи (7.1.1) — (7.1.4) при $\beta \rightarrow \infty$. Напомним, что $\theta(x)$ — единичная функция Хевисайда. Нашей целью является нахождение решения вплоть до выхода на установившийся режим. Поэтому задачу следует решать в неподвижной системе координат:

$$x = z + v_0 t, \quad t. \quad (7.1.5)$$

Переходя к новой системе координат, задачу (7.1.1) — (7.1.4) запишем в виде

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} - \alpha(u - u_1(x)) = \\ & = a^{-2} \frac{\partial u}{\partial t} - \gamma \rho \lambda^{-1} \beta \Delta u \theta(\Delta u) \theta(1 - \eta), \\ & \quad -\infty < x < \infty, \quad t > 0; \end{aligned} \quad (7.1.6)$$

$$\lim_{x \rightarrow \pm \infty} \frac{\partial(u - u_1(x))}{\partial x} = 0; \quad u(x, 0) = \varphi(x); \quad (7.1.7)$$

$$\mu = 0,5a^{-2}v_0, \quad (7.1.8)$$

причем η определяется интегралом:

$$\eta(x, t) = \beta \int_{t_0}^t \bar{F}(z, \tau) d\tau, \quad \bar{F} = \beta \Delta \bar{u} \theta(\Delta \bar{u}), \quad (7.1.9)$$

\bar{F} , \bar{u} — функции в системе координат z , t .

Выражение (7.1.9) преобразуем к виду, удобному для численного решения:

$$\begin{aligned} \eta(x, t) &= \beta \int_{t_0}^t \bar{F}(x - v_0 t, \tau) d\tau = \beta \int_{t_0}^t \bar{F}(x - v_0 \tau - v_0 \times \\ & \times (t - \tau), \tau) d\tau = \beta \int_{t_0}^t F(x - v_0(t - \tau), \tau) d\tau = \\ & = v_0^{-1} \beta \int_{x_0}^x F\left(s, t - \frac{x-s}{v_0}\right) ds. \end{aligned} \quad (7.1.10)$$

Таким образом, в новой системе координат η вычисляется по формуле

$$\eta(x, t) = v_0^{-1} \beta \int_{x_0}^x \Delta u \left(s, t - \frac{x-s}{v_0} \right) \theta(\Delta u) ds. \quad (7.1.11)$$

Из (7.1.11) следует, что если существует $\lim_{t \rightarrow \infty} u(x, t) = u(x)$, то и $\eta(x, t)$ стремится к определенному пределу, а именно:

$$\eta(x) = v_0^{-1} \beta \int_{x_0}^x \Delta u(s) \theta(\Delta u) \theta(\eta) ds. \quad (7.1.12)$$

Для решения задачи аппроксимируем уравнение (7.1.6) неявной разностной схемой:

$$\begin{aligned} (u_x^{n+1})_{\bar{x}} - 2\mu u_x^{n+1} - \alpha(u_i^{n+1} - u_1(x_i)) = \\ = a^{-2} u_t - \gamma \rho \lambda^{-1} \Phi_i^n, \quad i = 1, 2, 3, \dots, N-1, \\ n = 0, 1, 2, \dots; \end{aligned} \quad (7.1.13)$$

$$u_1^{n+1} - u_0^{n+1} = -hk; \quad u_N^{n+1} - u_{N-1}^{n+1} = -hk; \quad u_i^0 = \varphi_i, \quad (7.1.14)$$

Φ_i^n — разностная аппроксимация функции источника в правой части уравнения (7.1.6). Интеграл (7.1.11) вычисляется по формуле прямоугольников с шагом интегрирования, равным шагу h разностной схемы:

$$\begin{aligned} \eta_i^n = v_0^{-1} \beta \sum_{m=i_0}^i \Delta u \left(s_m, t^n - \frac{x_i - s_m}{v_0} \right) \times \\ \times \theta \left(\Delta u \left(s_m, t^n - \frac{x_i - s_m}{v_0} \right) \right) h. \end{aligned} \quad (7.1.15)$$

Трудность возникает при определении функции Φ_i^n . Если $\eta_i^n \leq 1$, то Φ_i^n является обычной аппроксимацией соответствующего выражения в правой части (7.1.6):

$$\Phi_i^n = \beta \Delta u_i^n \theta(\Delta u_i^n), \quad \eta_i^n \leq 1. \quad (7.1.16)$$

Если же $\eta_i^n > 1$, то для выполнения теплового баланса необходимо положить $\eta_i^n = 1$, или подробнее:

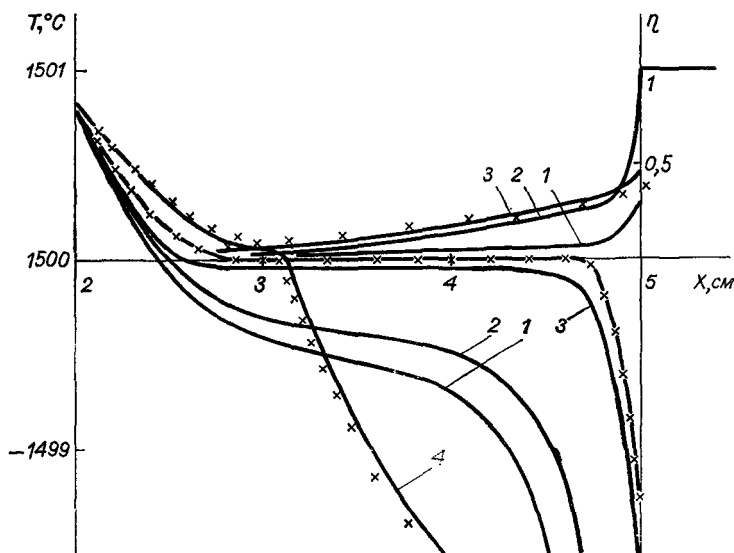


Рис. 18. Осевое распределение температуры и функции η :

— \times — \times — \times — — аналитическое решение ($\beta = \infty$); — — численное решение; 1 — $\beta = 0,001$, $v = 2v_K$; 2 — $\beta = 0,005$, $v = 2v_K$; 3 — $\beta = 0,01$, $v = 2v_K$; 4 — $\beta = 0,01$, $v = 0,9v_K$.

$$\begin{aligned} \eta_i^n &= v_0^{-1} \beta \sum_{m=i_c}^i \Delta u \left(s_m, t^n - \frac{x_i - s_m}{v_0} \right) \theta(\Delta u) h = \\ &= v_0^{-1} \beta \sum_{m=i_0}^{i-1} \Delta u \left(s_m, t^n - \frac{x_i - s_m}{v_0} \right) \theta(\Delta u) h + \\ &\quad + v_0^{-1} \beta \Delta u_i^n \theta(\Delta u_i^n) h = 1. \end{aligned} \quad (7.1.17)$$

Теперь видим, что для выполнения требования $\eta_i^n = 1$ нужно «подправить» источник Φ_i^n следующим образом:

$$\begin{aligned} \Phi_i^n &= v_0 \left[\left(1 - v_0^{-1} \beta \sum_{m=i_0}^{i-1} \Delta u \left(s_m, t^n - \frac{x_i - s_m}{v_0} \right) \times \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \times \theta(\Delta u) h \right) \right] h^{-1}, \quad \eta_{i-1}^n < 1, \quad \eta_i^n > 1. \end{aligned} \quad (7.1.18)$$

Если же нас интересует только стационарный случай, то выражение (7.1.18) можно упростить:

$$\Phi_i^n = v_0 (1 - \eta_{i-1}^n) h^{-1}, \quad \eta_{i-1}^n < 1, \quad \eta_i^n > 1. \quad (7.1.18')$$

Указанный алгоритм реализован для расчета двухфазной зоны в случае $v_0 = 2v_k$ ($v_k = 2\lambda (\gamma\rho)^{-1}$). При расчетах значение β варьировалось в пределах от 0,001 до 0,01. На рис. 18 приведены функции $u(x)$ и $\eta(x)$ в установившемся режиме, рассчитанные при различных значениях β , и точное аналитическое решение задачи теории двухфазной зоны ($\beta = \infty$) [см. (3.2.11) — (3.2.15)]. Как видим, при увеличении β численное решение приближается к точному и при $\beta = 0,01$ практически совпадает с ним. Следует отметить, что даже значение скачка функции η определяется с высокой точностью — погрешность составляет 7% от номинала при $\beta = 0,01$.

По указанной методике были также проведены расчеты при $v_0 = 0,9 v_k$, когда двухфазная зона отсутствует. В этом случае численное решение тоже хорошо согласуется с аналитическим. Таким образом, предложенный метод применим и для решения задачи Стефана с резкой границей фазового перехода. Расчеты проведены при следующих значениях параметров: $\lambda = 30$ Вт/(м · °С); $L = 2,1 \cdot 10^6$ Дж/м³; $\gamma = 6 \cdot 10^5$ Дж/кг; $\rho = 5 \cdot 10^3$ кг/м³; $k = 10^3$ °С/м; $\alpha_0 = 4 \cdot 10^2$ Вт/(м² · °С); $\alpha = \alpha_0 \lambda^{-1}$; $v_k = 0,18 \cdot 10^{-4}$ м/с; $R = 0,6 \cdot 10^{-2}$ м.

7.2. РАСЧЕТ НАЧАЛЬНОЙ СТАДИИ ПРОЦЕССА КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ПРИ ЗАДАННОЙ СКОРОСТИ ОХЛАЖДЕНИЯ [8]

В параграфе 6.3 дан приближенный качественный анализ зарождения и роста зародышей кристаллов, а также структуры твердой фазы в случае заданного переохлаждения расплава. В общем случае задача может быть решена только численными методами. Ниже приведен модельный пример, иллюстрирующий возможность численного решения задачи в обобщенной постановке с учетом зарождения и динамики роста зародышей в объеме переохлажденного расплава (см. главу 6). Константы, характеризующие скорость

зарождения, взяты согласно экспериментальным данным работы [28] для арсенида галлия.

Рассмотрим схему начальной стадии процесса направленной кристаллизации слитка. В начальный момент в кварцевой лодочке находится перегретый расплав. На муфеле печи сопротивления устанавливается заданный температурный градиент. Слиток начинает двигаться в холодную часть печи со скоростью v_0 . Расплав охлаждается и, когда переохлаждение ΔT в холодном конце лодочки достигает критического значения ΔT_{κ} , в нем возникают и растут зародыши твердой фазы. Особенностью рассматриваемого процесса является то, что ввиду малой скорости зарождения кристаллов может расти всего один или несколько зародышей. Осредненные уравнения, полученные в главе 6, описывают процесс кристаллизации и в этом случае.

Система кристалл — метастабильная фаза — расплав в одномерном случае описывается уравнением

$$\lambda \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} - \alpha_0 [T - T_1(z + v_0 t)] = \\ = L \frac{\partial T}{\partial t} - \gamma \rho \frac{\partial \eta}{\partial t}, \quad -\infty < z < 0, \quad t > 0. \quad (7.2.1)$$

Предполагая, что правый торец слитка обменивается теплом с ближайшим к торцу участком поверхности печи, запишем условие теплообмена на этом торце:

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial z} = -\alpha_0 [T - T_1(v_0 t)], \quad z = 0. \quad (7.2.2)$$

Второе граничное условие и начальные условия запишем в виде

$$\lim_{z \rightarrow -\infty} \frac{\partial}{\partial z} [T - T_1(z)] = 0; \quad (7.2.3)$$

$$T(z, 0) = T_1(z). \quad (7.2.4)$$

Температуру поверхности муфеля печи $T_1(z)$ задаем в виде линейной функции z :

$$T_1(z) = T_0 - kz. \quad (7.2.5)$$

Скорость образования зародышей определим выражением (6.1.22')

$$J = A \exp(-B/\Delta T^2). \quad (7.2.6)$$

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА ДЛЯ $\omega = 0,003^\circ \text{C}/\text{с}$

$z \cdot 10^3, \text{ м}$	1880			1900			1960		
	$\Delta T, ^\circ\text{C}$	[N]	η	$\Delta T, ^\circ\text{C}$	[N]	η	$\Delta T, ^\circ\text{C}$	[N]	η
-0,8	1,0	0	0	0,1	0	0	-1,1	0	0
-0,7	1,4	0	0	0,4	0	0	-0,8	0	0
-0,6	1,8	0	0	0,8	0	0	-0,4	0	0
-0,5	2,2	0	0	1,1	0	0	-0,1	0	0
-0,4	2,6	0	0	1,2	0	0	0,1	0	0
-0,3	3,0	0	0	1,4	0	0	0,4	0	0
-0,2	3,3	0	0	1,6	0	0	0,6	0	0
-0,1	3,6	0	0	1,7	1	0,1	0,8	1	0,3

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА ДЛЯ $\omega = 0,018^\circ \text{C}/\text{с}$

$z \cdot 10^3, \text{ м}$	550			600			760		
	$\Delta T, ^\circ\text{C}$	[N]	η	$\Delta T, ^\circ\text{C}$	[N]	η	$\Delta T, ^\circ\text{C}$	[N]	η
-0,8	4,3	0	0	1,4	0	0	1,2	0	0
-0,7	4,7	0	0	1,6	0	0	1,3	0	0
-0,6	5,2	0	0	1,8	0	0	1,5	0	0
-0,5	5,6	0	0	2,0	0	0	1,6	0	0
-0,4	6,1	0	0	2,0	0	0	1,6	0	0
-0,3	6,4	0	0	2,1	0	0	1,7	0	0
-0,2	6,7	0	0	2,2	0	0	1,7	0	0
-0,1	7,1	0	0	2,2	1	0,2	1,6	1	0,9

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА ДЛЯ $\omega = 0,037^\circ \text{C}/\text{с}$

$z \cdot 10^3, \text{ м}$	373			425,5			590,5		
	$\Delta T, ^\circ\text{C}$	[N]	η	$\Delta T, ^\circ\text{C}$	[N]	η	$\Delta T, ^\circ\text{C}$	[N]	η
-0,8	6,4	0	0	1,9	0	0	2,4	0	0
-0,7	6,9	0	0	2,0	0	0	2,3	0	0
-0,6	7,4	0	0	3,1	0	0	2,2	0	0
-0,5	7,8	0	0	3,1	0	0	2,1	0	0
-0,4	8,2	0	0	2,0	0	0	1,9	0	0
-0,3	8,6	0	0	1,9	0	0	1,7	0	0
-0,2	9,0	0	0	1,8	1	0,1	1,4	1	0,6
-0,1	9,3	0	0	1,9	1	0,2	1,5	1	0,9

Таблица 2

ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ЗНАЧЕНИЯХ t

Время, с								
2140			2200			2280		
$\Delta T, ^\circ\text{C}$	[N]	η	$\Delta T, ^\circ\text{C}$	[N]	η	$\Delta T, ^\circ\text{C}$	[N]	η
-1,2	0	0	-1,2	0	0	-0,8	0	0
-0,8	0	0	-0,9	0	0	-0,4	0	0
-0,5	0	0	-0,5	0	0	0	0	0
-0,2	0	0	-0,1	0	0	0,4	0	0
0,1	0	0	0,2	0	0	0,7	0	0
0,3	0	0	0,5	0	0	1,1	0	0
0,4	0	0	0,8	0	0,2	1,4	0	0,5
0,6	1	0,9	1,2	1	1	1,7	1	1

Таблица 3

ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ЗНАЧЕНИЯХ t

Время, с								
820			1030			1180		
$\Delta T, ^\circ\text{C}$	[N]	η	$\Delta T, ^\circ\text{C}$	[N]	η	$\Delta T, ^\circ\text{C}$	[N]	η
3,1	0	0	3,0	0	0	2,7	0	0
3,2	0	0	3,1	0	0	2,6	0	0
3,3	0	0	3,1	0	0	2,4	0	0
3,4	0	0	3,1	0	0	2,2	1	0,1
3,5	0	0	2,3	0	0	2,3	1	0,4
3,5	0	0	2,8	1	0,4	3,0	1	1
3,4	1	0,1	3,4	1	1	3,6	1	1
3,9	1	1	3,9	1	1	4,1	1	1

Таблица 4

ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ЗНАЧЕНИЯХ t

Время, с								
628			688			778		
$\Delta T, ^\circ\text{C}$	[N]	η	$\Delta T, ^\circ\text{C}$	[N]	η	$\Delta T, ^\circ\text{C}$	[N]	η
3,5	0	0	4,0	0	0	2,8	0	0
3,5	0	0	3,8	0	0	2,5	0	0
3,4	0	0	3,5	0	0	2,1	0	0,2
3,3	0	0	3,1	1	0	1,7	1	0,3
3,2	0	0	2,9	1	0,1	1,6	1	0,4
3,0	0	0	3,1	1	0,2	1,8	1	0,7
2,8	1	0,8	3,7	1	1	2,6	1	1
3,3	1	1	4,3	1	1	3,2	1	1

Тогда число зародышей в элементарном объеме можно выразить формулой

$$N = V \int_{t_0}^t J(\tau) (1 - \eta) d\tau. \quad (7.2.7)$$

Суммарный объем твердой фазы в предположении роста отдельных невзаимодействующих зародышей можно определить выражением (6.0.6). Однако эта формула дает удовлетворительные результаты лишь в том случае, когда скорости зарождения кристаллов велика. Когда зародыши возникают редко, в моменты времени t_1, t_2, \dots, t_N выражение (6.0.6) следует уточнить. Пусть $[N]$ — целая часть функции N . Соотношение (6.0.6) можно записать в следующем виде:

$$\begin{aligned} \eta(t) &= \int_{t_0}^t \frac{\partial [N(\tau)]}{\partial \tau} W(t, \tau) d\tau = \\ &= \int_{t_0}^t \sum_{m=1}^N \delta(\tau - t_m) W(t, \tau) d\tau = \sum_{m=1}^N W(t, t_m). \end{aligned} \quad (7.2.8)$$

Объем сферического зародыша выразится формулой (6.2.23). Будем считать, что размеры критических зародышей пре-

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА ДЛЯ $\omega = 0,09^\circ \text{C}/\text{с}$

$z \cdot 10^2, \text{ м}$	248			278			308		
	$\Delta T, ^\circ\text{C}$	$[N]$	η	$\Delta T, ^\circ\text{C}$	$[N]$	η	$\Delta T, ^\circ\text{C}$	$[N]$	η
	-0,8	11,6	0	0	4,4	0	0	3,2	0
-0,7	12,1	0	0	4,1	0	0	2,9	0	0
-0,6	12,6	0	0	3,7	0	0	2,6	0	0
-0,5	13,1	0	0	4,0	0	0	2,3	0	0
-0,4	13,5	0	0	2,7	1	0	1,8	1	0,1
-0,3	14,0	0	0	2,3	1	0	1,6	1	0,1
-0,2	14,4	0	0	2,2	1	0,1	1,6	1	0,2
-0,1	14,8	0	0	2,3	1	0,2	1,9	1	0,3

небрежимо малы. Тогда

$$W(t, \tau) = \frac{4\pi}{3} \left(\beta \int_{\tau}^t \Delta T(s) ds \right)^{3/2}; \quad (7.2.9)$$

$$\beta = \frac{2\lambda}{\gamma_0 b_1}, \quad b_1 \approx 1. \quad (7.2.10)$$

Согласно (7.2.8), (7.2.9) $\partial\eta/\partial t$ определяется выражением

$$\frac{\partial\eta}{\partial t} = \frac{3}{2} \left(\frac{4\pi}{3} \right)^{2/3} \beta \Delta T(t) \sum_{m=1}^N W^{1/3}(t, t_m). \quad (7.2.11)$$

Задача (7.2.1) — (7.2.4) аппроксимируется следующим образом:

$$L\tau^{-1}(T_i^{n+1} - T_i^n) = \lambda h^{-2}(T_{i+1}^{n+1} - 2T_i^{n+1} + T_{i-1}^{n+1}) - \\ - \alpha_0(T_i^{n+1} - T_1(z_i + v_0 t^{n+1})) + M\Delta T_i^n \sum_{m=1}^N [W(t_n, t_m)]^{1/3}; \quad (7.2.12)$$

$$\lambda h^{-1}(T_N^{n+1} - T_{N-1}^{n+1}) = \alpha_0 [T_N^{n+1} - T_1(v_0 t^{n+1})]; \quad (7.2.13)$$

$$T_1^{n+1} - T_0^{n+1} = T_1(z_1) - T_1(z_0); \quad (7.2.14)$$

$$T_i^0 = T_1(z_i). \quad (7.2.15)$$

Здесь $T_i^n = T(z_i, t_n)$; $z_i = hi$; $t_n = \tau n$; $i = 0, 1, 2, \dots, N$; $n = 0, 1, 2, \dots$

Таблица 5

ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ЗНАЧЕНИЯХ t

Время, с	458			578			608		
	$\Delta T, ^\circ\text{C}$	[N]	η	$\Delta T, ^\circ\text{C}$	[N]	η	$\Delta T, ^\circ\text{C}$	[N]	η
2,0	1	0,1	0,8	1	0,3	0,5	1	0,3	
2,0	1	0,1	0,8	1	0,3	0,7	1	0,3	
2,1	1	0,1	0,9	1	0,2	0,9	1	0,3	
2,1	1	0,1	1,1	1	0,2	1,3	1	0,3	
2,2	1	0,5	1,3	1	0,8	1,9	1	0,9	
2,4	1	0,5	2,0	1	0,9	3,2	1	1	
2,7	1	0,6	3,1	1	1	4,3	1	1	
1,2	1	1	4,2	1	1	5,4	1	1	

Счет интегралов, содержащихся в выражениях (7.2.7), (7.2.9), проводился по формуле трапеций.

Проведены расчеты начальной стадии процесса кристаллизации арсенида галлия при различных скоростях движения лодочки (различные скорости охлаждения расплава ω). Значения констант, принятые при расчетах, те же, что и в параграфе 7.1; значения кинетических констант A и B определены по экспериментальным данным [28]: для арсенида галлия $A = 0,1$; $B = 20$. Элементарный объем V выбирался таким образом, чтобы температура вдоль образца в пределах этого объема менялась не более чем на 1°C . При расчетах было принято, что V совпадает с ячейкой сетки. Принимая радиус образца равным $0,6 \cdot 10^{-2}$ м и шаг сетки $h = 10^{-3}$ м, получаем, что $V = 10^{-7}$ м³. Число зародышей и относительный объем твердой фазы рассчитывались для каждого элементарного объема отдельно. В случае, если растет только один зародыш, а другие зародыши в соседних объемах не появляются, этому зародышу «разрешается» расти и занимать соседние объемы.

В табл. 2—5 приведены результаты расчетов для различных скоростей охлаждения $\omega = kv_0$: распределение переохлаждения $\Delta T = T_e - T$ на протяжении 0,8 см вблизи холодного торца слитка, число зародышей $[N]$ и относительный объем кристаллической фазы η в элементарных объемах V для различных значений времени t . Первое, приведенное в таблицах, значение времени t_k соответствует максимальному переохлаждению расплава ΔT_k . Из таблиц видно, что с увеличением скорости охлаждения ω увеличивается число возникающих зародышей. Так, при $\omega = 0,003^\circ\text{C}/\text{с}$ растет один зародыш; при $\omega = 0,018^\circ\text{C}/\text{с}$ к моменту, когда первый зародыш достигает объема 10^{-7} м³, возникает второй зародыш ($t = 820$ с); при $\omega = 0,036^\circ\text{C}/\text{с}$ второй зародыш появляется в момент ($t = 420$ с), когда первый достигает размера $0,21 \cdot 10^{-7}$ м³, а к моменту $t = 700$ с растут три зародыша размером $0,4 \cdot 10^{-8}$; $0,9 \cdot 10^{-8}$ и $0,21 \cdot 10^{-7}$ м³. При $\omega = 0,092^\circ\text{C}/\text{с}$ к моменту $t = 450$ с растет восемь зародышей следующих размеров: $0,12 \times 10^{-7}$; $0,11 \cdot 10^{-2}$; $0,6 \cdot 10^{-8}$; $0,45 \cdot 10^{-7}$; $0,48 \cdot 10^{-7}$; $0,61 \cdot 10^{-7}$ и $0,1 \cdot 10^{-6}$ м³.

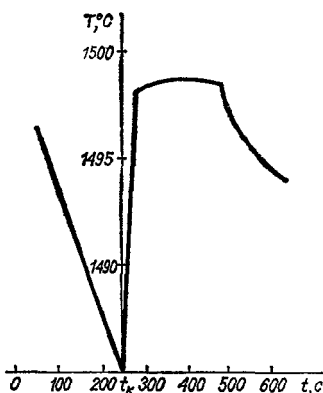


Рис. 19. Температура вблизи охлаждаемой поверхности в начальный период кристаллизации. $\omega = 0,09^\circ \text{C/c}$.

Получена следующая зависимость максимального переохлаждения и числа зародышей от скорости охлаждения расплава:

ω , $^\circ\text{C/c}$	$\Delta T_{\text{к}}$, $^\circ\text{C}$	$[N]$
0,003	4	1
0,006	5	2
0,018	7	3
0,037	10	5
0,09	15	10
0,18	22	Более 10

При значительной скорости охлаждения ($\omega = 0,09^\circ \text{C/c}$) переохлаждение перед фронтом кристаллизации становится больше, чем вблизи фронта (табл. 5). Рост зародышей столь медленный, что переохлаждение перед фронтом не успевает исчезнуть.

На рис. 19 показано изменение температуры в зависимости от времени на холодном торце образца. После достижения максимального переохлаждения температура резко повышается, но на $2-3^\circ \text{C}$ не доходит до равновесной. Затем наблюдается пологий участок, пока в данном элементарном объеме растет зародыш, а после того как элементарный объем полностью закристаллизовался, его температура продолжает понижаться.

7.3. РАСЧЕТЫ ПРОЦЕССА КРИСТАЛЛИЗАЦИИ БИНАРНОГО СПЛАВА С УЧЕТОМ ДИСПЕРСНЫХ ДОБАВОК; ОДНОМЕРНАЯ МОДЕЛЬ [9]*

Рассмотрим следующую упрощенную схему процесса кристаллизации бинарного сплава с учетом влияния дисперсных твердых частиц. Цилиндрический образец радиусом R и длиной L , боковая поверхность которого теплоизолирована, охлаждается с левого торца жидким теплоносителем. Поверхность цилиндра непроницаема для примеси. В начальный момент времени в перегретый расплав с заданной концентрацией C_0 введены дисперсные частицы заданных размеров и того же состава. Запишем обобщенные уравнения для осредненных по сечению образца концентрации C и температуры T , полагая равновесный коэффициент распределения m константой:

$$L \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \gamma \rho \frac{\partial \eta}{\partial t}, \quad 0 < x < L, \quad t > 0; \quad (7.3.1)$$

$$(1 - (1 - m) \eta) \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial T}{\partial x} \right) + (1 - m) C \frac{\partial \eta}{\partial t}, \\ 0 < x < L, \quad t > 0; \quad (7.3.2)$$

$$\lambda = \lambda_1 \eta + \lambda_2 (1 - \eta); \quad D = D_1 m \eta + D_2 (1 - \eta). \quad (7.3.3)$$

Индекс 1 относится к твердой фазе, а индекс 2 — к жидкой.

На левом торце образца задается условие теплообмена с охлаждающей жидкостью заданной температуры T_b , на правом — условие теплоизоляции:

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial x} = \alpha (T - T_b), \quad x = 0; \quad \frac{\partial T}{\partial x} = 0, \quad x = L. \quad (7.3.4)$$

Здесь α — коэффициент теплообмена. Концентрация C на торцах слитка удовлетворяет условиям

$$\frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{x=0} = \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{x=L} = 0. \quad (7.3.5)$$

Начальные условия задаются с учетом добавки дисперсных частиц, начальная температура которых T_{01} . Если считать, что температура перегретого расплава и твердых частиц мгновенно выравнивается, начальные условия можно записать в виде

$$T = (1 - m_0) T_{02} + m_0 T_{01}; \quad C = C_0; \quad \eta = m_0. \quad (7.3.6)$$

* Параграф написан совместно с А. Э. Бойтманисом.

Здесь m_0 — относительный начальный объем дисперсных частиц, T_{02} — начальная температура расплава.

В рассматриваемом случае относительный объем твердой фазы η состоит из доли твердой фазы дисперсных частиц η_1 и доли твердой фазы η_2 спонтанно зародившихся кристаллов: $\eta = \eta_1 + \eta_2$. Будем считать, что дисперсные частицы имеют сферическую форму. Тогда объем отдельной частицы задается формулой (6.2.23), а суммарный относительный объем N_1 частиц в единице объема — выражением

$$\eta_1 = m_0 \left(1 + \beta_1 \int_0^t \Delta T d\tau \right)^{3/2}. \quad (7.3.7)$$

Здесь

$$m_0 = \frac{4\pi}{3} r_0^3 N_1, \quad \beta_1 = \beta r_0^{-2} = \frac{2\lambda}{\gamma \rho b_1 r_0^2}, \quad (7.3.8)$$

r_0 — средний начальный радиус дисперсных частиц. В случае преобладания дендритного роста будем считать, что кристаллиты имеют форму вытянутых цилиндров. Тогда объем твердой фазы спонтанно зародившихся кристаллов согласно (6.0.6) и (6.2.24) выражается следующей зависимостью:

$$\eta_2 = \beta_2 \int_0^t J(\Delta T) (1 - \eta) \int_{\tau}^t \Delta T d\tau; \quad (7.3.9)$$

$$\beta_2 = \pi l \beta = \frac{2\lambda \pi l}{\gamma \rho b_1}, \quad (7.3.10)$$

где l — длина кристаллита в пределах элементарного объема. Вид зависимости $J(\Delta T)$, найденный с использованием экспериментальных данных работы [15], задается выражением [см. (6.3.8)]

$$J(\Delta T) = A \Delta T^2 \theta(\Delta T). \quad (7.3.11)$$

Диаграмма фазового равновесия на начальном участке аппроксимировалась прямыми линиями так, что

$$f_l(C) = \alpha_T C; \quad \Delta T = T_A - \alpha_T C - T. \quad (7.3.12)$$

Первичная структура твердой фазы характеризовалась числом $N = N_1 + N_2$, где N_2 — число дендритных ветвей или игольчатых кристаллов в единице объема:

$$N_2 = \int_0^t J(\Delta T) (1 - \eta) d\tau. \quad (7.3.13)$$

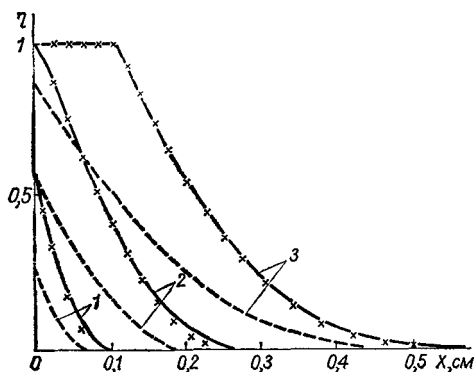


Рис. 20. Распределение доли твердой фазы η вдоль образца, $\alpha_T = 7700$:

1 - $t = 0,25$; 2 - $t = 2,5$ с;
 $= 1$; 3 - $t = 2,5$ с;
 $\frac{A}{\alpha} = 10^2$;
 $\alpha = 2 \cdot 10^3$ Вт/(м² · °С);
 $\times - A = 10^3$, $\alpha = 2 \times 10^3$ Вт/(м² · °С);
 $- - - A = 10^4$, $\alpha = 10^4$ Вт/(м² · °С).

Значение производной $\partial\eta/\partial t$, входящее в уравнения (7.3.1), (7.3.2), выражается согласно (7.3.7), (7.3.9) следующим образом:

$$\frac{\partial\eta}{\partial t} = \frac{\partial\eta_1}{\partial t} + \frac{\partial\eta_2}{\partial t} = \frac{3}{2} m_0^{2/3} \beta_1 \eta_1^{1/3} \Delta T + \beta_2 N_2 \Delta T. \quad (7.3.14)$$

Уравнения (7.3.1), (7.3.2) аппроксимировались неявной разностной схемой. Значения нелинейных коэффициентов и объемных источников аппроксимировались на предыдущем временном слое. Значения интегралов в выражениях (7.3.7), (7.3.9), (7.3.13) рассчитывались по формуле прямоугольников, причем шаг интегрирования был равен временному шагу по Δt .

Расчеты проводились при значениях параметров, близких к характеристикам углеродистой стали: $\lambda_1 = 40$; $\lambda_2 = 80$ Вт/(м · °С); $D_1 = 0,5 \cdot 10^{-10}$; $D_2 = 10^{-9}$ м²/с; $L_1 = L_2 = 5,0 \cdot 10^5$ Дж/(м³ · °С); $\gamma = 2,4 \cdot 10^5$ Дж/кг; $\rho_1 = \rho_2 = 7 \cdot 10^3$ кг/м³; $m = 0,5$; $\alpha_T = 7700$; $T_A = 1500^\circ$ С; $C_0 = 0,01$; $T_0 = T_l + 25$; $L = 0,006$ м; $R = 0,01$ м; $h = 0,2 \cdot 10^{-3}$ м. Шаг Δt подбирался так, чтобы счет был устойчивым.

Ввиду отсутствия экспериментальных данных по кинетике зарождения для углеродистой стали использовалась зависимость (7.3.11), полученная для кремнистого железа. Константа A варьировалась при расчетах в пределах 10^2 — 10^4 . Режим охлаждения регулировался значением коэффициента теплообмена при заданной температуре внешней среды $T_\infty = 100^\circ$ С.

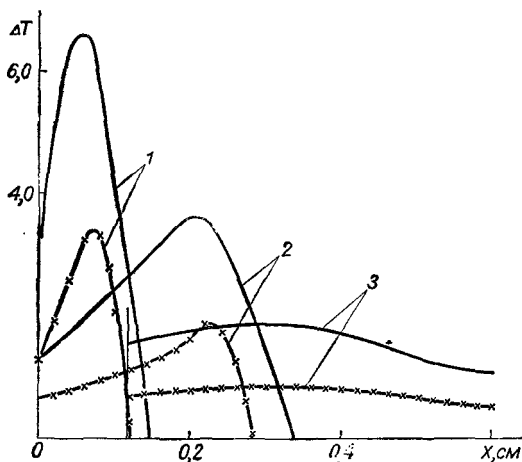


Рис. 21. Распределение переохлаждения в двухфазной области, $\alpha_T = 7700$:

1 — $t = 0,25$; 2 — $t = 1$; 3 — $t = 2,5$ с.
 $\frac{A}{A} = 10^2$; $\frac{A}{A} = 10^3$.

Рассмотрим вначале влияние кинетического коэффициента A на характер спонтанной объемной кристаллизации в отсутствие дисперсных твердых частиц ($\eta_1 \equiv 0$, $\eta = \eta_2$).

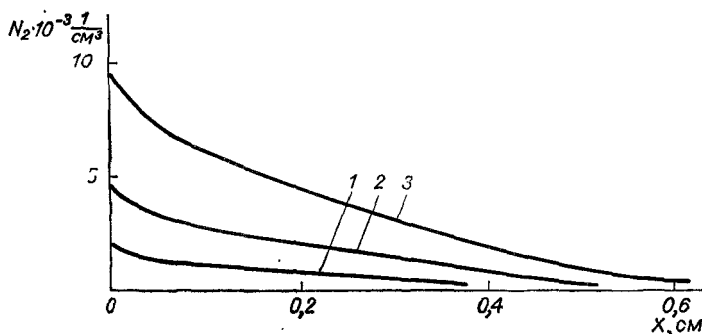


Рис. 22. Характеристика структуры дисперсной зоны N_2 , $\alpha_T = 7700$, $t = 2,5$ с:

1 — $A = 10^2$; 2 — $A = 10^3$; 3 — $A = 10^4$.

Были рассчитаны варианты с $A = 10^2$, 10^3 и 10^4 при значении коэффициента теплообмена $\alpha = 2 \cdot 10^3$ Вт/(м² · °С). На рис. 20 представлена основная характеристика двухфазной зоны — распределение функции η вдоль образца в различные моменты времени. Изменение A на один порядок практически не влияет на эту характеристику.

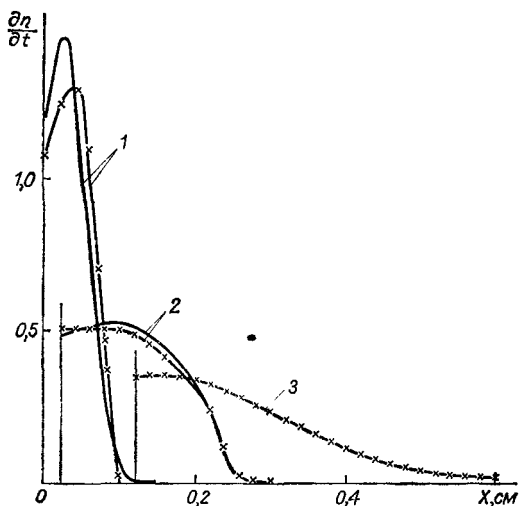


Рис. 23. Скорость изменения доли твердой фазы в пределах двухфазной зоны, $\alpha_T = 7700$.

1 — $t = 0,25$; 2 — $t = 1$; 3 — $t = 2,5$ с; — — — — $A = 10^2$; — × — × — × — — $A = 10^3$.

На рис. 21 показано распределение переохлаждения в двухфазной области, из которого видно, что увеличение A на один порядок приводит к уменьшению переохлаждения примерно в два раза. Это, естественно, отражается на структуре двухфазной зоны (рис. 22). При $A = 10^2$ структура твердой фазы характеризуется числом дендритных ветвей $N_2 = 2,5 \cdot 10^9 \text{ м}^{-3}$, а при $A = 10^3$ это число увеличивается до $5 \cdot 10^9 \text{ м}^{-3}$.

На рис. 23 представлено характерное распределение по элементарным объемам, или скорость нарастания твердой фазы в пределах двухфазной зоны. Наибольшая скорость нарастания твердой фазы наблюдается в конце двухфазной зоны. На рис. 24 представлен характер изменения во времени переохлаждения ΔT в различных точках двухфазной области. Кривые изменения переохлаждения имеют характерные максимумы в начальный период кристаллизации каждого элементарного объема.

Проанализировано также влияние содержания примеси на характер процесса кристаллизации. Были проведены

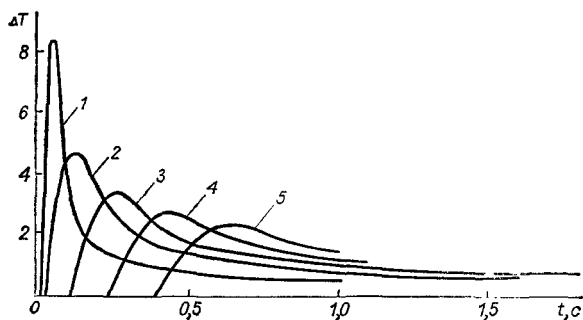


Рис. 24. Зависимость переохлаждения от времени в различных точках двухфазной зоны, $\alpha_T = 7700$, $A = 10^3$:
 1 — $x = 0,02$; 2 — $x = 0,06$; 3 — $x = 0,1$; 4 — $x = 0,14$; 5 — $x = 0,18$ см.

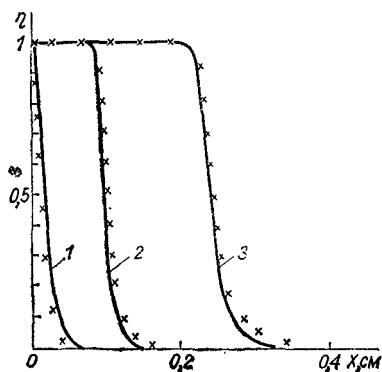


Рис. 25. Распределение доли твердой фазы вдоль образца, $\alpha_T = 77$:

1 — $t = 0,25$; 2 — $t = 1$; 3 — $t = 2,5$ с; — $A = 10^2$;
 × — $A = 10^3$.

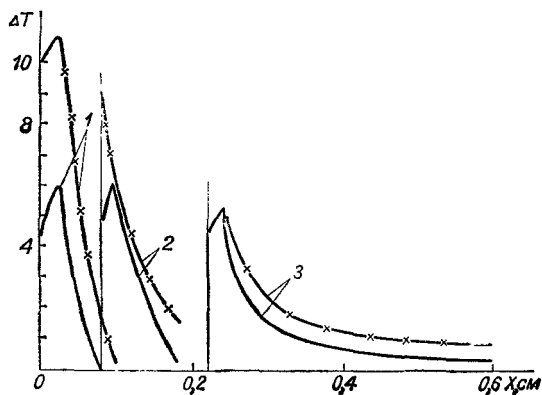


Рис. 26. Распределение переохлаждения в двухфазной области, $\alpha_T = 77$:

1 — $t = 0,25$; 2 — $t = 1$; 3 — $t = 2,5$ с;
 — $A = 10^2$; × — $A = 10^3$.

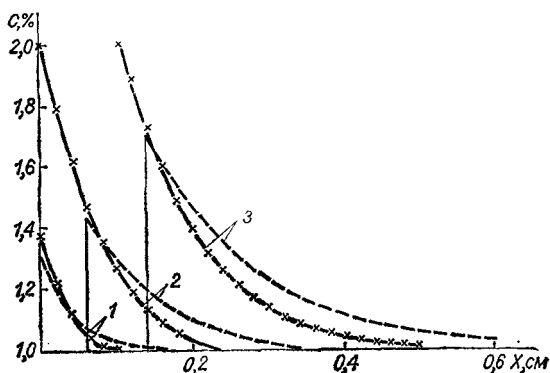


Рис. 27. Распределение концентрации в двухфазной зоне, $\alpha_T = 7700$:

1 — $t = 0,25$; 2 — $t = 1$; 3 — $t = 2,5$ с; ————
 $D_2 = 10^{-9}$; × — $D_2 = D_1 = 0$; - - - - -
 $D_2 = 10^{-6}$ м²/с.

расчеты при измененной диаграмме фазового равновесия, а именно при $\alpha_T = 77$. Такое изменение равносильно сдвигу в область малых концентраций примеси. Результаты расчетов представлены на рис. 25 и 26. Как видно из рисунков, в этом случае протяженность двухфазной зоны резко сокращается и увеличиваются переохлаждение и скорость нарастания твердой фазы.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА ПРОЦЕССА КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ПРИ

$x \cdot 10^2, \text{ м}$	$t = 0,25 \text{ с}$			
	η_1	η_2	η	N_2
0,02	0,19	0,45	0,64	1700
0,06	0,14	0,07	0,21	600
0,12	0,09	0,01	0,10	120
0,20	0,08	0,00	0,08	23
0,40	0,04	0,00	0,04	0
0,50	0,01	0,00	0,01	0

Масса и дисперсность твердых частиц характеризуются следующими данными: $m_0 = 0,1$; $N_1 = 250$. Значения остальных параметров, принятых при расчете: $D_2 = 10^{-9} \text{ м}^2/\text{с}$; $\alpha_T = 7700$; $\alpha = 0,5 \cdot 10^3 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{°С})$; $A = 10^2$. В табл. 6 приведены основные величины, характеризующие динамику процесса кристаллизации.

Вдали от охлаждаемого торца дисперсные частицы полностью расплавляются и не оказывают влияния на процесс кристаллизации. Вблизи охлаждаемой поверхности частицы полностью не расплавляются и объем их медленно нарастает. Однако преобладает нарастание твердой фазы за счет интенсивной спонтанной кристаллизации и большого числа зародившихся кристаллов.

7.4. ОБОБЩЕННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ ТЕОРИИ ДВУХФАЗНОЙ ЗОНЫ; ДВУМЕРНАЯ МОДЕЛЬ*

Приведем пример решения термодиффузионной задачи в обобщенной постановке методом введения параметра β , описанным в главе 5 [см. (5.0.1) — (5.0.3), (5.0.6), (5.0.7)], Рассмотрим следующую модельную задачу кристаллизации бипарного сплава. Образец цилиндрической формы радиусом R и высотой H охлаждается с боковой поверхности и с основания цилиндра. Запишем систему уравнений (5.0.6), (5.0.7) в осесимметрическом случае без учета конвективных членов, полагая m константой:

$$L \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \gamma \rho \Phi(\beta), \quad (7.4.1)$$

$$0 < z < H, \quad 0 < r < R, \quad t > 0;$$

$$\begin{aligned} & (1 - (1 - m) \eta) \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(D \frac{\partial C}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(D r \frac{\partial C}{\partial r} \right) + \\ & + (1 - m) C \Phi(\beta), \quad 0 < z < H, \quad 0 < r < R, \quad t > 0, \end{aligned} \quad (7.4.2)$$

где согласно (5.0.1) — (5.0.3)

$$\Phi(\beta) = \beta \Delta T \theta (1 - \bar{\eta}); \quad (7.4.3)$$

* Параграфы 7.4 и 7.5 написаны Г. Ф. Ивановой.

$$\bar{\eta} = \beta \int_0^i \Delta T^0 (\Delta T) d\tau; \quad (7.4.4)$$

$$\theta_1(x) = \left. \begin{aligned} \eta &= \bar{\eta}\theta_1(1 - \bar{\eta}) + 0_2(\bar{\eta} - 1); \\ \left. \begin{aligned} 0, & x < 0; \\ 1, & x \geq 0; \end{aligned} \right\} \theta_2 = \left. \begin{aligned} 0, & x \leq 0; \\ 1, & x > 0. \end{aligned} \right\} \end{aligned} \right\} \quad (7.4.5)$$

Задача решалась при следующих граничных условиях:

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial z} = \alpha(T - T_1), \quad z = 0; \quad \frac{\partial T}{\partial z} = 0, \quad z = H; \quad (7.4.6)$$

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial z} = -\alpha(T - T_2(z)), \quad r = R; \quad T_2 = T_0 + az, \quad (7.4.7)$$

где T_1, T_2 — температура охлаждающего агента.

Концентрация C на всех участках внешней границы Γ удовлетворяет условию

$$\left. \frac{\partial C}{\partial n} \right|_{\Gamma} = 0. \quad (7.4.8)$$

В начальный момент времени задавались температура перегрева и состав расплава:

$$T = T_l(C_0) + \delta T; \quad C = C_0, \quad t = 0. \quad (7.4.9)$$

Для разностной аппроксимации уравнений (7.4.1), (7.4.2) использовалась схема переменных направлений для уравнений с переменными коэффициентами [74], причем значения нелинейных коэффициентов и функции Φ брались с предыдущего целого шага:

$$\left. \begin{aligned} L_{ij}^n \frac{T_{ij}^{n+1/2} - T_{ij}^n}{0,5\tau} &= \frac{1}{r_i} (r_{i-1/2} \lambda_{ij}^n T_r^{n+1/2})_r + \\ &+ (\lambda_{ij}^n T_z^n)_z + \gamma \rho \Phi_{ij}^n(\beta), \\ (1 - (1 - m) \eta_{ij}^n) \frac{C_{ij}^{n+1/2} - C_{ij}^n}{0,5\tau} &= \frac{1}{r_i} (r_{i-1/2} D_{ij}^n C_r^{n+1/2})_r + \\ &+ (D_{ij}^n C_z^n)_z + (1 - m) C_{ij}^n \Phi_{ij}^n(\beta); \quad t = t_{n+1/2} = t_n + 0,5\tau; \end{aligned} \right\} \quad (7.4.10)$$

$$\left. \begin{aligned}
 L_{ij}^n \frac{T_{ij}^{n+1} - T_{ij}^{n+1/2}}{0,5\tau} &= \frac{1}{r_i} (r_{i-1/2} \lambda_{ij}^n T_r^{n+1/2})_r + \\
 &+ (\lambda_{ij}^n T_z^{n+1})_z + \gamma \rho \Phi_{ij}^n(\beta), \\
 (1 - (1 - m) \eta_{ij}^n) \frac{C_{ij}^{n+1} - C_{ij}^{n+1/2}}{0,5\tau} &= \frac{1}{r_i} (r_{i-1/2} D_{ij}^n C_r^{n+1/2})_r + \\
 &+ (D_{ij}^n C_z^{n+1})_z + (1 - m) C_{ij}^{n+1/2} \Phi_{ij}^n(\beta), \quad t = t_{n+1}.
 \end{aligned} \right\} \quad (7.4.11)$$

При вычислении интеграла, входящего в выражение для $\bar{\eta}$ [см. (7.4.4)], использовалась формула трапеций:

$$\left. \begin{aligned}
 \bar{\eta}_{ij}^1 &= 0,5\tau\beta (\Delta T_{ij}^0 + \Delta T_{ij}^1), \\
 \bar{\eta}_{ij}^{n+1} &= \bar{\eta}_{ij}^n + 0,5\tau\beta (\Delta T_{ij}^n + \Delta T_{ij}^{n+1}), \quad n = 1, 2, 3, \dots
 \end{aligned} \right\} \quad (7.4.12)$$

Граничные условия (7.4.6) — (7.4.8) аппроксимировались обычным образом с погрешностью аппроксимации $O(h)$.

При расчетах были приняты те же значения теплофизических характеристик, что и в параграфе 7.3, взятые для углеродистой стали. Остальные исходные данные следующие: $R = 0,01$ м; $H = 0,01$ м; $D_1 = 0,5 \times 10^{-10}$; $D_2 = 0,5 \cdot 10^{-8}$ м²/с; $C_0 = 0,005$; $\delta T = 50^\circ$ С; $T_0 = 1300^\circ$ С; $T_1 = 100^\circ$ С; $a = 0$; $\alpha = 2300$ Вт/(м² × °С).

Диаграмма фазового состояния аппроксимировалась прямыми линиями:

$$T_l(C) = 1500 - \alpha_T C;$$

$$C_s = mC_l, \quad (7.4.13)$$

причем $m = 0,4$; $\alpha_T = 7700$. Расчеты проводились на сетке 10×10 узлов.

Проанализируем результаты расчетов. Рассмотрим

ЗНАЧЕНИЯ ФУНКЦИЙ ζ , η , ΔT

t, c	$r \cdot 10^2, m$	$z \cdot 10^2, m$
2	0	0
	0,2	0,3
	0,4	0,3
	0,6	0,3
	0,8	0,3
4	0,9	0,4
	0	0,5
	0,2	0,5
	0,4	0,5
	0,5	0,5
	0,7	0,6
	0,8	0,6
	0,9	0,7

вначале случай $\alpha_T = 0$, что соответствует решению только тепловой задачи (кристаллизация чистой компоненты А). Для выяснения вопроса о сходимости решения, когда $\beta \rightarrow \infty$, к обобщенному решению были проведены расчеты при различных значениях β . Для того чтобы проследить характер изменения решения при увеличении β , в табл. 7 приведены значения функций C , η , ΔT при $\beta = 1, 5$ и 10 вблизи фронта кристаллизации, где наблюдается их наибольшее различие.

Из табл. 7 видно, что при $\beta = 1$ и 5 значения ΔT по всему полю различаются не более чем на $0,1\%$, $C(r, z, t)$ — не более чем на 7% , а η — не более чем на 10% . При $\beta = 5$ и 10 поля T практически совпадают, а поля C и η различаются не более чем на 2% . Характерные значения переохлаждения ΔT составляют $1,35$; $0,27$ и $0,14^\circ\text{C}$ при $\beta = 1, 5$ и 10 соответственно. Можно заметить, что ΔT убывает обратно пропорционально β . Таким образом, выбор значения β , при котором решение будет хорошим приближением точного предельного решения, можно осуществлять по значению переохлаждения. В нашем случае $\Delta T = 0,27^\circ\text{C}$ можно считать незначительной, и, следовательно, результаты расчета при $\beta = 5$ будут удовлетворительными.

Таблица 7

ПРИ РАЗЛИЧНЫХ β

$C(r, z, t), \%$			$\eta(r, z, t)$			$\Delta T(r, z, t), ^\circ\text{C}$		
$\beta = 1$	$\beta = 5$	$\beta = 10$	$\beta = 1$	$\beta = 5$	$\beta = 10$	$\beta = 1$	$\beta = 5$	$\beta = 10$
0,71	0,73	0,73	0,48	0,51	0,52	1,33	0,27	0,13
0,71	0,73	0,74	0,49	0,52	0,53	1,33	0,27	0,14
0,74	0,77	0,77	0,54	0,58	0,58	1,36	0,27	0,14
0,82	0,86	0,86	0,65	0,69	0,70	1,39	0,28	0,14
1,11	1,22	1,24	0,92	0,99	0,99	1,81	0,37	0,19
0,61	0,62	0,62	0,31	0,31	0,31	1,03	0,22	0,11
0,86	0,91	0,92	0,70	0,75	0,76	1,10	0,23	0,11
0,88	0,93	0,94	0,71	0,76	0,77	1,10	0,23	0,11
0,95	1,01	1,02	0,79	0,84	0,85	1,11	0,23	0,11
1,02	1,10	1,11	0,85	0,91	0,92	1,13	0,27	0,14
0,54	0,54	1,54	0,12	0,12	0,12	0,71	0,16	0,08
0,62	0,63	0,63	0,32	0,34	0,34	1,16	0,26	0,13
0,78	0,79	0,79	0,61	0,61	0,61	0,58	0,13	0,07

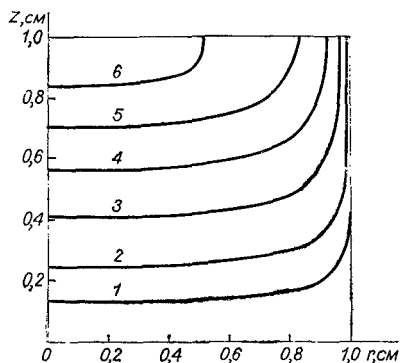


Рис. 28. Положение фронта кристаллизации в различные моменты времени, $\alpha_T = 0$, $\beta = 5$:

1 - $t = 1$; 2 - $t = 2$; 3 - $t = 3,5$;
4 - $t = 5$; 5 - $t = 6,5$; 6 - $t = 8$ с.

Дальнейшие расчеты проведены при $\beta = 5$. В рассматриваемом случае ($\alpha_T = 0$) двухфазная зона практически отсутствует, кристаллизация происходит между двумя соседними узлами сетки. Можно считать, что движется неразмытая поверхность раздела фаз. Положение и форма фронта кристаллизации в различные моменты времени представлены

Таблица 8

ЗНАЧЕНИЯ ФУНКЦИЙ C , η , ΔT ПРИ РАЗЛИЧНЫХ β

$r \cdot 10^3$, м	$C(r, z, t)$, %		$\eta(r, z, t)$		$\Delta T(r, z, t)$, °C	
	$\beta = 1$	$\beta = 5$	$\beta = 1$	$\beta = 5$	$\beta = 1$	$\beta = 5$

При $t = 2$ с, $z = 2 \cdot 10^{-3}$, м

0	1,05	1,06	0,87	0,87	0,34	0,07
0,2	1,05	1,05	0,87	0,88	0,34	0,07
0,4	1,06	1,07	0,89	0,89	0,34	0,05
0,6	1,10	1,11	0,91	0,91	0,34	0
0,8	1,18	1,18	0,96	0,96	0,30	0
0,9	1,24	1,24	0,99	0,99	0,14	0

При $t = 4$ с, $z = 4 \cdot 10^{-3}$, м

0	0,99	0,91	0,82	0,82	0,31	0,06
0,2	1,00	1,00	0,83	0,83	0,31	0,06
0,4	1,03	1,03	0,85	0,85	0,30	0,06
0,6	1,08	1,08	0,89	0,89	0,24	0,10
0,8	1,17	1,17	0,95	0,95	0	0,10
0,9	1,23	1,24	0,98	0,98	0	0,07

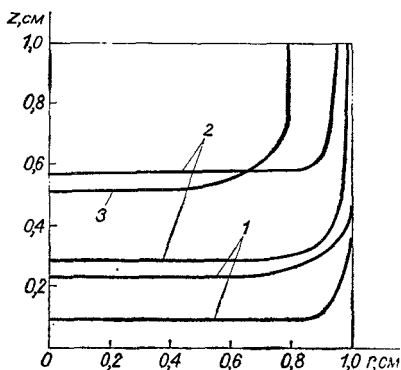


Рис. 29. Положение двухфазной зоны в различные моменты времени, $\alpha_T = 7700$, $\beta = 1$:

1 — $t = 1$; 2 — $t = 3$; 3 — $t = 6$ с.

на рис. 28. Точки фронта найдены интерполяцией по значениям функции η в элементарном объеме, в котором происходит кристаллизация. Отметим, что в данном случае неразмытая поверхность раздела фаз имеет довольно сложную форму; при численном решении скрытая теплота практически не «размазывается» и выделяется строго на фронте кристаллизации.

Рассмотрим теперь результаты расчетов для бинарной системы, когда диаграмма фазового равновесия задана в виде (7.4.13) при $\alpha_T = 7700$. В табл. 8 приведены значения S , η , ΔT при $\beta = 1$ и 5 в характерных точках двухфазной зоны, где наблюдаются наибольшие изменения этих функций. Максимальное различие функций S и η при $\beta = 1$ и 5 не превышает 1%. Результаты расчетов при $\beta = 5$ и 10 практически совпадают. Характерное значение переохлаждения при $\beta = 1$ составляет $0,34^\circ \text{C}$, и, следовательно, расчеты можно считать удовлетворительными.

Приведем краткий анализ полученных результатов. В табл. 9 представлены подробные поля значений температуры (для сокращения записей даются значения $1500 - T$), концентрации S (в %) и доли твердой фазы η в характерные моменты времени начала, середины и конца процесса кристаллизации. Из таблицы можно сделать все необходимые выводы. Здесь отметим лишь некоторые особенности полученного решения. Двухфазная зона значительной протяженности увеличивается с течением времени. На рис. 29 показаны границы этой зоны в различные моменты времени.

Таблица 9

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ ТЕМПЕРАТУРНЫХ И КОНЦЕНТРАЦИОННЫХ ПОЛЕЙ

$z \cdot 10^6$, м	$r \cdot 10^2$, м										
	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	1,0
	Поле 1500 — T; $t = 1$ с										
1,0	4,8	4,8	5,3	6,2	7,6	9,4	11,8	14,7	18,3	22,5	27,1
0,9	4,8	4,8	5,3	6,2	7,6	9,4	11,8	14,7	18,3	22,5	27,1
0,8	6,4	6,4	6,8	7,7	9,1	10,9	13,2	16,1	19,6	23,7	28,4
0,7	9,5	9,5	10,0	10,8	12,1	13,8	16,0	18,7	22,1	26,2	30,8
0,6	14,3	14,3	14,7	15,5	16,6	18,1	20,1	22,6	25,8	29,6	34,2
0,5	20,7	20,8	21,1	21,7	22,7	23,9	25,5	27,6	30,3	33,9	38,4
0,4	28,9	28,9	29,2	29,6	30,2	31,1	32,1	33,5	35,4	38,4	44,0
0,3	38,8	38,8	38,9	39,0	39,1	39,2	39,4	39,8	40,5	42,5	51,0
0,2	50,5	50,5	50,6	50,7	51,0	51,3	51,8	52,6	54,0	57,0	64,7
0,1	86,7	86,7	86,7	86,9	87,1	87,4	88,0	89,1	91,0	94,7	100,4
0	159,6	159,6	159,6	159,7	160,0	160,3	160,9	161,8	163,7	167,2	168,8
	Поле 1500 — T; $t = 3$ с										
1,0	38,9	38,9	38,9	38,9	38,9	38,9	39,0	39,3	40,4	42,9	51,0
0,9	38,9	38,9	38,9	38,9	38,9	38,9	39,0	39,3	40,4	42,9	51,0
0,8	38,9	38,9	38,9	38,9	38,9	39,0	39,1	39,4	40,6	43,2	51,4
0,7	39,1	39,1	39,1	39,1	39,2	39,2	39,4	40,0	41,3	44,1	52,3
0,6	40,1	40,1	40,1	40,2	40,3	40,2	40,9	41,7	43,4	46,5	54,6
0,5	43,8	43,8	43,9	44,1	44,4	44,9	45,6	46,9	49,2	52,9	60,7
0,4	54,7	54,7	54,9	55,2	55,8	56,7	58,1	60,1	63,2	67,6	74,7
0,3	79,9	79,9	80,2	80,9	81,9	83,5	85,9	88,4	92,5	97,2	102,5

Продолжение таблицы 9

$\lambda \cdot 10^2, \text{ м}$	$r \cdot 10^2, \text{ м}$										
	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	1,0
0,3	0,5 (0)	0,5 (0)	0,5 (0)	0,5 (0)	0,5 (0)	0,5 (0)	0,5 (0)	0,5 (0)	0,52 (0,05)	0,54 (0,12)	0,22 (1)
0,2	0,64 (0,36)	0,64 (0,36)	0,64 (0,37)	0,64 (0,38)	0,65 (0,39)	0,65 (0,39)	0,66 (0,40)	0,67 (0,42)	0,69 (0,45)	0,72 (0,52)	0,24 (1)
0,1	1,11 (0,92)	1,11 (0,92)	1,11 (0,92)	1,11 (0,93)	1,12 (0,93)	1,12 (0,94)	1,13 (0,95)	1,14 (0,96)	1,17 (0,96)	1,21 (0,99)	0,49 (1)
0	0,44 (1)	0,44 (1)	0,44 (1)	0,44 (1)	0,45 (1)	0,45 (1)	0,45 (1)	0,46 (0)	0,47 (1)	0,49 (1)	0,49 (1)

Поля S (в %) и η (в скобках); $t = 3 \text{ с}$

1,0	0,5 (0)	0,5 (0)	0,5 (0)	0,5 (0)	0,5 (0)	0,5 (0)	0,5 (0)	0,5 (0)	0,52 (0,06)	0,55 (0,15)	0,22 (1)
0,9	0,5 (0)	0,5 (0)	0,5 (0)	0,5 (0)	0,5 (0)	0,5 (0)	0,5 (0)	0,5 (0)	0,52 (0,07)	0,55 (0,16)	0,22 (1)
0,8	0,5 (0)	0,5 (0)	0,5 (0)	0,5 (0)	0,5 (0)	0,5 (0)	0,5 (0)	0,51 (0)	0,52 (0,07)	0,55 (0,16)	0,22 (1)
0,7	0,5 (0)	0,5 (0)	0,5 (0)	0,5 (0)	0,5 (0)	0,5 (0)	0,51 (0)	0,51 (0)	0,53 (0,09)	0,57 (0,19)	0,23 (1)
0,6	0,51 (0)	0,51 (0)	0,51 (0)	0,52 (0,05)	0,52 (0,05)	0,52 (0,06)	0,52 (0,08)	0,53 (0,11)	0,56 (0,17)	0,60 (0,27)	0,24 (1)
0,5	0,56 (0,18)	0,56 (0,18)	0,56 (0,18)	0,56 (0,19)	0,57 (0,20)	0,57 (0,21)	0,58 (0,24)	0,60 (0,28)	0,63 (0,34)	0,68 (0,43)	0,27 (1)

0,4	0,70 (0,47)	0,70 (0,47)	0,70 (0,48)	0,71 (0,48)	0,71 (0,50)	0,72 (0,52)	0,74 (0,54)	0,77 (0,58)	0,81 (0,63)	0,87 (0,70)	0,85 (1)
0,3	1,02 (0,85)	1,02 (0,85)	1,03 (0,86)	1,04 (0,86)	1,05 (0,87)	1,07 (0,89)	1,10 (0,91)	1,13 (0,93)	1,18 (0,96)	1,24 (0,99)	0,5 (1)
0,2	0,5 (1)	0,5 (1)	0,5 (1)	0,5 (1)	0,5 (1)	0,5 (1)	0,5 (1)	0,5 (1)	0,5 (1)	0,5 (1)	0,5 (1)
0,1	0,5 (1)	0,5 (1)	0,5 (1)	0,5 (1)	0,5 (1)	0,5 (1)	0,5 (1)	0,5 (1)	0,5 (1)	0,49 (1)	0,49 (1)
0	0,5 (1)	0,5 (1)	0,5 (1)	0,5 (1)	0,5 (1)	0,5 (1)	0,5 (1)	0,5 (1)	0,5 (1)	0,49 (1)	0,49 (1)

Поля С (в %) и η (в скобках); t = 5 с

1,0	0,51 (0)	0,51 (0)	0,52 (0)	0,52 (0,05)	0,52 (0,06)	0,53 (0,08)	0,54 (0,11)	0,56 (0,17)	0,59 (0,25)	0,64 (0,36)	0,26 (1)
0,9	0,51 (0)	0,51 (0)	0,52 (0)	0,52 (0,05)	0,52 (0,06)	0,53 (0,08)	0,54 (0,11)	0,56 (0,17)	0,59 (0,25)	0,64 (0,36)	0,26 (1)
0,8	0,53 (0,10)	0,53 (0,10)	0,53 (0,10)	0,53 (0,11)	0,54 (0,12)	0,55 (0,14)	0,56 (0,18)	0,58 (0,23)	0,62 (0,32)	0,67 (0,42)	0,27 (1)
0,7	0,58 (0,23)	0,58 (0,23)	0,58 (0,24)	0,59 (0,25)	0,59 (0,26)	0,60 (0,29)	0,62 (0,32)	0,64 (0,38)	0,69 (0,46)	0,75 (0,55)	0,36 (1)
0,6	0,70 (0,47)	0,70 (0,48)	0,70 (0,48)	0,71 (0,49)	0,72 (0,51)	0,74 (0,54)	0,76 (0,57)	0,80 (0,62)	0,85 (0,68)	0,91 (0,75)	0,36 (1)
0,5	0,95 (0,78)	0,95 (0,79)	0,96 (0,80)	0,97 (0,81)	0,99 (0,82)	1,01 (0,84)	1,05 (0,87)	1,09 (0,90)	1,15 (0,94)	1,21 (0,97)	0,48 (1)
0,4	0,51 (1)	0,51 (1)	0,51 (1)	0,51 (1)	0,51 (1)	0,51 (1)	0,51 (1)	0,51 (1)	0,51 (1)	0,51 (1)	0,51 (1)
0,3	0,5 (1)	0,5 (1)	0,5 (1)	0,51 (1)	0,51 (1)	0,51 (1)	0,51 (1)	0,51 (1)	0,51 (1)	0,51 (1)	0,51 (1)
0,2	0,5 (1)	0,5 (1)	0,5 (1)	0,5 (1)	0,5 (1)	0,5 (1)	0,5 (1)	0,5 (1)	0,5 (1)	0,5 (1)	0,50 (1)
0,1	0,5 (1)	0,5 (1)	0,5 (1)	0,5 (1)	0,5 (1)	0,5 (1)	0,5 (1)	0,5 (1)	0,5 (1)	0,49 (1)	0,49 (1)

Поля С (в %) и η (в скобках); $D_2 = 10^{-2}$ см²/с, $t = 3$ с

1,0	0,57 (0,01)	0,57 (0,01)	0,57 (0,01)	0,57 (0,01)	0,58 (0,02)	0,58 (0,02)	0,59 (0,02)	0,59 (0,03)	0,6 (0,23)	0,24 (1)
0,9	0,57 (0,01)	0,57 (0,01)	0,57 (0,01)	0,57 (0,01)	0,58 (0,02)	0,58 (0,02)	0,59 (0,02)	0,59 (0,03)	0,6 (0,23)	0,24 (1)
0,8	0,58 (0,01)	0,58 (0,01)	0,58 (0,01)	0,58 (0,01)	0,59 (0,01)	0,59 (0,01)	0,60 (0,02)	0,61 (0,03)	0,62 (0,24)	0,25 (1)
0,7	0,60 (0,02)	0,60 (0,02)	0,60 (0,02)	0,61 (0,02)	0,61 (0,02)	0,61 (0,02)	0,62 (0,03)	0,63 (0,04)	0,64 (0,25)	0,26 (1)
0,6	0,63 (0,02)	0,63 (0,02)	0,64 (0,02)	0,64 (0,02)	0,65 (0,03)	0,65 (0,03)	0,66 (0,03)	0,67 (0,04)	0,68 (0,27)	0,27 (1)
0,5	0,68 (0,03)	0,68 (0,03)	0,69 (0,03)	0,69 (0,04)	0,70 (0,04)	0,70 (0,04)	0,71 (0,05)	0,72 (0,07)	0,74 (0,31)	0,30 (1)
0,4	0,74 (0,18)	0,74 (0,18)	0,75 (0,20)	0,75 (0,22)	0,76 (0,25)	0,76 (0,25)	0,77 (0,29)	0,79 (0,45)	0,81 (0,77)	0,33 (1)
0,3	0,30 (1)	0,30 (1)	0,30 (1)	0,30 (1)	0,30 (1)	0,30 (1)	0,30 (1)	0,31 (1)	0,31 (1)	0,31 (1)
0,2	0,30 (1)	0,30 (1)	0,30 (1)	0,30 (1)	0,30 (1)	0,30 (1)	0,30 (1)	0,30 (1)	0,30 (1)	0,30 (1)
0,1	0,28 (1)	0,28 (1)	0,28 (1)	0,28 (1)	0,28 (1)	0,28 (1)	0,28 (1)	0,28 (1)	0,28 (1)	0,28 (1)
0	0,28 (1)	0,28 (1)	0,28 (1)	0,28 (1)	0,28 (1)	0,28 (1)	0,28 (1)	0,28 (1)	0,28 (1)	0,28 (1)

Поля С (в %) и η (в скобках); $D_2 = 10^{-2}$ см²/с, $t = 5$ с

1,0	0,75 (0,07)	0,75 (0,08)	0,75 (0,08)	0,76 (0,08)	0,77 (0,08)	0,77 (0,09)	0,79 (0,09)	0,80 (0,12)	0,81 (0,56)	0,32 (1)
0,9	0,75 (0,07)	0,75 (0,08)	0,75 (0,08)	0,76 (0,08)	0,77 (0,08)	0,77 (0,09)	0,79 (0,09)	0,80 (0,12)	0,81 (0,56)	0,32 (1)
0,8	0,77 (0,08)	0,77 (0,08)	0,77 (0,08)	0,78 (0,09)	0,79 (0,09)	0,80 (0,10)	0,81 (0,10)	0,82 (0,13)	0,83 (0,57)	0,33 (1)
0,7	0,80 (0,08)	0,80 (0,08)	0,81 (0,09)	0,81 (0,09)	0,82 (0,09)	0,82 (0,09)	0,84 (0,10)	0,85 (0,13)	0,88 (0,57)	0,35 (1)

Функция η в пределах зоны непрерывно меняется от 0 до 1. К концу зоны концентрация примеси достигает значения $C_0 m^{-1}$, поэтому очистки материала практически не происходит.

Иная картина наблюдается при расчетах с большим коэффициентом диффузии расплава ($D_1 = 0,5 \cdot 10^{-3}$, $D_2 = 10^{-2} \text{ см}^2/\text{с}$). Характер кристаллизации существенно меняется. Доля твердой фазы в конце двухфазной зоны изменяется скачкообразно — примерно от 0,32 до 1. В твердой фазе средняя концентрация меньше C_0 , т. е. наблюдается очистка материала.

7.5. ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ ЗАДАЧИ СПОНТАННОЙ ОБЪЕМНОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ В ОБОБЩЕННОЙ ПОСТАНОВКЕ; ДВУМЕРНАЯ МОДЕЛЬ

Численная реализация задачи с учетом кинетики объемной кристаллизации осуществлена на том же модельном примере, что и в параграфе 7.4. Для решения системы (7.4.1), (7.4.2) использован численный метод, описанный в предыдущем параграфе. В данном случае функции η и Φ согласно (6.0.6), (6.2.24) имеют вид

$$\eta = \beta_2 \int_0^t J(\Delta T) (1 - \eta) \int_{\tau}^t \Delta T d\tau, \quad \beta_2 = \frac{2\pi/\lambda}{\gamma \rho b_1}; \quad (7.5.1)$$

$$\Phi = \frac{\partial \eta}{\partial t} = \Delta T(t) \int_0^t J(\Delta T) (1 - \eta) d\tau. \quad (7.5.2)$$

Вычисляется функция N , характеризующая структуру двухфазной зоны:

$$N = \int_0^t J(\Delta T) (1 - \eta) d\tau. \quad (7.5.3)$$

Функция Φ аппроксимируется с учетом формулы трапеций:

$$\left. \begin{aligned} \Phi_{ij}^1 &= 0,5\tau\beta_2\Delta T_{ij}^1 [J_{ij}^0(1 - \eta_{ij}^0) + J_{ij}^1(1 - \eta_{ij}^1)], \\ \Phi_{ij}^{n+1} &= \Delta T_{ij}^{n+1} (\Delta T_{ij}^n)^{-1} \Phi_{ij}^n + 0,5\tau\beta_2\Delta T_{ij}^{n+1} \times \\ &\times [J_{ij}^n(1 - \eta_{ij}^n) + J_{ij}^{n+1}(1 - \eta_{ij}^{n+1})], \quad n = 1, 2, 3, \dots, \end{aligned} \right\} \quad (7.5.4)$$

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ ФУНКЦИЙ C , η , ΔT

t , с	$r \cdot 10^2$, м	$z \cdot 10^2$, м	$C(r, z, t)$, %			$\eta(r, z, t)$
			$A = 10^2$	$A = 10^3$	$A = 10^4$	$A = 10^2$
2	0	0,2	1,04	1,05	1,05	0,86
	0,2	0,2	1,04	1,05	1,06	0,87
	0,4	0,2	1,05	1,07	1,07	0,88
	0,6	0,2	1,09	1,10	1,11	0,90
	0,8	0,2	1,17	1,18	1,18	0,95
	0,9	0,2	1,23	1,24	1,24	0,99
4	0	0,4	0,99	0,99	1,00	0,82
	0,2	0,4	0,99	1,00	1,01	0,82
	0,4	0,4	1,02	1,03	1,03	0,85
	0,6	0,4	1,07	1,08	1,09	0,89
	0,8	0,4	1,16	1,17	1,18	0,92
	0,9	0,4	1,23	1,23	1,24	0,99

если

$$P \equiv (1 - \eta_{ij}^n) (1 - \eta_{ij}^{n+1}) \eta_{ij}^n \eta_{ij}^{n+1} \neq 0, \quad (7.5.5)$$

т. е. когда точка (z_i, r_j) в моменты времени t_{n+1} и t_n находится в двухфазной зоне. Если же $P = 0$, то

$$\Phi_{ij}^{n+1} = (\eta_{ij}^{n+1} - \eta_{ij}^n) \tau^{-1}, \quad (7.5.6)$$

причем η_{ij}^{n+1} заменяется на 1, если $\eta_{ij}^{n+1} > 1$, и η_{ij}^n — на 0, если $\eta_{ij}^n < 0$.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ ФУНКЦИИ N ПРИ

t , с	$z \cdot 10^2$, м	$N(0, z, t)$			$N(0,5 z, t)$		
		$A = 10^2$	$A = 10^3$	$A = 10^4$	$A = 10^2$	$A = 10^3$	$A = 10^4$
2	0	3284	8260	23 041	3288	8267	23 042
	0,2	1038	2228	4784	1045	2254	4810
	0,4	352	854	1938	399	1010	2258
	0,6	0	0	0	0	0	0
	0,8	0	0	0	0	0	0
	1,0	0	0	0	0	0	0
4	0	3284	8260	23 041	3288	8267	23 042
	0,2	1041	2234	4796	1051	2258	4820
	0,4	844	1814	3900	851	1834	3931
	0,6	453	1007	2199	494	1036	2307
	0,8	0	0	0	0	0	0
	1,0	0	0	0	0	0	0

Таблица 10

ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ЗНАЧЕНИЯХ A

z, t		$\Delta T (r, z, t), ^\circ\text{C}$			$1500 - T, ^\circ\text{C}$		
$A = 10^2$	$A = 10^4$	$A = 10^2$	$A = 10^3$	$A = 10^4$	$A = 10^2$	$A = 10^3$	$A = 10^4$
0,87	0,87	1,14	0,52	0,24	82,1	82,0	82,2
0,87	0,88	1,14	0,52	0,24	82,3	82,3	82,4
0,88	0,89	1,13	0,52	0,24	83,5	83,4	83,6
0,91	0,91	1,10	0,50	0,23	87,9	86,1	86,3
0,96	0,96	1,00	0,45	0,21	91,7	91,9	92,1
0,99	0,99	0,88	0,40	0,19	96,4	96,5	96,7
0,82	0,83	1,27	0,57	0,26	77,9	77,9	78,1
0,83	0,84	1,27	0,57	0,26	78,3	78,3	78,5
0,85	0,86	1,22	0,55	0,25	80,2	80,3	80,5
0,89	0,90	1,11	0,50	0,23	84,2	84,4	84,6
0,96	0,96	0,94	0,42	0,19	91,4	91,5	91,8
0,99	0,99	0,83	0,38	0,17	96,2	96,4	96,6

Для вычисления функции η , используя формулу трапеций, получаем следующие выражения:

$$\left. \begin{aligned} \eta_{ij}^1 &= 0,25\tau^2\beta_2 J_{ij}^0 (1 - \eta_{ij}^0) (\Delta T_{ij}^0 + \Delta T_{ij}^1), \\ \eta_{ij}^{n+1} &= \eta_{ij}^n + 0,5\tau (1 + \Delta T_{ij}^{n+1} (\Delta T_{ij}^n)^{-1}) \Phi_{ij}^n + \\ &+ 0,25\tau^2\beta_2 J_{ij}^n (1 - \eta_{ij}^n) (\Delta T_{ij}^n + \Delta T_{ij}^{n+1}), \quad n = 1, 2, 3, \dots \end{aligned} \right\} (7.5.7)$$

Таблица 11
РАЗЛИЧНЫХ ЗНАЧЕНИЯХ A

$N (l, z, t)$		
$A = 10^2$	$A = 10^3$	$A = 10^4$
3229	8125	20 983
1894	5117	14 240
1655	4401	11 551
1605	4321	11 463
1594	4397	11 673
1561	4398	11 703
3229	8125	20 983
1894	5117	14 240
1655	4401	11 551
1605	4321	11 463
1594	4397	11 673
1583	4398	11 703

Функция $J(\Delta T)$ аппроксимируется зависимостью (7.3.11).

Расчеты проводились при различных значениях кинетического коэффициента A . В табл. 10 приведены результаты расчетов при $A = 10^2, 10^3$ и 10^4 . Значения функций $S, \eta, \Delta T$ даны в характерных точках двухфазной зоны вблизи ее границы с твердой фазой. Из таблицы видно, что при изменении A на два порядка функции T, S, η практически остаются постоянными. Переохлаждение уменьшается примерно вдвое

Таблица 12

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ КОНЦЕНТРАЦИОННЫХ ПОЛЕЙ И ПОЛЕЙ ПЕРЕОХЛАЖДЕНИЯ

$z \cdot 10^2$, м	$r \cdot 10^2$, м										
	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	1,0
Поля ΔT (в скобках) и η ; $A = 10^4$, $t = 1$ с											
1,0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0,9	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0,8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0,7	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0,6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0,5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0,4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0,3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	(0,73)	1
0,2	(0,61)	(0,61)	(0,61)	(0,61)	(0,61)	(0,59)	(0,57)	(0,54)	(0,51)	0,12	1
	0,37	0,37	0,37	0,37	0,38	0,39	0,40	0,42	0,46	(0,46)	1
0,1	(0,17)	(0,17)	(0,17)	(0,17)	(0,17)	(0,17)	(0,18)	(0,18)	(0,17)	0,52	1
	0,92	0,92	0,92	0,92	0,93	0,93	0,94	0,94	0,96	(0,16)	1
0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0,99	1
										1	1
Поля ΔT (в скобках) и η ; $A = 10^4$, $t = 3$ с											
1,0	0	0	0	0	0	0	0	0	(0,24)	(0,19)	1
0,9	0	0	0	0	0	0	0	0	0,06	0,16	1
									(0,24)	(0,19)	1
0,8	0	0	0	0	0	0	0	0	0,06	0,16	1
									(0,25)	(0,20)	1
									0,06	0,15	

$z \cdot 10^5, \text{ м}$	$r \cdot 10^2, \text{ м}$										
	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	1,0
Поле C (в %); $A = 10^4, t = 1 \text{ с}$											
1,0	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5
0,9	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5
0,8	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5
0,7	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5
0,6	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5
0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5
0,4	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5
0,3	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5
0,2	0,64	0,64	0,64	0,65	0,65	0,65	0,66	0,67	0,69	0,73	0,73
0,1	1,12	1,12	1,12	1,12	1,13	1,14	1,15	1,15	1,17	1,22	1,22
0	0,45	0,45	0,45	0,45	0,45	0,45	0,46	0,46	0,47	0,49	0,49
Поле C (в %); $A = 10^4, t = 3 \text{ с}$											
1,0	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,52	0,55	0,22
0,9	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,52	0,55	0,22
0,8	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,51	0,52	0,56	0,23

Таблица 13

ПЕРВИЧНАЯ СТРУКТУРА ОБРАЗЦА (ФУНКЦИЯ N). $A = 10^4$, $t = 9$ с

$z \cdot 10^2$, м	$r \cdot 10^2$, м					
	0	0,2	0,4	0,6	0,8	1,0
0	23 040	23 040	23 040	23 070	22 800	20 900
0,2	4796	4800	4820	4880	5000	14 240
0,4	3230	3940	3950	3970	4000	11 550
0,6	3370	3380	3400	3430	3400	11 460
0,8	3190	3200	3218	3180	3030	11 670
1,0	3270	3280	3270	3180	2970	11 700

при увеличении A на один порядок. Существенное влияние параметр A оказывает на значение функции N . В табл. 11 приводятся значения N в характерных точках образца, полученные при различных A . Естественно, что с увеличением A структура двухфазной зоны становится более дисперсной. Функция N возрастает в 2,3 раза при увеличении A на один порядок.

Таким образом, кинетический коэффициент существенно влияет на структуру и переохлаждение в двухфазной зоне, в то время как основные функции T , C , η остаются почти неизменными при изменении A на два порядка. В табл. 12

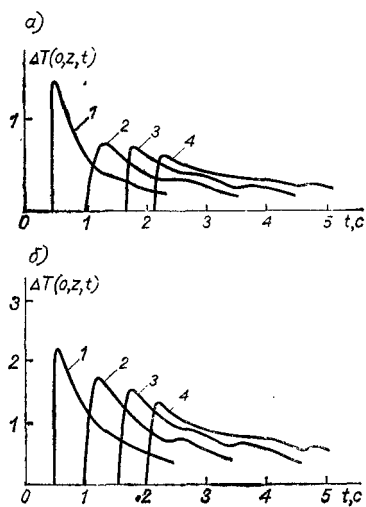


Рис. 30. Зависимость переохлаждения от времени в различных точках образца:

1 — $x = 10^{-2}$; 2 — $x = 0,8 \cdot 10^{-2}$;
 3 — $x = 0,6 \cdot 10^{-2}$; 4 — $x = 0,4 \cdot 10^{-2}$ м. а — $A = 10^4$; б — $A = 10^5$.

приведены подробные поля функций η , ΔT , C для трех характерных моментов времени процесса кристаллизации при $A = 10^4$. Таблица наглядно иллюстрирует размеры, структуру и характер движения двухфазной зоны в процессе кристаллизации расплава. В табл. 13 представлены расчетные данные, характеризующие дисперсность полностью закристаллизовавшегося слитка в различных его частях. Рис. 30 характеризует поведение переохлаждения в различных точках двухфазной зоны на оси слитка при различных значениях A .

В заключение приведем краткое описание программы и ее работы. Программа составлена на языке ФОРТРАН, расчеты проводились на ЭВМ ЕС-1022. Согласно вышеприведенной расчетной схеме вначале вычислялись поля функций T и C , а затем — ΔT , η и η' .

Расчеты проводились с удвоенной точностью, так как при вычислении функции ΔT для обеспечения устойчивости процесса счета требуется высокая точность.

Неустойчивость схемы возникала в основном из-за появления отрицательного переохлаждения в двухфазной зоне. Устойчивость схемы достигалась уменьшением шага по времени. Так, при $\beta = 1$ необходимо брать $\tau = 0,005$ с, при увеличении β шаг τ необходимо уменьшать обратно пропорционально β . Для расчета одного варианта до полной кристаллизации образца требовалось 50—70 мин машинного времени (при $\beta = 1$). В вариантах, когда $\alpha_T \neq 0$, с появлением размытой двухфазной зоны счет более устойчив, и при увеличении β или A не требуется уменьшения шага τ . При расчетах вариантов с учетом кинетики необходимо значительно больше машинного времени, так как в этом случае усложняются расчеты полей η и η' . Для расчета одного варианта до полной кристаллизации образца требовалось 2—3 ч машинного времени.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Авдонин Н. А. Исследование переохлаждения и колебаний фронта кристаллизации в нестационарной тепловой модели процесса направленной кристаллизации слитка.— В кн.: Тепло- и массоперенос. Т. 8. Минск, 1972, с. 245—252.
2. Авдонин Н. А. Наличие переохлажденной зоны в тепловой модели процесса направленной кристаллизации слитка.— Физика и химия обработки материалов, 1972, № 4, с. 22—29.
3. Авдонин Н. А. Описание процессов затвердевания бинарных систем с учетом кинетики объемной кристаллизации.— Вопр. теории кристаллизации, 1974, вып. 1, с. 56—74. (Рига).
4. Авдонин Н. А. Теория двухфазной зоны и обобщенное решение задачи Стефана.— Вопр. теории кристаллизации, 1974, вып. 1, с. 39—55. (Рига).
5. Авдонин Н. А. К вопросу о переохлаждении в объеме расплава при движении фронта кристаллизации, лимитируемом условиями теплоотвода.— В кн.: Рост кристаллов. Т. 2. Ереван, 1975, с. 268—272.
6. Авдонин Н. А. Теория обобщенного решения задачи кристаллизации бинарной системы.— Прикл. задачи теорет. и мат. физики, 1977, вып. 1, с. 3—26. (Рига).
7. Авдонин Н. А., Карножицкий В. Н., Клявиць Я. Я. Постановка задачи, описывающей гетерофазную кристаллизацию бинарных сплавов.— В кн.: Оптимизация теплофизических процессов литья. Киев, Изд-во АН УССР, 1977, с. 99—111.
8. Авдонин Н. А., Кояло И. Э. Расчет общей задачи кристаллизации с учетом зарождения и динамики роста кристаллов в объеме переохлажденного расплава.— Вопр. теории кристаллизаций, 1975, вып. 2, с. 68—77. (Рига).
9. Авдонин Н. А., Карножицкий В. Н., Бойтманис А. Э. Анализ процесса гетерофазной кристаллизации сплавов.— Оптимизация теплофиз. процессов литья, 1979, вып. 2, с. 56—68. (Киев).
10. Авдонин Н. А., Мартузан Б. Я., Пыленкова Э. Н. Сравнительная оценка различных вариантов метода переменных па-

- правлений при решении стационарных задач.— Латв. мат. ежегодник, 1966, вып. 2, с. 5—17.
11. Авдонин Н. А., Мартузан Б. Я., Пылеикова Э. Н. и др. Решение тепловой задачи, связанное с процессом направленной кристаллизации слитков.— Латв. мат. ежегодник, 1970, вып. 7, с. 3—15.
 12. Авдонин Н. А., Черепанова Т. А. Учет кинетики объемного зародышеобразования в задаче о кристаллизации расплава.— Изв. АН ЛатвССР. Сер. физ. и техн. наук, 1973, № 6, с. 36—43.
 13. Авдонин Н. А., Черепанова Т. А. К вопросу об определении скорости объемной кристаллизации в расплаве.— Изв. АН ЛатвССР. Сер. физ. и техн. наук, 1974, № 1, с. 48—51.
 14. Авдонин Н. А., Черепанова Т. А. К постановке задачи о кристаллизации расплава с учетом объемного зародышеобразования.— Вопр. теории кристаллизации, 1974, вып. 1, с. 6—17. (Рига).
 15. Алфинцев Г. А., Овсиенко Д. Е., Стойчев Н. В., Маслов В. В. Влияние кремния на переохлаждение железа и структура слитков железокремнистых сплавов после разных переохлаждений.— В кн.: Кинетика и механизм кристаллизации. Минск, Наука и техника, 1973, с. 332—337.
 16. Антимиров М. Я. Приближенное решение задачи кристаллизации расплава при погружении в него пластинки, цилиндра и шара.— Латв. мат. ежегодник, вып. 4, 1966, с. 123—126.
 17. Бадинтер Е. Я., Берман Н. Р., Драбенко И. Ф. и др. Литой микропровод и его свойства. Кишинев, Штиинца, 1973. 318 с.
 18. Бахвалов Н. С. Осредненные характеристики тел с периодической структурой.— ДАН, 1974, т. 218, № 5, с. 1046—1048.
 19. Бахвалов Н. С. Осреднение дифференциальных уравнений с частными производными с быстроосциллирующими коэффициентами.— ДАН, 1975, т. 221, № 3, с. 516—519.
 20. Борисов В. Т. Кристаллизация бинарного сплава при сохранении устойчивости.— ДАН, 1961, т. 136, № 3, с. 583—586.
 21. Борисов В. Т. Двухфазная зона при кристаллизации сплава в нестационарном режиме.— ДАН, 1962, т. 142, № 3, с. 581—583.
 22. Борисов В. Т., Виноградов В. В., Духин А. И. и др. О применимости теории квазиравновесной двухфазной зоны к описанию кристаллизации слитка.— Изв. АН СССР. Металлы, 1971, № 6, с. 104—109.
 23. Борисов В. Т., Виноградов В. В., Тяжелыникова И. Л. Квазиравновесная теория двухфазной зоны и ее применение к затвердеванию сплавов.— Изв. высш. учеб. заведений. Черная металлургия, 1977, № 5, с. 127—134.
 24. Борисов В. Т., Виноградов В. В., Тяжелыникова И. Л. Современное состояние квазиравновесной теории двухфазной зоны и ее применение к затвердеванию сплавов.— В кн.: Оптимизация теплофизических процессов литья. Киев, 1977, с. 39—58.

25. Борисов В. Т., Виноградов В. В., Тяжелыникова И. Л., Уразаев Р. А. Математическое описание кристаллизации слитка с учетом фазовых превращений.— Непрерывная разливка стали, 1975, вып. 3, с. 87—98. (М.)
26. Борисов В. Т., Дураченко А. М., Духин А. И. и др. Исследование неравновесных явлений при кристаллизации сплавов и их влияние на формирование структуры.— Пробл. металловедения и физики металлов, 1976, вып. 3, с. 85—92. (М.)
27. Борисов В. Т., Матвеев Ю. Е. Кристаллизация тонких слоев переохлажденного галлия.— Кристаллография, 1969, т. 14, вып. 5, с. 895—899.
28. Борисова Л. А., Желиховская Э. Н. К вопросу о кинетике кристаллизации арсенида галлия из переохлажденных расплавов.— Прил. к журн. «Изв. высш. учеб. заведений. Физика», 1969, № 5, вып. 2, с. 12—15.
29. Будаков Б. М., Гольдман Н. А., Егорова А. В., Успенский А. Б. Метод выпрямления фронтов для решения задач типа Стефана в многомерном случае.— Вычисл. методы и программирование, 1967, вып. 8, с. 103—120. (М.)
30. Будаков Б. М., Гольдман Н. А., Успенский А. Б. Разностные схемы с выпрямлением фронтов для решения многофронтных задач типа Стефана.— Вычисл. методы и программирование, 1967, вып. 6, с. 206—216. (М.)
31. Будаков Б. М., Соловьев Ф. П., Успенский А. Б. Разностные методы со сглаживанием коэффициентов для решения задач Стефана.— Журн. вычисл. математики и мат. физики, 1965, т. 5, № 5, с. 828—840.
32. Васильев Ф. П. О методе конечных разностей для решения однофазной задачи Стефана.— Журн. вычисл. математики и мат. физики, 1963, т. 3, № 5, с. 218—225.
33. Васильев Ф. П., Успенский А. Б. Разностный метод решения двухфазной задачи Стефана.— Журн. вычисл. математики и мат. физики, 1963, т. 3, № 5, с. 874—886.
34. Воронков В. В. Скорость образования зародышей с учетом диффузии и теплопроводности.— Кристаллография, 1970, т. 15, вып. 6, с. 1120—1126.
35. Голод В. М. Исследование механизма и кинетики выделения твердой фазы при неравновесной кристаллизации сплавов.— В кн.: Структура фаз, фазовые превращения и диаграммы состояния металлургических систем. М., Наука, 1974, с. 84—89.
36. Градштейн И. С., Рыжик И. Н. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М., Изд-во физико-математической литературы, 1962. 1095 с.
37. Гулянь-кунь. О поведении решения задачи Стефана при неограниченном возрастании времени.— ДАН, 1961, т. 138, № 2, с. 263—266.
38. Дачев А. В. О линейной задаче Стефана.— ДАН, 1947, т. 58, № 4, с. 563—566.
39. Дачев А. В. О линейной задаче Стефана. Случай чередующихся фаз.— ДАН, 1950, т. 75, № 5, с. 631—634.

40. Дацев А. В. О двумерной задаче Стефана.— ДАН, 1955, т. 101, № 3, с. 441—444.
41. Демченко В. Ф. Некоторые математические модели кинетики фазовых превращений.— Физика и химия обработки материалов, 1970, № 4, с. 124—131.
42. Дёч Г. Руководство к практическому применению преобразования Лапласа. М., Наука, 1965. 287 с.
43. Диткин В. А., Прудников А. П. Справочник по операционному исчислению. М., Высшая школа, 1965. 465 с.
44. Добровольская В. И., Мартузан Б. Я., Мартузан Э. Н., Ратников Д. Г. Тепловые поля бестигельной зонной плавки с учетом работы индуктора и чертания поверхности жидкой зоны.— Физика и химия обработки материалов, 1973, № 6, с. 43—46.
45. Журавлев В. А., Китаев Е. М. Теплофизика формирования непрерывного слитка. М., Металлургия, 1974. 210 с.
46. Зельдович Я. Б. К теории образования новой фазы. Кавитация.— Журн. эксперим. и теорет. физики, 1942, т. 12, вып. 11—12, с. 525—536.
47. Иванцов Г. П. Решение задачи об охлаждении полупространства, заполненного материалом с n критическими точками и различными термическими свойствами между ними.— ДАН, 1957, т. 59, № 4, с. 525—527.
48. Иванцов Г. П. Температурное поле вокруг шарообразного, цилиндрического и иглообразного кристалла, растущего в переохлажденном расплаве.— ДАН, 1947, т. 58, № 4, с. 567—569.
49. Иванцов Г. П. «Диффузионное» переохлаждение при кристаллизации бинарного сплава.— ДАН, 1951, т. 81, № 2, с. 179—181.
50. Карслоу Г., Егер Д. Теплопроводность твердых тел. Пер. с англ. М., Наука, 1964. 487 с.
51. Кашчиев Д. Б. О дисперсности новой фазы на начальных стадиях суммарной кристаллизации.— В кн.: Механизм и кинетика роста кристаллов. Ч. 1. Ереван, 1972, с. 82-85.
52. Коздоба Л. А. Методы решения задач затвердевания (обзор).— Физика и химия обработки материалов, 1973, № 2, с. 41—59.
53. Колмогоров А. Н. К статистической теории кристаллизации металлов.— Изв. АН СССР. Отд-ние мат. и естеств. наук, 1937, т. 3, с. 355—361.
54. Конаков П. К., Веревошкин Г. Е., Горяинов Л. А. и др. Тепло- и массообмен при получении монокристаллов. М., Металлургия, 1971. 420 с.
55. Кояло М. В. Исследование возможности переохлаждения расплава в двумерном случае.— В кн.: Вопросы теории кристаллизации, 1974, вып. 1, с. 75—84. (Рига).
56. Курант Р., Гильберт Д. Методы математической физики. Пер. с англ. Т. 1. М., Изд-во технико-теоретической литературы, 1951. 476 с.
57. Ладыженская О. А. Краевые задачи математической физики. М., Наука, 1973. 406 с.

58. Ладыженская О. А., Солонников В. А., Уралъ-цсва Н. Н. Линейные и квазилинейные уравнения параболического типа. М., Наука, 1967. 736 с.
59. Ландау А. И. К вопросу о волнообразном характере распределения примеси вдоль длины растущего монокристалла.— Физика металлов и металловедение, 1958, т. 6, вып. 1, с. 148—155.
60. Лихт М. К., Кузьминская С. Б. О затвердевании бинарных сплавов в интервале температур.— Физика металлов и металловедение, 1961, т. 11, вып. 6, с. 878—882.
61. Лыков А. В. Теория теплопроводности. М., ГИТТЛ, 1952. 585 с.
62. Любов Б. Я. Теория кристаллизации в больших объемах.— В кн.: Рост и дефекты металлических кристаллов. Киев, Наукова думка, 1972, с. 9—23.
63. Любов Б. Я. Теория кристаллизации в больших объемах. М., Наука, 1975. 255 с.
64. Мартузан Б. Я. К численному определению оптимальных параметров процесса зонной бестигельной плавки.— Латв. мат. ежегодник, 1970, вып. 8, с. 161—169.
65. Недзвецкий Ю. Э., Ратников Д. Г., Авдони Н. А., Мартузан Б. Я. Расчет температурного поля при индукционной бестигельной плавке кремния.— Инж.- физ. журн., 1967, т. 13, № 2, с. 225—231.
66. Никитенко Н. И. Исследование нестационарных процессов тепло- и массообмена методом сеток. Киев, Наукова думка, 1971. 226 с.
67. Овсиенко Д. Е., Костюченко В. П., Маслов В. В., Алфинцев Г. А. Влияние переохлаждения на структуру слитка никеля.— В кн.: Кинетика и механизм кристаллизации. Минск, Наука и техника, 1973, с. 75—79.
68. Олейник О. А. Об одном методе решения общей задачи Стефана.— ДАН, 1960, т. 135, № 5, с. 1054—1057.
69. Олейник О. А. О задаче Стефана.— В кн.: Материалы первой летней математической школы. Т. 2. Киев, Наукова думка, 1964, с. 38—45.
70. Олейник О. А. О распространении тепла в многомерных дисперсных средах.— В кн.: Задачи математической физики и механики. М., 1976, с. 224—236.
71. Оптимизация режимов затвердевания непрерывного слитка. Рига, Зинатпе, 1977. 135 с.
72. Петровский И. Г. Лекции об уравнениях с частными производными. М., Наука, 1961. 432 с.
73. Ратников Д. Г., Добровольская В. И., Недзвецкий Ю. Э. Тепловые задачи при бестигельной зонной плавке.— В кн.: Промышленное применение токов высокой частоты в электротермии. М., Машгиз, 1961, с. 124—129.
74. Самарский А. А. Введение в теорию разностных схем. М., Наука, 1971. 552 с.

75. Самарский А. А., Моисеенко Б. Д. Экономичная схема сквозного счета для многомерной задачи Стефана.— Журн. вычисл. математики и мат. физики, 1965, т. 5, с. 816—827.
76. 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.
77. Справочная математическая библиотека. Высшая алгебра. М., Физматгиз, 1962, 300 с.
78. Стрикленд-Констебл Р. Ф. Кинетика и механизм кристаллизации. Пер. с англ. Л., Недра, 1971. 420 с.
79. Сулимцев И. И., Матвеев Ю. Е., Борисов В. Т., Голиков И. Н. Экспериментальное определение диффузионного переохлаждения в двухфазной зоне бинарного сплава.— В кн.: Проблемы стального слитка. М., Металлургия, 1976, т. 6, с. 76—82.
80. Темкин Д. Е. Температурное поле в кристаллизующемся слитке цилиндрической формы.— Инж.-физ. журн., 1962, № 4, с. 89—92.
81. Тихонов А. Н., Самарский А. А. Уравнения математической физики. М., Наука, 1966. 724 с.
82. Тихонов А. Н., Швидковский Е. Г. К теории непрерывного слитка.— Журн. техн. физики, 1947, т. 17, вып. 2, с. 161—176.
83. Тяжелникова И. А., Борисов В. Т., Борисов В. И. Кристаллизация цилиндрической ячейки двухфазной зоны.— Изв. АН СССР. Металлы, 1970, № 5, с. 122—128.
84. Уилкоккс В., Дьюити Р. Макроскопическая форма фронта кристаллизации в процессе затвердевания. Пер. с англ.— Теплопередача, 1968, т. 88, № 1, с. 49—56.
85. Френкель Я. И. Кинетическая теория жидкостей. М., Изд-во АН СССР, 1945. 342 с.
86. Фридман А. Уравнения с частными производными параболического типа. М., Мир, 1968. 427 с.
87. Хакимов Х. Р. Замораживание грунтов в строительных целях. М., Недра, 1962. 310 с.
88. Щелкин Ю. Ф., Смирнов В. А. К вопросу постановки задач расчета температурного поля слитка в процессе выращивания из расплава.— В кн.: Научные труды Гиредмета. Т. 55. М., Металлургия, 1974, с. 42—55.
89. Яиенко Н. Н. Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики. Новосибирск, Наука, 1967. 220 с.
90. Albasiny E. L. The solution of non-linear heat conduction problems on the pilot ace.— Proc. Inst. Electr. Eng., 1956, vol. 103, N 1, p. 67—83.
91. Babuska I. Solution of interface problems by homogenization. III.— SIAM J. Math. Anal., 1977, vol. 8, N 6, p. 923—937.
92. Crank I. Two methods for the numerical solution of moving-boundary problems in diffusion and heat flow.— Quart. J. Mech. Appl. Math., 1957, vol. 10, N 2, p. 220—231.

93. Douglas I. A uniqueness theorem for the solution of a Stefan problem.— Proc. Amer. Math. Soc., 1957, vol. 8, N 2, p. 402—408.
94. Douglas I., Gallie T. On the numerical integration of a parabolic differential equation subject to a moving boundary condition.— Duke Math. J., 1966, vol. 22, N 4, p. 557—571.
95. Evans G., Isaakson E., Macdonald I. Stefan-like problems.— Quart. Appl. Math., 1950, vol. 8, N 3, p. 123—129.
96. Lightfoot N. M. H. The solidification of molten steel.— Proc. London Math. Soc. Ser. 2, 1930, vol. 31, p. 97—116.
97. Lotkin M. The calculation of heat flow in melting solids.— Quart. Appl. Math., 1960, vol. 18, N 1, p. 102—119.
98. Rose M. E. A method for calculating solutions of parabolic equations with a free boundary.— Math. Comp., 1960, vol. 14, N 71, p. 249—256.
99. Stefan I. Über einige Probleme der Theorie der Wärmeleitung.— Sitzungsber. Wien. Akad. Wiss. Math. Naturw., 1889, Bd. 98, N 11a, S. 473—484.
100. Turnbull D., Fisher C. Rate of nucleation in condensed systems.— J. Chem. Phys., 1949, vol. 17, N 1, p. 71—79.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	5
Основные принятые обозначения	7
Глава 1. ПОСТАНОВКА ПРОБЛЕМЫ	9
Глава 2. ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАДАЧИ СТЕФАНА В КЛАС- СИЧЕСКОЙ ПОСТАНОВКЕ	16
2.1. Решение одномерной квазистационарной задачи процесса направленной кристаллизации	16
2.2. Решение нестационарной линеаризованной задачи	26
2.3. Анализ нестационарной нелинейной задачи	32
2.4. Численное решение задачи Стефана в классической поста- новке	40
2.5. Термодиффузионная задача в классической постановке	46
Глава 3. ОБОБЩЕННАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ В СЛУ- ЧАЕ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ОДНОКОМПОНЕНТНОГО РАС- ПЛАВА	54
3.1. Обобщенное решение задачи в обобщенной постановке	54
3.2. Анализ обобщенной постановки задачи на модельном при- мере направленной кристаллизации	64
3.3. Численное решение задачи в обобщенной постановке	67
Глава 4. ОБОБЩЕННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ КРИСТАЛ- ЛИЗАЦИИ БИНАРНОГО СПЛАВА	73
4.1. Теория квазиравновесной двухфазной зоны	74
4.2. Вывод осредненных уравнений	79
4.3. Обобщенная постановка задачи. Обобщенное решение	87
4.4. Параболичность системы уравнений по Петровскому	89
Глава 5. ПОСТРОЕНИЕ ОБОБЩЕННОГО РЕШЕНИЯ ЗА- ДАЧИ	92
5.1. Анализ модельного примера	93
5.2. Вывод априорных оценок	97
5.3. Конечно-разностный метод	102

Глава 6. ЗАДАЧА С УЧЕТОМ КИНЕТИКИ СПОНТАННОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ В ОБЪЕМЕ РАСПЛАВА	109
6.1. Определение скорости зарождения в случае спонтанной гомогенной кристаллизации	111
6.2. Учет влияния теплоотвода и диффузии на скорость роста зародыша	115
6.3. Определение кинетических коэффициентов по экспериментальным данным	125
Глава 7. ПРИМЕРЫ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ	128
7.1. Одномерная модель процесса направленной кристаллизации слитка	128
7.2. Расчет начальной стадии процесса кристаллизации при заданной скорости охлаждения	132
7.3. Расчеты процесса кристаллизации бинарного сплава с учетом дисперсных добавок; одномерная модель	140
7.4. Обобщенное решение задачи теории двухфазной зоны; двумерная модель	148
7.5. Численный анализ задачи спонтанной объемной кристаллизации в обобщенной постановке; двумерная модель	161
Список литературы	170

НИКОЛАЙ АЛЕКСЕЕВИЧ АВДОНИН
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ПРО-
ЦЕССОВ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ

Редактор *А. Тихомирова*

Художник *А. Омелянюк*

Художественный редактор *Г. Крутой*

Технический редактор *Э. Поча*

Корректор *А. Морозова*

ИБ № 507

Сдано в набор 27.02.79. Подписано в печатать 04.01.80. ЯТ 07029. Форма $81 \times 108 \frac{1}{2}$. Бумага типогр. № 1. Гарнигура литературная. Высокая печать. 5,63 физ. печ. л.: 9,16 усл. печ. л.: 7,61 уч.-изд. л. Тираж 1500 экз. Заказ № 9—694. Цена 65 к. Заказное.

Издательство «Зинатне», 226018, Рига, ул. Тургенева, 19

Отпечатано в типографии «Циня» Государственного комитета Латвийской ССР по делам издательств, полиграфии и книжной торговли, 226124, Рига, ул. Блауманя, 32.

Набрано и сматрицировано на Голодном предприятии республиканского производственного объединения «Полиграфкиппа» Госкомиздата УССР, 252057, Киев-67, ул. Довжиско, 3.

Н. А. Авдонин, кандидат физико-математических наук, заведующий отделом физико-технических проблем Вычислительного центра Латвийского ордена Трудового Красного Знамени государственного университета им. П. Стучки, специализируется в области математической физики, в течение ряда лет занимался задачами теории фильтрации и их применением к неизотермической фильтрации в нефтяных пластах. Его работы нашли применение при проектировании разработок нефтяных месторождений. С 1965 года исследует задачи с фазовыми переходами, в частности приложение классической задачи Стефана к описанию процессов выращивания монокристаллов.

В монографии развиваются обобщенные (нестефановские) подходы к описанию процессов кристаллизации. Введена обобщенная постановка задачи; показаны случаи, когда классическая и обобщенная постановки задач дают качественно различные решения (возникновение дисперсной двухфазной зоны); разработана теория обобщенного решения термодиффузионной задачи, описывающей кристаллизацию переохлажденного бинарного расплава; предложены эффективные численные методы решения указанных задач.

Книга может быть полезна для специалистов, занимающихся математической физикой, инженерно-технических работников, а также для преподавателей и студентов старших курсов, специализирующихся по прикладной математике.