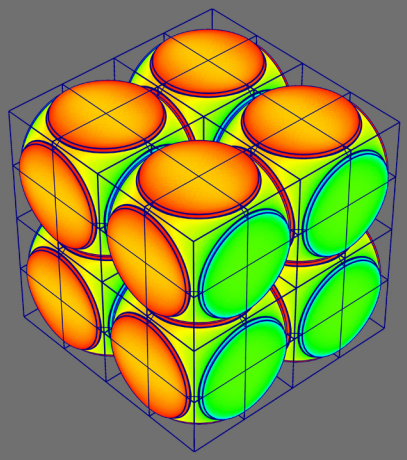
ISSN 2309-3684



Математическое моделирование и численные методы

Димитриенко Ю.И., Леонтьева С.В. Моделирование термоконвективных процессов при однонаправленной кристаллизации сплавов с учетом движения свободных границ. Математическое моделирование и численные методы. 2018. № 4. с. 3–24.

Источник: https://mmcm.bmstu.ru/articles/178/

Параметры загрузки:
IP: 3.41.188.32
17.11.2026 07:50:59

УДК 532.51 DOI: 10.18698/2309-3684-2018-4-324

Моделирование термоконвективных процессов при однонаправленной кристаллизации сплавов с учетом движения свободных границ

© Ю.И. Димитриенко, С.В. Леонтьева

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, 105005, Россия

Рассмотрена задача термоконвекции в зоне расплава при однонаправленной кристаллизации металлического осесимметричного образца с наличием свободной границы поверхности (жидкого моста) в условиях микрогравитации. Математическая задача включает в себя систему уравнений Навье–Стокса в приближении Буссинеска с уравнением для массопереноса частиц примесей в жидкости, а также уравнения для движения свободной поверхности жидкости. Разработан численный алгоритм решения задачи, основанный на использовании метода функций вихря и тока, линеаризации и конечно-разностной аппроксимации с применением метода переменных направлений для решения разностной системы линейных уравнений. Выполнен расчет физических параметров термоконвективных процессов в зоне расплава. Показано, что учет движения свободной границы у кристаллизующейся жидкой фазы приводит к изменению распределения примесей вблизи поверхности отверждения, что, в свою очередь, вызывает изменение характеристик отвержденного материала.

Ключевые слова: *направленная кристаллизация, микрогравитация, несжимаемая вязкая жидкость, термоконвекция, поверхностное натяжение, свободная поверхность, жидкие мосты, численное моделирование*

Введение. Метод направленной кристаллизации является эффективным технологическим способом получения монокристаллических материалов: интерметаллидов, сплавов, в том числе наполненных наночастицами, а также некоторых типов полимерных материалов [1, 2]. Общепризнана перспективность применения направленной кристаллизации в условиях микрогравитации, достигаемой в условиях орбитального полета, параболического полета или иных способов ее создания [3–6]. Условия измененных сил гравитации создают возможность для получения кристаллов высокого структурного совершенства с равномерным или заданным распределением примесей. Задача моделирования процессов термоконвекции жидкого металлического расплава, насыщенного примесями, достаточно хорошо исследована. Известно, что важную роль в этих процессах играют эффекты сил поверхностного натяжения на свободной поверхности, определяемые температурным и концентрационным числами Марангони [3–9]. Однако проблема корректного моделирования процессов конвекции в условиях движения свободных жидких мостов с учетом нелинейных

эффектов, обусловленных движением свободной поверхности жидкости, еще далека от решения.

Цель настоящей работы — разработать численный алгоритм решения задачи термоконвекции при однонаправленной кристаллизации сплава с примесями в условиях микрогравитации с учетом нелинейной свободной формы движения границы жидкого моста, а также численное моделирование влияния свободной формы границы на термоконвективные процессы кристаллизующейся жидкой фазы.

Разработка математической модели термоконвективных и диффузионных процессов при однонаправленной кристаллизации. Рассмотрим термоконвективное и диффузионное движение несжимаемой вязкой жидкости (жидкого расплава с растворенными в нем частицами примесей) в цилиндрической системе координат Or–φz, связанной с движущимся фронтом кристаллизации (рис. 1). Термоконвекция обусловлена наличием продольного градиента температуры, массовой силой гравитации, а также силами поверхностного натяжения жидкости на свободной части поверхности. Гравитационная сила действует вдоль оси направленной кристаллизации. Она может быть вынужденной (вызванной дополнительными источниками колебаний) или пониженной (вызванной различными источниками микрогравитации) [1]. Силы поверхностного натяжения учитывают эффект Марангони, обусловленный зависимостью коэффициента поверхностного натяжения от температуры и концентрации примесей.

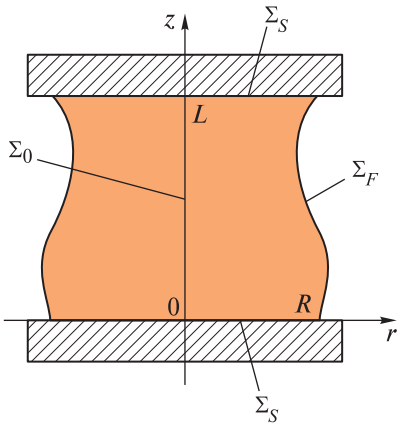


Рис. 1. Геометрическая модель термоконвективного движения жидкого сплава при однонаправленной кристаллизации со свободной границей

Математическая формулировка указанной задачи включает в себя систему уравнений Навье — Стокса в приближении Буссинеска с уравнением для массопереноса частиц примесей в жидкости. При этом предполагаются постоянными коэффициенты вязкости, теплопроводности, удельной теплоемкости и диффузии в жидкости, а в уравнении энергии пренебрегают выделением теплоты за счет вязкой диссипации и работы сил сжатия, а также термо- и бародиффузионными эффектами. С учетом данных предположений уравнения движения, переноса теплоты и массы неоднородной несжимаемой жидкости можно записать в следующем виде [2, 7]:

$$\begin{cases} \operatorname{div}\mathbf{v}=0; \\ \dfrac{\partial \mathbf{v}}{\partial t}+\mathbf{v}\nabla\otimes\mathbf{v}=\dfrac{\mu}{\rho}\Delta\mathbf{v}-\dfrac{1}{\rho}\nabla p+\mu_0 g\left(\beta_T\theta'+\beta_C Y'-1\right)\mathbf{e}_g+\mathbf{g}; \\ \dfrac{\partial \theta'}{\partial t}+\mathbf{v}\nabla\theta'=\dfrac{\lambda}{\rho c}\Delta\theta'; \\ \dfrac{\partial Y'}{\partial t}+\mathbf{v}\nabla Y'=D\Delta Y', \end{cases} \tag{1}$$

где $\theta'=\theta-\theta_0$; $Y'=Y-Y_0$ — отклонения температуры и концентрации частиц от их статических значений, θ_0, Y_0 — постоянные величины, исходные значения теммпературы и концентрации примесей, причем $Y'<<Y_0$; ρ — плотность; μ — коэффициент вязкости; λ — коэффициент теплопроводности; D — коэффициент диффузии; c — коэффициент удельной теплоемкости при постоянном давлении; g — ускорение свободного падения; ν — коэффициент микрогравитации (коэффициент снижения силы тяжести в условиях квазистатической невесомости) [1]; β_T и β_C — коэффициенты теплового и концентрационного изменения плотности; $\mathbf{e}_g$ — вектор, определяющий направление действие силы тяжести; $\mathbf{g}$ — вектор, задающий внешние ускорения; ∇ — набла-оператор [10, 11].

Искомые величины, которые зависят от пространственных координат и времени t, в системе (1) следующие: вектор скорости $\mathbf{v}$, давление p, температура θ', концентрация примеси Y'.

Граничные условия к системе (1) задаются на поверхностях Σ_S контакта с твердой фазой (исходный твердый материал и отвержденный материал), на свободной подвижной поверхности жидкости Σ_F и на оси симметрии задачи (при ее наличии).

На поверхностях Σ_S задаются условие прилипания, отсутствие диффузионного потока, а также температура плавления (или отверждения):

$$\Sigma_S:\ \mathbf{v}=0;\ \mathbf{n}\nabla Y'=0;\ \theta=\theta_S, \tag{2}$$

где $\mathbf{n}$ — вектор нормали к поверхности.

Условия на оси симметрии:

$$\Sigma_0:\ \mathbf{n}\mathbf{v}=0;\ \boldsymbol{\tau}\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial n}=0;\ \mathbf{n}\nabla Y'=0;\ \mathbf{n}\nabla\theta'=0, \tag{3}$$

где $\boldsymbol{\tau}$ — касательный вектор.

Условия на подвижной поверхности жидкости имеют вид [7]:

$$\Sigma_F: \; -p\mathbf{n} + \mathbf{n}\boldsymbol{\sigma}_v = \sigma_R \mathbf{n}(\nabla \cdot \mathbf{n}) + (\mathbf{E} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n})\nabla\sigma_R; \tag{4}$$

$$\mathbf{n}\nabla Y' = 0; \;\; \theta' = \theta_F(\mathbf{x}),$$

где $\mathbf{E}$ — метрический тензор; σ_R — коэффициент поверхностного натяжения, зависящий от температуры и концентрации примесей [1, 3, 6, 7]; $\theta_F(\mathbf{x})$ — заданная температура на свободной поверхности, изменяющаяся по координате по определенному закону; $\boldsymbol{\sigma}_v$ — тензор вязких напряжений жидкости;

$$\boldsymbol{\sigma}_v = \mu\left(\nabla \otimes \mathbf{v} + \nabla \otimes \mathbf{v}^T\right); \tag{5}$$

$$\nabla\mathbf{n} = R^{-1} = \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2}\right), \tag{6}$$

где R_1, R_2 — главные радиусы кривизны поверхности [10];

$$\sigma_R = \sigma_{R0} + \beta_{\sigma T}\theta' + \beta_{\sigma C}Y', \tag{7}$$

здесь $\beta_{\sigma T}$, $\beta_{\sigma C}$ — коэффициенты теплового и концентрационного изменения поверхностного натяжения (коэффициенты Марангони).

Уравнение движения свободной поверхности жидкости имеет вид [11]:

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \mathbf{v}\nabla F = 0, \tag{8}$$

где $F(\mathbf{x}, t) = 0$ — уравнение свободной поверхности.

Вектор нормали $\mathbf{n}$ на свободной поверхности Σ_F вычисляется по формуле [12]:

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla F}{|\nabla F|}. \tag{9}$$

Начальные условия к системе (1) имеют вид

$$t = 0: \; \theta' = 0; \;\; Y' = Y_0; \;\; \mathbf{v} = 0; \;\; F(\mathbf{x}, 0) = F_0(\mathbf{x}), \tag{10}$$

где $F_0(\mathbf{x})$ — начальная форма свободной поверхности.

Постановка осесимметричной задачи. Рассмотрим цилиндрическую систему координат $Or - \varphi z$, в которой ось Oz сонаправлена с вектором $\mathbf{e}_g$, определяющим направление действие силы тяжести. Примем допущения об отсутствии окружной составляющей у вектора ускорения $\mathbf{g}$: $g_\varphi = 0$, температурное поле θ' положим не зависящим

от φ: $\theta' = \theta'(r, z, t)$, начальную форму свободной поверхности будем считать осесимметричной

$$F = F(r, z, t) = r - f(z, t), \tag{11}$$

где $f(z, t)$ — функция формы свободной поверхности. Рассматриваемая область движения жидкости имеет вид

$$0 \le z \le L, \ \ 0 \le r \le f(z, t),$$

где L — высота области.

Тогда решение задачи (1)–(10) можно искать в осесимметричной форме

$$\theta', Y', F, v_r, v_z \,//\, r, z, t, \ \ v_\varphi = 0. \tag{12}$$

Для нахождения этих функций из (1)–(10) получим постановку осесимметричной задачи. Для этого введем функции вихря ω и тока ψ:

$$v_r = \frac{1}{r}\frac{\partial \psi}{\partial z}; \ \ v_z = -\frac{1}{r}\frac{\partial \psi}{\partial r}; \ \ \omega = \frac{\partial v_r}{\partial z} - \frac{\partial v_z}{\partial r}. \tag{13}$$

Уравнение несжимаемости при этом выполняется тождественно.

Введем характерные значения функций: $v_0, x_0, t_0, \theta_0, Y_0, p_0 = \rho v_0^2$, $\psi_0 = x_0^2 v_0$, а также безразмерные функции:

$$\overline{v_r} = \frac{v_r}{v_0}; \ \ \overline{v_z} = \frac{v_z}{v_0}; \ \ \overline{r} = \frac{r}{x_0}; \ \ \overline{z} = \frac{z}{x_0}; \ \ \overline{t} = \frac{t}{t_0}; \ \ \overline{\theta} = \frac{\theta}{\theta_0}; \ \ \overline{Y} = \frac{Y}{Y_0};$$

$$\overline{p} = \frac{p}{p_0}; \ \ \overline{\omega} = \frac{\omega x_0}{v_0}. \tag{14}$$

Тогда система уравнений (1) в осесимметричной безразмерной форме может быть сведена к следующему виду:

$$\begin{cases} \mathrm{Eu}\dfrac{\partial \overline{\omega}}{\partial \overline{t}} + \dfrac{\overline{v}_r}{\overline{r}}\dfrac{\partial \overline{r}\,\overline{\omega}}{\partial \overline{r}} + \overline{v}_z \dfrac{\partial \overline{\omega}}{\partial \overline{z}} = \dfrac{1}{\mathrm{Re}}\left(\overline{\Delta}\overline{\omega} - \dfrac{\overline{\omega}}{\overline{r}^2}\right) - \mathrm{Gr}_\theta \dfrac{\partial \overline{\theta}}{\partial \overline{r}} - \mathrm{Gr}_Y \dfrac{\partial \overline{Y}}{\partial \overline{r}}; \\ \dfrac{\partial^2 \overline{\psi}}{\partial \overline{r}^2} - \dfrac{1}{\overline{r}}\dfrac{\partial \overline{\psi}}{\partial \overline{r}} + \dfrac{\partial^2 \overline{\psi}}{\partial \overline{z}^2} = \overline{r}\,\overline{\omega}; \\ \overline{\Delta}\overline{p} = H(\psi) + \mathrm{Gr}_\theta \dfrac{\partial \overline{\theta}}{\partial \overline{z}} + \mathrm{Gr}_Y \dfrac{\partial \overline{Y}}{\partial \overline{z}}; \\ \mathrm{Eu}\dfrac{\partial \overline{\theta}}{\partial \overline{t}} + \overline{v}_r \dfrac{\partial \overline{\theta}}{\partial \overline{r}} + \overline{v}_z \dfrac{\partial \overline{\theta}}{\partial \overline{z}} = \dfrac{1}{\mathrm{Pr}\,\mathrm{Re}}\overline{\Delta}\overline{\theta}; \\ \mathrm{Eu}\dfrac{\partial \overline{Y}}{\partial \overline{t}} + \overline{v}_r \dfrac{\partial \overline{Y}}{\partial \overline{r}} + \overline{v}_z \dfrac{\partial \overline{Y}}{\partial \overline{z}} = \dfrac{1}{\mathrm{Sc}\,\mathrm{Re}}\overline{\Delta}\overline{Y}, \end{cases} \tag{15}$$

где $\bar{\Delta} = \dfrac{\partial^2}{\partial \bar{r}^2} + \dfrac{1}{\bar{r}}\dfrac{\partial}{\partial \bar{r}} + \dfrac{\partial^2}{\partial \bar{z}^2}$ — оператор Лапласа для осесимметричной задачи в безразмерной форме; $\bar{H}(\psi)$ — функция, определяемая соотношениями

$$\bar{H}(\psi) = \frac{\rho}{p_0 x_0^2} H(\psi); \;\; H(\psi) = \nabla \otimes \mathbf{v} \cdot\cdot \nabla \otimes \mathbf{v}. \tag{16}$$

После подстановки в (16) выражений (13) получаем представление $\bar{H}(\psi)$ через функцию тока

$$\bar{H}(\psi) = \frac{2}{\bar{r}^2}\left(\left(\frac{\partial^2 \bar{\psi}}{\partial \bar{r}\partial \bar{z}}\right)^2 + \frac{1}{\bar{r}}\left(\frac{\partial \bar{\psi}}{\partial \bar{z}}\right)^2\left(\frac{1}{\bar{r}}\frac{\partial \bar{\psi}}{\partial \bar{z}} - \frac{\partial^2 \bar{\psi}}{\partial \bar{r}\partial \bar{z}}\right) + \left(\frac{1}{\bar{r}}\frac{\partial \bar{\psi}}{\partial \bar{r}} - \frac{\partial^2 \bar{\psi}}{\partial \bar{r}^2}\right)\frac{\partial^2 \bar{\psi}}{\partial \bar{z}^2}\right). \tag{17}$$

В систему уравнений (15) введены следующие безразмерные параметры (критерии): Re — число Рейнольдса; Eu — число Эйлера; Gr — число Грасгофа; Gr_C — концентрационное число Грасгофа; Pr — число Прандтля; $\mathrm{Sc} = \mathrm{Pr}_\mathrm{D}$ — число Шмидта (диффузионное число Прандтля); Mn — число Марангони; Mn_Y — концентрационное число Марангони

$$\mathrm{Re} = \frac{\rho v_0 x_0}{\mu}; \;\; \mathrm{Eu} = \frac{x_0}{v_0 t_0}; \;\; \mathrm{Pr} = \frac{\mu c}{\lambda}; \;\; \mathrm{Sc} = \mathrm{Pr}_\mathrm{D} = \frac{\mu}{\rho D};$$

$$\mathrm{Gr} = \frac{g\beta_T \theta_0 x_0^3 \rho^2}{\mu^2}; \;\; \mathrm{Gr}_C = \frac{g_0 \beta_C Y_0 x_0^3 \rho^2}{\mu^2}; \;\; Gr_\theta = \frac{\mathrm{Gr}}{\mathrm{Re}^2}; \;\; Gr_Y = \frac{\mathrm{Gr}_C}{\mathrm{Re}^2};$$

$$\mathrm{Mn} = \frac{\beta_{\sigma T} \theta_0 x_0 \rho}{\mu\lambda}; \;\; \mathrm{Mn}_Y = \frac{\beta_{\sigma T} Y_0 x_0 \rho}{\mu\lambda}. \tag{18}$$

Введем подвижные координаты, связанные с движением свободной поверхности:

$$r' = \frac{r}{f(z,t)}; \;\; z' = z. \tag{19}$$

Тогда имеют место следующие выражения для первых производных в новых координатах

$$\frac{\partial \omega}{\partial r} = \frac{1}{f}\frac{\partial \omega}{\partial r'}; \;\; \frac{\partial \omega}{\partial z} = \frac{\partial \omega}{\partial z'} - \frac{\partial \omega}{\partial r'}\frac{f_z r'}{f}; \;\; \frac{\partial \omega}{\partial t} = \frac{\partial \omega}{\partial t} - \frac{\partial \omega}{\partial r'}\frac{f_t r'}{f}, \tag{20}$$

а также для вторых производных

$$\frac{\partial^2\omega}{\partial r^2}=\frac{1}{f^2}\frac{\partial^2\omega}{\partial r'^2};$$

$$\frac{\partial^2\omega}{\partial \bar{z}^2}=\frac{\partial^2\omega}{\partial z'^2}-\frac{2f_z r'}{f^2}\frac{\partial^2\omega}{\partial r'\partial z'}+\left(\frac{f_z r'}{f^2}\right)^2\frac{\partial^2\omega}{\partial r'^2}-\frac{\partial\omega}{\partial r'}\frac{r'}{f^2}\left(ff_{zz}-2f_z^2\right); \qquad (21)$$

$$\frac{\partial^2\omega}{\partial r\partial z}=\frac{1}{f}\frac{\partial^2\omega}{\partial z'\partial r'}-\frac{\partial\omega}{\partial r'}\frac{f_z}{f^2}-\frac{\partial^2\omega}{\partial r'^2}\frac{f_z r'}{f^2}.$$

Производные от функции формы свободной поверхности обозначены:

$$f_z=\frac{\partial}{\partial z}f(z,t);\quad f_{zz}=\frac{\partial^2}{\partial z^2}f(z,t);\quad f_t=\frac{\partial}{\partial t}f(z,t).$$

В подвижных координатах имеют место также следующие представления:

$$\mathrm{Eu}\frac{\partial\omega}{\partial t}+\frac{v_r}{f}\frac{\partial\omega}{\partial r}+v_z\frac{\partial\omega}{\partial z}=\mathrm{Eu}\frac{\partial\omega}{\partial t}+V_r\frac{\partial\omega}{\partial r}+v_z\frac{\partial\omega}{\partial z'};$$

$$\Delta=\frac{1}{f^2}\frac{\partial^2}{\partial r'^2}+\frac{\partial^2}{\partial z'^2}-2U_r\frac{\partial^2}{\partial r'\partial z'}+W_r\frac{\partial}{\partial r'}, \qquad (22)$$

где обозначены функции

$$V_r=\frac{1}{f}(v_r-Euf_t r'-f_z r');\quad W_r=\frac{1}{f^2}\left(2f_z^2 r'+\frac{1}{r'}-ff_{zz}r'\right);$$

$$U_r=\frac{f_z r'}{f};\quad \tilde{W}_r=\frac{1}{f^2}\left(2f_z^2 r'-\frac{1}{r'}-ff_{zz}r'\right);\quad \Omega=\frac{v_r}{r'f}+\frac{1}{\mathrm{Re}(r'f)^2}. \qquad (23)$$

Тогда систему (15) можно записать в подвижных координатах, опуская черту над переменными:

$$\mathrm{Eu}\frac{\partial\omega}{\partial t}+V_r\frac{\partial\omega}{\partial r'}+v_z\frac{\partial\omega}{\partial z'}=\frac{1}{\mathrm{Re}}\Delta\omega-\Omega\omega-\frac{\mathrm{Gr}_\theta}{f}\frac{\partial\theta}{\partial r'}-\frac{\mathrm{Gr}_Y}{f}\frac{\partial Y}{\partial r'};$$

$$\frac{1}{f^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial r'^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z'^2}-U_r\frac{\partial^2\psi}{\partial r'\partial z'}+\tilde{W}_r\frac{\partial\psi}{\partial r'}=r'f\omega; \qquad (24)$$

$$\Delta p=\frac{2}{r'^2f^2}\left(\bar{H}(\psi)+\mathrm{Gr}_\theta\left(\frac{\partial\theta}{\partial z'}-U_r\frac{\partial\theta}{\partial r'}\right)+\mathrm{Gr}_Y\left(\frac{\partial Y}{\partial z'}-U_r\frac{\partial Y}{\partial r'}\right)\right);$$

$$\mathrm{Eu}\frac{\partial\theta}{\partial t}+V_r\frac{\partial\theta}{\partial r'}+v_z\frac{\partial\theta}{\partial z'}=\frac{1}{\mathrm{Re}\,\mathrm{Pr}}\Delta\theta;\ \mathrm{Eu}\frac{\partial Y}{\partial t}+V_r\frac{\partial Y}{\partial r'}+v_z\frac{\partial Y}{\partial z'}=\frac{1}{\mathrm{Re}\,Sc}\Delta Y.$$

Систему (24) дополняет уравнение движения свободной поверхности жидкости (8), которое с учетом выражения (11) можно записать в виде

$$\frac{\partial f}{\partial t}+v_z\frac{\partial f}{\partial z}=v_r. \tag{25}$$

Компоненты нормали **n** связаны с формой свободной поверхности следующими формулами:

$$n_r=\frac{f_z}{f_n};\ n_\varphi=0;\ n_z=-\frac{1}{f_n};\ f_n=\sqrt{1+f_z^2}. \tag{26}$$

Введем касательный вектор к подвижной поверхности, ортогональный к **n**, компоненты которого τ_j имеют вид

$$\tau_r=\frac{1}{f_n};\ \tau_\varphi=0;\ \tau_z=-\frac{f_z}{f_n}. \tag{27}$$

Границы области решения в подвижных переменных имеют вид $\Sigma_S=\{z=0\cup z=z_S\};\ \Sigma_0=\{r'=0\};\ \Sigma_F=\{r'=r_F\}$.

Граничные условия (2)–(4) в осесимметричной постановке записывают следующим образом в подвижных координатах:

$$\text{на } \Sigma_S=\{z=z_S\}:\begin{cases}\omega(z_S,r')=\dfrac{1}{fr'}\dfrac{\partial^2\psi}{\partial z^2}(z_S,r');\\ \psi(z_S,r')=0;\\ \dfrac{\partial p}{\partial z}(z_S,r')=\dfrac{1}{\mathrm{Re}}\dfrac{\partial\omega}{\partial z}(z_S,r)+\mathrm{Gr}_\theta\theta(z_S,r')+\mathrm{Gr}_C Y(z_S,r');\\ \theta(z_S,r')=\theta_S;\\ \dfrac{\partial Y}{\partial z}(z_S,r')=0.\end{cases} \tag{28}$$

$$\text{на } \Sigma_S=\{z=0\}:\begin{cases}\omega(0,r')=\dfrac{1}{fr'}\dfrac{\partial^2\psi}{\partial z^2}(0,r);\\ \psi(0,r')=0;\\ \dfrac{\partial p}{\partial z}(0,r')=\dfrac{1}{\mathrm{Re}}\dfrac{\partial\omega}{\partial z}(0,r')+\mathrm{Gr}_\theta\theta(0,r')+\mathrm{Gr}_C Y(0,r');\\ \theta(0,r')=\theta_S;\\ \dfrac{\partial Y}{\partial z}(0,r')=0.\end{cases} \tag{29}$$

$$\text{на } \Sigma_0 = \{r' = 0\}: \begin{cases} \omega(z,0) = 0, \ \psi(z,0) = 0; \\ \dfrac{\partial p}{\partial r'}(z,0) = 0; \ \dfrac{\partial \theta}{\partial r'}(z,0) = 0; \ \dfrac{\partial Y}{\partial r'}(z,0) = 0. \end{cases} \tag{30}$$

Условия (4) на подвижной поверхности жидкости Σ_F в подвижных координатах записывают так:

$$\Sigma_F: \begin{cases} -\mathrm{Re}\, p + \sigma_{vij} n_i n_j = R^{-1}\left(\dfrac{Mn}{\mathrm{Re}\,\mathrm{Pr}}(\theta - 1) + \dfrac{Mn_Y}{\mathrm{Re}\,\mathrm{Pr}}(Y - 1)\right); \\ \sigma_{vij} n_i \tau_j = \dfrac{Mn}{\mathrm{Re}\,\mathrm{Pr}}\dfrac{\partial \theta}{\partial \tau} + \dfrac{Mn_Y}{\mathrm{Re}\,\mathrm{Pr}}\dfrac{\partial Y}{\partial \tau}; \\ \dfrac{\partial Y}{\partial n} = 0; \\ \theta = \theta_F(\mathbf{x}). \end{cases} \tag{31}$$

Безразмерная средняя кривизна подвижной поверхности (6) для осесимметричного случая имеет вид

$$R^{-1} = \frac{1 + f_z^2 + ff_{zz}}{ff_n^3}. \tag{32}$$

Нормальная и касательная составляющие вектора вязких напряжений $\sigma_{vij} n_i$ (5) для рассматриваемого случая имеют следующий вид:

$$\sigma_{vij} n_i n_j = \sigma_{vrr} n_r^2 + \sigma_{vzz} n_z^2 + 2\sigma_{vrz} n_r n_z; \tag{33}$$

$$\sigma_{vij} n_i \tau_j = \sigma_{vrr} \tau_r n_r + \sigma_{vzz} \tau_z n_z + \sigma_{vrz}(\tau_r n_z + \tau_z n_r),$$

где компоненты тензора вязких напряжений в подвижных координатах выражаются по следующим формулам:

$$\sigma_{vrr} = \frac{1}{f}\frac{\partial v_r}{\partial r'}; \ \sigma_{vzz} = \frac{\partial v_z}{\partial z'} - \frac{\partial v_z}{\partial r'}\frac{f_z r'}{f};$$

$$\sigma_{vrz} = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{f}\frac{\partial v_z}{\partial r'} + \frac{\partial v_r}{\partial z'} - \frac{\partial v_r}{\partial r'}\frac{f_z r'}{f}\right). \tag{34}$$

В формулах (31) обозначены производные по нормали и по касательному направлению к подвижной поверхности

$$\frac{\partial}{\partial n} = \frac{n_r - n_z f_z r'}{f}\frac{\partial}{\partial r} + n_z \frac{\partial}{\partial z'}; \ \frac{\partial}{\partial \tau} = \frac{\tau_r - \tau_z f_z r'}{f}\frac{\partial}{\partial r} + \tau_z \frac{\partial}{\partial z'}. \tag{35}$$

Численный алгоритм решения задачи. Для построения численного алгоритма решения задачи (24), (25) с условиями (28)–(31) область непрерывного изменения аргументов z', r', t была заменена разностной сеткой:

$z_i = i\Delta z,\ i = 0, 2, \ldots, N_1;$

$r_j = j\Delta r,\ j = 0, 2, \ldots, N_2;$

$t^n = n\Delta t,\ n = 0, 1, \ldots, T,$

где $\Delta z,\ \Delta r,\ \Delta t$ — шаги по координатам и времени. Значения функций в узлах разностной сетки обозначим как $\theta^n_{i,j} = \theta(z_i, r_j, t^n)$.

Система уравнений (24) является нелинейной, уравнения для функции вихря, температуры и концентрации относятся к параболическому типу, а уравнения для функции тока и давления — к эллиптическому. Для численного решения нелинейной задачи были выполнены такие шаги: использован метод линеаризации по временному шагу; для уравнений эллиптического типа применено искусственное время, вследствие чего вся система уравнений (24) была решена с помощью неявной разностной схемы переменных направлений (продольно-поперечная схема [13, 14], в которой наряду с основными значениями искомой сеточной функции u^n и u^{n+1} введено значение $u^{n+1/2}$ на промежуточном шаге. Переход от временного слоя n к слою $n + 1$ совершается в два этапа с шагами $0{,}5\Delta t$:

$$Eu\frac{\Phi^{m+1/2}_{ij} - \Phi^m_{ij}}{t^{(1)}_{m+1}} = \Lambda_1\Phi^{m+1/2}_{ij} + \Lambda_2\Phi^m_{ij} + \Gamma^m;$$

$$Eu\frac{\Phi^{m+1}_{ij} - \Phi^{m+1/2}_{ij}}{t^{(2)}_{m+1}} = \Lambda_1\Phi^{m+1/2}_{ij} + \Lambda_2\Phi^{m+1}_{ij} + \Gamma^m.$$

Здесь $\tau^{(1)}_{m+1} > 0$ и $\tau^{(2)}_{m+1} > 0$ — итерационные параметры, выбираемые из условия минимума итераций по Жордану; Φ — координатный столбец неизвестных функций; Λ_1, Λ_2 — диагональные матрицы с диагональными элементами $\Lambda_{1,\alpha}$ $\Lambda_{2,\alpha}$; $\alpha = 1, ..., 5.$

$$\Phi = (\omega, \psi, p, \theta, Y);$$

$$\Lambda_{1,1} = \frac{1}{\mathrm{Re}\, f^2}\frac{\partial^2}{\partial r'^2} + \frac{W_r}{\mathrm{Re}}\frac{\partial}{\partial r'} - V_r\frac{\partial}{\partial r'} - \Omega;\ \ \Lambda_{2,1} = \frac{1}{\mathrm{Re}}\frac{\partial^2}{\partial z'^2} - v_z\frac{\partial}{\partial z'};$$

$$\Lambda_{1,2} = \frac{1}{f^2}\frac{\partial^2}{\partial r'^2} + \tilde{W}_r\frac{\partial}{\partial r'};\ \ \Lambda_{2,2} = \frac{\partial^2}{\partial z'^2};$$

$$\Lambda_{1,3} = \frac{1}{f^2}\frac{\partial^2}{\partial r'^2} + W_r \frac{\partial}{\partial r'};\ \ \Lambda_{2,3} = \frac{\partial^2}{\partial z'^2};$$

$$\Lambda_{1,4} = \frac{1}{\mathrm{Re}\,\mathrm{Pr}}\left(\frac{1}{f^2}\frac{\partial^2}{\partial r'^2} + W_r \frac{\partial}{\partial r'}\right) - V_r \frac{\partial}{\partial r'};\ \ \Lambda_{1,4} = \frac{1}{\mathrm{Re}\,\mathrm{Pr}}\frac{\partial^2}{\partial z'^2} - v_z \frac{\partial}{\partial z'}.$$

Заменяя частные производные, входящие в дифференциальные уравнения (26), (28), разностными отношениями, получим двухшаговую разностную схему, которая на первом шаге неявна по направлению z и явна по направлению r, на втором шаге схема явна по z и неявна по r. Численное решение системы (29) с граничными и начальными условиями осуществлялось методом прогонки.

Для численного решения уравнения (25) применялась следующая двухэтапная разностная схема:

$$\frac{f_i^{m+1/2} - f_i^m}{\Delta t / 2} + v_{ziN}^m \frac{f_{i+1}^m - f_{i-1}^m}{2\Delta z} = v_{riN}^m;$$

$$\frac{f_i^{m+1} - f_i^{m+1/2}}{\Delta t / 2} + v_{ziN}^m \frac{f_{i+1}^{m+1/2} - f_{i-1}^{m+1/2}}{2\Delta z} = v_{riN}^m.$$

Результаты численной реализации математической модели. В качестве отверждающейся жидкости был рассмотрен никелевый жидкий расплав. При расчетах были приняты следующие значения параметров:

$$\beta_C = 10^{-4}\ K^{-1};\ \ \beta_Y = 2,43;\ \ \theta_0 = \theta_m = 1600\,\mathrm{K};\ \ \Delta\theta = \theta_m - \theta_s = 200\,\mathrm{K};$$

$$Y_0 = 0,01;\ \ \mu = 3\cdot 10^{-3}\ \mathrm{Па}\cdot\mathrm{с};\ \ \rho = 7,8\cdot 10^3\ \mathrm{кг/м^3};\ \ \lambda = 50\ \mathrm{Вт/(м\cdot К)};$$

$$c = 460\,\mathrm{Дж/(кг\cdot К)};\ \ D = 0,8\cdot 10^{-9}\ \mathrm{м^2/с};\ \ t_0 = 3,6\cdot 10^3\ \mathrm{с};\ \ \mathrm{Eu} = 10;$$

$$x_0 = R = 0,1\ \mathrm{м};\ \ g = 9,8\ \mathrm{м/с^2};\ \ P_0 = 10^5\ \mathrm{Па};\ \ \sigma_R = 1,7\cdot 10^6\ \mathrm{Н/м};\ \ \mu_0 = 0,1.$$

Соотношение геометрических размеров расчетной области: характерного радиуса к длине по z: $R / L = 0,5$, безразмерное уравнение начальной формы поверхности расплавленной зоны: $f(z,0) = 1 + 0,3\sin(\frac{\pi}{2}z)$.

На рис. 2–5 приведены расчетные значения параметров жидкости для случая, когда граница Σ_F рассматривается как жесткая стенка; на рис. 6–10 — для случая, когда граница Σ_F рассматривается как свободная поверхность. Все изображенные функции безразмерные.

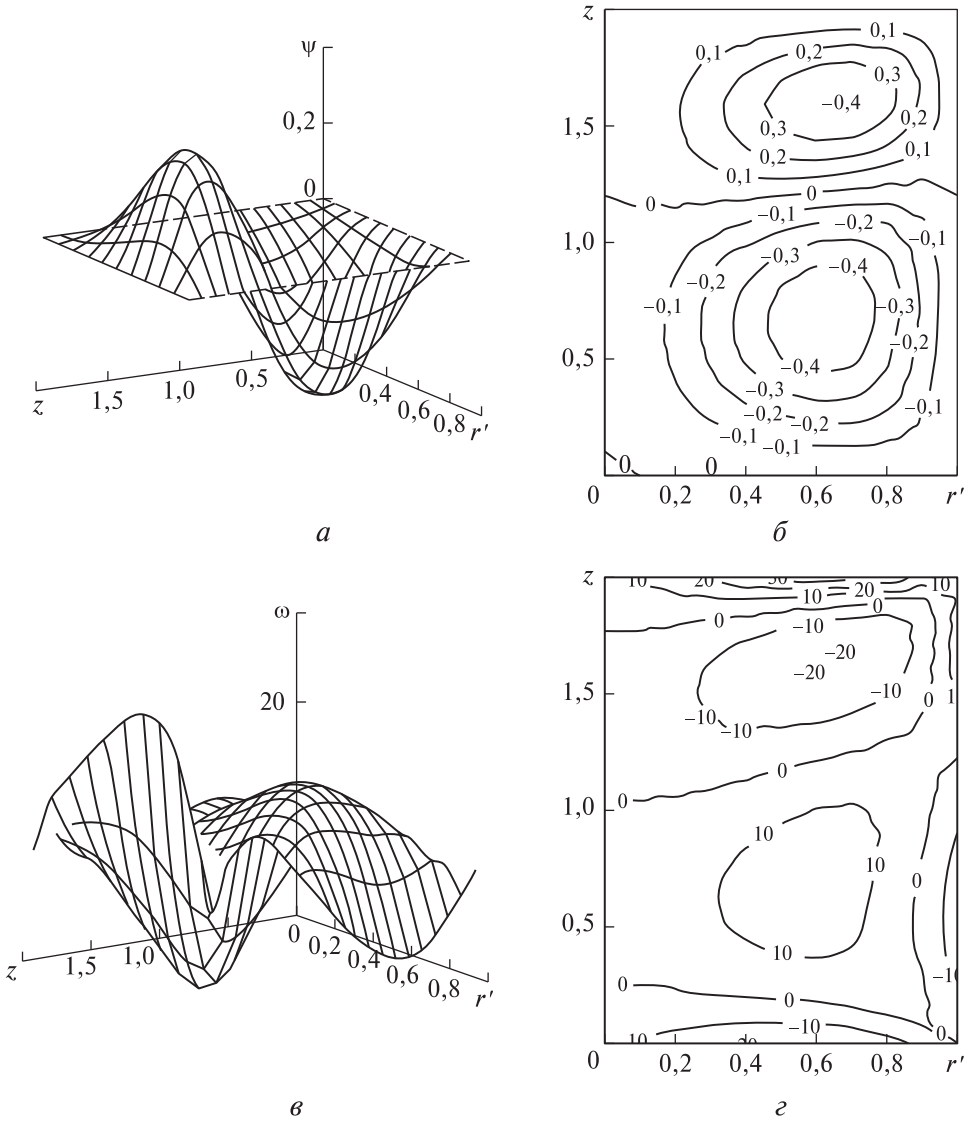


Рис. 2. 3D-визуализация и линии уровня тока ψ (*а*, *б*) и вихря ω (*в*, *г*) при условии, что Σ_F — жесткая стенка

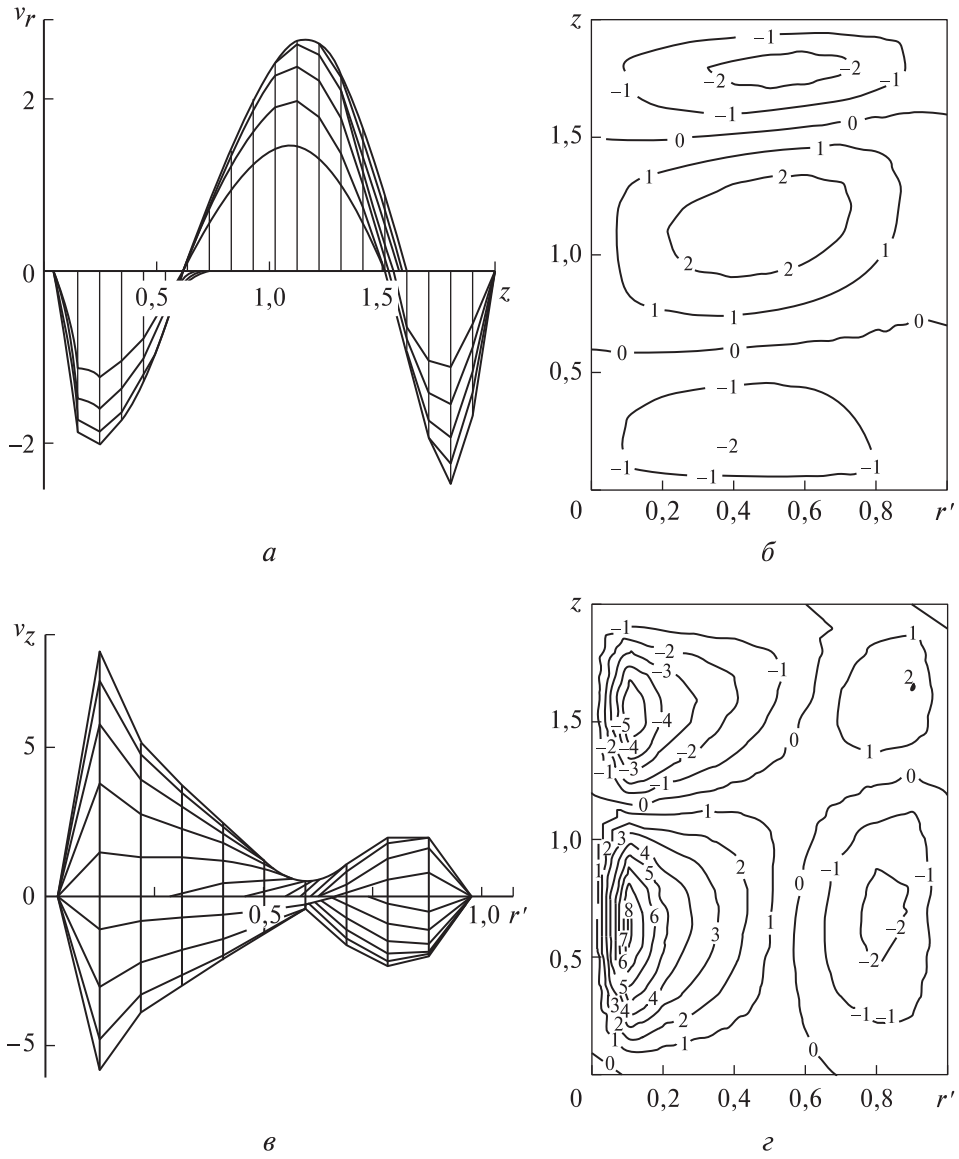
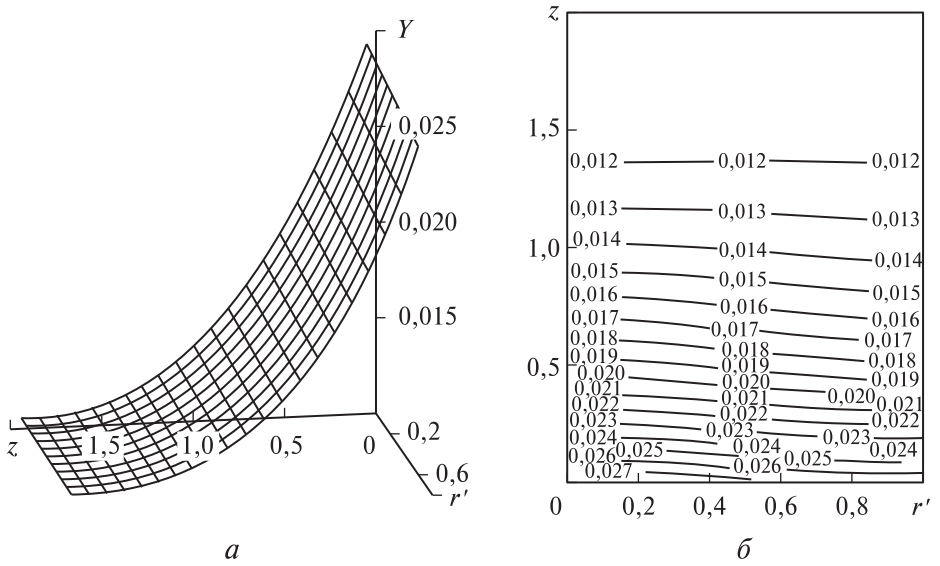
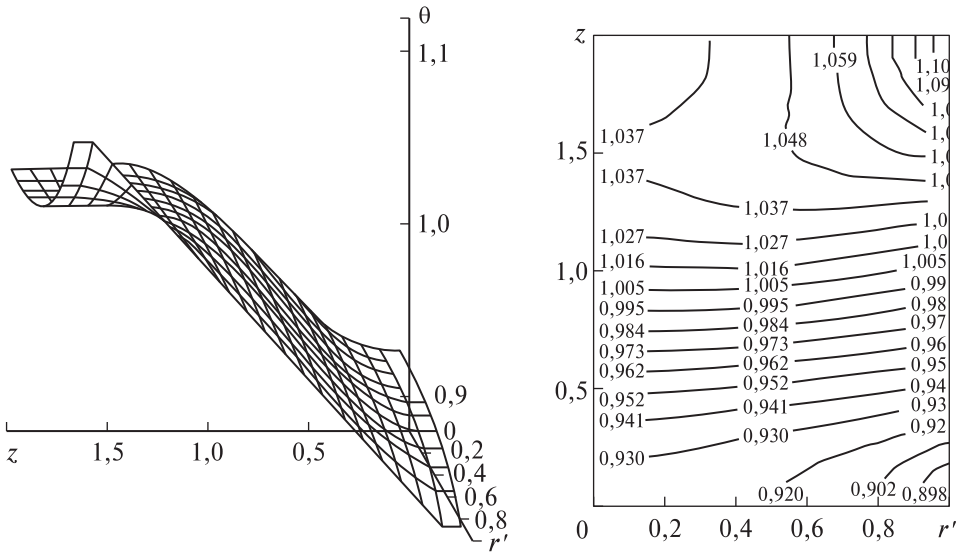


Рис. 3. 3D-визуализация, линии уровня безразмерных компонент вектора скорости v_r (*а, б*) и v_z (*в, г*) в области движения расплава при условии, что Σ_F — жесткая стенка



а *б*

Рис. 4. 3D-визуализация (*а*) и линии уровня (*б*) концентрации *Y* при условии, что Σ_F — жесткая стенка



а *б*

Рис. 5. 3D-визуализация (*а*) линии уровня (*б*) безразмерной температуры θ при условии, что Σ_F — жесткая стенка

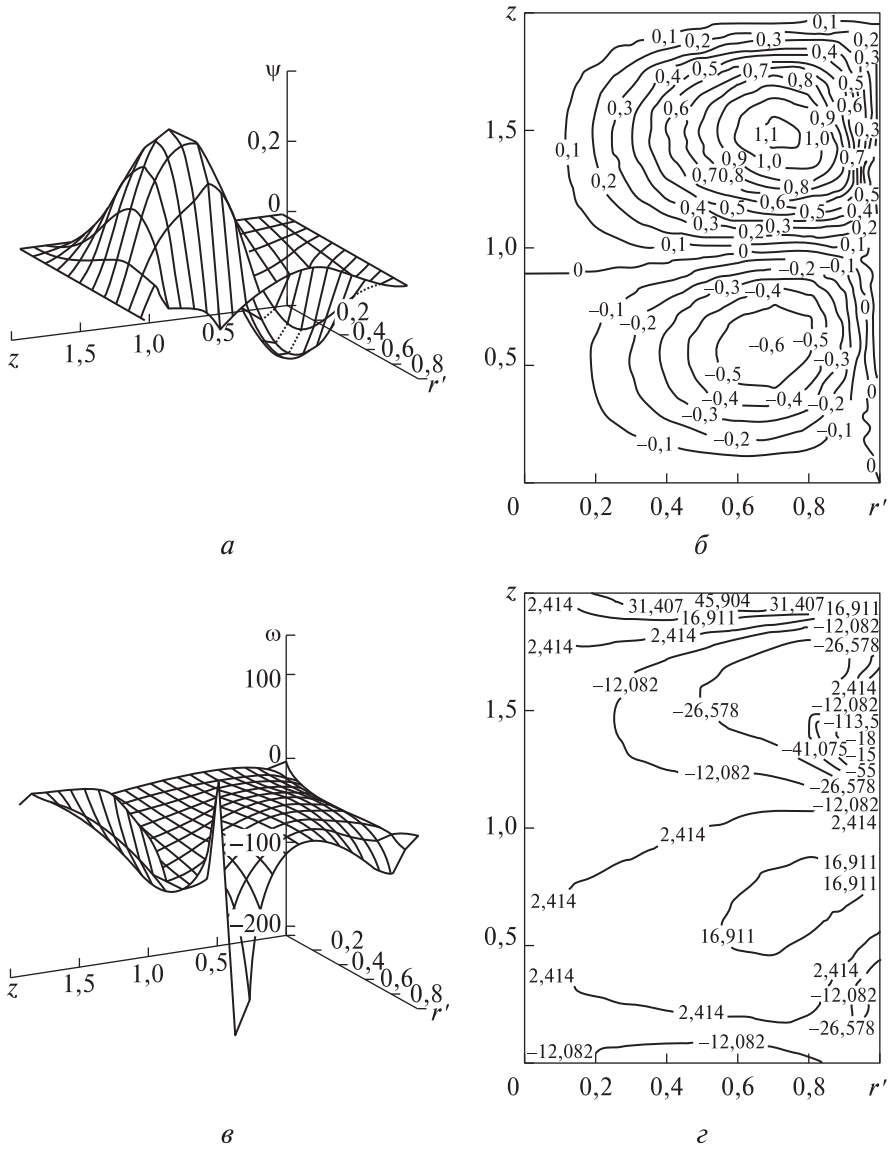


Рис. 6. 3D-визуализация и линии функций тока ψ (*а, б*) и вихря ω (*в, г*) в области движения жидкого расплава при условии, что Σ_F — подвижная граница

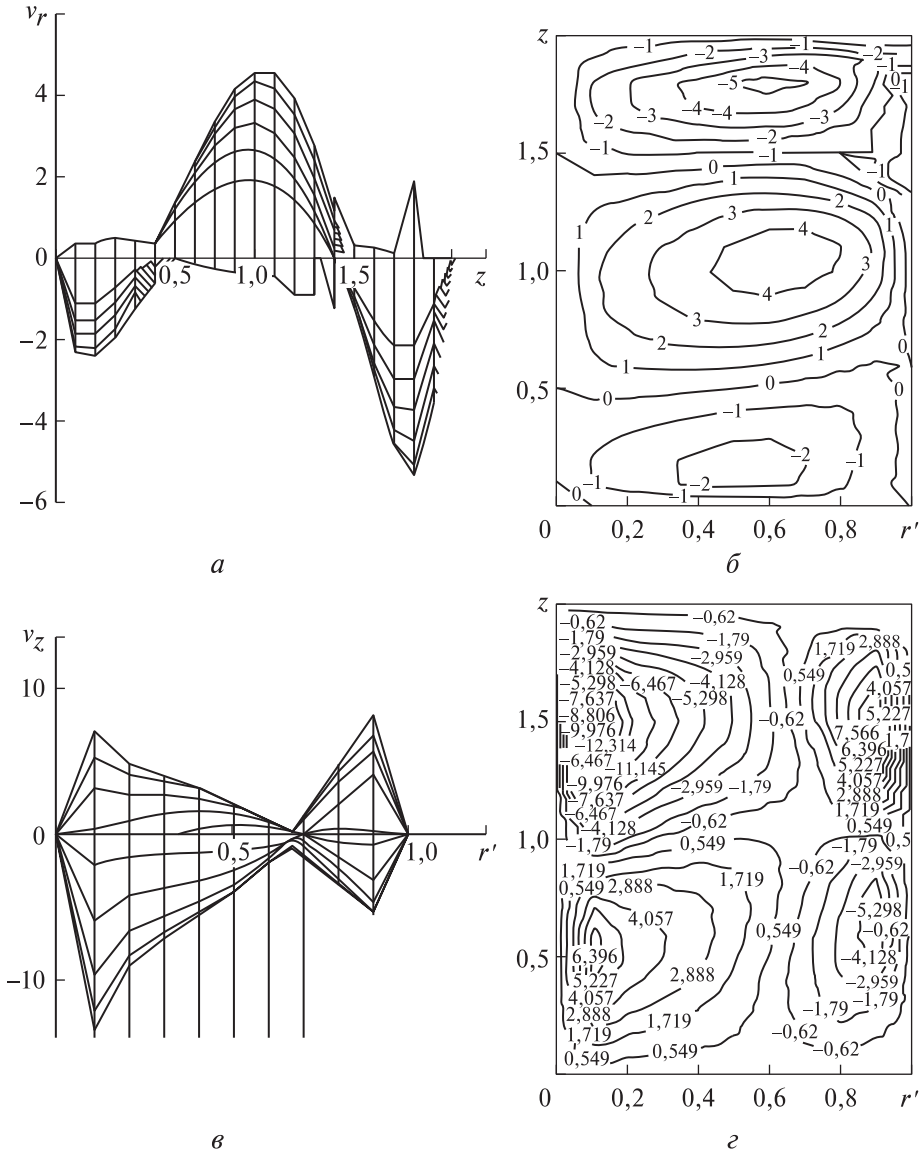
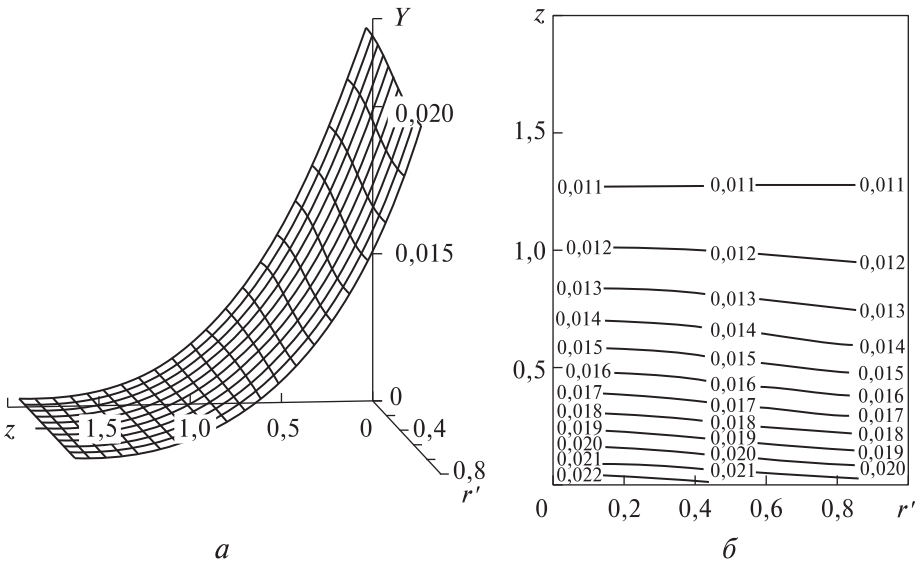
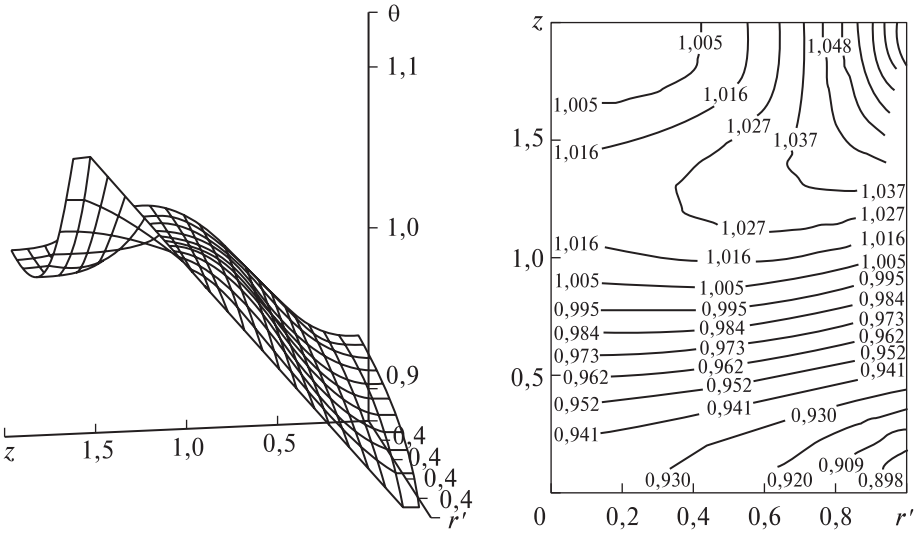


Рис. 7. 3D-визуализация и линии уровня безразмерных компонент вектора скорости v_r (*а*, *б*) и v_z (*в*, *г*) в области движения расплава при условии, что Σ_F — подвижная граница



а *б*

Рис. 8. 3D-визуализация (*а*) и линии уровня (*б*) концентрации *Y* при условии, что Σ_F — подвижная граница



а *б*

Рис. 9. 3D-визуализация (*а*) и линии уровня (*б*) безразмерной температуры θ при условии, что Σ_F — подвижная граница

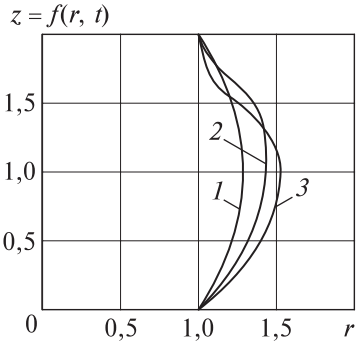


Рис. 10. Изменение формы свободной поверхности Σ_F во времени:
1 — $t = 0$; *2* — $t = 1$ ч; *3* — $t = 2$ ч

Характер распределения компонент вектора скорости показывает, что движение жидкости в рассматриваемой области носит циркуляционный характер, поскольку компоненты скорости меняют свой знак. На линиях уровня, когда радиальная составляющая скорости v_r обращается в ноль, компонента v_z достигает своих пиковых значений. Полученные режимы циркуляционного конвективного течения обусловлены заданным постоянным перепадом температуры на боковой поверхности. При заданной геометрии области возникает структура течения, состоящая из двух ячеек. Линии функции тока совпадают с траекториями движения жидкости и позволяют получить достаточно полную информацию о характере течения.

Примерно на высоте $z = 0{,}5L$ радиальный поток разделяется на два потока, устремляющихся к торцам вдоль боковой поверхности. Вблизи торцов направление движения изменяется, а интенсивность падает. Это означает, что в этих местах образуются зоны устойчивости и основная циркуляция оттесняется от них. У оси симметрии встречные потоки имеют максимальную интенсивность. Такое движение влияет на распределение температуры, что вызывает колебания ее значений в углах области. В центральной по высоте части слоя изотермы практически горизонтальны. На этом участке поток направлен по радиальной составляющей, вследствие чего температура выравнивается.

При наличии свободной границы возникающее конвективное течение становится более сложным, что сказывается на распределении температуры. Если для случая жесткой стенки температурное поле внутри рассматриваемой жидкой зоны практически повторяет заданный на боковой поверхности линейный профиль, то для случая свободной поверхности температурные профили на боковой поверхности и на оси симметрии различаются значительно. На оси симметрии максимум температуры находится не на горячей границе, а внутри жидкого моста.

Изолинии концентрации показывают, что распределение частиц примеси по высоте имеет нелинейный характер и практически не изменяется в поперечном направлении, максимальные значения достигаются у фронта кристаллизации. Полученная в ходе вычислений форма свободной поверхности обусловлена наличием сил гравита-

ции, направленной вдоль оси симметрии тела. Наличие свободной формы границы приводит к более быстрому движению частиц кристаллизующейся жидкости.

Выводы. Рассмотрена модель термоконвективных процессов, которые имеют место при однонаправленной кристаллизации сплавов с примесями в условиях микрогравитации с учетом свободной формы движения границы (жидкого моста).

Предложен алгоритм численного решения задачи с неизвестной формой поверхности свободной границы, основанный на преобразовании базовой системы уравнений к неподвижной области с фиксированными границами.

Для решения преобразованной системы нелинейных уравнений применен метод линеаризации по временному шагу в сочетании с разностной схемой метода переменных направлений.

Проведенный сравнительный анализ термоконвективного движения жидкого расплава в зоне однонаправленной кристаллизации показал, что учет формоизменения жидкого моста в процессе нагрева заметно влияет на результаты моделирования: при учете свободной формы границы скорость движения частиц кристаллизующейся жидкости больше, на оси симметрии максимум температуры находится не на горячей границе, а внутри жидкого моста, а температурные профили на боковой поверхности и на оси симметрии различаются сильнее, чем без учета движения свободной поверхности.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Волков П.К. Конвекция в жидкости на Земле и в космосе. *Природа*, 2001, № 11, с. 35–43.

[2] *Математическое моделирование конвективного тепломассообмена на основе уравнений Навье-Стокса*. Авдуевский В.С., ред. Москва, Наука, 1987, 258 с.

[3] Shevtsova V.M., Melnikov D.E., Legros J.-C., Yan Y., Saghir Z., Lyubimova T., Sedel G. Influence of vibrations on thermodiffusion in binary mixture: a benchmark of numerical solutions. *Physics of Fluids*, 2007, vol. 19 (1), 017111.

[4] Shevtsova V.M., Ermakov M.K., Ryabitskii E., Legros J.C. Oscillations of a liquid bridge free surface due to the thermal convection. *Acta. Astronautica*, 1997. 41. pp. 471–479.

[5] Melnikov D.E., Pushkin D., Shevtsova V. Accumulation of particles in time-dependent thermocapillary flow in a liquid bridge. Modeling of experiments, *The European Physical Journal Special Topics*, 2011, vol. 192 (1), pp. 29–39.

[6] Ermakov M.K., Nikitin S.A., Polezhaev V.I. A system and a computer laboratory for modeling convective heat and mass transfer. *Fluid Dynamics*, 1997, vol. 23, no. 3, pp. 338–350.

[7] Martínez I., Perales J.M., Meseguer J. Response of a Liquid Bridge to an Acceleration Varying Sinusoidally with Time. *Lecture Notes in Physics*, 1996, vol. 464, pp. 271–282.

[8] Kulikov V., Briesen H., Marquardt W. Scale integration for the coupled simulation of crystallization and fluid dynamics. *Chemical Engineering Research and Design*, 2005, vol. 83, pp. 706–717.

[9] Nishino K., Yano T., Kawamura H., Matsumoto S., Ueno I., Ermakov M.K. Instability of Thermocapillary convection in long bridges of high Prandtl number fluids in microgravity. *Journal of Crystal Growth*, 2015, vol. 420, pp. 57–63.

[10] Димитриенко Ю.И. *Механика сплошной среды*. Т. 1: *Тензорный анализ.* Москва, Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2011, 463 с.

[11] Dimitrienko Yu.I. *Nonlinear Continuum Mechanics and Large Inelastic Deformations.* Springer, 2002, 721 p.

[12] Димитриенко Ю.И. *Механика сплошной среды*. Т. 2: *Универсальные законы механики и электродинамики сплошной среды.* Москва, Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2011, 560 с.

[13] Самарский А.А. *Теория разностных схем*. Москва, Наука, 1989, 616 с.

[14] Димитриенко Ю.И., Шугуан Ли. Конечно-элементное моделирование неизотермического стационарного течения неньютоновской жидкости в сложных областях. *Математическое моделирование и численные методы*, 2018, № 2, с. 70–95.

Статья поступила в редакцию 03.07.2018

Ссылку на эту статью просим оформлять следующим образом:

Димитриенко Ю.И., Леонтьева С.В. Моделирование термоконвективных процессов при однонаправленной кристаллизации сплавов с учетом движения свободных границ. *Математическое моделирование и численные методы.* 2018. № 4. с. 3–24.

Димитриенко Юрий Иванович — д-р физ.-мат. наук, заведующий кафедрой «Вычислительная математика и математическая физика» МГТУ им. Н.Э. Баумана, директор Научно-образовательного центра «Суперкомпьютерное инженерное моделирование и разработка программных комплексов» МГТУ им. Н.Э. Баумана. Автор более 400 научных работ в области механики сплошной среды, вычислительной механики, газодинамики, механики и термомеханики композитов, математического моделирования в науке о материалах. e-mail: dimit.bmstu@gmail.com

Леонтьева Светлана Викторовна — ассистент кафедры «Вычислительная математика и математическая физика» МГТУ им. Н.Э. Баумана. Автор нескольких работ в области численной механики жидких сред. e-mail: sv_leontieva@rambler.ru

Modeling of thermal convection processes under unidirectional crystallization of alloys with liquid bridges motion

©Yu.I. Dimitrienko, S.V. Leontyeva

Bauman Moscow State Technical University, Moscow, 105005, Russian Federation

The paper considers the problem of thermal convection in the melt zone during unidirectional crystallization of a metal axisymmetric sample with a free surface boundary (liquid bridge) under microgravity. The mathematical problem includes a system of Navier-Stokes equations in the Boussinesq approximation with an equation for the mass transfer of impu-

rity particles in a liquid, as well as equations for the motion of the liquid free surface. A numerical algorithm for solving the problem based on the vortex and current function method, linearization of the problem, and finite-difference approximation using the variable direction method to solve the difference system of linear equations is developed. The physical parameters of thermal convection processes in the melt zone are calculated. It is shown that taking into account the motion of the free boundary near the crystallizing liquid phase leads to a change in the distribution of impurities near the curing surface, which in turn causes a change in the characteristics of the cured material.

Keywords: *directional crystallization, microgravity, incompressible viscous liquid, thermal convection, surface tension, free surface, liquid bridges, numerical simulation*

REFERENCES

[1] Volkov P.K. *Priroda* (*Nature*), 2001, no. 11, pp. 35–43

[2] Avduevsky V.S., ed. *Matematicheskoe modelirovanye konvektivnogo teplomassoobmena na osnove uravneniy Navye-Stoksa* [Mathematical modeling of convective heat and mass transfer based on the Navier-Stokes equations]. Moscow, Nauka Publ., 1987, 258 p.

[3] Shevtsova V.M., Melnikov D.E., Legros J.C., Yan Y., Saghir Z., Lyubimova T., Sedel G. *Physics of Fluids*, 2007, vol. 19 (1), 017111.

[4] Shevtsova V.M., Ermakov M.K., Ryabitskii E., Legros J.C. *Acta. Astronautica*, 1997, no. 41, pp. 471–479.

[5] Melnikov D.E., Pushkin D., Shevtsova V. *The European Physical Journal Special Topics*, 2011, vol. 192, no.1, pp. 29–39.

[6] Ermakov M.K., Nikitin S.A., Polezhaev V.I. *Fluid Dynamics*, 1997, vol. 23, no. 3, pp. 338–350.

[7] Martínez I., Perales J.M., Meseguer J. *Lecture Notes in Physics*, 1996, vol. 464, pp. 271–282.

[8] Kulikov V., Briesen H., Marquardt W. *Chemical Engineering Research and Design*, 2005, vol. 83, pp. 706–717.

[9] Nishino K., Yano T., Kawamura H., Matsumoto S., Ueno I., Ermakov M.K. *Journal of Crystal Growth*, 2015, vol. 420, pp. 57–63.

[10] Dimitrienko Yu. I. *Mekhanika Sploshnoy Sredy. Tom 1. Tensornyy Analiz* [Continuum Mechanics. Vol. 1. Tensor Analysis]. Moscow, BMSTU Publ., 2011, 463 p.

[11] Dimitrienko Yu.I. *Nonlinear Continuum Mechanics and Large Inelastic Deformations.* Springer Publ., 2002, 721 p.

[12] Dimitrienko Yu. I. *Mekhanika Sploshnoy Sredy. Tom 2. Universalniye zakony mekhaniki i elektrodinamiki sploshykh sred* [Continuum Mechanics. Vol. 2. Universal lows of continuum mechanics and electrodynamics]. Moscow, BMSTU Publ., 2011, 560 p.

[13] Samarsky A.A. *Teoriya raznostnykh skhem.* [Theory of difference schemes]. Moscow, Nauka Publ., 1989, 616 p.

[14] Dimitrienko Y. I., Li S. *Matematicheskoe modelirovanie i chislennye menody – Mathematical Modeling and Computational Methods*, 2018, no. 2, pp. 70–95.

Dimitrienko Yu. I., Professor, Head of the Department of Computational Mathematics and Mathematical Physics, Director of Scientific-Educational Center of Supercomputer Engineering Modeling and Program Software Development, Bauman Moscow State

Technical University. Member of the Russian Academy of Engineering Science. Author of over 400 research publications in the field of computational mechanics, gasdynamics, thermomechanics of composite materials, mathematical simulations in material science.
e-mail: dimit.bmtstu@gmail.com

Leontyeva S.V., Assist. Lecturer, Department of Computational Mathematics and Mathematical Physics, Bauman Moscow State Technical University. Author of several scientific publications in the field of computational fluid mechanics.
e-mail: sv_leontieva@rambler.ru