

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ИНСТИТУТ
ПРОБЛЕМ БЕЗОПАСНОГО
РАЗВИТИЯ АТОМНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ

RUSSIAN ACADEMY OF
SCIENCES
NUCLEAR
SAFETY INSTITUTE

Препринт № IBRAE-95-11

Preprint IBRAE-95-11

А.Е. Аксенова, П.Н. Вабищевич, В.В. Чуданов,
А.Г. Чурбанов

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ПРОЦЕССОВ ЗАТВЕРДЕВАНИЯ
В ЗАДАЧАХ
ДИФФУЗИИ/КОНВЕКЦИИ**

Обзор

Москва
1995

Moscow
1995

УДК 536.24

Аксенова А.Е., Вабищевич П.Н., Чуданов В.В., Чурбанов А.Г. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ЗАТВЕРДЕВАНИЯ В ЗАДАЧАХ ДИФФУЗИИ/КОНВЕКЦИИ. Обзор. Препринт № IBRAE-95-11. Москва: Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН, 1995. 30 с.

Аннотация

Дается обзор моделей для описания течений в "mushy" зоне, образующейся в процессе затвердевания бинарных систем. Рассматривается энтальпийная формулировка проблемы на фиксированных сетках. Приводится обзор основных численных методов решения таких задач со свободной границей — методов сквозного счета.

©ИБРАЭ РАН, 1995

Aksenova A.E., Vabishchevich P.N., Chudanov V.V., Churbanov A.G. NUMERICAL SIMULATION OF SOLIDIFICATION PROCESSES IN DIFFUSION/CONVECTION PROBLEMS. Review. Preprint IBRAE-95-11. Moscow: Nuclear Safety Institute, 1995. 30 p.

Abstract

A review of heat and mass transfer models in the mushy region formed during binary system solidification is presented. Enthalpy formulation of problem on fixed grids is considered. A review of basic numerical techniques for solving of these problems with a moving boundary (phase change interface), namely, methods with moving boundary-smearing are considered.

©Nuclear Safety Institute, 1995

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ЗАТВЕРДЕВАНИЯ В ЗАДАЧАХ ДИФФУЗИИ/КОНВЕКЦИИ

Обзор

Аксенова А.Е., Вабищевич П.Н., Чуданов В.В., Чурбанов А.Г.

ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ БЕЗОПАСНОГО РАЗВИТИЯ АТОМНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ

113191 Москва, ул. Б.Тулская, 52

тел.: (095) 952-24-21, факс: (095) 230-20-29, эл. почта: pbl@ibrae.msk.su

Введение

Современный уровень развития вычислительной техники и численных методов позволяет более детально исследовать многие физические и технологические процессы и явления. В последние годы непрерывно возрастает число работ, посвященных разработке численных методов для сопряженных задач тепло- и массопереноса при фазовом переходе жидкость-твердое тело с учетом конвекции в жидкой фазе и свободной границей между фазами. Соответственно, возрастает и число работ, посвященных численному моделированию физических и технологических процессов, при которых встречаются указанные выше явления.

Впервые к проблеме численного моделирования фазовых переходов с учетом конвекции в жидкой фазе обратились в связи с исследованием металлургических процессов. При затвердевании или плавлении относительно больших объемов металлов и сплавов роль конвекции становится существенной [1, 2]. В настоящее время такие задачи приходится решать при анализе литья и плавления металлов, выращивания кристаллов, аккумуляции энергии, лазерной обработки металлов, замораживания пищевых продуктов, получения пластмасс, в геологии и т. д.

Естественно, огромное количество опубликованных работ в данной области требует осмысления, анализа и классификации, в связи с чем все чаще появляются обзоры литературы по моделированию фазовых превращений. Так, например, формулировки и классификации задач затвердевания и плавления с учетом и без учета конвекции, преимущественно с физической точки зрения, обсуждаются в работе Basu и Date [3]. Анализ англоязычной литературы по методам сквозного счета для численного решения задач фазового перехода без учета конвекции представлен в работе [4] Volter с соавторами. Обзоры литературы по математическому моделированию и экспериментальному исследованию задач кристаллизации периодически публикуются Viskanta (см., например, [5]). С методологическими проблемами моделирования процессов кристаллизации, а также качеством и возможностью программного обеспечения для решения такого типа задач можно познакомиться в обзорной работе Каппан с соавторами [6].

Целью настоящей работы является обсуждение основных подходов к численному решению задач фазового перехода с учетом конвекции на основе современного уровня развития методов прикладной и вычислительной математики. Приводится обзор моделей для переходной от твердого к жидкому состоянию вещества зоны (mushy region), а также дается обзор численных методов, основанных на фиксированных сетках для численного решения задач конвекции/диффузии.

1 Обзор моделей течений в mushy зоне

Типичным примером затвердевающей системы может служить бинарная система. Рассмотрим область прямоугольного сечения с тремя теплоизолированными твердыми стенками, заполненную жидкой бинарной массой. В момент времени $t = 0$ на левой грани прямоугольной полости задается температура $T_{cold} < T_L$ меньшая, чем температура находящейся в полости жидкости.

В результате чего, по прошествии некоторого времени, в полости, первоначально заполненной жидким веществом, формируются три области: полностью твердая, mushy зона и полностью жидкая.

Mushy зона представляет собой переходную от твердого к жидкому состоянию вещества область, имеющую различную структуру. Так, например, в металлах mushy зона имеет ветвисто-кристаллическую структуру. Границы mushy зоны определяются соответственно твердой и жидкой изотермами. В процессе затвердевания растворенное вещество вытесняется затвердевающими дендритами в область mushy зоны. На локальном уровне оно перераспределяется посредством диффузии. Такое перераспределение растворенного вещества относится к явлениям микросегрегации, т.е. к микрокомпозиционным изменениям (выделению тяжелой фракции). Одновременно с этими процессами в mushy зоне присутствуют конвективные течения растворенного вещества, которые уносят последнее из мест контакта, что приводит к явлению макросегрегации. С практической точки зрения, природа и продолжительность макросегрегации являются более важными по сравнению с микросегрегацией, поскольку они определяют окончательную картину процесса затвердевания (результаты исследования природы макросегрегации можно найти в работах [7]–[12]).

Помимо указанного разделения, модели затвердевающих систем могут быть отнесены к одному из трех следующих классов: макро, микро-макро, микро.

Макро. В моделях этого класса уделяется особое внимание механизмам тепло- и массопереноса на макроскопическом уровне. Они предназначены для предсказания крупномасштабных особенностей процесса затвердевания, т. е. времени затвердевания, различных видов переноса и т. д. В то же время, события, сопровождающие явления макроскопического затвердевания, могут оказывать существенное влияние на течение микроскопических явлений, что необходимо принимать во внимание при создании моделей.

Микро-Макро. В “микро-макро” моделировании основной целью является предсказание микроструктуры на основе использования моделей микроскопического роста и зародышеобразования. Таким моделям требуется в качестве входного параметра скорость охлаждения, которая получается из макроскопических моделей переноса тепла.

Микро. Многие модели затвердевания являются чисто микроскопическими моделями и имеют масштаб длины сопоставимый с размерами ветви дендрита в твердо/жидкой mushy зоне. В таких моделях макроскопическими особенностями процесса затвердевания можно пренебречь. Они могут быть использованы как микро компоненты в микро-макро моделях и как основа для уравнивания составляющих в макро моделях.

Первоначально модели затвердевающих систем были одномерными и учитывали только теплопроводностные процессы [13, 14]. В дальнейшем, возрастающий интерес к двух- и трехмерным задачам привел к созданию моделей, объединяющих в себе уравнения Навье-Стокса и уравнение энергии. Примером может служить работа Spagow с соавторами [15], в которой исследовались конвективно-диффузионные изотермические фазовые превращения. Дальнейшее исследование в этом направлении можно подразделить на следующие две категории:

- 1) использующие температурную формулировку вместе с изменяющимися сетками [16]–[18];
- 2) применяющие энтальпийную формулировку для фиксированных вычислительных сеток [19]–[21].

Указанные работы посвящены исследованию проблемы изотермических фазовых превращений (происходящих при определенной температуре), которые характерны для чисто металлических систем. В то время как в бинарных сплавах, являющихся типичным примером затвердевающих систем, фазовые изменения происходят в температурном интервале. Такие затвердевающие системы характеризуются наличием mushy зоны.

Первые модели, учитывающие эффект mushy зоны, были представлены в работах [22, 23]. В них для трактования природы mushy зоны предполагалось отсутствие зависимости между массовой долей жидкости (f_l) и ее температурой (T). В действительности же, в бинарных системах соотношение ($f_l - T$) является функцией концентрации растворенного вещества, благодаря чему и происходит макросегрегация, т. е. перераспределение растворенного вещества в результате затвердевания. Поэтому, для моделирования затвердевающих бинарных систем помимо

решения уравнения Навье–Стокса и уравнения энергии необходимо решать уравнение переноса растворенного вещества. Примеры таких моделей можно найти в работах [24]–[30]. Заметим, что в этих работах рассматриваются однофазные модели бинарных затвердевающих систем в терминах средних или смешанных величин, которые предназначены для моделирования процесса затвердевания бинарного столбчато–дендритного сплава/смеси в предположении локального равновесия. В действительности затвердевающие системы настолько многообразны, что невозможно одним предположением описать все существующие ситуации. Поэтому используются несколько физических предположений, позволяющих отнести исследуемый процесс к тому или иному классу моделей. В этой связи важно обратить внимание на различие между общей формулировкой проблемы и конкретными моделями. Так уравнения переноса, учитывающие двухфазную природу рассматриваемого процесса, представляют общую формулировку проблемы, использование которой с учетом дополнительных предположений для решения конкретной задачи дает в результате конкретную модель.

Обычно моделирование двухфазных течений сводится к написанию своей системы уравнений для каждой фазы, которые затем объединяются в единую систему с помощью множителей межфазного переноса. Такой подход был предложен Carver [31] и Ishii и Mishima [32] и получил название модели двух сред.

Для затвердевающей бинарной системы в декартовых координатах справедливы следующие уравнения модели двух сред:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_s g_s \phi_s) + \nabla(\rho_s g_s \mathbf{u}_s \phi_s) = \nabla(g_s \Gamma_s \phi_s) + \text{Source} + \text{межфазный множитель}; \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_l g_l \phi_l) + \nabla(\rho_l g_l \mathbf{u}_l \phi_l) = \nabla(g_l \Gamma_l \phi_l) + \text{Source} - \text{межфазный множитель}; \quad (2)$$

здесь параметры ϕ_s, ϕ_l используются для обозначения любой консервативной переменной (энтальпии, концентрации, движения), остальные переменные обозначают $g_s, g_l, \mathbf{u}_s, \mathbf{u}_l, \rho_s, \rho_l, \Gamma_s, \Gamma_l, f_s, f_l$ — объемные доли твердого и жидкого, скорости твердого и жидкого, плотности твердого и жидкого, коэффициенты диффузии твердого и жидкого, объемные доли твердого и жидкого связанные с массовой долей с помощью соотношения

$$\rho f_s = \rho_s g_s \quad \text{или} \quad \rho f_l = \rho_l g_l,$$

где

$$\rho = \rho_s g_s + \rho_l g_l.$$

Слагаемое Source в уравнениях (1), (2) учитывает влияние дисперсионных потоков и градиенты давления.

С помощью описанных ниже подстановок из уравнений (1), (2) можно получить полные системы уравнений для каждой из фаз.

Так для получения уравнения сохранения массы множитель ϕ полагается равным 1, а сомножителю Γ присваивается значение 0.

Для записи уравнения сохранения движения множитель ϕ заменяется на соответствующую компоненту скорости u_s, v_s, u_l, v_l . Сомножитель Γ в этом случае полагается равным динамической вязкости μ . Общее давление P разделяется между твердой и жидкой фазами и градиент давления в виде слагаемых $\partial P/\partial x$ и $\partial P/\partial y$ добавляется в соответствующие уравнения движения для u и v .

Уравнение сохранения энтальпии для каждой из фаз может быть получено из (1), (2), если в производной по времени и в конвективном слагаемом заменить сомножитель ϕ на общую энтальпию H , а в диффузионном слагаемом — на температуру T . При этом сомножитель Γ полагается равным теплопроводности K . Заметим, что энтальпия для каждой из фаз определяется, пренебрегая изменениями растворенного вещества и предполагая выполнение условий термодинамического равновесия на границе твердого и жидкого, с помощью соотношений

$$H_s = \int_0^T c_s dT, \quad H_l = \int_0^T c_l dT + L,$$

где L — скрытая теплота плавления, а c — удельная теплота.

И, наконец, для получения уравнения сохранения растворенного вещества из уравнений модели двух сред Γ полагается равным одному из разновидностей диффузионного коэффициента D , а ϕ обозначает в этом случае массовую долю разновидности растворенного вещества.

Далее, для перехода к однофазной модели вводятся следующие дополнительные предположения:

- 1) рассматриваемое течение является ньютоновским и ламинарным;
- 2) свойства в фазах гомогенны и изотропны;
- 3) влиянием малых возмущений (дисперсионными потоками и т.д.) пренебрегают;
- 4) предполагается выполнение условий термодинамического равновесия на межфазной границе твердое/жидкое, т.е. $T^* = T_s = T_l$, $C_s^* = \kappa C_l^*$, где C обозначает концентрацию растворенного вещества, κ — коэффициент сегрегации, а T — температуру. Подиндексы $*$, s , l указывают на принадлежность параметра соответственно интерфейсной (твердое/жидкое) границе, твердой и жидкой фазе.

Приведенные предположения являются общими для представляемых ниже моделей.

В свою очередь каждая конкретная модель использует свои дополнительных предположения.

С учетом вышеизложенного уравнения для однофазной модели принимают вид:

уравнение сохранения массы:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho) + \nabla(\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (3)$$

уравнения сохранения движения:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \nabla(\rho \mathbf{u} u) = \frac{-\partial P}{\partial x} + \nabla(\mu^+ \nabla u) + F_x, \quad (4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \nabla(\rho \mathbf{u} v) = \frac{-\partial P}{\partial y} + \nabla(\mu^+ \nabla v) + F_y - \rho g_r, \quad (5)$$

уравнение сохранения энтальпии:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \nabla(\rho \mathbf{u} h) = \nabla\left(\frac{K^+}{c_s} \nabla h\right) + S_h, \quad (6)$$

уравнение сохранения растворенного вещества:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho C^+) + \nabla(\rho \mathbf{u} C^+) = \nabla(\rho D^+ \nabla C^+) + S_C, \quad (7)$$

Представленная выше система уравнений (3)–(7) записана в терминах энтальпии определяемой как

$$h = \int_0^T c_s dT$$

и массовой скорости

$$\rho \mathbf{u} = \rho_s g_s u_s + \rho_l g_l u_l.$$

При таком определении энтальпии $H_s = h$ и $H_l = h + \delta H$, где

$$\delta H = \int_0^T (c_l - c_s) dT + L,$$

$\nabla T = \nabla h / c_s$. Основные параметры в системе уравнений (3)–(7) маркированы символом $()^+$, а многочисленные источники S_h, S_C, F_x и F_y зависят от использования конкретных моделей, о которых речь пойдет ниже.

Рассматриваемые явления относятся к макроскопическим по масштабам и с этой точки зрения возможны два предельных случая:

- 1) твердое полностью растворяется (диспергируется) в жидкой фазе и скорости твердого и жидкого равны друг другу;
- 2) твердая матрица отделена от жидкой и либо остается неподвижной, т. е. $u_s = 0$, либо движется с предписанной скоростью. Оба эти случая сводятся к уравнениям (3)–(7) и, в дальнейшем, конкретные модели, полученные на базе этих уравнений, могут быть численно реализованы с помощью стандартных вычислительных схем для параболических уравнений.

Рассмотрим конкретные модели течения в mushy зоне.

Жидкостная модель mushy зоны (А): Эта модель применима к аморфным материалам, таким как парафин или стекло, и в ограниченной степени может быть использована для моделирования зоны равноосного затвердевания в металлургическом литье. В модели предполагается, что твердая часть полностью диспергируется в жидкой и движется вместе с ней, т. е. $u = u_s = u_l$. Учитывая это предположение двухфазные уравнения для твердой и жидкой фазы могут быть сведены к однофазной системе уравнений (3)–(7), исключая множитель межфазного переноса. Основные коэффициенты конкретной однофазной модели представлены в таблице 1.

Таблица 1: Модель А

<i>Параметры</i>	
Скорость системы	$\mathbf{u} = \mathbf{u}_l = \mathbf{u}_s$
Концентрация	$C^+ = C_s$
Вязкость	$\mu^+ = \mu_{eff} = \mu_s g_s + \mu_l g_l$
Диффузия растворенного вещества	$D^+ = \rho_s g_s D_s + \rho_l g_l D_l / \kappa$
Теплопроводность	$K^+ = g_s K_s + g_l K_l$
<i>Источники</i>	
в уравнении движения	$F_x = 0$ $F_y = 0$
в уравнении энтальпии	$S_h = \frac{-\partial}{\partial t}(\rho f_l \delta H) - \nabla(\rho f_l \mathbf{u} \delta H)$
в уравнении для растворенного вещества	$S_C = \frac{-\partial}{\partial t}[(1/\kappa - 1)\rho f_l C_s] - \nabla[(1/\kappa - 1)\rho f_l \mathbf{u} C_s]$
зависимость температуры/растворенное вещество	$T = \frac{T_L - (1 - f_l)(1 - \kappa)T_m}{[1 - (1 - f_l)(1 - \kappa)]}$ $T_L = T_m - (T_m - T_e)C_{mix}/C_e$

Столбчато–дендритная модель с дисперсионной микроструктурой (В): В этой модели предполагается, что твердая фаза отделена от жидкой и движется с предписанной скоростью (нулевой в статическом литье или ненулевой в случае непрерывного литья). В физическом смысле эта модель аппроксимирует столбчато–дендритную зону затвердевающего металлургического сплава. Ниже будет рассмотрена модель с нулевой предписанной скоростью, т. е. пример статического литья ($u_s = 0$). В этом случае массовая скорость будет равняться $\rho \mathbf{u} = \rho_l g_l \mathbf{u}_l$.

Предположение о дендритной структуре сплава относится к макромасштабным явлениям. Микроструктурные явления, также оказывающие важное влияние на окончательный, результат, приводят к двум возможным ситуациям. В первой, микроструктура моделируется как диспергирование твердого вещества в жидкой матрице. Коэффициенты, соответствующие этому случаю, представлены в таблице 2.

Таблица 2: Модель Б

<i>Параметры</i>	
Скорость системы	$\mathbf{u} = f_l \mathbf{u}_l$
Концентрация	$C^+ = C_s$
Вязкость	$\mu^+ = \mu_l \rho / \rho_l$
Диффузия растворенного вещества	$D^+ = \rho_s g_s D_s + \rho_l g_l D_l / \kappa$
Теплопроводность	$K^+ = g_s K_s + g_l K_l$
<i>Источники</i>	
в уравнении движения	$F_x = -\{(1/K_0)(1 - g_l)^2 / g_l^3 (\rho / \rho_l)\} u$ $F_y = -\{(1/K_0)(1 - g_l)^2 / g_l^3 (\rho / \rho_l)\} v$
в уравнении энтальпии	$S_h = \frac{-\partial}{\partial t} (\rho f_l \delta H) - \nabla (\rho \mathbf{u} \delta H)$
в уравнении для растворенного вещества	$S_C = \frac{-\partial}{\partial t} [(1/\kappa - 1) \rho f_l C_s] - \nabla [(1/\kappa - 1) \rho \mathbf{u} C_s]$
зависимость температуры/растворенное вещество	$T = \frac{T_L - (1 - f_l)(1 - \kappa) T_m}{[1 - (1 - f_l)(1 - \kappa)]}$ $T_L = T_m - (T_m - T_e) C_{mix} / C_e$

Уравнения переноса массы и энтальпии для этой модели получаются из уравнений модели двух сред (1), (2), в предположении $u_s = 0$ для каждой фазы.

Для записи уравнения движения однофазной модели использованы следующие дополнительные предположения [25]–[28], а именно:

- 1) в mushy зоне, в случае столбчато–дендритной структуры, действует закон Дарси [33]. Тогда выражения для F_x и F_y получаются из уравнений Carman–Kozeny для течений в пористой среде [23], [25]–[28];
- 2) твердая фаза свободна от внутренних напряжений;
- 3) вязкие напряжения малы и являются результатом локального градиента плотности;
- 4) плотность является постоянной в каждой фазе [25]–[28].

В этом случае получается однофазное уравнение движения, коэффициенты которого представлены в таблице 2.

Что касается уравнения переноса растворенного вещества, то оно получается при рассмотрении макроскопического баланса растворенного вещества в произвольном контрольном объеме внутри mushy зоны [29, 30, 34]:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho C_{mix}) + \nabla (\rho \mathbf{u} C_l) = \nabla (\rho_s g_s D_s \nabla C_s + \rho_l g_l D_l \nabla C_l), \quad (8)$$

где C_{mix} — параметр, полученный в результате пространственного осреднения по микроскопическому объему (см. [35]). Определяя микроскопический объем V как сумму объемных долей твердого и жидкого $V = V_s + V_l$, можем записать следующее выражение для C_{mix}

$$C_{mix} = \frac{\int \rho_l C_l dV_l + \int \rho_s C_s dV_s}{\rho V}. \quad (9)$$

В случае дисперсной микроструктуры предполагается что твердая матрица растворяется в жидкости и $C_{mix} = f_l C_l + f_s C_s$, где $C_s = \kappa C_l$ во всех точках внутри mushy зоны. Отсюда можно записать уравнение сохранения растворенного вещества, переписав уравнение (8) в терминах C^+ , D_{eff} , S_C (табл. 2).

Столбчато–дендритная модель с раздельной микроструктурой (В): На макроскопическом уровне эта модель идентична модели Б, т. е. mushy зона состоит из массива столбчатых дендритов. Однако в отличие от модели Б, микроструктура в этом случае представлена раздельными твердой и жидкой областями. Основные коэффициенты модели приведены в таблице 3.

Таблица 3: Модель В	
<i>Параметры</i>	
Скорость системы	$\mathbf{u} = f_l \mathbf{u}_l$
Концентрация	$C^+ = C_l$
Вязкость	$\mu^+ = \mu_l \rho / \rho_l$
Диффузия растворенного вещества	$D^+ = \rho_l g_l D_l$
Теплопроводность	$K^+ = g_s K_s + g_l K_l$
<i>Источники</i>	
в уравнении движения	$F_x = -\{(1/K_0)(1 - g_l)^2 / g_l^3 (\rho / \rho_l)\} u$ $F_y = -\{(1/K_0)(1 - g_l)^2 / g_l^3 (\rho / \rho_l)\} v$
в уравнении энтальпии	$S_h = \frac{\partial}{\partial t} (\rho f_l \delta H) - \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \delta H)$
в уравнении для растворенного вещества	$S_C = \frac{\partial}{\partial t} (\rho(1 - f_l) C_l) - \rho \kappa C_l \frac{\partial (\rho f_s)}{\partial t}$
зависимость температуры/растворенное вещество	$T = T_m - (T_m - T_e) C_l / C_e$

Уравнения переноса массы, энтальпии и уравнения для скорости в этой модели совпадают с уравнениями модели Б. Различие в моделях возникает при получении уравнения сохранения растворенного вещества, в частности, при определении величины C_{mix} . В данном случае вид выражения для этого коэффициента определяется механизмом локального переноса растворенного вещества на микроскопическом уровне. Перенос вещества на микроскопическом уровне может происходить следующими образом:

- 1) диффузия растворенного вещества на микроскопическом уровне предполагается бесконечной как в жидкой, так и в твердой области, в результате чего профиль концентрации будет однородным. Сказанное означает, что все твердое находится в равновесии с жидким и условия подобны тем, что используются в модели Б;
- 2) диффузия в жидкой области бесконечна (в этом случае концентрация растворенного вещества в жидкости будет однородной), а диффузия в твердой области равна нулю. Это предположение приводит к уравнению Scheil, применимому для рассмотрения многих металлургических ситуаций [1]. В предположении $V_s = g_s V$, из уравнения (9) можно получить выражение

$$\rho C_{mix} = \rho_l f_l C_l + \int_0^{g_s} C_s d\alpha, \quad (10)$$

где α вспомогательная переменная для выполнения интегрирования. Предполагая отсутствие локального проплавления, поскольку внутри твердого нет переноса растворенного вещества, концентрация в любой точке в твердой области остается равной концентрации на тот момент, когда процесс затвердевания только начался. Поэтому интегральная функция во втором слагаемом правой части уравнения (10) не зависит от времени. Кроме того, когда $\alpha = g_s(t)$, будет достигаться текущая позиция твердого фронта и $C_s = C_s^* = \kappa C_l$. Используя эти наблюдения и правило Лейбница можно получить следующее соотношение [95]

$$\frac{\partial (\rho C_{mix})}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} (\rho C_l) + \frac{\partial}{\partial t} (\rho (f_l - 1) C_l) + \kappa C_l \frac{\partial (\rho f_s)}{\partial t},$$

которое будучи подставлено в уравнение (9), в предположении нулевой диффузии в твердом, дает коэффициенты D^+ , S_C (табл. 3).

Зависимость температура/растворенное вещество: В случае модели А, для дисперсной микроструктуры (модель Б) и раздельной микроструктуры в предположении локального термодинамического равновесия, объединение соотношений для энтальпии и растворенного вещества достигается через равновесную фазовую диаграмму для бинарной системы (прямые ликвидус и солидус линии на фазовой диаграмме, см. рис. 1). В случае раздельной микроструктуры

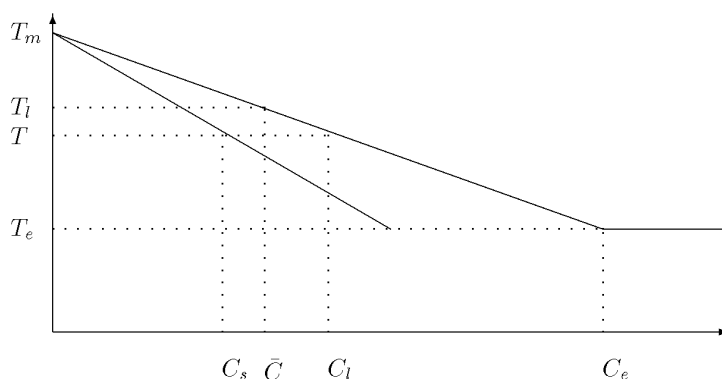


Рис. 1:

равновесия не существует, поэтому делаются дополнительные предположения с целью объединения указанных соотношений. Полагается, что температура микроскопических объемных фазовых изменений равняется температуре ликвидуса T_L , соответствующей текущей концентрации ликвидуса C_l . В этом случае температура в любой точке mushy зоны может быть связана с концентрацией жидкого через ликвидус линию на фазовой диаграмме.

Сравнение приведенных выше моделей было выполнено Voller с соавторами [95] на основе термодинамических данных примерно соответствующих характеристикам водного раствора хлорида аммония. Была исследована картина макросегрегации, по результатам которой были выявлены следующие основные особенности приведенных выше моделей:

в модели А (mushy fluid model) в уравнение движения вводится множитель эффективной вязкости, подобно работам [19, 20, 25, 29]. В отличие от ранее выполненных работ, в модели учтен перенос энтальпии и растворенного вещества в mushy зоне. Макросегрегационная картина, полученная с помощью этой модели, имеет более однородную природу по сравнению со столбчато-дендритной моделью. Модель может быть использована для моделирования зоны равноосного затвердевания в металлическом литье;

в модели Б (the columnar dendritic model) с дисперсной микроструктурой, эквивалентной однофазным моделям [24]–[30], используется предположение о локальном термодинамическом равновесии. Откуда следует, что на микроскопическом уровне либо диффузия твердого растворенного вещества будет бесконечной, либо твердое вещество будет полностью диспергироваться в жидком, что не всегда выполняется в предположении макроскопической природы столбчатой зоны;

в модели В (the columnar dendritic model) с раздельной микроструктурой, по некоторым аспектам подобной модели Б, отсутствует предположение о локальном равновесии растворенного вещества. Механизм переноса растворенного вещества в этой модели основан на раздельной микроструктуре в предположении нулевой диффузии твердого растворенного вещества, что наиболее соответствует физике столбчатой зоны. Предсказания макросегрегационной

структуры являются более строгими, нежели в модели Б. Результаты, полученные с помощью этой модели, хорошо согласуются с наблюдениями за многими металлургическими системами [1]. Кроме того, она лучше других моделей аппроксимирует микроскопические явления.

Описанные здесь модели, разработаны в 80-х годах, относятся к классу макромоделей, исследующих макромасштабные явления. В последнее время исследование этих явлений развивается по двум направлениям. С одной стороны, проводится сопоставление результатов полученных ранее моделей с экспериментами по моделированию затвердевания металлических бинарных сплавов (например, эксперимент, проведенный в 1992г. Shahani с соавторами [41]). До этого сравнение проводилось с растворами солей (водный раствор хлорида аммония), имеющими иную природу затвердевания, чем металлы. В качестве примера работ проводимых в указанном направлении можно назвать работы Prescott с соавторами [42, 43], в которых хорошо известная однофазная модель для затвердевающего бинарного сплава сравнивается с результатами эксперимента моделирующего затвердевание Pb–Sn сплава в кольцеобразной стальной форме. В результате сравнения было получено совпадение кривых охлаждения, а также конвективной картины течения. Однако при численном моделировании, в предположении осевой симметрии, не удалось предсказать перераспределения растворенного вещества.

Другое направление в исследовании макромасштабных явлений сводится к совершенствованию понимания макропроцессов путем более подробного исследования микромасштабных процессов. Исследование последних, в свою очередь, способствует лучшему пониманию микроявлений, и как уже упоминалось выше, позволяет применять полученные результаты как микрокомпоненты в микро–макро моделях, и составляет основу соответствующих уравнений в макромоделях. Последние работы в этом направлении посвящены анализу микрокомпозиционных изменений, касающихся вторичных дендритных ветвей [49]–[52], и предназначены для предсказания их микроструктуры и явлений микросегрегации.

Как уже упоминалось ранее, кристаллы в mushy зоне могут имеют ветвистую морфологию, сформированную первичными и вторичными дендритами. Масштаб длины для такой морфологии определяется размерами (длиной) вторичной дендритной ветви и его величина составляет порядка десяти микрон. В результате затвердевания бинарного сплава растворенное фазовое вещество диффундирует внутрь дендритного пространства, что позволяет отнести подобный процесс к явлению микросегрегации. Природа такой микроскопической массовой диффузии определяется локальной долей жидкости и, в конечном счете, макроскопическим режимом затвердевания. Многие существующие макроскопические модели затвердевания [44] используют соотношение доли жидкости и температуры, основанное на простейших предположениях микросегрегации — правиле Scheil и правиле рычага [53]. В действительности, микросегрегационное моделирование требует более всестороннего подхода, а именно объединения уравнений тепло– и массопереноса в процессе локального затвердевания между вторичными дендритными ветвями. Указанный процесс может быть описан с помощью рассмотрения одномерного плоского фронта затвердевания, контролируемого совместно тепло– и массодиффузией. В связи с чем проблема может быть легко идентифицирована как вариация хорошо документированной проблемы бинарного сплава [54]–[57], [13, 58]. Рассмотрим подробнее одну из последних разработок в области микромоделей, предложенную Voller с соавторами [59], как включающую в себя последние разработки в области микромоделирования и явлений микросегрегации.

Рассматривается бинарный сплав, находящийся в области $0 < x < X(t)$ в предположении, что:

- 1) размер области составляет примерно половину длины вторичной дендритной ветви;
- 2) в процессе затвердевания размеры вторичных дендритных ветвей увеличиваются.

Первоначально сплав находится в жидком состоянии и имеет однородный состав C_0 и температуру $T_i \geq T_{liq}$. В начальный момент времени $t = 0$ температура на левой границе опускается ниже температуру T_{sol} , вследствие чего, через некоторое время область разделяется на твердую и жидкую фазы а граница солидус/ликвидус $x = s(t) < X(t)$ начинает сдвигаться вправо.

Для написания модели используются следующие предположения:

- 1) тепло– и массоперенос осуществляются только посредством диффузии. Во многих системах диффузия тепла значительно превосходит по скорости распространения массовую диффузию [53], поэтому тепловой диффузией довольно часто пренебрегают [49]–[51]. Однако в этой модели, без нарушения общности, учтены оба вида диффузии;

- 2) солидус/ликвидус граница является выпуклой и имеет почти плоский фронт. Предыдущие исследования, проведенные Wilson с соавторами [56, 57] в предположении плоского фронта, показывают, что в некоторых ситуациях такое предположение дает физически необоснованные результаты;
- 3) равновесие, поддерживаемое на границе между твердой и жидкой фазами, определяется с помощью соотношений

$$T = F_l(C_l) = F_s(C_s) \quad (11)$$

и

$$C_s = \kappa_0 C_l, \quad (12)$$

где T — температура неразрывная на границе солидус/ликвидус, C — концентрация, F_s, F_l — солидус и ликвидус кривые фазовой диаграммы, κ_0 — коэффициент сегрегации;

- 4) в работах [45]–[50], [52], [54]–[57], [13, 58] предполагалось, что солидус и ликвидус на фазовой диаграмме являются прямыми линиями и отношение соединений является постоянным. В этой модели, следуя Roosz с соавторами [51], солидус и ликвидус на фазовой диаграмме представлены непрямыми линиями, а коэффициент κ_0 зависит от температуры на поверхности солидус/ликвидус;
- 5) содержание растворенного вещества в области $0 < x < X(t)$ сохраняется при начальном состоянии C_0 , т.е.

$$\frac{1}{X(t)} \left[\int_0^{s(t)} \rho C_s dx + \int_{s(t)}^{X(t)} \rho C_l dx \right] = \rho_0 C_0, \quad (13)$$

где ρ — плотность сплава;

- 6) предполагая сохранение консервативности массы при увеличении размеров области, вытекающее из предыдущего предположения, жидкость содержится в области $x > X(t)$ при условии, что

$$C = C_0 \quad \text{и} \quad T = T_{liq}, \quad x > X(t);$$

- 7) что касается физических свойств, то к ним предъявляются следующие требования:

- (1) теплопроводность K и теплоемкость c постоянны внутри фаз и разрывны на границе солидус/ликвидус;
- (2) массовая диффузия жидкого D_l постоянна, а массовая диффузия твердого D_s является функцией температуры. Кроме того, они претерпевают скачок через интерфейсную границу;
- (3) композиционными изменениями скрытой теплоты ΔH [61] пренебрегают. Плотность ρ является функцией только состава, т.е.

$$\rho = \left[\frac{100}{\frac{C}{\rho_Z} + \frac{100 - C}{\rho_Y}} \right], \quad (14)$$

где ρ_Z и ρ_Y плотности растворенного вещества Z и сольвента Y . Плотность, являющаяся функцией состава вещества, будет испытывать скачок на интерфейсной границе. Однако конвективными эффектами, вызванными разностью плотностей в этой модели пренебрегают;

- 8) ключевым параметром модели является природа ветвей (arm coarsening). В модели использован подход, предложенный Roosz с соавторами [51], основанный на теоретическом методе Kattamins с соавторами [60]:

$$[X(t)]^3 = 13.125 \int_0^t M dt, \quad (15)$$

где

$$M = \frac{\gamma D_l T}{m_l (1 - \kappa_0) \Delta H C_l},$$

здесь γ — поверхностная энергия, отнесенная к единице площади, $m_l = (T_f - T_{eut})/C_{eut}$ обозначает наклон кривой ликвидус;

9) граничные условия совпадают с условиями эксперимента Sarreal и Abbaschian [62].

С учетом выше приведенных предположений можно записать следующие уравнения для теплопереноса:

$$\frac{\partial(\rho c_s T_s)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_s \frac{\partial T_s}{\partial x} \right), \quad 0 \leq x \leq s(t), \quad (16)$$

$$\frac{\partial(\rho c_l T_l)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_l \frac{\partial T_l}{\partial x} \right), \quad s(t) \leq x \leq X(t); \quad (17)$$

для массопереноса:

$$\frac{\partial(\rho C_s)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_s \frac{\partial C_s}{\partial x} \right), \quad 0 \leq x \leq s(t), \quad (18)$$

$$\frac{\partial(\rho C_l)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_l \frac{\partial C_l}{\partial x} \right), \quad s(t) \leq x \leq X(t). \quad (19)$$

Температура на левой стенке определяется как

$$T(0, t) = T_0(t) = T_{liq} - \text{скорость охлаждения} * t$$

а на линии $x = X(t)$ задается условие

$$K \frac{\partial T}{\partial x} = 0.$$

Для концентрации задается условие $\partial C / \partial x = 0$ при $x = 0$ и для $X(t)$ используется предположение 5).

На интерфейсной границе уравнения для температуры и концентрации объединяются с помощью условий равновесия и соотношений (11), (12). В дополнение к этим условиям на этой границе записывается баланс температуры и концентрации в виде [13, 63]:

$$\left(K_s \frac{\partial T_s}{\partial x} \right) - \left(K_l \frac{\partial T_l}{\partial x} \right) = \rho [(c_l - c_s) T_{eut} + \Delta H] \frac{ds}{dt}, \quad (20)$$

$$\left(\rho D_s \frac{\partial C_s}{\partial x} \right) - \left(\rho D_l \frac{\partial C_l}{\partial x} \right) = \rho (C_l - C_s) \frac{ds}{dt}, \quad (21)$$

где плотность в правой части соотношений вычисляется со стороны твердого на интерфейсной границе.

Основные трудности в реализации модели (16)–(21) связаны:

- 1) с реализацией условий баланса тепла и массы на интерфейсной границе $x = s(t) < X(t)$, т. е. условий (20), (21);
- 2) с увеличением размеров твердой области, т. е. с движением вправо границы солидус/ликвидус.

Во избежании указанных трудностей проводится переформулировка основных уравнений модели, что позволяет решать задачу на фиксированной сетке без каких-либо специальных дополнений, касающихся подвижной границы. Так, для того чтобы избежать проблем связанных с условиями (20), (21), уравнения записываются в консервативном виде [55, 13, 58]. Для решения проблем, касающихся второго пункта, с помощью преобразования Ландау [64, 65] осуществляется переход от расширяющейся области $0 < x < X(t)$ к фиксированной области $0 < \xi < 1$. Более подробное описание последовательности действий можно найти в работе [59].

Результаты численных исследований, полученные с помощью этой модели, сравнивались с результатами эксперимента [62], в котором исследовался процесс затвердевания бинарного сплава Al–Cu. Проведенное сравнение показало, что при низких и средних скоростях охлаждения достигается хорошее совпадение с экспериментом как по характерному размеру микроструктур, так и по общей картине микросегрегации. Исследование влияния используемых в модели предположений (условий охлаждения, плотности, диффузии тепла и массы) показало, что модель может быть дополнена предположениями о бесконечном переносе тепла и бесконечном переносе

жидкой массы. В то же время, недостаток учета условий охлаждения и coarsening в указанной модели в некоторых случаях оказывается критическим для результатов предсказаний [59].

Последние разработки в области моделирования течений в mushy зоне сводятся к уточнению известной модели [25]–[28] путем учета движения твердого в mushy зоне [66, 67]. В предыдущих работах моделирование сводилось к неявному учету переноса твердого вещества в терминах смешанной скорости, которая не позволяет строго учитывать перенос твердого вещества, и предполагалось, что твердое вещество имеет стационарную дендритную структуру $v_s = 0$. Или же, как в работе [95], mushy зона была представлена двумя областями, одна из которых состояла из диспергирующего твердого вещества, скорость растворения которого равнялась скорости жидкости $v_s = v_l$, а вторая — была образована стационарными дендритами, в предположении $v_s = 0$. Перенос твердого вещества между этими областями учитывался через объединяющий множитель, являющийся линейной комбинацией скоростей жидкого и твердого, что не является физически обоснованным. Кроме того, образующиеся кристаллы не всегда являются стационарными. Фрагменты кристаллов, образующиеся в процессе затвердевания на стенках формы, могут отрываться и переноситься конвективными течениями, возникающими в mushy зоне, внутри переохлажденной области расплава, где они способны расти, формируя равноосные кристаллы. Если обломки попадают в область больших температур, то они могут плавиться и распадаться на более мелкие структуры (зерна). Под действием сил тяжести, равноосные кристаллы могут накапливаться внизу, а также растущие дендриты могут отклоняться от параллельного направления роста, что препятствует движению дендритного фронта. Последнее обстоятельство влияет на общую макросегрегационную картину течения. Отсюда возникла необходимость учета движения твердого вещества. Модель, описанная в работах [66, 67], представляет собой однофазную модель в терминах осредненных величин, полученную путем объемного осреднения двухфазной модели с уравнениями переноса отдельно для твердой и жидкой фазы. Помимо учета движения твердого, в модель введены уравнения движения зерен твердых кристаллов, учтены как эвтектические реакции, так и неэвтектическое затвердевание, а также перераспределение переохлажденного растворенного вещества. К сожалению, работы [66, 67] являются чисто теоретическими, поскольку по представленной модели не были проведены ни численные расчеты, ни сопоставление с экспериментом, в виду отсутствия последнего.

2 Вычислительные методы решения задачи конвективно/диффузионных фазовых изменений

Рассмотрим методы численного решения представленных выше моделей (см. раздел 1), относящихся к классу вычислительных алгоритмов с фиксированными сетками.

При численном исследовании конвективно–диффузионных процессов с учетом фазовых превращений жидкость–твердое тело в качестве основных приняты следующие предположения:

- используется обычное параболическое уравнение теплопроводности, базирующееся на законе Фурье;
- для чистых материалов на границе раздела фаз выполняется условие Стефана, а для сплавов и солей используются простейшие макроскопические модели двухфазной зоны;
- естественная и/или концентрационная конвекция в жидкой фазе рассматривается на основе уравнений Навье–Стокса в приближении Буссинеска для ламинарных течений;
- изменение плотности при фазовом переходе незначительно;
- течение в двухфазной зоне рассматривается в рамках простейших макроскопических уравнений, например, на основе приближения Дарси–Буссинеска для пористой среды.

2.1 Основные уравнения

Рассматриваемые уравнения тепло– и массопереноса при фазовом переходе ликвидус–солидус базируются на законах сохранения энергии, массы, количества движения [68]. Здесь и далее будем говорить о затвердевании имея в виду, что численные методы для задач затвердевания и плавления не отличаются друг от друга. Естественно, необходимы и соответствующие

предпосылки относительно массовой доли примеси при моделировании затвердевания/плавления сплавов. Будем считать, в частности, что чистые материалы затвердевают при фиксированной температуре $T = T^*$ и при этом существует гладкая граница $\Gamma(t)$ раздела твердой и жидкой фаз. Для сплавов и солей характерно затвердевание в интервале температур и существование двухфазной зоны.

2.1.1 Уравнение энергии

Распределение температуры в твердой фазе описывается обычным уравнением теплопроводности:

$$\rho C_s \frac{\partial T_s}{\partial t} = \operatorname{div}(\kappa_s \operatorname{grad} T_s) + S_s^T. \quad (22)$$

В достаточно общей форме уравнения распределения температуры в жидкой и mushy зонах с учетом кондуктивного и конвективного теплообмена записывается в виде:

$$\rho C_l \left(\frac{\partial T_l}{\partial t} + (\mathbf{v}, \operatorname{grad}) T_l \right) = \operatorname{div}(\kappa_l \operatorname{grad} T_l) + S_l^T. \quad (23)$$

В случае затвердевания чистых материалов на границе раздела фаз $\Gamma(t)$ температура постоянна и равна температуре фазовых изменений:

$$\Gamma(t) = \{(x, y, z) | T(x, y, z, t) = T^*\} \quad (24)$$

На границе фазового перехода $\Gamma(t)$ удовлетворяются обычные условия Стефана (непрерывность температуры и скачок теплового потока, пропорциональный скорости движения границы):

$$[T] = 0, \quad (x, y, z) \in \Gamma(t), \quad (25)$$

$$\left[\kappa \frac{\partial T}{\partial n} \right] = -\rho L V_n, \quad (x, y, z) \in \Gamma(t). \quad (26)$$

Здесь через $[\phi]$ обозначен скачок величины ϕ при переходе через $\Gamma(t)$ со стороны твердой в жидкую фазу. Отметим, что условия (25) и (5) могут быть учтены в источниковом члене и тогда вместо уравнений (1)–(5) можно во всей расчетной области рассматривать одно уравнение:

$$\rho C \left(\frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{v}, \operatorname{grad}) T \right) = \operatorname{div}(\kappa \operatorname{grad} T) + S^*. \quad (27)$$

При этом естественно положить $\mathbf{v} \equiv 0$ в твердой фазе. Уравнение (27) используется для изучения затвердевания как чистых материалов, так и сплавов и солей — при этом следует определить подходящим образом источник S^* . Остановимся на этом более подробно и заодно продемонстрируем возможность записать уравнение энергии с использованием эффективной теплоемкости.

В работах [70]–[72] показано, что в случае затвердевания чистых материалов (т.е. решения задачи Стефана) условия (25) и (5) эквивалентны выбору источников члена S^* в виде $S^* = S^T - \rho L \delta(T - T^*) (\partial T / \partial t)$, где через S^T обозначены источники, несвязанные с выделением скрытой теплоты кристаллизации. В случае затвердевания сплавов источниковый член S^* может быть представлен в виде $S^* = S^T - \rho L (d\Phi/dT)$ (см., например, [1]). После этого уравнение (27) переписывается как:

$$\rho C_{ef} \left(\frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{v}, \operatorname{grad}) T \right) = \operatorname{div}(\kappa \operatorname{grad} T) + S^T, \quad (28)$$

где

$$C_{ef} = \begin{cases} C + L\delta(T - T^*) & \text{для чистых материалов,} \\ C + L \frac{d\Psi}{dT} & \text{для сплавов.} \end{cases}$$

Численное решение уравнения с дельта-функцией требует разработки специальных подходов, поэтому во многих случаях уравнение (28) преобразуется с помощью введения энтальпии h к виду:

$$\rho \left(\frac{\partial h}{\partial t} + (\mathbf{v}, \operatorname{grad}) h \right) = \operatorname{div}(\kappa \operatorname{grad} T) + S^T, \quad (29)$$

где:

$$h = \int_0^T C_s dT, \quad T \geq T^*, \quad (30)$$

$$h = h(T^*) + L = \int_{T_0}^T C_l dT + L, \quad T > T^*. \quad (31)$$

Обсуждению преимуществ и недостатков вышеуказанных формулировок уравнения энергии (в основном для чисто тепловых задач), а также примерам их использования посвящено большое число работ. Влияние различных способов “размазывания” разрыва энтальпии в уравнениях (29)–(31) на точность получаемого решения исследовано, в частности, в работе [73]. В данном обзоре мы не будем касаться этой тематики, отсылая читателя за подробностями к обстоятельному обзору [4].

2.1.2 Уравнения импульса и неразрывности

Рассмотрим теперь используемые модели конвективного движения расплава. Уравнения Навье–Стокса, описывающие ламинарные течения, имеют вид:

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = 2 \operatorname{div}(\mu \sigma) - \operatorname{grad} P - \operatorname{grad}\left(\left(\frac{2}{3} \mu - \mu'\right) \operatorname{div} \mathbf{v}\right) + S^V, \quad (32)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) = 0. \quad (33)$$

В большинстве работ по численному моделированию фазового перехода с учетом конвекции движение расплава рассматривается в приближении Буссинеска для вязкой несжимаемой жидкости. В этом случае имеем:

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v}, \operatorname{grad}) \mathbf{v} = -\frac{1}{\rho} \operatorname{grad} P + \operatorname{div}(\nu \operatorname{grad} \mathbf{v}) + S^V, \quad (34)$$

$$\operatorname{div}(\mathbf{v}) = 0. \quad (35)$$

В вычислительной гидродинамике [36]–[40] для решения двумерных задач вместо формулировки уравнений Навье–Стокса (34)–(35) в естественных переменных чаще используются уравнения в терминах функция тока–завихренность (ψ, ω) :

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + (\mathbf{v}, \operatorname{grad}) \omega = \operatorname{div}(\nu \operatorname{grad} \omega) + S^\omega, \quad (36)$$

$$\operatorname{div}(\omega) = 0. \quad (37)$$

где $\Omega = \operatorname{rot} \mathbf{v}$, $\Omega = (0, 0, \omega)$, $\mathbf{v} = \operatorname{rot} \Psi$, $\Psi = (0, 0, \psi)$. В отдельных случаях используется одно уравнение четвертого порядка для функции тока ϕ :

$$\frac{\partial \Delta \psi}{\partial t} + (\mathbf{v}, \operatorname{grad}) \Delta \psi = \operatorname{div}(\nu \operatorname{grad} \Delta \psi) + S^\psi. \quad (38)$$

Вычислительные аспекты использования различных формулировок уравнений Навье–Стокса подробно обсуждаются в литературе (см., например, [36]–[40], [74, 75]). Подробного обсуждения заслуживают модели движения в двухфазной зоне. Простейшая модель, которая широко используется во многих работах, основана на том, что возникающая при затвердевании сплавов двухфазная зона трактуется как пористая среда. В простейшем случае для описания движения может использоваться обычное приближение Дарси–Буссинеска. В таких моделях основное внимание должно уделяться установлению зависимости коэффициента фильтрации такой пористой среды от доли примеси.

Для удобства изложения в последующих частях работы будут рассмотрены численные методы, предназначенные для решения модельной задачи о затвердевании металла (или сплава) в охлаждаемой сбоку прямоугольной полости с теплоизолированными верхним и нижним основаниями. Эта ситуация схематично отображена на рис. 2.

Естественно, что в случае классической задачи Стефана (чисто тепловая задача) существует только одна плоская граница между фазами. Отклонение от этой границы является мерой влияния конвекции в расплаве на процессы теплопереноса.

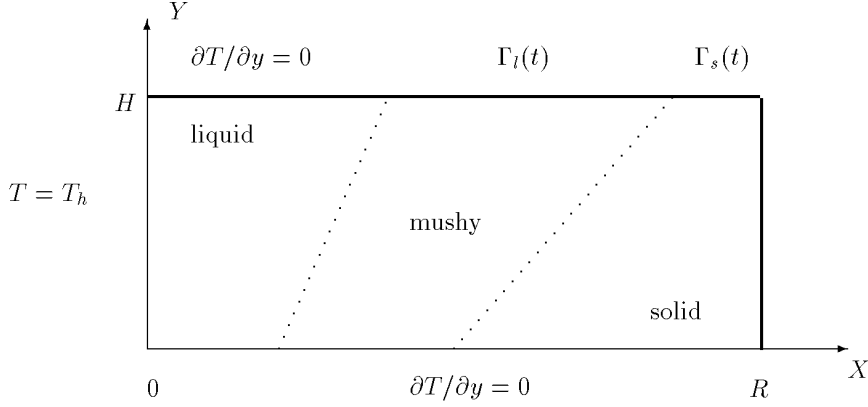


Рис. 2:

2.2 Методы решения задачи теплопроводности с фазовыми переходами

Задача Стефана является предметом многих исследований [72, 13], [76]–[78]. Она допускает аналитическое решение только в отдельных сильно упрощенных случаях (см., например, [70, 79]), поэтому, в подавляющем числе случаев, задачи типа Стефана решаются численно. Наиболее общее деление численных методов для решения подобных задач со свободной (неизвестной) границей [80] связано с использованием двух классов методов. Прежде всего различают методы с выделением границы раздела фаз (иногда их называют *variable domain methods*). Подробный обзор по этой группе методов можно найти в [69]. Второй класс образуют методы без выделения этой границы (или методы сквозного счета, называемые еще *fixed domain methods*, по терминологии работ [3, 4]). В этом обзоре будут рассмотрены лишь методы относящиеся ко второй группе, а именно *fixed domain methods*, поскольку для многомерных задач с фазовым переходом использование численных методов с явным выделением границы раздела фаз во многих случаях связано с алгоритмическими сложностями и большими вычислительными затратами.

Начиная с работ Самарского и Моисеенко [81], Будака с соавторами [82] для температурной формулировки и работы [84] для энтальпийной формулировки, было разработано и использовано множество вариантов метода сквозного счета чисто тепловых задач с фазовым переходом. Суть предложенного в работе [81] метода сквозного счета для решения задачи Стефана состоит в следующем. Вместо уравнения

$$\rho(C + L\delta(T - T^*)) \frac{\partial T}{\partial t} = \operatorname{div}(\kappa \operatorname{grad} T). \quad (39)$$

решается уравнение

$$\rho \tilde{C} \frac{\partial T}{\partial t} = \operatorname{div}(\kappa \operatorname{grad} T). \quad (40)$$

Эффективная (сглаженная) теплоемкость \tilde{C} выбирается из условия сохранения тепла на некотором интервале:

$$\int_{T^*-\eta}^{T^*+\eta} (C + L\delta(T - T^*)) dT = \int_{T^*-\eta}^{T^*+\eta} \tilde{C}(T) dT \quad (41)$$

Например, можно положить

$$\tilde{C} = C + \frac{L}{2\eta}. \quad (42)$$

Более детальное обсуждение этого метода, в частности, обоснование выбора величины η в (42), другие аппроксимационные зависимости для \tilde{C} можно найти в работе [81]. Заметим также,

что некоторые варианты энтальпийной формулировки задачи Стефана практически эквивалентны методу из [81] — (см., например, обзорную работу [3], стр.182). Более подробное обсуждение англоязычной литературы по методам сквозного счета имеется в упомянутом выше обзоре [4].

2.3 Расчет фазового перехода с учетом конвекции.

Методы без выделения границы фазового перехода

Как уже отмечалось в начале, в большинстве работ по численным методам для решения сопряженных задач тепло- и массопереноса при затвердевании/плавлении с учетом конвекции в жидкой фазе принимается, что можно рассматривать расплав как вязкую несжимаемую жидкость, а течения — как ламинарные. Кроме того считается, что плотность не меняется при фазовом переходе и поэтому на границе фазового перехода можно ставить простейшие однородные условия для скорости [85]. Рассматриваемые в этом разделе численные методы могут быть поделены на две большие группы в зависимости от используемых математических моделей для описания гидродинамических процессов в жидкой фазе. В первой группе вычислительных алгоритмов используются естественные переменные “скорость, давление”, во второй — переменные “функция тока, вихрь скорости”.

В рассматриваемой области прикладного математического моделирования различные специалисты (прежде всего прикладники и математики-теоретики) подходят с разных сторон к решению одних и тех же задач, используя свою интерпретацию результатов и терминологию. Методы сквозного счета в данной работе рассматриваются с математических позиций, хотя для описания твердой фазы можно привлекать и чисто физические соображения. Как нам представляется, удобная формализация различных численных методов в данной области может быть достигнута на основе общего подхода к решению задач математической физики в нерегулярных областях, известного как метод фиктивных областей (МФО). Этот метод был предложен с целью приближенного решения краевых задач для эллиптических уравнений Саульевым еще в 1960г. [86]. Изложение сути метода можно найти в книге [87], общий обзор результатов имеется в работе [88]. Наиболее полное изложение метода фиктивных областей с приложением результатов для численного решения различных классов задач гидродинамики имеется в монографии [89].

2.3.1 Естественные переменные

Перейдем к рассмотрению методов сквозного счета задач динамики расплава в естественных переменных (u, v, P) . В этом случае возможно применение двух вариантов МФО — с продолжением по младшим производным и с продолжением по старшим производным [89]. Отметим, что в литературе по моделированию конвективных течений с фазовыми переходами встречается пока только первый вариант.

Продолжение по младшим производным сводится к следующей последовательности действий. Вместо уравнений (34)–(35) в нерегулярной и изменяющейся во времени области $G^*(t)$ рассмотрим во всей расчетной области G следующие уравнения:

$$\frac{\partial \mathbf{v}_\varepsilon}{\partial t} + (\mathbf{v}_\varepsilon, \text{grad}) \mathbf{v}_\varepsilon = \frac{1}{\rho} \text{grad } P + \text{div}(\nu \text{grad} \mathbf{v}_\varepsilon) - C_\varepsilon \mathbf{v}_\varepsilon + S_\varepsilon^{\mathbf{V}}, \quad (43)$$

$$\text{div} \mathbf{v}_\varepsilon = 0. \quad (44)$$

Здесь коэффициент продолжения C_ε и правая часть $S_\varepsilon^{\mathbf{V}}$ выбираются следующим образом:

$$C_\varepsilon = \begin{cases} 0, & (x, y) \in G^*(t), \\ \varepsilon^{-2}, & (x, y) \in G/G^*(t). \end{cases} \quad (45)$$

$$S_\varepsilon^{\mathbf{V}} = \begin{cases} S^{\mathbf{V}}, & (x, y) \in G^*(t), \\ 0, & (x, y) \in G/G^*(t). \end{cases} \quad (46)$$

где ε достаточно мало. Естественно, что функции C_ε и $S_\varepsilon^{\mathbf{V}}$ в конкретных задачах могут выбираться и в несколько другом виде.

Подчеркнем, что вариант метода фиктивных областей (43)–(46) известен давно, а в работе [90] дано обоснование данного подхода. А именно, для стационарных и нестационарных задач гидродинамики вязкой несжимаемой жидкости получена оценка близости приближенного \mathbf{v}_ε и точного \mathbf{v} решений вида

$$\|\mathbf{v}_\varepsilon - \mathbf{v}\| \leq \text{const} \cdot \varepsilon^{1/2} \quad (47)$$

в соответствующий нормам.

В ряде более поздних работ такой подход получил название “модель пористой среды”. Член $C_\varepsilon v_\varepsilon$ в уравнении (43) может интерпретироваться как сила сопротивления движению жидкости в пористой среде. Как известно, при пренебрежении инерционными членами уравнение Дарси–Буссинеска для пористой среды имеет вид

$$\mathbf{v} = -\frac{K}{\mu} \text{grad}P. \quad (48)$$

Объединяя уравнения (48) и (34) и продолжая коэффициент K в жидкой фазе нулем, а в твердой фазе очень большим числом, можно получить одно уравнение типа (43), описывающее рассматриваемые процессы во всей области — жидкой и твердой фазах. Аналогичное описание может использоваться и для двухфазной зоны.

Подход “пористой среды” изложен детально в работах [20, 91, 92], где он сочетается с энтальпийной формулировкой для уравнения энергии и используется для изучения затвердевания чистого материала в каверне. Он же положен в основу исследования затвердевания сплавов — т. е. при наличии двухфазной зоны в работе [23]. В дальнейшем указанный подход использован этими же и другими авторами для изучения ряда конкретных процессов. Так, в работе [93] численно изучались ламинарные нестационарные течения чистого материала и образование корки в охлаждаемых трубах. В работе [21] рассчитывалось плавление чистого галлия в подогреваемой сбоку каверне и приводилось сравнение с экспериментальными данными. В работе [94] численно исследовалось затвердевание чистого олова (pure tin solidification), а в работе [95] наряду с естественной конвекцией в жидкой фазе была учтена и концентрационная конвекция.

Наряду с изучением конкретных процессов авторы вышеперечисленных работ работали и над усовершенствованием численного алгоритма. Особое внимание уделялось определению эффективного коэффициента проницаемости K (уравнение (48) в пористой среде и его продолжению в твердую фазу. В работе [96] демонстрируется существенное влияние способа определения K на результаты расчетов и предлагается более удачный, по мнению авторов, подход к его определению по сравнению с предыдущими работами авторов. Дальнейшему изучению возможностей определения этого коэффициента посвящена работа [97]. В этой работе определение коэффициента проницаемости K базируется на имеющейся информации о природе двухфазной зоны. Из последних работ в этом направлении отметим [98, 99]. Заметим также, что развитие численного алгоритма в вышеуказанной работе [96] опирается на предыдущие работы Vennon и Inceoglu.

Повышению точности численных расчетов конвективно–диффузионных задач с фазовым переходом посвящены работы Shyu и Chen. В работе [100] при рассмотрении стационарного тепло-массообмена в подогреваемой сбоку каверне с учетом фазового перехода используются неортогональные координаты и адаптивные сетки. При этом, как и в отмеченных выше работах, в ней используется модель пористой среды. Интересным является одновременное использование декартовых и криволинейных компонент скорости. В общем виде используемые обезразмеренные уравнения записываются в следующем виде:

$$\frac{\partial U}{\partial \xi} + \frac{\partial V}{\partial \eta} = 0, \quad (49)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{J} \frac{\partial(Uu)}{\partial \xi} + \frac{1}{J} \frac{\partial(Vu)}{\partial \eta} &= \frac{Pr}{J} \left(\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{J} \left(q_1 \frac{\partial u}{\partial \xi} - q_2 \frac{\partial u}{\partial \eta} \right) \right) + \right. \\ &\left. \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{1}{J} \left(-q_2 \frac{\partial u}{\partial \xi} + q_3 \frac{\partial u}{\partial \eta} \right) \right) \right) - \frac{1}{J} \left(y_\eta \frac{\partial p}{\partial \xi} - y_\xi \frac{\partial p}{\partial \eta} \right) + Au, \end{aligned} \quad (50)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{J} \frac{\partial(Uv)}{\partial \xi} + \frac{1}{J} \frac{\partial(Vv)}{\partial \eta} &= \frac{Pr}{J} \left(\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{J} \left(q_1 \frac{\partial v}{\partial \xi} - q_2 \frac{\partial v}{\partial \eta} \right) \right) + \right. \\ &\left. \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{1}{J} \left(-q_2 \frac{\partial v}{\partial \xi} + q_3 \frac{\partial v}{\partial \eta} \right) \right) \right) - \frac{1}{J} \left(x_\xi \frac{\partial p}{\partial \eta} - x_\eta \frac{\partial p}{\partial \xi} \right) + Av + Ra \cdot Pr \cdot \phi, \end{aligned} \quad (51)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{J} \frac{\partial(U\phi)}{\partial \xi} + \frac{1}{J} \frac{\partial(V\phi)}{\partial \eta} &= \frac{1}{J} \left(\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{J} \left(q_1 \frac{\partial \phi}{\partial \xi} - q_2 \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right) \right) + \right. \\ &\left. \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{1}{J} \left(-q_2 \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + q_3 \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right) \right) \right) - \frac{1}{J \cdot St} \left(\frac{\partial}{\partial \xi} (U \cdot \Delta H) + \frac{\partial}{\partial \eta} (V \cdot \Delta H) \right), \end{aligned} \quad (52)$$

где:

$$U = uy_\eta - vx_\eta, \quad (53)$$

$$V = vx_\xi - uy_\xi, \quad (54)$$

$$q_1 = x_\eta^2 + y_\eta^2, \quad (55)$$

$$q_2 = x_\xi x_\eta + y_\xi y_\eta, \quad (56)$$

$$q_3 = x_\xi^2 + y_\xi^2, \quad (57)$$

$$J = x_\xi y_\eta - x_\eta y_\xi. \quad (58)$$

Отметим, что усовершенствования численной методики в этой работе относятся к расчету гидродинамики, в то время как используется простейшая линейная зависимость объемной доли жидкой фазы от температуры для двухфазной зоны. Использование неортогональных координат и адаптивных сеток позволяет более аккуратно рассчитывать тепло- и массообмен при больших числах Грасгофа. В этой и в последующих работах [101, 102] Shyu и Chen представляют результаты проведенных ими параметрические исследование безразмерной системы (49)–(58) при нормальной и микрогравитации с учетом естественной и термокапиллярной конвекции.

Рассмотренные в этом пункте работы показывают, что предложенные в разное время разными авторами подходы к решению конвективно-диффузионных задач плавления/затвердевания, основанные на использовании модели пористой среды, с точки зрения вычислительной и прикладной математики могут быть рассмотрены как вариант МФО с продолжением по младшим производным.

2.3.2 Переменные функция тока — вихрь скорости

При интерпретации имеющихся вариантов метода фиктивных областей для уравнения для функции тока (уравнение четвертого порядка) можно в качестве основных выделить (см. [89]) три варианта МФО, а именно: вариант с продолжением по младшим производным, с продолжением коэффициентов при вторых производных и с продолжением коэффициентов при старших (четвертых) производных. В обсуждаемой литературе по моделированию процессов тепло и массопереноса с фазовыми превращениями пока известны только работы с продолжением по младшим и по вторым производным.

В варианте с продолжением по младшим коэффициентам вместо уравнения (38) в нерегулярной области $G^*(t)$ решается следующее уравнение во всей области G :

$$\frac{\partial \Delta \psi_\varepsilon}{\partial t} + (\mathbf{V}_\varepsilon, \text{grad} \Delta \psi_\varepsilon) = \text{div}(\nu \text{grad} \Delta \psi_\varepsilon) - C_\varepsilon \psi_\varepsilon + S_\varepsilon^\psi, \quad (59)$$

где функции C_ε и S_ε^ψ определяются как и в (45), (46). Этот подход предложен в работах [103] и [104] для решения тестовой задачи о затвердевании в каверне с горячей и холодной вертикальными стенками. В работе [105] вышеуказанный метод использован для расчета затвердевания металла в изложнице.

В качестве варианта метода фиктивных областей с продолжением по вторым производным, можно рассматривать метод, предложенный в работе [106]. Этот вариант тесно связан с вариантом МФО при продолжении по младшим коэффициентам (модель “пористой среды”). В этом случае вместо уравнения (59) рассматривается уравнение вида

$$\frac{\partial \Delta \psi_\varepsilon}{\partial t} + (\mathbf{V}_\varepsilon, \text{grad}) \Delta \psi_\varepsilon = \text{div}(\nu \text{grad} \Delta \psi_\varepsilon + C_\varepsilon \text{grad} \psi_\varepsilon) + S_\varepsilon^\psi. \quad (60)$$

Аналогичный вариант метода фиктивных областей можно применять и при моделировании гидродинамических течений в многосвязных областях.

2.3.3 Моделирование течений в двухфазной зоне

Математические модели процессов тепло-массопереноса в двухфазной зоне могут основываться на различных предпосылках (см., например, [107]). Основные усилия при написании таких моделей направлены на описание процессов в двухфазной зоне и на учет взаимодействия между различными зонами. Начиная с общих уравнений для каждой из фаз в двухфазной зоне

авторы усредняют их по пространству и получают единые непрерывные уравнения для бинарной смеси. В общем плане следует выделить модель с переменной вязкостью, когда двухфазная зона рассматривается как жидкость с твердыми включениями. Другой подход к моделированию процессов тепло–массопереноса в двухфазной зоне сводится к модели, базирующейся на предположении дендритной структуры двухфазной зоны и использовании модели пористой среды.

При рассмотрении двухфазной зоны как пористой среды [25] можно записать уравнения движения в виде (43), (44), при этом вместо (45), (46) коэффициент продолжения C_ϵ и правая часть определяются из физических соображений, зависящих от свойств рассматриваемой среды. Разработанная модель была протестирована различными авторами в сравнении с экспериментальными данными и использована для расчета ряда конкретных процессов.

В работе [26] рассматривается затвердевание бинарного сплава в прямоугольной каверне и проводится сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными. В работе [28] подробно обсуждается методология численного решения системы дифференциальных уравнений в частных производных, на которой основывается вышеуказанная модель. Работа [108] посвящена описанию модели и численного алгоритма и его использованию для изучения плавления бинарной смеси $\text{NH}_4\text{Cl}-\text{H}_2\text{O}$ с учетом не только естественной конвекции, но также и конвекции Марангони, вызванной силами поверхностного натяжения. Широкомасштабное сравнение результатов расчета по этой модели с экспериментальными данными приводится в работе [109]. В работе [110] численно исследуется затвердевание бинарного раствора Na_2CO_3 в горизонтальном цилиндрическом кольцевом канале и численные результаты сравниваются с экспериментальными. Из этой серии работ отметим интересное приложение вышеизложенного алгоритма для моделирования фазовых переходов в геологии [111]. Аналогичная модель пористой среды для решения конвективно–диффузионных задач плавления использована в работе Леончука с соавторами [112]. Для повышения точности расчетов на фиксированной прямоугольной сетке авторами проводится корректировка коэффициентов в уравнении теплопроводности вблизи фронта плавления, использующая приближенные аналитические значения для толщины теплового пограничного слоя и коэффициента теплоотдачи.

Дальнейшему совершенствованию математической модели теплообмена при затвердевании сплавов и солей посвящена работа [113]. В отличие от предыдущих работ, указанных в этой главе, здесь рассматривается и пространственное изменение доли жидкой фазы в двухфазной зоне. При этом основными базовыми предположениями являются модель пористой среды и единая форма уравнений, похожая на (43)–(44) для всех трех фаз: жидкой, твердожидкой и твердой. Расчеты авторов показывают, что это существенно меняет вычисляемые поля скоростей и температуры.

Заключение

В приближенном решении задач тепло– и массопереноса при фазовых превращениях твердое тело/жидкость накоплен значительный расчетно–теоретический опыт. В настоящее время расчеты затвердевания/плавления в двумерной постановке с учетом конвективных движений жидкости в расплаве ведутся многими научными группами.

При построении математических моделей используется подход объемного осреднения двухфазных моделей и уточнение с помощью них однофазной (continuum) модели записываемой в терминах смешанных переменных. Моделирование макросегрегационных явлений сводится к сопоставлению результатов ранее разработанных моделей с выполненными в последнее время экспериментальными исследованиями затвердевания бинарных металлургических сплавов. Одновременно с этими исследованиями разрабатываются новые подходы к моделированию микросегрегации, служащие основой для уточнения макромоделей. Уточнение математических моделей, в основном, проводится в рамках использования гидродинамических уравнений, а именно терминов источников в уравнении движения. В последнее время делаются попытки промоделировать перенос твердого вещества, учитывать более точно картину перераспределения растворенного вещества, например, через определение его как функции скорости затвердевания и стереологических характеристик границы твердое/жидкое.

В настоящее время при разработке алгоритмов приближенного описания динамики расплава сложилось два направления. Как и при моделировании чисто тепловых проблем, используются вычислительные алгоритмы с выделением границы фазового перехода и без ее выделения. Однако методы сквозного счета привлекают своей алгоритмической простотой, и поэтому получили

наибольшее распространение. Методы с фиксированными сетками позволяют избежать учета ряда дополнительных требований связанных с подвижной границе. Что касается теоретической стороны вопроса используемых методов, то можно отметить практически отсутствие работы по обоснованию используемых методов (сходимости, устойчивости).

Литература

- [1] M. C. Flemings, *Solidification processing*, McGraw–Hill, New York (1974).
- [2] V. A. Yefimov, *Steel Processing and Solidification*. Metallurgia, Moscow (1976) (in Russia).
- [3] B. Basu and A. W. Date, Numerical modelling of melting and solidification problems — A review. *Sadhana* **13**(3), 169–213 (1988).
- [4] V. R. Voller, C. R. Swaminathan and B. G. Thomas, Fixed grid techniques for phase change problems: A review. *Int. J. Numer. Methods Engng* **30**(4), 875–898 (1990).
- [5] R. Viskanta, Mathematical modeling of transport processes during solidification of binary systems. *JSME Int. J., Series II* **33**(3), 409–423 (1990).
- [6] K. S. Kannan, K. Madhusudana, R. Venkataramani, N. Ganesh and O. Prabhakar, Modelling of solidification processes. *Indian J. Technology* **28**(6–8), 460–474 (1990).
- [7] M. C. Flemings and G. E. Nereo, Macro–segregation: Part I, *Trans. TMS–AIME* **239**, 1449–1461 (1967).
- [8] M. C. Flemings, R. Mehrabian and G. E. Nereo, Macro–segregation: Part II, *Trans. TMS–AIME* **242**, 41–49 (1968).
- [9] M. C. Flemings and G. E. Nereo, Macro–segregation: Part III, *Trans. TMS–AIME* **242**, 50–55 (1968).
- [10] R. Mehrabian, M. Keane and M. C. Flemings, Interdendritic fluid flow and macro–segregation, influence and gravity, *Metall. Trans. B* **1B**, 3228–3241 (1970).
- [11] S. Kou, D. R. Poirier and M. C. Flemings, Macro–segregation in electro slag remelted ingots, *Proc. Elect. Furn. Conf. Iron Steel Soc. AIME* **35**, 221–228 (1977).
- [12] A. L. Maples and D. R. Poirier, Convection in the two–phase zone of solidifying alloys, *Metall. Trans. B* **15B**, 163–172 (1984).
- [13] J. Crank, *Free and Moving Boundary Problems*. Clarendon Press, Oxford (1984).
- [14] T. W. Clyne, Modelling of heat flow in solidification, *Mater. Sci. Engng.* **65**, 111–124 (1984).
- [15] E. M. Sparrow, S. V. Patankar and S. Ramadhyani, Analysis of melting in the presence of natural convection in the melt region, *J. Heat Transfer* **99**, 520–526 (1977).
- [16] A. Gadgil and D. Gobin, Analysis of two–dimensional melting in rectangular enclosures in the presence of natural convection, *J. Heat Transfer* **106**, 20–26 (1984).
- [17] C. Benard, D. Gobin and A. Zanoli, Moving boundary problem: heat conduction in the solid phase of phase change material during melting driven by natural convection in the liquid, *Int. J. Heat Transfer* **29**, 1669–1681 (1986).
- [18] J. Yoo and B. Rubinsky, A finite element method for the study of solidifications processes in the presence of natural convection, *Int. J. Numer. Engng* **23**, 1785–1805 (1986).
- [19] K. Morgan, A numerical analysis of freezing and melting with convection, *Comp. Meth. Appl. Engng* **28**, 275–284 (1981).
- [20] V. R. Voller, M. Cross and N. C. Markatos, An enthalpy method for convection/diffusion phase change, *Int. J. Numer. Meth. Engng* **24**, 271–284 (1987).
- [21] A. D. Brent, V. R. Voller and K. J. Reid, Enthalpy–porosity technique for modelling convection–diffusion phase change: application to the melting of a pure metal, *Numer. Heat Transfer* **13**(3), 297–318 (1988).

- [22] J. Szekely and A. S. Jassal, An experimental and analytical study of the solidification of a binary dendritic system, *Metall. Trans. B* **9B**, 389–398 (1978).
- [23] V. R. Voller and C. Prakash, A fixed grid numerical modelling methodology for convection–diffusion mushy region phase–change problem, *Int. J. Heat Mass Transfer* **30**, 1709–1720 (1987).
- [24] V. R. Voller, A numerical method for analysis of solidification in heat and mass transfer systems, In *Numerical Methods in Thermal Problems V* (Edited by R. W. Lewis *et al.*), 693–704 (1987).
- [25] W. D. Bennon and F. P. Incropera, A continuum model for momentum, heat and species transport in binary solid–liquid phase change systems — 1, Model formulation, *Int. J. Heat Mass Transfer* **30**(10), 2161–2170 (1987).
- [26] W. D. Bennon and F. P. Incropera, A continuum model for momentum, heat and species transport in binary solid–liquid phase change systems — 2, Application to solidification in rectangular cavity, *Int. J. Heat Mass Transfer* **30**(10), 2171–2187 (1987).
- [27] W. D. Bennon and F. P. Incropera, The evolution of macro–segregation in statically cast binary ingots, *Metall. Trans. B* **18B**, 611–616 (1987).
- [28] W. D. Bennon and F. P. Incropera, Numerical analysis of binary solid–liquid phase change using continuum model, *Numer. Heat Transfer* **13**, 277–296 (1988).
- [29] R. Viskanta and C. Beckermann, Mathematical modelling of solidification. Presented at Symposium on “Interdisciplinary Issues in Materials Processing and Manufacturing”, ASME Annual Meeting, Boston, Massachusetts, 14–18 December (1987).
- [30] C. Beckermann and R. Viskanta, Double–diffusive convection during dendritic solidification of a binary mixture, *PCH* **10**, 195–213 (1988).
- [31] M. B. Carver, Numerical computation of phase separation in two fluid flow, *J. Fluids Engng* **106**, 147–153 (1984).
- [32] M. Ishii and K. Mishima, Two–fluid model and hydrodynamic constitutive relations, *Nucl. Engng Des.* **82**, 107–126 (1984).
- [33] D. R. Poirier, Permeability for flow of interdendritic liquid in columnar–dendritic alloys, *Metall. Trans. B* **18B**, 245–256 (1987).
- [34] M. Rappaz and V. R. Voller, A note on accounting for the effect of the microstructure in a macroscopic model of a solidification process, *Metall. Trans. A* (1989).
- [35] A. Celmins, Representation of two–phase flows by volume averaging, *Int. J. Multiphase Flow* **14**, 81–90 (1988).
- [36] P. J. Roache, *Computational Fluid Dynamics*. Hermosa Publishers, Albuquerque (1976).
- [37] D. A. Anderson, J. C. Tannehill and R. H. Pletcher, *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*. Hemisphere, New York (1984).
- [38] C. A. Fletcher, *Computational Techniques in Fluid Dynamics*. Springer, Berlin (1988).
- [39] T.–M. Shin, *Numerical Heat Transfer*. Hemisphere, Washington, D.C. (1984).
- [40] S. V. Patankar, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Hemisphere, Washington, D.C. (1980).
- [41] H. Shahani, G. Amberg and H. Fredriksson, On the formation of macrosegregations in unidirectionally solidified Sn–Pb and Pb–Sn alloys, *Metall. Trans. A* **23 A**, 2301–2311 (1992).
- [42] P. J. Prescott and F. P. Incropera, Convective transport phenomena and macrosegregation during solidification of a binary metal alloy: I — Numerical predictions, *J. Heat Transfer* **116**, 735–741 (1994).
- [43] P. J. Prescott, F. P. Incropera and D. R. Gaskell, Convective transport phenomena and macrosegregation during solidification of a binary metal alloy: II — Experiments and comparisons with numerical predictions, *J. Heat Transfer* **116**, 741–749 (1994).

- [44] M. Rappaz, Modeling of microstructure formation in solidification process, *Int. Mater. Rev.* **34**, 93–123 (1989).
- [45] T. W. Clyne and W. Kurz, Solute redistribution during solidification with rapid solid state diffusion, *Metall. Trans. A* **12 A**, 965–971 (1981).
- [46] I. Ohnaka, Mathematical analysis of solute redistribution during solidification with diffusion in solid phase, *Trans. ISIJ* **26**, 1045–1051 (1986).
- [47] T. Matsumiya, H. Kajioka, S. Mizoguchi, Y. Ueshima and H. Esaka, Mathematical analysis of segregation in continuously-cast slabs, *Trans. ISIJ* **24**, 873–882 (1984).
- [48] S. Kobayashi, Solute redistribution during solidification with diffusion in solid phase: a theoretical analysis, *J. Crystal Growth* **88**, 87–96 (1988).
- [49] A. J. W. Ogilvy and D. H. Kirkwood, A model for the numerical computation of microsegregation in alloys, *Appl. Scient. Res.* **44**, 43–49 (1987).
- [50] A. Roosz, Z. Gacsi and E. G. Fuchs, Solute redistribution during solidification and homogenization of binary solid solution, *Acta. Metall.* **32**, 1745–1754 (1984).
- [51] A. Roosz, E. Halder and H. E. Exner, Numerical calculation of micro-segregation in coarsened dendritic microstructures, *Mat. Sci. Technol.* **2**, 1149–1155 (1986).
- [52] T. P. Battle and R. D. Pehlke, Mathematical modeling of microsegregation in binary metallic alloys, *Metall. Trans. B* **21 B**, 357–375 (1990).
- [53] W. Kurz and D. J. Fisher, Fundamentals of solidification, *Trans. Tech. Publs* (1986).
- [54] L. I. Rubinstein, *The Stefan Problem*. Translations of Mathematical Monographs, 27, American Mathematical Society (1971).
- [55] A. B. Crowley and J. R. Okendon, On the numerical solution of an alloy solidification problem, *Int. J. Heat Mass Transfer* **22**, 941–947 (1979).
- [56] D. G. Wilson, A. D. Solomon and V. Alexiades, A shortcoming of the explicit solution for the binary alloy solidification problem, *Lett. Heat Mass Transfer* **9**, 421–428 (1982).
- [57] D. G. Wilson, V. Alexiades and A. D. Solomon, A model of binary alloy solidification, *Int. J. Numer. Meth. Engng* **20**, 1067–1084 (1984).
- [58] V. R. Voller, An implicit enthalpy solution for phase change problem with application to a binary alloy solidification, *Appl. Math. Model.* **11**, 110–116 (1987).
- [59] Suresh Sundarra and V. R. Voller, The binary alloy problem in an expanding domain: the microsegregation problem, *Int. J. Heat Mass Transfer* **36**(3), 713–723 (1993).
- [60] T. Z. Kattamins, J. C. Coughlin and M. C. Flemings, Influence of coarsening on dendritic arm spacing of aluminum–copper alloys, *Trans. Metall. Soc. AIME* **239**, 1504–1511 (1967).
- [61] D. R. Pourier and P. Nandapurkar, Enthalpies of a binary alloy during solidification, *Metall. Trans. A* **19A**, 3057–3061 (1988).
- [62] J. A. Sarreal and G. J. Abbaschian, The effect of solidification rate on microsegregation, *Metall. Trans. A* **17 A**, 2063–2073 (1985).
- [63] R. B. Bird, W. E. Stewart and E. N. Lightfoot, *Transport Phenomena*, Wiley Int. Edn. Wiley, New York (1960).
- [64] J. Crank, Two methods for the numerical solution of moving boundary problems in diffusion and heat flow, *Q. J. Mech. Appl. Math.*, **10**, 220–231 (1957).
- [65] G. Landau, Heat conduction in a melting solid, *Q. J. Mech. Appl. Math.*, **8**, 81–94 (1950).

- [66] J. Ni and F. P. Incropera, Extension of the continuum model for transport phenomena occurring during metal alloy solidification — I. The conservation equations, *Int. J. Heat Mass Transfer*, **38**(7), 1271–1284 (1995).
- [67] J. Ni and F. P. Incropera, Extension of the continuum model for transport phenomena occurring during metal alloy solidification — II. Microscopic considerations, *Int. J. Heat Mass Transfer*, **38**(7), 1285–1296 (1995).
- [68] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Fluid mechanics*. Pergamon, Oxford (1987).
- [69] A. A. Samarskii, P. N. Vabishchevich, O. P. Iliev and A. G. Churbanov, Numerical simulation of convection/diffusion phase change problems — a review, *Int. J. Heat Mass Transfer* **36**(17), 4095–4106 (1993).
- [70] A. N. Tikhonov and A. A. Samarskii, *Equations of Mathematical Physics*. Nauka, Moscow (1972) (in Russian).
- [71] O. A. Oleinik, On a method for the general Stefan problem solution, *Doklady Akademii nauk SSSR* **135**(5), 1054–1057 (1960) (in Russian).
- [72] L. I. Rubinstein, *The Stefan Problem*. Zinatne, Riga (1967) (in Russian).
- [73] V. I. Mazhukin, Yu. A. Poveshchenko, S. B. Popov and Yu. P. Popov, On uniform algorithms for the Stefan problem solution, Keldysh Institute of Applied Mathematics Preprint No. 122, Moscow, (1985) (in Russian).
- [74] R. Peyrert and T. D. Taylor, *Computational Methods for Fluid Flow*. Springer, Berlin (1983).
- [75] V. M. Paskonov, V. I. Polezhaev and L. A. Chudov, *Numerical Simulation of Heat and Mass Transfer Processes*. Nauka, Moscow (1984) (in Russian).
- [76] P. Ya. Polubarinova–Kochina, *Theory of Underground Water Motion*, Nauka, Moscow (1977) (in Russian).
- [77] A. M. Meirmanov, *The Stefan Problem*, Nauka, Novosibirsk (1986) (in Russian).
- [78] A. Friedman, *Variational Principles and Free–Boundary Problems*. Wiley, New York (1982).
- [79] H. S. Carslaw and J. C. Jaeger, *Conduction of Heat in Solids*. Oxford University Press, London (1959).
- [80] P. N. Vabishchevich, *Numerical Methods for Free Boundary Problems Solution*. Moscow University Publishers, Moscow (1987) (in Russian).
- [81] A. A. Samarskii and B. D. Moiseenko, An efficient fixed grid scheme for the solution of the multidimensional Stefan Problem. *Zhurnal Vychislitel'noi Matematiki i Matematicheskoi Fiziki* **5**(5), 816–827 (1965) (in Russian).
- [82] B. M. Budak, E. N. Solov'yeva and A. B. Uspenskii, A difference method with coefficients smoothing for the Stefan Problem solution, *Zhurnal Vychislitel'noi Matematiki i Matematicheskoi Fiziki* **5**(5), 828–840 (1965) (in Russian).
- [83] N. Shamsundar and E. M. Sparrow, Analysis of multidimensional conduction phase change via the enthalpy model, *ASME J. Heat Transfer* **97**, 333–340 (1975).
- [84] N. Shamsundar and E. M. Sparrow, Analysis of multidimensional conduction phase change via the enthalpy model, *ASME J. Heat Transfer* **97**, 333–340 (1975).
- [85] D. A. Frank–Kamenetskii, *Diffusion and Conduction in Chemical Kinetics*. Nauka, Moscow (1967).
- [86] V. K. Saul'yev, On a method for computer solution of boundary value problem, *Doklady Akademii SSSR* **144**(3), 497–500 (1962) (in Russian).
- [87] G. I. Marchuk, *Methods of Computational Mathematics*. Nauka, Moscow (1980) (in Russian).

- [88] A. N. Konovalov, The fictitious regions method in problems of mathematical physics. In *Computing Methods in Applied Sciences and Engineering* (Eds R. Glowinski, J. I. Lions), 29–40. North–Holland, Amsterdam (1980).
- [89] P. N. Vabishchevich, *The Fictitious Regions Method in Problems of Mathematical Physics*. Moscow University Publishers, Moscow (1991) (in Russian).
- [90] A. N. Bugrov and Sh. Smagulov, The fictitious regions method in the boundary value problems for the Navier–Stokes equations. In *Mathematical Models of Fluid Motion*, 79–90. Novosibirsk (1978) (in Russian).
- [91] V. R. Voller, N. Markatos and M. Cross, Techniques for accounting for the moving interface in convection/diffusion phase change. In *Numerical Methods in Thermal Problems* (Edited by R. W. Lewis and K. Morgan). **4**, 595–609. Pineridge Press: Swansea (1985).
- [92] V. R. Voller, N. Markatos and M. Cross, Solidification in convection and diffusion. In *Numerical Simulations of Fluid Flow and Heat/Mass Transfer Processes* (Edited by N. Markatos, D. Tatchell, M. Cross and N. Rhodes), 425–432. Springer, Berlin (1986).
- [93] S. E. Hibbert, N. C. Markatos and V. R. Voller, Computer simulation of moving–interface, convective, phase–change processes, *Int. J. Heat Mass Transfer* **31**(9), 1785–1795 (1988).
- [94] A. D. Brent, Numerical simulation of tin solidification under the influence of natural convection in a thick walled annular crucible, *Int. Commun. Heat Mass Transfer* **16**(5), 693–701 (1989).
- [95] V. R. Voller, A. D. Brent and C. Prakash, The modelling of heat, mass and solute transport in solidification systems, *Int. J. Heat Mass Transfer* **32**, 1719–1731 (1989).
- [96] C. Prakash and V. R. Voller, On the numerical solution of continuum mixture model equations describing binary solid–liquid phase change *Numer. Heat Transfer, Part B* **15**, 171–189 (1989).
- [97] V. R. Voller, A. D. Brent and C. Prakash, Modelling the mushy region in a binary alloy, *Appl. Math. Modelling* **14**, 320–326 (1990).
- [98] C. R. Swaminathan and V. R. Voller, A general enthalpy method for modelling solidification processes, Research Report of the Supercomputer Institute at the University of Minnesota, UMSI 91/167.
- [99] V. R. Voller and C. R. Swaminathan, A general source–based method for solidification phase change, *Numer. Heat Transfer, Part B* **19**, 175–190 (1991).
- [100] W. Shyy and M.–H. Chen, Steady–state natural convection with phase change, *Int. J. Heat Mass Transfer* **33**(11), 2545–2563 (1990).
- [101] W. Shyy and M.–H. Chen, Effect of Prandtl number on buoyancy–induced transport processes with and without solidification, *Int. J. Heat Mass Transfer* **33**(11), 2565–2578 (1990).
- [102] W. Shyy and M.–H. Chen, Interaction of thermocapillary and natural convection flows during solidification: normal and reduced gravity conditions, *J. Crystal Growth* **108**(1/2), 247–261 (1991).
- [103] P. N. Vabishchevich and O. P. Iliev, Numerical investigation of conjugate heat and mass transfer problems including phase change, *Differentsial'nye Uravneniya*, **23**(7), 1127–1132 (1987).
- [104] M. I. Izteletov and Sh. Smagulov, An approximate method for the solution of a steady–state conjugate heat and mass transfer problem, *Differentsial'nye Uravneniya* **25**(7), 1227–1232 (1989) (in Russian).
- [105] P. N. Vabishchevich and O. P. Iliev, Numerical investigation of heat and mass transfer during the crystallization of metal in a mould, *Comm. Appl. Num. Meth.* **5**(5), 515–526 (1989).
- [106] W. Y. Raw and S. L. Lee, Application of weighting function scheme on convection–conduction phase–change problems, *Int. J. Heat Mass Transfer* **34**(6), 1503–1513 (1991).
- [107] J. Ni and C. Beckermann, A volume–averaged two–phase model for transport phenomena during solidification, *Metall. Trans. B* **22B**, 349–361 (1991).

- [108] F. P. Incropera, A. H. H. Engel and W. D. Bennon, Numerical analysis of binary solid–liquid phase change with buoyancy and surface tension driven convection. *Numer. Heat Transfer, Part A* **16**(4), 407–427 (1989).
- [109] M. S. Christenson, W. D. Bennon and F. P. Incropera, Solidification of an aqueous ammonium chloride solution in a rectangular cavity — II. Comparison of predicted and measured results. *Int. J. Heat Mass Transfer* **32**(1), 69–79 (1989).
- [110] D. G. Neilson, F. P. Incropera and W. D. Bennon, Numerical simulation of solidification in a horizontal cylindrical annulus charged with an aqueous salt solution, *Int. J. Heat Mass Transfer* **33**(2), 367–380 (1990).
- [111] C. M. Oldenburg and F. J. Spera, Numerical modeling of solidification and convection in a viscous pure binary eutectic system, *Int. J. Heat Mass Transfer* **34**(8), 2107–2121 (1991).
- [112] M. P. Leonchuk, Yu. E. Shvetsov and L. V. Shvetsova, Numerical simulation of melting processes involving convection. Obninsk Institute for Thermophysics Preprint No. 1932. Obninsk (1988) (in Russian).
- [113] P. J. Nandapurkar, D. R. Poirier and J. C. Heinrich, Momentum equations for dendritic solidification, *Numer. Heat Transfer, Part A* **19**, 297–311 (1991).

Таблица обозначений для моделей А, Б, В

c	—	удельная теплоемкость
C	—	концентрация растворенного вещества
C_e	—	эвтектическая концентрация растворенного вещества
C_{mix}	—	смешанная концентрация растворенного вещества
g	—	объемная доля
g_r	—	ускорение силы тяжести
h	—	sensible энтальпия
H	—	фазовая энтальпия
ΔH	—	разность фазовых энтальпий
K	—	теплопроводность
K_0	—	коэффициент проницаемости в уравнении Carman–Kozeny
L	—	скрытая теплота плавления
P	—	давление
S	—	источник в уравнениях сохранения массы, движения, энтальпии, растворенного вещества
t	—	время
T	—	температура
T_e	—	эвтектическая температура
T_L	—	ликвидус температура
T_M	—	температура плавления чистого растворенного вещества
\mathbf{u}	—	вектор скорости
u	—	x -овое направление скорости
v	—	y -овое направление скорости

Греческие символы

α	—	вспомогательная переменная для проведения интегрирования
β_s	—	коэффициент растворимости объемного расширения
β_T	—	термический коэффициент объемного расширения
Γ	—	общий коэффициент диффузии
κ	—	коэффициент сегрегации
μ	—	динамическая вязкость
ρ	—	плотность
ρg_r	\approx	$\rho_{ref} g_r [\beta_T (T - T_e) + \beta_s (C_l - C_e)]$
ρ_{ref}	$=$	$\rho(C_e, T_e)$
ϕ	—	общая зависимая переменная
ψ	—	функция тока

Верхние и нижние индексы

e	—	эвтектические условия
$cold$	—	условия на охлаждаемой стенке
eff	—	эффективное значение коэффициента переноса для моделирования текучести mushy зоны
l	—	жидкая фаза
s	—	твердая фаза
$*$	—	значение на границе твердое/жидкое

Таблица обозначений [59]

c	—	удельная теплоемкость
C	—	концентрация растворенного вещества
C_0	—	начальная концентрация сплава
D	—	коэффициент массовой диффузии смеси
f	—	локальная массовая доля жидкости
F_l	—	ликвидус кривая
F_s	—	солидус кривая
g	—	локальная объемная доля жидкости
H	—	энтальпия
ΔH	—	скрытая теплота плавления
K	—	смешанная теплопроводность
q	—	предварительно определенный тепловой поток
$s(t)$	—	положение фазового фронта в реальной области
S^H	—	конвективный источник в уравнении теплопроводности
S^C	—	конвективный источник в уравнении переноса массы
t	—	время
Δt	—	шаг по времени
T	—	температура
T_i	—	начальная температура
T_f	—	температура плавления
T_{liq}	—	ликвидус температура
T_{sol}	—	солидус температура
$T_0(t)$	—	зависящая от времени температура при $x = 0$
U	—	скорость движения интерфейсной границы
V	—	химическая активность
x	—	координата в реальной области
$X(t)$	—	протяженность расширяющейся реальной области
Y	—	солювент в Y-Z бинарном сплаве
Z	—	растворенное вещество в Y-Z бинарном сплаве
Греческие символы		
α	—	температуропроводность
Γ	—	Гиббса–Томпсона коэффициент
γ	—	энергия на интерфейсной границе
κ_0	—	коэффициент сегрегации
λ_2	—	протяженность вторичной дендритной ветви
ξ	—	координата в трансформированной области
ρ	—	плотность сплава
Верхние и нижние индексы		
eut	—	эвтектические условия
l	—	жидкая фаза
s	—	твердая фаза

Таблица обозначений [69]

C	—	удельная теплоемкость
h	—	энтальпия
K	—	проницаемость пористой среды
L	—	энтальпия фазового перехода
P	—	давление
S	—	источниковый член в уравнениях переноса
t	—	время
T	—	температура
T^*	—	температура фазового перехода
(x, y, z)	—	декартовы координаты

Греческие символы

$\varphi = (u, v, w)$	—	скорость
σ	—	тензор скоростей деформации
Δ	—	оператор Лапласа
ε	—	параметр продолжения в методе фиктивных областей
κ	—	теплопроводность
μ, μ', ν	—	коэффициенты динамической, объемной, кинематической вязкости
ρ	—	плотность сплава
Ψ	—	доля твердой фазы
ψ	—	функция тока
ω	—	вихрь скорости

Верхние и нижние индексы

ef	—	эвтектические условия
l	—	жидкая фаза
s	—	твердая фаза
n	—	нормальная составляющая