УДК 517.9

И.А. Сыпко
Донецкий национальный технический университет, г. Донецк
кафедра системного анализа и моделирования

МЕТОДЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССА КРИСТАЛЛИЗАЦИИ МЕТАЛЛА

Аннотация

Сыпко И.А. Численное моделирование процесса кристаллизации металла. *Рассматривается задача тепловой обработки металла, на основе математического моделирования, анализа статистических данных и теплофизических экспериментальных измерений. Строится приближенное решение задачи. Получены оценки для температуры и теплового потока.*

Ключевые слова: *процесс кристаллизации, математическая модель, задача Стефана, жидкая фаза, конвекция.*

Постановка проблемы. Распространение тепла в различных средах оказывает большое влияние на характер протекания многих важных для практики процессов. Среди задач, связанных с распространением тепла, выделяется класс задач, в которых исследуемое вещество переходит из одной фазы в другую с выделением или поглощением тепла.

Целью статьи является моделирование процесса кристаллизации металла, изучение процесса завершения получения слитка в кристаллизаторе путем его вытягивания.

Постановка задачи исследования. Пусть $D = (-1 < x < 1, y < 0)$ полуполоса, заполненная твердым металлом. Обозначим через $u(x, y)$ температуру этого металла. Требуется определить температуру $u(x, y)$ по следующим условиям:

$$u_{xx} + u_{yy} + \omega u_y = 0, (x, y) \in D, \tag{1}$$

$$u_x \pm \omega_0 u = 0, x = \pm 1, -\infty < y < 0, \tag{2}$$

$$u(x, -\infty) = 0, \tag{3}$$

$$u_y(x, 0) = v(x), -1 \le x \le 1. \tag{4}$$

Здесь ω и ω_0 - постоянные, соответственно, число Пекле и Нуссельта. Решение задачи (1)-(4) имеет вид [1]

$$u(x,y)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\cos\lambda_n x e^{\mu_n y}}{\mu_n(1+\omega_0\frac{\cos^2\lambda_n}{\lambda_n^2})}\int_{-1}^{1}v(\zeta)\cos\lambda_n\zeta d\zeta, \tag{5}$$

где $\mu_n=-\frac{\omega}{2}+\sqrt{\frac{\omega^2}{4}+\lambda_n^2}$, $n=1,2,3...\lambda_n$ - положительные корни уравнения $\lambda=\omega_0 ctg\lambda$.

Далее, введем в рассмотрение функционал

$$I(v)=\int_{H}^{0}(u(1,y)-T^*)^2dy. \tag{6}$$

При этом формула (5) примет вид:

$$u(x,y)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\cos\lambda_n x e^{\mu_n y}}{\mu_n(1+\omega_0\frac{\cos^2\lambda_n}{\lambda_n^2})}\sum_{k=0}^{m}v_k\frac{\sin\lambda_n x_{k+1}-\sin\lambda_n x_k}{\lambda_n},$$

а $I(v)=I(v_0,v_1,v_2,...,v_m)$.

При численной реализации задачи необходимо учесть ограничение $2500\le v(x)\le 5000$, здесь $v(x)$ - мощность потока в единицах МВт/ м^2, а также $\omega=2{,}66$, $\omega=3{,}05$.

Способы решения задачи

Нулевое приближение. Найдем минимум функционала (6), в случае когда $u_0(x,y)=f_0(x,y)v$,

где $f_0(x,y)=2\frac{\cos\lambda_0 x\sin\lambda_0}{\lambda_0\mu_0(1+\omega_0\frac{\cos^2\lambda_0}{\lambda_0^2})}e^{\mu_0 y}$.

Минимум функционала (6) находим из условия

$$\frac{\partial I}{\partial v}=2\int_{H}^{0}(f_0(1,y)v-T^*)f_0(1,y)dy=0.$$

Непосредственные вычисления показывают, что

$$v_0 = 4T^* \frac{\lambda_0 \mu_0 (1+\omega_0 \dfrac{\cos^2 \lambda_0}{\lambda_0^2})}{\sin 2\lambda_0},$$

$$I(v_0) = v_0^2 \frac{\sin 2\lambda_0 (1-e^{2\mu_0 H})}{2\mu_0^3 \lambda_0^2 (1+\omega_0 \dfrac{\cos^2 \lambda_0}{\lambda_0^2})^2} - (T^*)^2 H -$$

$$- 2T^* v_0 \frac{\sin 2\lambda_0 (1-e^{\mu_0 H})}{\lambda_0 \mu_0^2 (1+\omega_0 \dfrac{\cos^2 \lambda_0}{\lambda_0^2})}.$$

Первое приближение. Найдем теперь минимум функционала (6), в случае когда $u_1(x,y) = (f_0(x,y) + f_1(x,y))v$,

где $f_1(x,y) = 2 \dfrac{\cos \lambda_1 x e^{\mu_1 y}}{\mu_1 (1+\omega_0 \dfrac{\cos^2 \lambda_1}{\lambda_1^2})} \dfrac{\sin \lambda_1}{\lambda_1}$.

Поступая, аналогично тому, как это было сделано в случае нулевого приближения, получим

$$v_1 = 2T^* \left[\frac{\sin 2\lambda_0 (1-e^{\mu_1 H})}{\lambda_0 \mu_0^2 (1+\omega_0 \dfrac{\cos^2 \lambda_0}{\lambda_0^2})} + \frac{\sin 2\lambda_2 (1-e^{\mu_2 H})}{\lambda_1 \mu_1^2 (1+\omega_0 \dfrac{\cos^2 \lambda_1}{\lambda_1^2})} \right] A,$$

$$A = \frac{\sin^2 \lambda_0 (1-e^{\mu_2 H})}{\lambda_0 \mu_1^2 (1+\omega_0 \dfrac{\cos^2 \lambda_0}{\lambda_0^2})^2} + \frac{\sin^2 2\lambda_1 (1-e^{2\mu_1 H})}{2\mu_1^3 \lambda_1^2 (1+\omega_0 \dfrac{\cos^2 \lambda_1}{\lambda_1^2})^2} +$$

$$+ 2 \frac{\sin 2\lambda_0 \sin 2\lambda_1}{\lambda_0 \mu_0 (1+\omega_0 \dfrac{\cos^2 \lambda_0}{\lambda_0^2})} \frac{(1-e^{\mu_0 H})(1-e^{\mu_1 H})}{\lambda_1 \mu_1 (1+\omega_0 \dfrac{\cos^2 \mu}{\lambda_1^2})}.$$

Далее, имеет место следующая формула:

$$I(v_1)=v_1^2\,\frac{\sin^2 2\lambda_0(1-e^{2\mu_0 H})}{2\mu_0^3\lambda_0^2(1+\omega_0\dfrac{\cos^2\lambda_0}{\lambda_0^2})^2}+v_1^2\,\frac{\sin^2 2\lambda_1(1-e^{2\mu_1 H})}{2\mu_1^3\lambda_1^2(1+\omega_0\dfrac{\cos^2\lambda_1}{\lambda_1^2})^2}+$$

$$+2v_1^2\,\frac{\sin 2\lambda_0\sin 2\lambda_1(1-e^{\mu_1 H})(1-e^{\mu_0 H})}{\lambda_1\mu_1(1+\omega_0\dfrac{\cos^2\lambda_1}{\lambda_1^2})\lambda_0\mu_0(1+\omega_0\dfrac{\cos^2\lambda_0}{\lambda_0^2})}-$$

$$-2T^*v_1\left[\frac{\sin 2\lambda_1(1-e^{\mu_1 H})}{\lambda_1\mu_1^2(1+\omega_0\dfrac{\cos^2\lambda_1}{\lambda_1^2})}+\frac{\sin 2\lambda_0(1-e^{\mu_0 H})}{\lambda_0\mu_0^2(1+\omega_0\dfrac{\cos^2\lambda_0}{\lambda_0^2})}\right]-H(T^*)^2.$$

Приближение любого порядка. Аналогичным образом можно исследовать минимум функционала $I(v_n)$, когда

$$u_n(x,y)=2\frac{v_n\sin\lambda_0\cos\lambda_0 x(1-e^{\lambda_0 H})}{\lambda_0\mu_0(1+\omega_0\dfrac{\cos^2\lambda_0}{\lambda_0^2})}e^{\mu_0 y}+$$

$$+2\omega_0 v_n\sum_{k=1}^{n}\frac{\cos\lambda_k x\cos\lambda_k(1-e^{\mu_k H})}{\lambda_k^2\mu_k\left[1+\omega_0\dfrac{\cos^2\lambda_k}{\lambda_k^2}\right]}e^{\mu_k y}.$$

Оценить погрешность предлагаемого метода вычисления минимума функционала (6) можно, используя следующее утверждение.

При достаточно малых значениях ω и при $(x,y)\in\overline{D}$ справедлива оценка

$$\left|\sum_{k=n+1}^{\infty}\frac{\cos\lambda_k x\cos\lambda_k(1-e^{\varpi_k H})}{\lambda_k^2\mu_k[1+\omega_0\dfrac{\cos^2\lambda_k}{\lambda_k^2}]}e^{\mu_k y}\right|\le\sum_{k=n+1}^{\infty}\frac{1}{(k\pi)^2}e^{\mu_k y}.$$

При доказательстве этого утверждения воспользоваться соотношением: $\lambda_n=n\pi+\varepsilon_n$, где $\varepsilon_n>0$ для всех n [2]. Справедливо также утверждение.

Пусть выполнены условия $\omega_0 \ge \omega\sqrt{2} tg\,\omega\sqrt{2}$, $0 < \omega \le A$, $0 < A \le \frac{\pi^2}{16}$, $0 < \nu_0 \le \nu(x) < \nu_1$ при $x \in [-1,1]$, где ν_0 и ν_1 - некоторые постоянные. Тогда решение краевой задачи (1)-(5) удовлетворяет следующим условиям при $(x, y) \in \overline{D}$:

$$u_y(x, y) \le C_1 \omega \exp(\mu_0 y) \le C_1 \omega \exp(\omega y),$$

$$C_0 \exp(\mu_0 y) \le u(x, y) \le C_1 \exp(\mu_0 y) \le C_1 \exp(\omega y),$$

где $C_1 = \dfrac{6 + A(1+\cos\sqrt{A})}{3(1+\cos\sqrt{A})}$, $C_0 = \dfrac{3(1-A)(1+\cos^2\sqrt{A})\cos^2\sqrt{A}}{6 + A(1+\cos^2\sqrt{A})}$.

Для утверждения необходимо сравнить с помощью принципа максимума функции $u_y(x, y)$ и $v(x, y)$, где $v(x, y)$- решение задачи (1)-(5) в предположении, что $v_y(x,0) = \nu_1$ при $x \in [-1,1]$. Далее, рассматривается функция $f(x, y) = v_y(x, y) - u_y(x, y)$, $(x, y) \in \overline{D}$ и доказывается, что $f(x, y) \ge 0$ в $\overline{D}$. Действительно, функция $f(x, y)$ не может принимать наименьшее отрицательное значение внутри D в силу принципа максимума. На вертикальных частях границы $x = \pm 1$ функция $f(x, y)$ также не может принимать отрицательный минимум. В такой точке имели бы $f_x(x, y) < 0$, между тем $f_x(x, y) = -\omega_0 f(x, y) > 0$, $x = \pm 1$, так как $f(x, y) < 0$, по предположению. На бесконечности функция $f(x, y)$ исчезает, т.е. $f(x,-\infty) = 0$. На границе $y = 0$, $-1 \le x \le 1$ имеем $f(x,0) = v_y(x,0) - u_y(x,0) = \nu_1 - \nu(x) \ge 0$. Следовательно, всюду в $\overline{D}$ справедливо неравенство $u_y(x, y) \le v_y(x, y)$ при $(x, y) \in \overline{D}$. Отсюда с помощью интегрирования по переменной y следует оценка для функции $u(x, y)$ сверху. Аналогичным образом, можно получить оценку на производную $u_x(x, y)$ сверху при $(x, y) \in \overline{D}$. Полученные оценки позволяют оценить температуру $u(x, y)$ и тепловой поток внутри области D не прибегая к решению задачи (1)-(5) [3-5].

Проделанные численные результаты задачи представлены в 2 таблицах.

Таблица 1 – Численные результаты при различных значениях параметров

ω_0	λ_0	λ_1	T	H	υ_0	υ_1	I (υ_0)	I (υ_1)
1,5	0,9882	3,5422	0,9	-3,0	2,783	4,367	1,011	21,997
1,5	0,9882	3,5422	0,9	-4,0	2,783	5,730	5,428	38,576
1,5	0,9882	3,5422	0,9	-6,0	2,783	6,588	-3,038	62,490
1,5	0,9882	3,5422	0,95	-3,0	2,937	4,610	1,126	24,509
1,5	0,9882	3,5422	0,95	-4,0	2,937	5,730	-0,559	42,982
1,5	0,9882	3,5422	0,95	-6,0	2,937	6,954	-3,385	69,627
1,5	0,9882	3,5422	0,9	-3,0	4,5	4,5	16,728	23,709
1,5	0,9882	3,5422	0,9	-4,0	4,5	4,5	15,256	24,355
1,5	0,9882	3,5422	0,9	-6,0	4,5	4,5	12,397	25,275
1,5	0,9882	3,5422	0,95	-3,0	4,5	4,5	15,537	23,062
1,5	0,9882	3,5422	0,95	-4,0	4,5	4,5	13,866	23,695
1,5	0,9882	3,5422	0,95	-6,0	4,5	4,5	10,718	24,696
1,5	0,9882	3,5422	0,9	-3,0	11,1	11,1	173,683	192,101
1,5	0,9882	3,5422	0,9	-4,0	11,1	11,1	175,717	198,788
1,5	0,9882	3,5422	0,9	-6,0	11,1	11,1	173,351	202,940
1,5	0,9882	3,5422	0,95	-3,0	11,1	11,1	171,150	190,098
1,5	0,9882	3,5422	0,95	-4,0	11,1	11,1	172,831	196,617
1,5	0,9882	3,5422	0,95	-6,0	11,1	11,1	170,023	200,697

Таблица 2 – Численные результаты при различных значениях параметров

ω_0	λ_0	λ_1	T	H	υ_0	υ_1	I (υ_0)	I (υ_1)
4,0	1,2646	3,9352	0,9	-3,0	3,560	8,457	13,134	80,696
4,0	1,2646	3,9352	0,9	-4,0	3,560	11,217	12,291	162,631
4,0	1,2646	3,9352	0,9	-6,0	3,560	14,954	9,811	321,551
4,0	1,2646	3,9352	0,95	-3,0	3,758	8,927	14,634	89,911
4,0	1,2646	3,9352	0,95	-4,0	3,758	11,840	13,694	181,203
4,0	1,2646	3,9352	0,95	-6,0	3,758	15,785	10,932	358,271
4,0	1,2646	3,9352	0,9	-3,0	4,5	4,5	26,374	17,467
4,0	1,2646	3,9352	0,9	-4,0	4,5	4,5	26,115	18,407
4,0	1,2646	3,9352	0,9	-6,0	4,5	4,5	23,830	19,422
4,0	1,2646	3,9352	0,95	-3,0	4,5	4,5	25,268	16,899
4,0	1,2646	3,9352	0,95	-4,0	4,5	4,5	24,790	17,804
4,0	1,2646	3,9352	0,95	-6,0	4,5	4,5	22,171	18,855
4,0	1,2646	3,9352	0,9	-3,0	11,1	11,1	226,770	148,999
4,0	1,2646	3,9352	0,9	-4,0	11,1	11,1	237,580	158,868
4,0	1,2646	3,9352	0,9	-6,0	11,1	11,1	241,625	166,516

Продолжение таблицы 2

ω_0	λ_0	λ_1	T	H	υ_0	υ_1	I (υ_0)	I (υ_1)
4,0	1,2646	3,9352	0,95	-3,0	11,1	11,1	224,449	147,191
4,0	1,2646	3,9352	0,95	-4,0	11,1	11,1	234,854	156,838
4,0	1,2646	3,9352	0,95	-6,0	11,1	11,1	238,346	164,304

Выводы. Создана математическая модель, которая позволяет определить тепловой режим, при котором она определяется. Моделируется процесс кристаллизации металла, проходящий в спецметаллургии, а именно изучается процесс завершения получения слитка в кристаллизаторе путем его вытягивания. Рассматривается задача тепловой обработки металла. Строится приближенное решение задачи. Получены оценки для температуры и теплового потока. Актуальность представленной работы обусловлена практической востребованностью нечеткого управления процесса кристаллизации для объекта со сложной геометрией.

Список литературы

1. Патон Б.Е. Избранные труды. – Киев: Институт электросварки им.Е.О. Патона НАН Украины, 2008. – 893 с.
2. Шевченко А.И., Миненко А.С. Методы исследования нелинейных моделей, – Киев: Наук.думка, 2012. – 132 с.
3. Миненко А.С. Вариационные задачи со свободной границей. – Киев: Наук.думка, 2005 – 341 с.
4. Шевченко А.И., Миненко А.С., Сыпко И.А. Моделирование одного класса сложных систем с нечетким управлением // Доп. НАН України. – 2013. – №8. – С.52-54.
5. Сыпко А.И. Приближенное моделирование процесса кристаллизации при наличии конвекции // Искусственный интеллект – 2013. – №2. – С.80-85.
6. Будак Б.М., Самарский А.А., Тихонов А.Н. Сборник задач по математической физике. – Москва: Наука, 1980. – 686 с.