

УДК 517.988

*А.С. Миненко, С.А.Гулько*

## **Численный анализ конвективной модели кристаллизации**

Исследуется пространственная задача Стефана, с учетом конвективного движения и примесей в жидкой фазе. Получено уравнение свободной границы.

1.Статья посвящена численной реализации нелинейной конвективной задачи теплообмена, возникающей при кристаллизации вещества, в следующей постановке.

Пусть  $\Omega_0$  – заданная область в  $R^3$ , граница которой состоит из двух замкнутых связанных гладких поверхностей  $\Gamma_0^+$  и  $\Gamma_0^-$ , не имеющих самопересечений. Пусть, далее  $\Gamma_0$  - гладкая замкнутая поверхность, лежащая внутри  $\Omega_0$ , такая, что  $\Gamma_0^-$  лежит внутри ограниченной области, границей которой является  $\Gamma_0$ . Поверхность  $\Gamma_0$  разбивает  $\Omega_0$  на две подобласти  $\Omega_0^+$  и  $\Omega_0^-$ , которые в начальный момент  $t=0$  заняты жидкой и твердой фазами соответственно. Будем обозначать через  $\Omega_t^\pm$  область занятую жидкой (твердой) фазой в момент времени  $t$ . Заметим, что в процессе кристаллизации проходит изменение границы  $\Gamma_0^+$  (это связано с тем, что жидкая и твердая фазы имеют разные плотности), а граница  $\Gamma_0^-$  остается неизменной. Задача состоит в определении областей  $\Omega_t^+$  и  $\Omega_t^-$  (т.е. границ  $\Gamma_t^+$  и  $\Gamma_t^-$ ), занимаемых твердой и жидкой фазами соответственно в момент времени  $t \in [0, T]$ , вектора скорости  $\vec{V}(x, t) = (V_1(x, t), V_2(x, t), V_3(x, t))$ , давления  $p(x, t)$ , концентрации примеси  $c(x, t)$ , распределений температур жидкой  $u^+(x, t)$  и твердой  $u^-(x, t)$  фаз по следующим условиям:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial u^+(x, t)}{\partial t} + (\vec{V} \nabla) u^+(x, t) - a_+^2 \nabla^2 u^+(x, t) = 0, (x, t) \in D_T^+; \frac{\partial u^-(x, t)}{\partial t} - a_-^2 \nabla^2 u^-(x, t) = 0, (x, t) \in D_T^-, \\
& \frac{\partial \vec{V}(x, t)}{\partial t} + (\vec{V} \nabla) \vec{V}(x, t) + \nabla p(x, t) = \nu \nabla^2 \vec{V}(x, t) + \vec{f}(u^+, c), \nabla \vec{V}(x, t) = 0, (x, t) \in D_T^+, \\
& \vec{V}(x, 0) = \vec{C}(x); T(\vec{V}, p) \vec{n} = -q(x, t) \vec{n}, (x, t) \in \Gamma_t^+; V_n = -(1 - \frac{\rho^-}{\rho^+}) W_n; V_\tau = 0, (x, t) \in \Gamma_t^-, \\
& u^\pm(x, t) = B^\pm(x, t), (x, t) \in \Gamma_t^+ \cup \Gamma_0^-; u^\pm(x, 0) = A^\pm(x); \\
& u^+ = u^- = T^* - \varepsilon c, k_- \frac{\partial u^-}{\partial n} - k_+ \frac{\partial u^+}{\partial n} = \chi \rho^+ W_n, (x, t) \in \Gamma_t^-, \\
& \frac{\partial c(x, t)}{\partial t} + (\vec{V} \nabla) c(x, t) - \gamma \nabla^2 c(x, t), (x, t) \in D_T^+; c(x, 0) = g_0(x), \\
& c(x, t) = g(x, t), (x, t) \in \Gamma_t^+; -\alpha \frac{\partial c}{\partial n} = \beta c W_n, (x, t) \in \Gamma_t^-.
\end{aligned} \tag{1}$$

здесь  $D_t^\pm = \{(x,t) : x \in \Omega_t^\pm, t \in (0,T)\}$ ,  $x = (x_1, x_2, x_3)$ ,  $\Omega_t^\pm$  – области соответственно жидкой и твердой фаз,  $\partial\Omega^+ = \Gamma_t \cup \Gamma_t^+$ ,  $\partial\Omega^- = \Gamma_0^- \cup \Gamma_t^-$ ,  $\vec{n}$  – нормаль к  $\Gamma_t$ , направленная в сторону  $\Omega_t^+$ ;  $T^*$ ,  $\nu$ ,  $\varepsilon$ ,  $\chi$ ,  $\rho^+$ ,  $\rho^-$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\kappa_-$ ,  $\kappa_+$ , – положительные постоянные,  $\nabla = (\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \frac{\partial}{\partial x_3})$ ,  $T(\vec{V}, p)$  – тензор напряжений с элементами  $T_{ij} = -\delta_{ij}p + \nu(\frac{\partial V_i}{\partial x_j} + \frac{\partial V_j}{\partial x_i})$ ,  $W_n$  – скорость движения фронта кристаллизации в направлении нормали  $\vec{n}$ ,  $V_n$  и  $V_\tau$  – нормальная и тангенциальная составляющие  $\vec{V}$ .

Если  $\Phi(x,t) = u^\pm(x,t) + \varepsilon c(x,t) - T^* = 0$  – уравнение поверхности  $\Gamma_t$ , тогда  $W_n = -\Phi_t / |\nabla\Phi|$ ,  $\vec{n} = \frac{\nabla(u^\pm + \varepsilon c)}{|\nabla(u^\pm + \varepsilon c)|}$ .

Укажем, что условие Стефана можно представить также в виде:  
 $\kappa_-^2 |\nabla u^-|^2 - \kappa_+^2 |\nabla u^+|^2 + \varepsilon(\kappa_-^2 + \kappa_+^2)(\nabla u^-, \nabla c) - \varepsilon(\kappa_-^2 + \kappa_+^2)(\nabla u^+, \nabla c) + \chi\rho^+(\kappa_- u^- + \kappa_+ u^+) + \chi\rho^+ \varepsilon(\kappa_+ + \kappa_-)c_t = 0$ ,  $(x,t) \in \Gamma_t$ .

Предполагается, что  $A(x) \in H^{4+\alpha}(\overline{\Omega_0^+})$ ,  $C(x) \in H^{2+\alpha}(\Omega_0^+)$ ,

$B^\pm(x,t) \in H^{2+\alpha, \frac{2+\alpha}{2}}(\Gamma_t^+ \cup \Gamma_0^- \times [0,T])$ ,  $\vec{f}(u^+, c) \in C^1(R^2)$ ,  $g(x,t) \in H^{2+\alpha, \frac{2+\alpha}{2}}(\Gamma_t^+ \times [0,T])$ ,

$g_0(x) \in H^{4+\alpha}(\overline{\Omega_0^+})$ . При этом  $g(x,t)$  и  $g_{x_i}(x,t)$  должны быть функциями класса

$H^{1+\alpha, \frac{1+\alpha}{2}}(R^3 \times [0,T])$ . Предполагается также выполненными условия

согласования до первого порядка включительно, которые следуют из предположения существования гладкого решения и формулируются аналогично [1 с. 363, с. 268].

Отметим, что при малых значениях  $t$ , задача (1) разрешима в классе

гладких функций  $u^\pm \in H^{2+\alpha, \frac{2+\alpha}{2}}(\overline{D_T^\pm})$ ,  $\vec{V} \in H^{2+\alpha, \frac{2+\alpha}{2}}(\overline{D_T^\pm})$ ,  $C \in H^{2+\alpha, \frac{2+\alpha}{2}}(\overline{D_T^\pm})$ ,

$\nabla p \in H^{\alpha, \frac{\alpha}{2}}(\overline{D_T^\pm})$ , а границы  $\Gamma_t^+$  и  $\Gamma_t^-$  описываются функциями,

принадлежащими классам  $H^{2+\alpha, \frac{2+\alpha}{2}}$  [2].

Решение задачи (1) моделирует процесс кристаллизации вещества с учетом переноса примеси в жидкой фазе. При этом последнее условие в (1) следует из закона Нернста, а  $\vec{f}(u^+, c)$  описывает влияние неравномерного распределения температуры и концентрации примеси на движение жидкости.

2. Известно, что свободные границы  $\Gamma_t$  и  $\Gamma_t^+$  можно представить в виде  $\Gamma_t = \{x = x(\omega) + \vec{n}(\omega)\rho(\omega, t)\}$ ,  $\Gamma_t^+ = \{x = x(\omega^*) + \eta(\omega^*, t)\vec{n}(\omega^*)\}$ , где  $\omega = (\omega_1, \omega_2)$ ,  $\omega^* = (\omega_1^*, \omega_2^*)$ ,  $x(\omega) \in \Gamma_0$ ,  $x(\omega^*) \in \Gamma_0^+$ ,  $\rho(\omega, t)$  и  $\eta(\omega^*, t)$  некоторые функции соответственно классов  $H^{2+\alpha, \frac{2+\alpha}{2}}(\Gamma_0 \times [0, T])$  и  $H^{2+\alpha, \frac{2+\alpha}{2}}(\Gamma_0^+ \times [0, T])$ ,  $\rho(\omega, 0) = 0$  и  $\eta(\omega^*, 0) = 0$  [2].

Предложен метод решения задачи (1), состоящий в разложении решения в ряд по степеням малых чисел  $\varepsilon$ :

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

Для нулевого приближения  $u_0^\pm(x), \vec{V}_0(x) = (V_{10}(x), V_{20}(x), V_{30}(x))$ ,  $\Gamma_0$  и  $c_0(x)$  из условий (1) и разложения (2) вытекает следующая задача:

$$\begin{aligned} (\vec{V}_0 \nabla) \vec{V}_0(x) + \nabla p_0(x) &= \nu \nabla^2 \vec{V}_0(x) + \vec{f}(u_0, c_0), \quad x \in \Omega_0^+, \\ \nabla \vec{V}_0(x) = 0, \quad x \in \Omega_0^+, \quad T(\vec{V}_0, p_0) \vec{n} &= -q(x) \vec{n}, \quad x \in \Gamma_0^+, \quad V_n = -(1 - \frac{\rho^-}{\rho^+}) W_n, \quad V_\tau = 0, \\ x \in \Gamma_0; \quad (\vec{V}_0 \nabla) u_0^+ - a_+^2 \nabla u_0^+ &= 0, \quad x \in \Omega_0^+, \quad u_0^\pm(x) = B^\pm(x), \quad x \in \Gamma_0^+ \cup \Gamma_0^-, \quad u_0^-(x) = u_0^+(x) = T^*, \\ x \in \Gamma_0; \quad k_- \frac{\partial u_0^-}{\partial n} - k_+ \frac{\partial u_0^+}{\partial n} &= 0, \quad x \in \Gamma_0, \quad \nabla^2 u_0^- = 0, \quad x \in \Omega_0^-, \quad (\vec{V}_0 \nabla) c_0 - \gamma \nabla^2 c_0 = 0, \\ x \in \Omega_0^+, \quad c_0(x) = g_0(x), \quad x \in \Gamma_0^+; \quad -\alpha \frac{\partial c_0}{\partial n} &= 0, \quad x \in \Gamma_0. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь ради простоты предполагается, что функции  $B^\pm$  и  $q$  зависят только от переменной  $x$ .

**Лемма 1.** Пусть функции  $u_0^\pm(x) = A^\pm(x)$ ,  $\bar{V}_0(x) = \bar{C}(x)$ ,  $c_0(x) = g_0(x)$  являются решением задачи (3) соответственно в области  $\Omega_0^\pm$  и  $\Omega_0^+$ . Тогда эти функции можно взять в качестве нулевого приближения задачи (1).

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

Рассмотрим первое приближение  $(\bar{V}_1, u_1^\pm, p_1, \rho_1, c_1)$  задачи (1) для малых чисел  $\varepsilon$ . Имеем:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \bar{V}_1}{\partial t} + (\bar{V}_1 \nabla) \bar{V}_0 + (\bar{V}_0 \nabla) \bar{V}_1 + \nabla p_1 = \nu \nabla^2 \bar{V}_1 + f_u'(u_0^+, c_0) u_1^+ + f_c'(u_0^+, c_0) c_1, (x, t) \in Q_T^+; \\ \nabla \bar{V}_1 = 0, (x, t) \in Q_T^+; \\ T(\bar{V}_0 + \bar{V}_1, p_1) \bar{n} = 0, x \in \Gamma_0^+, \bar{V}_1(x, 0) = 0, \\ V_{1n} = (1 - \frac{\rho^-}{\rho^+}) \frac{u_{1r}^+}{|\nabla u_0^+|}, V_{1r} = 0, x \in \Gamma_0; \end{array} \right. \quad (4)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u_1^+}{\partial t} + (\bar{V}_1 \nabla) u_0^+ + (\bar{V}_0 \nabla) u_1^+ - a_+^2 \nabla^2 u_1^+ = 0, (x, t) \in Q_T^+; \frac{\partial u_1^-}{\partial t} + a_-^2 \nabla^2 u_1^- = 0, (x, t) \in Q_T^-, \\ u^\pm(x, 0) = 0; u_1^\pm(x, t) = 0, (x, t) \in \Gamma_{0T}^- \cup \Gamma_{0T}^+, \\ u_1^\pm = u_1^\mp, \quad k_- \frac{\partial u_1^-}{\partial n} - k_+ \frac{\partial u_1^+}{\partial n} + f_1(x, t) = \chi \rho^+ \frac{\partial \rho_1}{\partial t}, \quad (x, t) \in \Gamma_{0T}; \end{array} \right. \quad (5)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial c_1}{\partial t} + (\bar{V}_1 \nabla) c_0 + (\bar{V}_0 \nabla) c_1 - \gamma \nabla^2 c_1 = 0, (x, t) \in Q_T^+, \\ c_1(x, 0) = 0, c_1(x, t) = 0, (x, t) \in \Gamma_{0T}^+, \\ -\alpha \frac{\partial c_1}{\partial n} = f_2(x, t), \quad (x, t) \in \Gamma_{0T}, \quad f_2(x, t) = c_0 \frac{u_{1r}^+}{|\nabla u_0^+|}, \\ \frac{\partial c_0(x)}{\partial n} \eta_1(\omega, t) + c_1(x, t) = 0, \quad (x, t) \in \Gamma_{0T}^+. \end{array} \right. \quad (6)$$

Зададим теперь  $\bar{V} = \bar{V}_1(x, t)$ . Затем решим задачу (5)-(6) и найдем  $u^\pm, c, \rho$ . После чего заменим  $u^\pm, c, \rho$  – решением задачи (5)-(6) и решим задачу (4), являющуюся начально-краевой задачей для системы Навье-Стокса. Затем, используя новое значение  $V(x, t)$ , снова решаем задачу (5) и (6) и т.д. Таким образом, получим процесс последовательных приближений. Доказательство сходимости этого процесса аналогично

приведенному в работе [3]. При этом при заданном  $\rho_1(\omega, t) \in H^{2+\alpha, \frac{2+\alpha}{2}}(\Gamma_{0T})$  найдем функции  $u_1^\pm(x, t; \rho) \in H^{2+\alpha, \frac{2+\alpha}{2}}(\overline{Q_T^\pm})$ ,  $c_1(x, t; \rho) \in H^{2+\alpha, \frac{2+\alpha}{2}}(\overline{Q_T^\pm})$ , как единственное решение задачи (5)-(6) [1], причем  $\rho_1(\omega, t)$  находим как неподвижную точку сжимающегося оператора  $M_1$ :

$$M_1 \rho_1 = \frac{1}{\chi \rho^+} \int_0^t (k_- \frac{\partial u_1^-}{\partial n} - k_+ \frac{\partial u_1^+}{\partial n} + f_1(x, t)) dt, \quad x(\omega) \in \Gamma_{0T}. \text{ Имеют место следующие}$$

утверждения.

**Лемма 2.** Пусть выполнено условие  $|\nabla A^+(x)| = \frac{\partial g_0(x)}{\partial n}$  на  $\Gamma_0$ . Тогда оператор  $M_1$ , действующий из  $H^{2+\alpha, \frac{2+\alpha}{2}}(\Gamma_{0T})$  в  $H^{2+\alpha, \frac{2+\alpha}{2}}(\Gamma_{0T})$ , имеет там неподвижную точку.

**Лемма 3.** В качестве первого приближения задачи (1) можно взять решение задачи (4)-(6):  $u_1^\pm(x, t), c_1(x, t), \vec{V}_1(x, t), p_1(x, t), \rho_1(x, t)$ .

**Теорема.** Пусть  $\frac{\partial g_0(x)}{\partial n} \neq 0$  на  $\Gamma_0^+$ . Тогда при малых числах  $\varepsilon$  и достаточно малых значениях  $t$  справедливы формулы:

$$\Gamma_t^- : x = x(\omega) - \varepsilon n \frac{u_1^\pm(x(\omega), t)}{|\nabla u_0^\pm(x(\omega))|} + o(\varepsilon), (x, t) \in \Gamma_{0T},$$

$$\Gamma_t^+ : x = x(\omega^*) - \varepsilon n \frac{c_1(x(\omega), t) + g_0(x(\omega)) - g(x(\omega), t)}{\frac{\partial g_0(x(\omega))}{\partial n}} + o(\varepsilon), (x, t) \in \Gamma_{0T}^+,$$

где  $u_1^\pm(x, t), c_1(x, t), \rho_1(\omega, t), \eta_1(\omega, t)$  – функции класса  $H^{2+\alpha, \frac{2+\alpha}{2}}$ , являющиеся решением задачи (4)-(6).

4. Рассмотрим случай, когда  $\Omega = \{(x_1, x_2, x_3) : r < x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 < R\}$  и без учета концентрации примеси в задаче (1). Далее, так как решение задачи (1) ищем в виде (2), тогда нулевое приближение находим как решение следующей задачи:

$$\begin{aligned} \nabla^2 u^\pm(x) &= 0, x \in \Omega_0^\pm, A^\pm(x)|_{\Gamma^\pm} = B^\pm(x), u^\pm(x)|_{\Gamma_0} = 0, \\ \bar{C}(x) &= 0, x \in \overline{\Omega_0^\pm}; |\nabla u^-(x)| - |\nabla u^+(x)| = 0, x \in \Gamma_0 \end{aligned} \quad (7)$$

Заметим, что замена  $\tilde{u}^- = ku^-$ , при  $x \in \Omega^-$  и  $\tilde{u}^+ = u^+$ , если  $x \in \Omega^+$ , сводит задачу (7) к случаю  $k=1$ . Поэтому в дальнейшем будем считать, что это условие выполнено. Нулевое приближение  $u_0^\pm(x)$ ,  $\Gamma_0$  найдем из условия минимума функционала  $I(u_0^\pm, \Gamma_0) = \iiint_{\Omega} |\nabla u|^2 dx_1 dx_2 dx_3$ , здесь  $\Omega = \Omega_0^+ \cup \Omega_0^-$  и  $u = u^-$  при  $x \in \Omega^-$  и  $u = u^+$ , если  $x \in \Omega^+$ .

Далее, рассматривая функционал  $I$  в сферических координатах, получим

$$I(u_0^\pm) = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_r^R \left( u_\rho^2 + \frac{1}{\rho^2} u_\Theta^2 + \frac{1}{\rho^2 \sin^2 \Theta} u_\varphi^2 \right) \rho^2 \sin \Theta d\varphi d\Theta d\rho.$$

Минимум функционала ищем в следующем виде

$$u = B^+ + \frac{R^2 - \rho^2}{R^2 - r^2} (B^- - B^+) + (R^2 - \rho^2)(\rho^2 - r^2) \sum_{k=0}^{\infty} C_k \rho^k.$$

Неизвестные коэффициенты  $C_k$  определяются методом Ритца. В частности в случае нулевого приближения

$$u_0 = B^+ + \frac{R^2 - \rho^2}{R^2 - r^2} (B^- - B^+) + (R^2 - \rho^2)(\rho^2 - r^2) C_0$$

из уравнения  $\partial I(u_0^\pm) / \partial C_0 = 0$  определим коэффициент  $C_0$ . Свободную поверхность  $\Gamma_0 : \rho = \rho_0(\varphi, \Theta)$  найдем из условия  $u_0(\varphi, \Theta, \rho_0(\varphi, \Theta)) = 0$ . Тогда для свободной поверхности  $\Gamma_t$  получим уравнение

$$\Gamma_t : \rho(\varphi, \Theta, t) = \rho_0(\varphi, \Theta) - \operatorname{Re} \frac{u_1^\pm(\varphi, \Theta, t)}{|\nabla A^\pm(\varphi, \Theta)|} + o(\operatorname{Re}).$$

На рисунке представлена поверхность  $\Gamma_t$  при следующих значениях параметров:

$$t = 200, \quad R = 6, \quad r = 0,8, \quad -\frac{\pi}{2} \leq \Theta \leq \frac{\pi}{3}, \quad -\frac{\pi}{2} \leq \varphi \leq \frac{\pi}{2},$$

$$B^+ = 3[\cos^2 \Theta + \cos^2 \varphi], \quad B^- = -0,35[\cos^2 \Theta + \cos^2 \varphi] - 0,1$$

Предложенный алгоритм построения поверхности  $\Gamma$ , позволяет исследовать эту поверхность в зависимости от основных параметров задачи (1) в том числе и числа  $\text{Re}$ . На рисунке свободная поверхность  $\Gamma$ , расположена между сферами радиусов  $R$  и  $r$ .

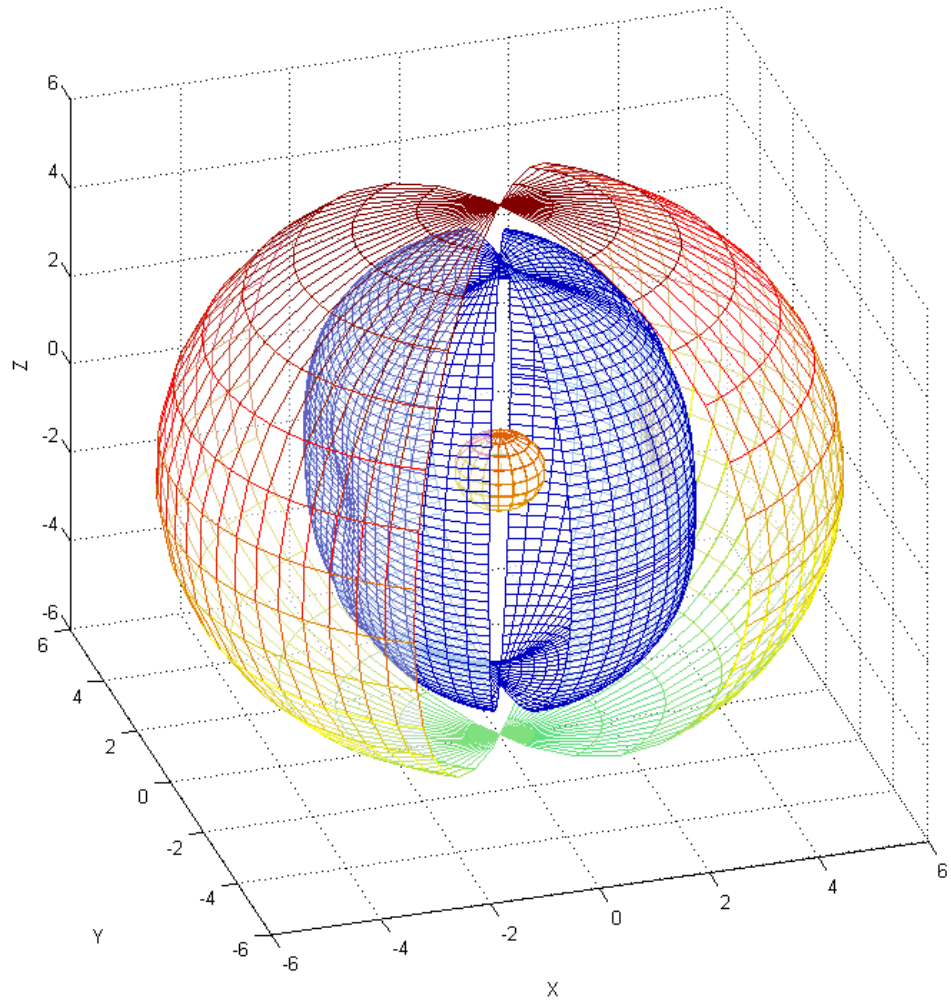


Рисунок.



## Литература

1. Ладыженская О.А., Солонников В.А., Уральцева Н.Н. Линейные и квазилинейные уравнения параболического типа. – М.: Наука, 1967. – 756с.
2. Миненко А.С. Вариационные задачи со свободной границей. – К.: Наукова думка, 2005. – 341 с.
3. Солонников В.А. Разрешимость задачи о движении вязкой несжимаемой жидкости, ограниченной свободной поверхностью // Изв. АН СССР. Сер. матем. – 1977. – 41, №6. – С. 1388-1424.

## **Чисельний аналіз конвективної моделі кристалізації**

Досліджується просторова задача Стефана, з урахуванням конвективних рухів і домішок у рідинній фазі. Доведено рівняння вільної границі.

## **Numerical analysis model of crystallization with convection**

The three dimensional convection Stefan problem in liquid phase is investigated. Formula of free boundary equation is obtained.

Институт информатики и  
искусственного интеллекта ДонНТУ,  
83050 г. Донецк, пр. Б.Хмельницкого, 84  
Тел. (062) 304 – 92 – 58  
Факс (062) 337 – 78 – 66  
E-mail: minenko@iai.donetsk.ua

Поступило в редакцию