УДК 517.988

Член-корреспондент НАН Украины **А. И. Шевченко, А. С. Миненко**

Математическое моделирование процессов кристаллизации металла с учетом конвекции и примесей

Досліджено просторову задачу Стефана з урахуванням конвективних рухів і домішок у рідинній фазі. Побудовано наближений розв'язок задачі. Доведено рівняння вільної межі.

1. Пусть Γ_0 — гладкая замкнутая поверхность, лежащая внутри заданной области Ω_0 из R^3, граница которой состоит из двух замкнутых, связных, гладких поверхностей Γ_0^+ и Γ_0^-, не имеющих самопересечений. При этом Γ_0^- лежит внутри ограниченной области, границей которой является Γ_0. Поверхность Γ_0 разбивает Ω_0 на две подобласти Ω_0^+ и Ω_0^-, которые заняты жидкой и твердой фазами соответственно в момент $t = 0$. Требуется определить области Ω_t^+ и Ω_t^-, занимаемые твердой и жидкой фазами соответственно в момент времени $t \in [0, T]$, вектор скорости $\overrightarrow{V}(x,t)$, давление $p(x,t)$, концентрацию примеси $c(x,t)$, температуру жидкой $u^+(x,t)$ и твердой $u^-(x,t)$ фазы по следующим условиям:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \overrightarrow{V}(x,t)}{\partial t} + (\overrightarrow{V}\nabla)\overrightarrow{V}(x,t) + \nabla p(x,t) = v\nabla^2\overrightarrow{V}(x,t) + \overrightarrow{f}(u^+,c), \\ \qquad \nabla\overrightarrow{V}(x,t) = 0, \qquad (x,t) \in D_T^+, \\ \dfrac{\partial u^+(x,t)}{\partial t} + (\overrightarrow{V}\nabla)u^+(x,t) - a_+^2\nabla^2 u^+(x,t) = 0, \qquad (x,t) \in D_T^+; \\ \dfrac{\partial u^-(x,t)}{\partial t} - a_-^2\nabla^2 u^-(x,t) = 0, \qquad (x,t) \in D_T^-; \\ \qquad \overrightarrow{V}(x,0) = \overrightarrow{C}(x); \qquad T(\overrightarrow{V},p)\overrightarrow{n} = -q(x,t)\overrightarrow{n}, \qquad (x,t) \in \Gamma_t^+; \\ V_n = -\left(1 - \dfrac{\rho^-}{\rho^+}\right)W_n, \qquad V_\tau = 0, \qquad (x,t) \in \Gamma_t; \\ \qquad u^\pm(x,t) = B^\pm(x,t), \qquad (x,t) \in \Gamma_t^+ \bigcup \Gamma_0^-; \qquad u^\pm(x,0) = A^\pm(x); \\ u^+ = u^- = T^* - \varepsilon c, \qquad k_-\dfrac{\partial u^-}{\partial n} - k_+\dfrac{\partial u^+}{\partial n} = \chi\rho^+ W_n, \qquad (x,t) \in \Gamma_t; \\ \dfrac{\partial c(x,t)}{\partial t} + (\overrightarrow{V}\nabla)c(x,t) - \gamma\nabla^2 c(x,t) = 0, \qquad (x,t) \in D_T^+, \\ c(x,0) = g_0(x); \quad c(x,t) = g(x,t), \quad (x,t) \in \Gamma_t^+; \quad -\alpha\dfrac{\partial c}{\partial n} = \beta c W_n, \quad (x,t) \in \Gamma_t. \end{cases} \tag{1}$$

Здесь $D_T^\pm = \{(x,t)\colon x \in \Omega_t^\pm, t \in (0,T)\}$, $x = (x_1, x_2, x_3)$, $\partial\Omega^+ = \Gamma_t \bigcup \Gamma_t^+$, $\partial\Omega^- = \Gamma_t^- \bigcup \Gamma_t$; $\overrightarrow{n}$ — нормаль к Γ_t, направленная в сторону Ω_t^+; $T(\overrightarrow{V}, p)$ — тензор напряжений с элементами $T_{ij} = -\delta_{ij}p + v(\partial V_i/\partial x_j + \partial V_j/\partial x_i)$; V_n и V_τ — нормальная и тангенциальная составляющие; W_n — скорость движения фронта кристаллизации в направлении к нормалям $\overrightarrow{n}$; T^*, v, ε, χ, ρ^+, ρ^-, α, β, γ, k_+, k_- — известные положительные постоянные. Если $\Phi(x,t) = u^\pm(x,t) + \varepsilon c(x,t) - T^* = 0$ — уравнение поверхности Γ_t, то $W_n = -\Phi_t/|\nabla\Phi|$.

Заметим, что условия Стефана можно представить в следующем виде:

$$L(u^+,u^-,\Gamma_t,\varepsilon)=k_-^2|\nabla u^-|^2-k_+^2|\nabla u^+|^2+\varepsilon(k_-^2+k_-k_+)(\nabla u^-,\nabla c)-$$
$$-\varepsilon(k_+^2+k_+k_-)(\nabla u^+,\nabla c)+\chi\rho^+(k_-u_t^-+k_+u_t^+)+\chi\rho^+\varepsilon(k_++k_-)c_t=0, \qquad (2)$$
$$(x,t)\in\Gamma_t.$$

При некоторых предположениях на функции $A(x)$, $\overrightarrow{C}(x)$, $B^{\pm}(x,t)$, $\overrightarrow{f}(u^+,c)$, $g(x,t)$ и $g_0(x)$ задача (1) разрешима при малых значениях t в классе функций $u_{\pm}\in H^{2+\alpha,(2+\alpha)/2}(\overline{D_T^{\pm}})$, $\overrightarrow{V}\in H^{2+\alpha,(2+\alpha)/2}(\overline{D_T^{\pm}})$, $c\in H^{2+\alpha,(2+\alpha)/2}(\overline{D_T^{\pm}})$, $\nabla p\in H^{\alpha,\alpha/2}(\overline{D_T^{\pm}})$, а границы Γ_t^+ и Γ_t описываются функциями класса $H^{2+\alpha,(2+\alpha)/2}$.

Далее пусть $Q_T^{\pm}=\Omega_0^{\pm}\times[0,T]$, $\Gamma_{0T}^-=\Gamma_0^-\times[0,T]$, $\Gamma_{0T}^+=\Gamma_0^+\times[0,T]$, $\Gamma_{0T}=\Gamma_0\times[0,T]$.

Отметим также, что решение задачи (1) моделирует процесс кристаллизации вещества с учетом конвективного теплообмена и переноса примеси в жидкой фазе.

2. Свободные границы Γ_t и Γ_t^+ можно представить в следующем виде:

$$\Gamma_t=\{x=x(\omega)+\overrightarrow{n}(\omega)\cdot\rho(\omega,t)\},\qquad \Gamma_t^+=\{x=x(\theta)+\eta(\theta,t)\overrightarrow{n}(\theta)\},$$

где $\omega=(\omega_1,\omega_2)$, $\theta=(\theta_1,\theta_2)$, $x(\omega)\in\Gamma_0$, $x(\theta)\in\Gamma_0^+$, $\rho(\omega,t)$ и $\eta(\theta,t)$ — некоторые функции соответственно классов $H^{2+\alpha,(2+\alpha)/2}(\Gamma_0\times[0,T])$ и $H^{2+\alpha,(2+\alpha)/2}(\Gamma_0^+\times[0,T])$, $\rho(\omega,0)=0$ и $\eta(\theta,0)=0$.

При достаточно малых значениях чисел ε предложен метод решения задачи (1), состоящий в разложении решения в ряд по степеням чисел:

$$u^{\pm}(x,t;\varepsilon)=u_0^{\pm}(x)+\sum_{k=1}^{\infty}\varepsilon^k u_k^{\pm}(x,t),\qquad p(x,t;\varepsilon)=p_0(x)+\sum_{k=1}^{\infty}\varepsilon^k p_k(x,t),$$
$$V_i(x,t;\varepsilon)=V_{i0}(x)+\sum_{k=1}^{\infty}\varepsilon^k V_{ik}(x,t),\qquad i=1,2,3; \qquad (3)$$
$$\rho(\omega,t;\varepsilon)=\sum_{k=1}^{\infty}\varepsilon^k\rho_k(\omega,t),\qquad c(x,t)=c_0(x)+\sum_{k=1}^{\infty}\varepsilon^k c_k(x,t).$$

В работе [1] изучено нулевое $u_0^{\pm}(x)$, $\overrightarrow{V}_0(x)=(V_{10},V_{20},V_{30})$, Γ_0, $c_0(x)$ и первое приближение $(\overrightarrow{V}_1,u_1^{\pm},p_1,\rho_1,c_1)$ задачи (1) для малых чисел ε. При этом установлено, что $u_0^{\pm}(x)=A^{\pm}(x)$, $\overrightarrow{V}_0(x)=\overrightarrow{C}(x)$, $C_0(x)=g_0(x)$, $\rho_1(\omega,t)\in H^{2+\alpha,(2+\alpha)/2}(\Gamma_{0T})$, $u_1^{\pm}(x,t;\rho)\in H^{2+\alpha,(2+\alpha)/2}(\overline{Q_T^{\pm}})$, $c_1(x,t;\rho)\in H^{2+\alpha,(2+\alpha)/2}(\overline{Q_T^{\pm}})$, причем $\rho_1(\omega,t)$ находим как неподвижную точку сжимающегося оператора M_1:

$$M_1\rho_1=\frac{1}{\chi\rho^+}\int\limits_0^t\left(k_-\frac{\partial u_1^-}{\partial n}-k_+\frac{\partial u_1^+}{\partial n}+f_1(x,t)\right)dt,\qquad x(\omega)\in\Gamma_{0T}.$$

Из условия Стефана (2) для малых чисел ε следует разложение:

$$L(u^+,u^-,\Gamma_t,\varepsilon)=[k_-^2|\nabla u_0^-|^2-k_+^2|\nabla u_0^+|^2]+\varepsilon[2k_-^2(\nabla u_0^-,\nabla u_1^-)-2k_+^2(\nabla u_0^+,\nabla u_1^+)+f_1+$$

$$+\chi\rho^+(k_-u_{1t}^- + k_+u_{1t}^+)] + \varepsilon^2[2k_-^2(\nabla u_0^-, \nabla u_2^-) - 2k_+^2(\nabla u_0^+, \nabla u_2^+) +$$

$$+ f_2 + \chi\rho^+(k_-u_{2t}^- + k_+u_{2t}^+)] + 0(\varepsilon^2) = 0, \qquad (x,t) \in \Gamma_{0T}.$$

Откуда следует, что

$$k_-^2|\nabla u_0^-|^2 - k_+^2|\nabla u_0^+|^2 = 0, \qquad x_0 \in \Gamma_0,$$

$$k_-\frac{\partial u_1^-}{\partial n} - k_+\frac{\partial u_1^+}{\partial n} + f_1 = \chi\rho^+\frac{\partial \rho_1}{\partial t}, \qquad (x,t) \in \Gamma_{0T},$$

$$k_-\frac{\partial u_2^-}{\partial n} - k_+\frac{\partial u_2^+}{\partial n} + f_2 = \chi\rho^+\frac{\partial \rho_2}{\partial t}, \qquad (x,t) \in \Gamma_{0T},$$

где $f_1(x,t)$ и $f_2(x,t)$ — известные гладкие функции.

3. Рассмотрим второе приближение $(\overrightarrow{V_2}, u_2^\pm, p_2, \rho_2, c_2, \eta_2)$ задачи (1) для малых чисел ε. Имеем:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \overrightarrow{V}_2}{\partial t} + (\overrightarrow{V}_0\nabla)\overrightarrow{V}_2 + (\overrightarrow{V}_1\nabla)\overrightarrow{V}_1 + (\overrightarrow{V}_2\nabla)\overrightarrow{V}_0 + \nabla p_2 = \\ \qquad = \nu\nabla^2\overrightarrow{V}_2 + \left[\overrightarrow{f}'_u u_2 + \overrightarrow{f}'_c c_2 + \dfrac{1}{2}\overrightarrow{f}''_{uu}u_1^2 + \dfrac{1}{2}\overrightarrow{f}''_{cc}c_1^2\right], \\ (x,t) \in Q_T^+, \qquad \nabla\overrightarrow{V}_2 = 0, \qquad (x,t) \in Q_T^+, \\ T(\overrightarrow{V}_0, p_2)\overrightarrow{n} + T(\overrightarrow{V}_1, p_1)\overrightarrow{n} + T(\overrightarrow{V}_2, p_0)\overrightarrow{n} = 0, \qquad x \in \Gamma_0^+, \\ \overrightarrow{V}_2(x,0) = 0, \qquad V_{2n} = \left(1 - \dfrac{\rho^-}{\rho^+}\right)\left[\dfrac{u_{2t}}{|\nabla u_0|} + F(x,t)\right], V_{2\tau} = 0, \qquad x \in \Gamma_0; \end{cases} \tag{4}$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u_2^+}{\partial t} + (\overrightarrow{V_0}\nabla)u_2^+ + (\overrightarrow{V_2}\nabla)u_0^+ + (\overrightarrow{V_1}\nabla)u_1^+ = a_+^2\nabla^2 u_2^+, \\ (x,t) \in Q_T^+, \qquad \dfrac{\partial u_2^-}{\partial t} - a_-^2\nabla^2 u_2^- = 0, \\ (x,t) \in Q_T^-, \quad u_2^\pm(x,0) = 0; \quad u_2^\pm(x,t) = 0, \quad (x,t) \in \Gamma_{0T}^- \bigcup \Gamma_{0T}^+, \quad u_2^+ = u_2^-, \\ |\nabla u_0^\pm(x(\omega))|\rho_2(\omega,t) + u_2(x(\omega),t) + f_3(x(\omega),t) = 0, (x,t) \in \Gamma_{0T}; \end{cases} \tag{5}$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial c_2}{\partial t} + (\overrightarrow{V_0}\nabla)c_2 + (\overrightarrow{V_2}\nabla)c_0 + (\overrightarrow{V_1}\nabla)c_1 - \gamma\nabla^2 c_2 = 0, \qquad (x,t) \in Q_T^+, \\ c_2(x,0) = 0; \qquad c_2(x,t) = 0, \\ (x,t) \in \Gamma_{0T}^+, \qquad -\alpha\dfrac{\partial c_2}{\partial n} = \dfrac{u_{2t}^+}{|\nabla u_0^+|} + f_4(x,t), \qquad (x,t) \in \Gamma_{0T}, \\ \dfrac{\partial c_0}{\partial n}\eta_2(\omega,t) + c_2(x,t) + f_5(x,t) = 0, \qquad (x,t) \in \Gamma_{0T}^+, \end{cases} \tag{6}$$

где $f_3(x,t)$, $f_4(x,t)$, $f_5(x,t)$ и $F(x,t)$ — известные функции.

При заданных $\rho_2(\omega,t)$ и $\widetilde{\rho}_2(\omega,t)$ из $H^{2+\alpha,(2+\alpha)/2}(\Gamma_{0T})$ найдем функции $u_2^\pm(x,t,\rho_2)$ и $u_2^\pm(x,t,\widetilde{\rho}_2)$ как единственные решения задачи (5). Затем рассмотрим оператор, действующий из $H^{2+\alpha,(2+\alpha)/2}(\Gamma_{0T})$ в $H^{2+\alpha,(2+\alpha)/2}(\Gamma_{0T})$ следующим образом:

$$M_2\rho_2 = \frac{1}{\chi\rho^+}\int\limits_0^t \left(k_-\frac{\partial u_2^-}{\partial n} - k_+\frac{\partial u_2^+}{\partial n} + f_2(x,t)\right)dt, \qquad x(\omega) \in \Gamma_0.$$

Справедливы оценки [2]:

$$|u_2^{\pm}|_{Q_T^{\pm}}^{(\alpha+2)} \leqslant C\big(|F_2^{\pm}|_{Q_T^{\pm}}^{(\alpha)} + |\rho_2|_{\Gamma_{0T}}^{(\alpha+2)}\big),$$

где C — некоторая постоянная, а $F_2^{+} = -(\overrightarrow{V}_2\nabla)u_0^{+} - (\overrightarrow{V}_1\nabla)u_1^{+}$ при $(x,t) \in Q_T^{+}$ и $F_2(x,t) = 0$ при $(x,t) \in Q_T^{-}$. Отсюда следует, что

$$|M_2\rho_2 - M_2\widetilde{\rho}_2|_{\Gamma_{0T}}^{(\alpha+2)} \leqslant \widetilde{C}|\rho_1 - \rho_2|_{\Gamma_{0T}}^{(\alpha+2)},$$

где $\widetilde{C} = C(k_+ + k_-)/\chi\rho^+$. Следовательно, оператор M_2 сжимающий, если выполняется условие

$$\frac{C(k_+ + k_-)}{\chi\rho^+} < 1. \tag{7}$$

Лемма 1. *Пусть выполнено условие* (7). *Тогда оператор* M_2, *действующий из* $H^{2+\alpha,(2+\alpha)/2}(\Gamma_{0T})$ *в* $H^{2+\alpha,(2+\alpha)/2}(\Gamma_{0T})$, *имеет там неподвижную точку.*

Лемма 2. *В качестве второго приближения задачи* (1) *можно взять решение* $u_2^{\pm}(x,t)$, $c_2(x,t)$, $\overrightarrow{V_2}(x,t)$, $\rho_2(x,t)$, $p_2(x,t)$, $\eta_2(x,t)$ *задачи* (4)–(6).

Теорема. *Пусть* $\partial g_0/\partial n \neq 0$ *и* $g_0(x) = g(x)$ *на* Γ_0^{+}. *Тогда при малых значениях* t *справедливы формулы*

$$\begin{aligned}
&\Gamma_t\colon x = x(\omega) - \varepsilon\overrightarrow{n}\frac{u_1(x(\omega),t) + g_0(x(\omega))}{|\nabla u_0(x(\omega))|} - \varepsilon^2\overrightarrow{n}\frac{u_2(x(\omega),t) + f_3(x(\omega),t)}{|\nabla u_0(x(\omega))|} + o(\varepsilon^2),\\
&\qquad (x,t) \in \Gamma_{0T};\\
&\Gamma_t^{+}\colon x = x(\theta) - \varepsilon\overrightarrow{n}\frac{c_1(x(\theta),t)}{\frac{\partial g_0}{\partial n}(x(\theta))} - \varepsilon^2\overrightarrow{n}\frac{c_2(x(\theta),t) + f_5(x(\theta),t)}{\frac{\partial g_0}{\partial n}(x(\theta))} + o(\varepsilon^2), \quad (x,t) \in \Gamma_{0T}^{+},
\end{aligned} \tag{8}$$

где $u_1^{\pm}(x,t)$, $c_1(x,t)$, $\rho_1(\omega,t)$, $\eta_1(\theta,t)$ — *функции класса* $H^{2+\alpha,(2+\alpha)/2}$, *являющиеся первым приближением задачи* (1).

Формулы (8) позволяют осуществить анализ свободных границ Γ_t и Γ_t^{+} в зависимости от параметров задачи. Отметим также, что численная реализация подобного класса задач осуществлена в работе [3].

1. *Шевченко А. И., Миненко А. С.* Приближенный анализ многомерной конвективной задачи Стефана // Доп. НАН України. – 2010. – № 4. – С. 30–34.
2. *Ладыженская О. А., Солонников В. А., Уральцева Н. Н.* Линейные и квазилинейные уравнения параболического типа. – Москва: Наука, 1967. – 756 с.
3. *Шевченко А. И., Миненко А. С.* Приближенный анализ стационарной конвективной задачи Стефана // Доп. НАН України. – 2010. – № 5. – С. 36–40.

Государственный университет информатики и искусственного интеллекта, Донецк

Поступило в редакцию 13.09.2010

Corresponding Member of the NAS of Ukraine **A. I. Shevchenko, A. S. Minenko**

Mathematical modeling of the processes of crystallization of a metal with convection and admixtures

The three-dimensional Stefan problem with convection and admixtures in the liquid phase is investigated. The approximation solution is constructed. The equation for a free boundary is obtained.