

Федеральное государственное учреждение  
«Федеральный исследовательский центр  
Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша  
Российской академии наук»

На правах рукописи

Гусев Андрей Олегович

**Разработка и исследование численных методов  
решения задачи о фазовом переходе  
в многокомпонентном растворе**

Специальность 1.1.6 – Вычислительная математика

Диссертация на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель  
кандидат физико-математических наук  
Щерица Ольга Владимировна

Москва – 2022

# Оглавление

|                                                                                                                                                        |     |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| <b>Введение</b> . . . . .                                                                                                                              | 4   |
| <b>Глава 1. Консервативная разностная схема для задачи о фазовом переходе в многокомпонентном растворе</b> . . . . .                                   | 23  |
| 1.1. Математическая модель . . . . .                                                                                                                   | 23  |
| 1.2. Метод выпрямления фронта . . . . .                                                                                                                | 29  |
| 1.3. Разностная задача . . . . .                                                                                                                       | 37  |
| <b>Глава 2. Методы решения системы сеточных уравнений, возникающей при моделировании процесса кристаллизации многокомпонентного раствора</b> . . . . . | 56  |
| 2.1. Численное решение сеточных уравнений тепломассопереноса . .                                                                                       | 57  |
| 2.2. Численное решение сеточных уравнений Навье — Стокса . . . . .                                                                                     | 75  |
| 2.3. Методы решения систем линейных алгебраических уравнений . .                                                                                       | 77  |
| 2.4. Результаты численного моделирования . . . . .                                                                                                     | 78  |
| <b>Глава 3. Построение разностных схем для решения задачи Стефана эквивалентных на подвижной и фиксированной сетках</b> . . . . .                      | 86  |
| 3.1. Математическая модель . . . . .                                                                                                                   | 86  |
| 3.2. Метод выпрямления фронта . . . . .                                                                                                                | 88  |
| 3.3. Метод расчета на подвижной сетке . . . . .                                                                                                        | 95  |
| 3.4. Эквивалентность подходов . . . . .                                                                                                                | 109 |
| <b>Глава 4. Численное моделирование процесса получения многокомпонентных соединений методом направленной кристаллизации</b> . . . . .                  | 115 |
| 4.1. Постановка задачи . . . . .                                                                                                                       | 116 |
| 4.2. Результаты численного моделирования . . . . .                                                                                                     | 121 |

|                                                 |     |
|-------------------------------------------------|-----|
| Заключение . . . . .                            | 141 |
| Публикации автора по теме диссертации . . . . . | 143 |
| Список литературы . . . . .                     | 145 |
| Приложение А. . . . .                           | 157 |
| Приложение Б. . . . .                           | 158 |
| Приложение В. . . . .                           | 159 |

## Введение

**Актуальность темы исследования.** Математическое моделирование широкого круга физических явлений и технологических процессов приводит к необходимости решения задач с подвижными границами, положение которых определяется физико-химическими процессами, протекающими в системе. Внутренние подвижные границы, положение которых необходимо определять в ходе решения, возникают, например, в задачах металлургии и полупроводниковых технологий при моделировании процессов плавления (растворения) и кристаллизации. Наличие подвижных границ в математической модели значительно усложняет процесс ее численного исследования.

Одним из распространенных способов получения современных полупроводниковых материалов является выращивание кристаллов из жидкой фазы. Натурные эксперименты в этой области являются длительными, трудоемкими и дорогостоящими, поэтому математическое моделирование стало неотъемлемой частью исследования и оптимизации технологических режимов. В задачах полупроводниковых технологий необходимо определять положение межфазной границы с высокой точностью. При этом температура фазового перехода в многокомпонентных системах не является постоянной и определяется составами твердой и жидкой фаз. На межфазной границе температура и концентрация удовлетворяют балансным соотношениям, вытекающим из законов сохранения теплоты и массы, и фазовой диаграмме системы — как правило, нелинейным соотношениям, связывающим температуру фазового перехода и равновесные концентрации компонентов. Существует широкий круг методов решения задач с подвижными границами. Однако большинство подходов ориентировано на решение классической задачи Стефана. Методам решения задачи о фазовом переходе в многокомпонентной среде уделяется значительно меньше внимания. Вместе с тем при решении этого класса задач возникают дополнительные трудности, связанные с численной реализацией условий на границе раздела фаз.

Основу математических моделей процесса кристаллизации многокомпонентного соединения составляют уравнения Навье — Стокса, уравнения тепло-массопереноса в твердой и жидкой фазах и условия термодинамического равновесия на межфазной границе. Области, в которых рассматриваются основные уравнения, с течением времени изменяются. При этом скорость движения межфазной границы в многокомпонентных системах определяется не только балансным соотношением для внутренней энергии на фронте кристаллизации (условие Стефана), но и законами сохранения массы для каждого из компонентов, а также нелинейными соотношениями, описывающими поверхностные процессы, протекающие на границе раздела. Численное исследование таких моделей стандартными средствами, доступными в коммерческих программных комплексах, сопряжено со значительными трудностями. Поэтому возникает потребность в разработке и исследовании вычислительных алгоритмов, сконструированных с учетом конкретных особенностей задачи о кристаллизации многокомпонентного раствора — изменения геометрии расчетной области, наличия процессов с существенно различающимися характерными временами, высокой длительности технологических режимов и т.д. При этом, с точки зрения практического применения, особый интерес представляют численные методы, позволяющие получать детальную информацию о процессе кристаллизации существенно быстрее, чем в случае проведения натурных экспериментов.

**Степень разработанности научной проблемы.** В настоящее время разработан широкий круг методов численного решения задач о фазовом переходе. Однако при выборе надежной разностной схемы, наиболее подходящей для рассматриваемого класса задач, недостаточно опираться на требования аппроксимации, устойчивости и сходимости. Одним из основных критериев качества вычислительной процедуры является выполнение в ней разностных аналогов законов сохранения и дополнительных соотношений, свойственных исходной дифференциальной задаче (наличие дивергентной и недивергентной формы записи законов сохранения, выполнение балансов отдельных видов энергии и т.п.). На-

личие в соответствующих разностных уравнениях фиктивных источников или стоков массы, теплоты и кинетической энергии может приводить к тому, что в расчетах динамика процесса существенно искажается: изменяется интенсивность процессов переноса в растворе, состав твердой фазы значительно отличается от истинного, вместо роста кристалла происходит растворение материала и т.д.

Современные численные методы решения задачи о фазовом переходе в многокомпонентном растворе можно разделить на две большие группы:

- методы сквозного счета, в которых геометрия фаз задается с помощью специальной функции-индикатора, принимающей определенные значения внутри кристалла и раствора. К данной группе относятся метод функции уровня (level set method) и модели, построенные на основе метода фазового поля (phase field method);
- методы, основанные на явном выделении границы раздела фаз, в которых межфазная граница определяется положением закрепленных на ней узлов сетки. Это обеспечивается за счёт либо использования сеток, согласованных с формой границы фазового перехода, либо с помощью динамической замены переменных – метода выпрямления фронта.

Рассмотрим преимущества и недостатки данных подходов.

Метод функции уровня был разработан в конце 1980-х годов в работах американских математиков С. Ошера и Д. Сетиана для решения задач с подвижными границами [13]. Модификация этого метода, позволяющая численно моделировать процессы фазового перехода, была предложена в работе С. Ошера [14] и в дальнейшем получила достаточно широкое распространение (См., например, [15–18]). При использовании данного подхода для отслеживания положения границы раздела в расчетной области рассматривается поверхность  $\phi(t, \mathbf{x})$ , такая что в каждый момент времени фронт кристаллизации совпадает с нулевой линией уровня этой поверхности. Значение функции  $\phi(t, \mathbf{x})$  совпадает

с расстоянием до границы раздела фаз, взятым со знаком плюс внутри твердой фазы и со знаком минус внутри жидкой. В ходе расчета поверхность уровня перемещается со скоростью, совпадающей на межфазной границе со скоростью движения фронта кристаллизации. Значения параметров фаз переинтерполируются в соответствии с новым положением границы раздела.

Метод функций уровня позволяет численно моделировать рост кристаллов со сложной геометрией границы раздела (образование дендритов и т.д.), слияние существующих и образование новых межфазных границ. Однако данный метод имеет ряд существенных недостатков. В ходе решения задачи  $\phi(t, \mathbf{x})$  теряет свойства функции расстояния, поэтому на каждом шаге по времени необходимо проводить достаточно громоздкую регуляризующую процедуру и решать уравнения, отсутствующие в исходной постановке задачи. Также известно, что на основе классического метода функции уровня нельзя построить консервативную вычислительную схему (см., например, [19; 20]). Поэтому в случае моделирования длительных процессов применение такого алгоритма может приводить к получению неверных результатов.

Модель фазового поля была предложена в 1990-х годах Л. Ченом [21] и Ю. Вонгом [22]. В моделях метода фазового поля граница раздела фаз имеет ненулевую толщину, "размазывается" в пространстве. Твердая и жидкая фазы задаются с помощью функции фазового поля  $\phi(t, \mathbf{x})$ , равной единице в кристалле, нулю в растворе, и монотонно изменяющейся от нуля до единицы в области раздела фаз. В работе [23] было показано, что метод фазового поля позволяет моделировать многие микро- и мезоскопические эффекты — перестроение кристаллических решеток, зародышеобразование внутри жидкой фазы, рост дендритов. Обобщение метода фазового поля на случай кристаллизации многокомпонентного соединения было рассмотрено в статье [24].

В моделях фазового поля законы, описывающие процесс кристаллизации, получаются путем минимизации функционала свободной энергии

$F(\phi, \eta_1, \dots, \eta_n, T, C)$ , где  $\eta_i$ ,  $i = \overline{1, n}$  — параметры порядка, описывающие мик-

роструктуру фаз. Применение такой процедуры приводит к тому, что в уравнениях, описывающих движение жидкости, эволюцию фазового поля, микроструктуры, температуры и концентрации, возникают пространственные производные высокого порядка (как правило, третьего и четвертого). При этом в уравнении для  $\phi$  присутствует малый параметр — ширина диффузионной границы, поэтому для получения надежных результатов при численном моделировании необходимо использовать очень подробные пространственные сетки в области границы раздела. Для численного исследования моделей фазового поля, как правило, используют явные схемы [25], из-за структуры уравнений ограничение на шаг интегрирования по времени  $\tau$  очень жесткое:  $\tau \sim h^4$ , где  $h$  — характерный размер пространственной сетки. Современный уровень развития вычислительной техники позволяет использовать метод фазового поля для моделирования быстрых неравновесных процессов, протекающих в ходе кристаллизации переохлаждённой многокомпонентной жидкой фазы — образование дефектов кристаллической структуры, рост дендритов и т.д. (см., например [26—31]). Однако его применение для численного исследования длительных технологических режимов выращивания монокристаллов из жидкой фазы представляется затруднительным. Другим недостатком метода фазового поля, не связанным с вычислительными возможностями исследователя, является наличие в функционале свободной энергии физических параметров, отсутствующих в классических моделях. Для определения этих параметров необходимо производить большое количество вычислительной и экспериментальной работы. При этом для многокомпонентных соединений в большинстве случаев экспериментальные и теоретические данные отсутствуют, и микроскопические параметры веществ необходимо определять численно из первых принципов, с помощью методов молекулярной динамики [25].

Широкое распространение получил метод сквозного счета, основанный на сглаживании физических параметров фаз — энтальпийный метод [32—35]. Однако данный подход позволяет моделировать фазовые переходы лишь в чистых



веществах и поэтому подробно не рассматривается.

Перейдем к рассмотрению методов с явным выделением границы раздела фаз. Методы, основанные на использовании сеток, согласованных с формой границы раздела, позволяют отслеживать положение фронта кристаллизации с высокой точностью. В настоящее время такие подходы преимущественно развиваются в двух направлениях. Первое составляют методы, в которых используются подвижные сетки, второе – вычислительные схемы, в которых на каждом шаге по времени в твердой и жидкой фазах строятся новые пространственные сетки высокого качества.

В подходе, основанном на использовании подвижных сеток, часть узлов в ходе всего процесса закреплена на межфазной границе и движется со скоростью фронта кристаллизации. Скорость узлов, расположенных внутри расчетных подобластей, задается с помощью некоторого закона. В работе [36] узлы двигаются только в вертикальном направлении, их скорость линейно зависит от расстояния до межфазной границы, в [37–39] сетка представляется в виде системы частиц, соединенных пружинами, в [40–45] новое положение узлов определяется в ходе решения системы эллиптических уравнений, в [46–48] применяется версия метода, реализованная в комплексе программ Comsol Multiphysics. При построении соответствующих вычислительных схем используются движущиеся контрольные объемы (конечные элементы). В работах [49; 50] показано, что для получения надежных результатов в случае расчета на подвижной сетке в дискретной среде должен выполняться закон сохранения объема (space conservation law). Обеспечение выполнения данного балансного соотношения на разностном уровне является отдельной трудоемкой задачей. Другой недостаток метода состоит в том, что при существенном искривлении фронта кристаллизации качество сетки, и как следствие, получаемых результатов заметно ухудшается.

Методы, в которых на каждом шаге по времени происходит перестроение пространственной сетки рассматриваются в работах [51–54]. Главное преиму-

щество данного подхода заключается в том, что для его реализации можно использовать существующие программные комплексы, не предназначенные для решения задач с подвижными границам: на каждом шаге по времени расчетная область и сетка перестраиваются, осуществляется переинтерполяция полей температуры, концентрации и скоростей жидкости, затем с помощью встроенного в программный пакет решателя происходит переход на следующий временной слой, и описанная процедура повторяется. Однако в работе [52] отмечается, что при использовании данного метода расчет нужно вести с очень мелким шагом по времени.

Еще одну группу методов, основанных на явном выделении границы раздела фаз, составляют подходы, представленные в работах [55—58]. В них проблема построения подвижной сетки формулируется на дифференциальном уровне — задача дополняется уравнениями, описывающими поведение сетки. В основе метода лежит процедура перехода к произвольной нестационарной системе координат, при этом преобразование координат осуществляется автоматически с помощью искомого решения. За счет использования функции преобразования, которая зависит от нескольких производных численного решения, сгущение сетки происходит в соответствии с особенностями решения — в областях с большими градиентами, на границах раздела. Однако теоретический анализ таких алгоритмов является очень трудоемким, а выбор функции преобразования, обеспечивающей устойчивость расчета, является отдельной задачей.

Основой метода выпрямления фронта является использование динамической замены переменных, в результате которой фронт кристаллизации на протяжении всего расчета остается плоским и неподвижным в новой системе координат. В результате замены переменных в уравнениях, описывающих тепломассоперенос в системе, появляются дополнительные члены переноса, зависящие от неизвестной скорости движения границы раздела; в двумерном и трехмерном случае в диссипативных членах возникают смешанные пространственные производные. Однако в силу того, что на протяжении всего процесса геомет-

рия задачи остается неизменной, для дискретизации полученных нелинейных уравнений можно использовать неподвижные прямоугольные сетки, что значительно упрощает конструирование консервативных разностных схем. При этом метод выпрямления фронта позволяет отслеживать положение границы раздела фаз с высокой точностью.

Преобразование системы координат для классической задачи Стефана было приведено в 1950 г. в работе Г. Ландау [59]. Первый конечно-разностный алгоритм решения задачи о фазовом переходе, основанный на преобразовании Ландау, был предложен Дж. Кранком в 1957 г. [60]. В работах [61; 62] метод выпрямления фронта был использован для решения классической задачи Стефана в двумерном приближении. С начала 1980-х годов метод выпрямления фронта получил широкое распространение при моделировании процессов получения полупроводниковых соединений из многокомпонентных растворов (см., например [63–75]). При этом данный подход обладает рядом недостатков. Метод выпрямления фронта не применим для моделирования процессов, в которых происходит образование новых фаз, граница раздела имеет сложную геометрию и не описывается однозначной функцией. При существенном искривлении фронта кристаллизации качество получаемых результатов заметно ухудшается.

В настоящее время для моделирования длительных режимов выращивания полупроводниковых монокристаллов, как правило, используют методы, основанные на явном выделении границы раздела фаз. Дискретные аппроксимации для уравнений, описывающих эволюцию многокомпонентной системы, строятся с помощью метода конечных объемов (интегро – интерполяционного метода) или методов проекционного типа (метод Галеркина, метод конечных элементов), в расчетах используются неявные по времени вычислительные схемы. На длительность расчетов и качество получаемых результатов значительно влияет выбор метода решения полученной системы нелинейных алгебраических уравнений.

Физические процессы протекающие в ростовой камере имеют существенно

различающиеся характерные времена. Масштабы времени, обусловленные диссипативными процессами:  $t_{\kappa}^{\text{cr}} = \frac{(L^{\text{cr}})^2}{\kappa^{\text{cr}}}$ ,  $t_{\kappa}^{\text{liq}} = \frac{(L^{\text{liq}})^2}{\kappa^{\text{liq}}}$  температуропроводностью,  $t_D^{\text{cr}} = \frac{(L^{\text{cr}})^2}{D^{\text{cr}}}$ ,  $t_D^{\text{liq}} = \frac{(L^{\text{liq}})^2}{D^{\text{liq}}}$  диффузией, и  $t_{\nu}^{\text{liq}} = \frac{(L^{\text{liq}})^2}{\nu}$  вязкостью ( $L^{\text{cr}}$ ,  $L^{\text{liq}}$  — характерные размеры твердой и жидкой фаз, соответственно) отличаются на несколько порядков. Еще один масштаб определяется длительностью процесса и связан со скоростью движения границы раздела  $v_{\text{ph}}$  следующим образом:  $t_{\text{tec}} = \frac{H}{v_{\text{ph}}}$ , где  $H$  — высота монокристалла. Как правило длительность кристаллизации  $t_{\text{tec}}$  на несколько порядков превосходит характерные времена диссипативных процессов. Таким образом, используемые алгоритмы должны обеспечивать необходимую точность расчёта быстрых процессов и, вместе с тем, не требовать слишком больших затрат машинного времени на расчёт всей задачи в целом. Важно, чтобы выбор шага по времени определялся спецификой физических процессов, протекающих в системе, а не диктовался внутренними свойствами вычислительной процедуры.

В работах [40—45; 65; 66; 68] нелинейные уравнения, описывающие движение жидкости, тепломассоперенос, сопровождающийся фазовым переходом, и движение узлов сетки, решаются совместно с помощью метода Ньютона или его модификаций. Полностью совместный алгоритм позволяет получать надежные результаты в широком диапазоне физических параметров, однако является очень трудоемким с вычислительной точки зрения. Данное обстоятельство ограничивает его область применения.

Более широкое распространение получили методы решения, основанные на расщеплении по физическим процессам. В них поле скоростей жидкости, распределения температуры и концентрации, а также скорость фронта кристаллизации определяются последовательно (см., например, работы [37; 38; 46—48; 52—54]). Для решения уравнений динамики вязкой жидкости, как правило, применяются методы типа предиктор-корректор (методы дробных шагов, SIMPLE и его модификации [50; 76]). Известно, что использование таких подходов приво-

дят к нарушению в дискретной среде закона сохранения кинетической энергии. В работах [63; 77; 78] показано, что методы решения уравнений тепломассопереноса, основанные на последовательном определении полей температуры, концентрации и скорости фронта, являются условно устойчивыми. При этом существуют области изменения физических параметров, в которых ограничения на величину шага по времени являются очень жесткими, что значительно осложняет моделирование длительных нестационарных процессов. Для некоторых веществ последовательный алгоритм оказывается неустойчивым при любых значениях шага по времени [77; 78].

Существуют режимы выращивания, в которых в начальный момент времени раствор не равновесен твердой фазе: температура и концентрации на фронте кристаллизации не удовлетворяют фазовой диаграмме системы и балансным соотношениям. В таких случаях возникает проблема задания начальных данных, отмеченная, например, в работах [37; 38; 79—81]. Во многих современных алгоритмах составы твердой и жидкой фаз на фронте кристаллизации искусственно согласовывают, как правило, для этого применяют численные или аналитические решения, полученные в рамках исследования упрощенных моделей. Однако известно, что даже незначительные ошибки в задании начальной температуры могут приводить к получению физически неверных результатов: вместо растворения будет наблюдаться рост кристалла и наоборот [82]. В работах [71; 72] показано, что применение алгоритма, основанного на совместном определении полей температуры, концентрации и скорости фронта, позволяет задавать начальные данные естественным образом.

**Цели и задачи диссертационной работы.** Целью работы является построение и исследование численных методов решения задачи о фазовом переходе в многокомпонентном растворе. Для достижения этой цели необходимо было решить следующие **задачи**:

- построить консервативную разностную схему для задачи о фазовом переходе

в многокомпонентном растворе в цилиндрической системе координат в осесимметричном приближении. Исследовать методы решения сеточных уравнений, аппроксимирующих уравнения движения жидкости и тепло- и массопереноса в многокомпонентной среде с фазовым переходом;

- построить консервативную разностную схему для двухфазной задачи Стефана на движущейся сетке, согласованной с формой границы раздела фаз, в исходной системе координат. Определить закон движения узлов сетки, обеспечивающий алгебраическую эквивалентность разностных схем, построенных на подвижной сетке и методом выпрямления фронта;
- продемонстрировать возможности разработанных алгоритмов. Провести численное моделирование процесса получения многокомпонентного соединения методом вертикальной направленной кристаллизации.

**Научная новизна.** Разработаны методы численного исследования двумерной модели процесса кристаллизации бинарного соединения, учитывающей тепломассоперенос в твердой и жидкой фазах, движение фронта кристаллизации и зависимость температуры фазового перехода от состава фаз. С помощью методов, основанных на явном выделении границы фазового перехода, построены разностные схемы, обеспечивающие выполнение дискретных аналогов законов сохранения массы, внутренней и кинетической энергии. Выделен класс схем, для которых метод выпрямления фронта и метод, основанный на использовании подвижных сеток, согласованных с формой фронта кристаллизации, алгебраически эквивалентны. Проведен анализ устойчивости различных методов численной реализации нелинейных условий на границе раздела фаз. Получены и доказаны условия сходимости итерационных методов, основанных на последовательном и совместном определении полей температуры и концентрации. Показано, что совместный алгоритм решения задачи обладает значительным запасом устойчивости и позволяет численно исследовать фазовые переходы в широком диапазоне физических параметров.

**Теоретическая и практическая значимость диссертационной работы.** Для задачи о фазовом переходе в многокомпонентном растворе построен вычислительный метод, позволяющий проводить исследования промышленных режимов выращивания монокристаллов. Результаты расчетов, полученные в работе, согласуются с имеющимися теоретическими и экспериментальными данными, и отражают качественные особенности рассмотренных методов выращивания полупроводниковых материалов из жидкой фазы.

Экспериментальный подбор оптимальных параметров технологического режима является крайне дорогостоящим. Длительность эксперимента может достигать нескольких недель, при этом отсутствует возможность следить за ходом процесса, так как рост кристалла протекает в непрозрачном тигле, температура в котором составляет несколько тысяч градусов. О характере процессов внутри ростовой камеры можно судить лишь косвенно, проанализировав распределения состава в различных сечениях монокристалла по окончании эксперимента. Предложенный вычислительный алгоритм позволяет проводить многопараметрические исследования технологических режимов и получать детальную информацию о физико-химических процессах, сопровождающих рост кристалла. В работе показано, что даже в случае проведения расчетов на персональном компьютере, результаты моделирования удастся получить за время существенно меньшее длительности реального физического процесса.

**Методы исследования научной проблемы.** В работе рассматривается математическая модель процесса кристаллизации многокомпонентного раствора, основу которой составляют уравнения Навье — Стокса, уравнения тепломассопереноса в твердой и жидкой фазах и условия термодинамического равновесия на границе раздела фаз. Для отслеживания положения фронта кристаллизации применяются методы, основанные на явном выделении границы фазового перехода. Разностные схемы строятся с помощью интегро-интерполяционного метода (метода конечных объемов). Для анализа устойчивости методов решения системы нелинейных сеточных уравнений, описывающих тепломассо-

перенос в многокомпонентной среде, рассматривается упрощенная разностная модель, отражающая характерные особенности задачи и поддающаяся исследованию аналитическими методами.

### **Основные положения, выносимые на защиту:**

- Построен и исследован метод численного решения задачи о фазовом переходе в многокомпонентном растворе. Математическая постановка задачи учитывает движение фронта кристаллизации, конвективный и диффузионный тепло-массоперенос в растворе, процессы теплопроводности и диффузии в кристалле, зависимость температуры фазового перехода от состава фаз. Доказано, что предложенный вычислительный алгоритм гарантирует выполнение разностных аналогов законов сохранения характерных для рассматриваемого физического процесса.
- Изучено влияние способа аппроксимации нелинейных условий на межфазной границе на сходимость итерационного процесса решения соответствующей системы разностных уравнений. Указаны условия сходимости итерационных методов, основанных на последовательном и совместном определении полей температуры и концентрации.
- Для двухфазной задачи Стефана на подвижной сетке, согласованной с формой границы раздела фаз, построена разностная схема алгебраически эквивалентная схеме, построенной методом выпрямления фронта. Доказано, что, аналогично дифференциальному случаю, схемы переходят друг в друга с помощью замены переменных.

**Степень достоверности и апробация результатов.** Результаты работы были представлены на следующих научных конференциях и семинарах

- Всероссийская научная конференция «Теоретические основы конструирования численных алгоритмов и решение задач математической физики», посвященная памяти К.И. Бабенко, Пущино, Россия (2022);



- Международная научная конференция «Фундаментальные и прикладные задачи механики (FAPM-2021)», Москва, Россия (2021);
- International symposium «Non-equilibrium processes in continuous media», Пермь, Россия (2021);
- VIII Международная конференция «Кристаллизация: компьютерные модели, эксперимент, технологии», Ижевск, Россия (2019);
- FDM'18: Seventh conference of finite difference methods: theory and applications, Лозенец, Болгария (2018);
- Международная научная конференция «Фундаментальные и прикладные задачи механики (FAPM-2017)», Москва, Россия (2017);
- Международная научная конференция «Современные проблемы математической физики и вычислительной математики», посвященная 110-летию академика А.Н. Тихонова, Москва, Россия (2016);
- XIV International seminar «Mathematical models and modeling in laser plasma processes and advanced science technologies», Москва, Россия (2016).

Результаты работы также обсуждались в Институте прикладной математики им. М.В. Келдыша на семинарах «Вычислительные методы и математическое моделирование» им. Ю.П. Попова под руководством проф. М.П. Галанина и проф. В.М. Чечёткина.

**Публикации.** По теме диссертации опубликованы двенадцать работ [1—12]. Из них десять [1—3; 5; 6; 8—12] опубликованы в журналах из перечня рецензируемых научных изданий, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией, шесть [3—5; 7; 9; 10] — в журналах, индексируемых в базе данных Scopus, четыре [5; 7; 9; 10] в журналах, индексируемых в базе данных Web of Science.

**Личный вклад автора.** Автором самостоятельно построены разностные схемы, представленные в работе, доказаны утверждения о свойствах рассмот-

ренных численных методов, разработан параллельный программный комплекс для численного исследования процессов тепло- и массопереноса в среде с фазовым переходом, получены все численные результаты. Постановка задачи и обсуждение результатов работы осуществлены совместно с научным руководителем О.В. Щерицой и соавтором публикаций О.С. Мажоровой. Из совместных публикаций в диссертацию включен лишь тот материал, который непосредственно принадлежит соискателю, заимствованный материал обозначен в работе ссылками.

**Содержание работы.** Диссертационная работа посвящена разработке и исследованию численных методов решения задачи о фазовом переходе в многокомпонентном растворе и состоит из четырех глав.

Первая глава посвящена построению консервативной разностной схемы для задачи о фазовом переходе в многокомпонентном растворе в цилиндрической системе координат. Задача рассмотрена в осесимметричном приближении, основу математической модели составляют уравнения Навье — Стокса, записанные в переменных “функция тока – завихренность”, уравнения тепломассопереноса в твердой и жидкой фазах и условия термодинамического равновесия на границе раздела фаз. Для решения задачи применяется метод выпрямления фронта. В результате замены переменных типа Ландау положение границы раздела фаз на протяжении всего процесса остается неизменным и совпадает с некоторой координатной линией.

В расчетной системе координат на прямоугольной сетке с помощью интегро-интерполяционного метода (метода конечных объемов) построена разностная схема, наследующая основные свойства исходной дифференциальной задачи. Получены дивергентная и недивергентная формы записи разностной схемы, аппроксимирующие соответствующие формы записи исходной дифференциальной задачи. В Главе 1 доказаны утверждения, согласно которым в дискретной среде

- конвективные члены в уравнении переноса завихренности не вносят вклад в производство кинетической энергии;
- члены переноса в уравнениях тепло- и массообмена не влияют на балансы теплоты и массы, а также на средние по области значения квадратов температуры и концентрации;
- оператор, аппроксимирующий диссипативные члены в уравнениях движения жидкости и тепломассопереноса в расчетной системе координат, самосопряжён и отрицательно определён;
- выполнены законы сохранения массы, внутренней и кинетической энергии, завихренности, балансные соотношения для квадратов температуры и концентрации.

Во второй главе рассмотрены методы решения сеточных уравнений, аппроксимирующих уравнения движения жидкости, тепло- и массопереноса в многокомпонентной среде с фазовым переходом. В основе метода решения соответствующей системы нелинейных алгебраических уравнений лежит расщепление по физическим процессам: сначала из сеточных уравнений, аппроксимирующих уравнения Навье — Стокса, определяется поле скоростей жидкости; затем из уравнений тепломассопереноса вычисляются распределение температуры в области, состав кристалла и раствора, скорость движения границы раздела фаз.

Изучено влияние способа аппроксимации нелинейных условий на межфазной границе на сходимость итерационного процесса решения соответствующей системы разностных уравнений. Для этого рассмотрена упрощенная одномерная разностная модель процесса кристаллизации многокомпонентного раствора, отражающая характерные особенности задачи и поддающаяся исследованию классическими методами (модель учитывает диффузионный тепло- и массоперенос в твердой и жидкой фазах, условия термодинамического равновесия на межфазной границе). Получены условия сходимости для методов, осно-

ванных на последовательном определении полей температуры и концентрации. Доказано, что область применимости соответствующих методов определяется физическими свойствами рассматриваемых веществ, а также параметрами технологического режима. Для некоторых веществ последовательные алгоритмы оказываются неустойчивыми при любых значениях шага по времени. Проведен анализ сходимости алгоритма, в котором соответствующая система нелинейных уравнений решаются совместно с помощью метода Ньютона относительно вектора неизвестных, компонентами которого являются концентрация в твердой и жидкой фазах, температура во всей расчетной области и скорость движения фронта. Показано, что несмотря на бóльшую, по сравнению с последовательными методами, вычислительную сложность, совместный алгоритм является существенно более надежным и гибким инструментом исследования процессов кристаллизации.

Для решения уравнений Навье — Стокса применен практически безусловно устойчивый алгоритм. Соответствующая система сеточных уравнений решается совместно, относительно вектора неизвестных, компонентами которого являются функция тока и завихренность.

Разработанный вычислительный алгоритм применялся для решения модельной задачи о кристаллизации двухкомпонентного раствора в цилиндрической ампуле. Результаты моделирования отражают качественные особенности рассматриваемого процесса (эволюцию структуры течения в растворе, изменение формы фронта кристаллизации, характер распределения компонентов в твердой фазе) и согласуются с имеющимися теоретическими данными. Расчеты показывают, что разностные аналоги законов сохранения выполняются с высокой точностью, вклад конвективного переноса в балансы теплоты, массы и кинетической энергии на протяжении всего процесса остается на уровне машинной погрешности. Достоверность полученных результатов подтверждается расчетами, проведенными на серии сгущающихся пространственных сеток.

В третьей главе представлены разностные схемы для задачи о кристал-

лизации чистого вещества в декартовой системе координат в прямоугольной области. Основу математической модели составляют уравнения Навье — Стокса в переменных функция тока-вихрь, уравнения теплопереноса в твердой и жидкой фазах, условия баланса внутренней энергии на межфазной границе.

С помощью методов, основанных на явном выделении границы фазового перехода, построены две разностные схемы — на подвижной сетке, согласованной с формой границы раздела фаз, и на фиксированной сетке, полученной с помощью метода выпрямления фронта. Указан закон движения узлов сетки, обеспечивающий алгебраическую эквивалентность разностных схем, построенных на подвижной и фиксированной сетках. Доказано, что преобразование одной схемы в другую осуществляется с помощью замены переменных, аналогично тому, как это делается в дифференциальной задаче. В силу алгебраической эквивалентности методов, разностная схема, построенная на подвижной сетке, также является консервативной. Таким образом в Главе 3 для двухфазной задачи Стефана выделен класс схем, наследующих основные свойства исходной дифференциальной модели.

В основу методов решения задачи о фазовом переходе в многокомпонентном растворе, построенных в Главах 1–3, положены следующие принципы:

- применение алгоритмов, в которых граница раздела фаз выделяется явным образом;
- использование консервативных разностных схем, наследующие основные свойства исходной дифференциальной задачи;
- использование совместного алгоритма решения системы нелинейных разностных уравнений, описывающих тепломассоперенос в системе.

В четвертой главе показано, что предложенная вычислительная стратегия является гибким инструментом исследования фазовых переходов и допускает внесение существенных изменений в математическую модель процесса кристалли-

зации. Методы, разработанные на основе изложенных принципов, могут быть использованы для численного моделирования промышленных способов получения полупроводниковых материалов из жидкой фазы. Проведено численное исследование основных этапов выращивания двухкомпонентного соединения методом Бриджмена: растворение загрузки, смена раствора ростом, кристаллизация полупроводникового материала. Математическая модель, рассмотренная в Главе 1, дополнена соотношениями, описывающими кинетические процессы на межфазной границе, теплообмен излучением между нагревателем и ростовой камерой. В расчетах используются реальные параметры установки и материалов, а так же внешние температурные режимы.

Численно изучена стадия растворения загрузки: определены внешние температурные режимы, позволяющие растворить необходимый объем материала. Указан технологический режим, применение которого приводит к росту кристалла с выпуклым в жидкую фазу фронтом и искомым распределением состава. Изучено влияние процессов, протекающих на межфазной границе, на ход кристаллизации. Показано, что поверхностные эффекты играют существенную роль на ранней стадии процесса кристаллизации, когда скорость фронта велика. Результаты расчетов согласуются с теоретическими и экспериментальными данными.

Изложение материала в работе ведется на примере метода вертикальной направленной кристаллизации двухкомпонентного раствора. Однако предложенный вычислительный алгоритм очевидным образом обобщается на случай кристаллизации жидкой фазы с произвольным числом растворенных компонентов и применим для моделирования выращивания тонких пленок методом жидкофазной эпитаксии, получения монокристаллов методом подвижного нагревателя и диффузии в жидкой фазе, процесса легирования элементарных полупроводников и т.д.

## Глава 1

# Консервативная разностная схема для задачи о фазовом переходе в многокомпонентном растворе

## 1.1. Математическая модель

Рассмотрим процесс получения монокристалла из двухкомпонентного раствора. Рост кристалла осуществляется в вертикальной цилиндрической ампуле (рис. 1.1), находящейся в печи. Раствор компонента  $A$  в веществе  $B$  располагается над твердой фазой состава  $A_x B_{1-x}$ , где  $x$  — мольная доля компонента  $A$  в кристалле. Ампулу перемещают вниз вдоль вертикальной оси печи с постоянной скоростью  $V_g$ , в результате вблизи твердой фазы раствор становится пересыщенным, и происходит рост кристалла.

Математическое моделирование процесса кристаллизации проводится в рамках следующих предположений. Поля температуры, концентрации и скоростей жидкости — осесимметричны. Расчет ведется в области  $\Omega(r, z) = [0, R_{\text{out}}] \times [0, Z_4]$ , расположенной в плоскости  $(r, z)$  и состоящей из трех подобластей: затравки и кристалла  $\Omega^{\text{cr}}(t, r, z) = \{(r, z) : r \in [0, R_{\text{in}}], z \in [Z_1, \zeta(t, r)]\}$ , жидкой фазы  $\Omega^{\text{li}}(t, r, z) = \{(r, z) : r \in [0, R_{\text{in}}], z \in [\zeta(t, r), Z_3]\}$ , ампулы  $\Omega^{\text{amp}}(r, z) = \Omega(r, z) / (\Omega^{\text{cr}}(t, r, z) \cup \Omega^{\text{li}}(t, r, z))$  (см. рис. 1.1). Положение подвижной границы раздела кристалл–раствор описывается кривой  $z = \zeta(t, r)$ ,  $0 \leq r \leq R_{\text{in}}$ . Раствор считается вязкой несжимаемой жидкостью, зависимость плотности жидкой фазы от температуры и содержания компонента  $A$  учитывается в рамках приближения Обербека — Буссинеска [83].

Обозначения для физических параметров модели приведены в таблице А.1. Уравнения, описывающие эволюцию системы, записываются в безразмерном ви-

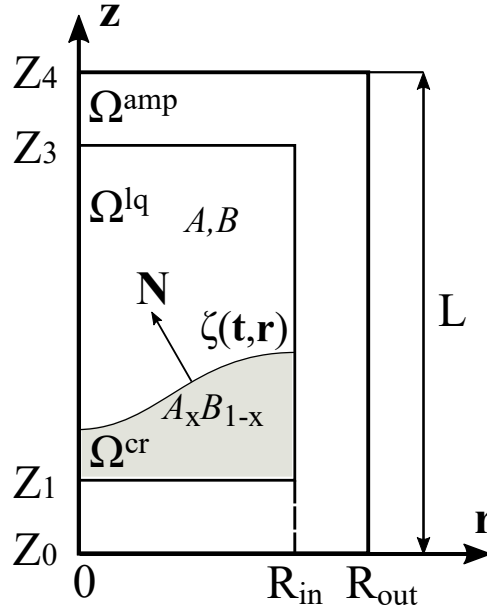


Рис. 1.1. Цилиндрическая ампула.

де. В качестве пространственного масштаба выбран внутренний радиус ампулы  $R_{\text{in}}$ , временной масштаб  $t_\nu = R_{\text{in}}^2/\nu$ . Безразмерная температура определяется соотношением  $T = (T^d - T_0^d)/\Delta T^d$ , где  $T^d$  — размерная температура,  $T_0^d$  — температура плавления чистого вещества  $B$ ,  $\Delta T^d$  — характерный перепад температуры в ампуле. В двухкомпонентной системе состав раствора и кристалла однозначно определяется концентрациями компонента  $A$  [моль/см<sup>3</sup>] в твердой и жидкой фазах —  $C^{\text{crd}}$  и  $C^{\text{lqd}}$ , соответственно. (Будем опускать у концентрации индекс, указывающий на принадлежность к фазе, там где это не вызывает разночтений). Безразмерная концентрация в твердой и жидкой фазах определяется выражением  $C = C^d/C_{\text{init}}^{\text{lqd}}$ , здесь  $C_{\text{init}}^{\text{lqd}}$  — начальная концентрация вещества  $A$  в растворе. Теплофизические параметры системы нормируются на соответствующие значения параметров жидкой фазы (см. таблицу А.2). Безразмерные параметры приведены в таблице А.3.

### 1.1.1. Основные уравнения

**Тепломассоперенос в жидкой фазе  $\Omega^{\text{lq}}$ .** Движение раствора–расплава описывается уравнениями Навье — Стокса в переменных «функция тока — завихренность». Компоненты вектора скорости  $\mathbf{V} = (V^r, 0, V^z)$  представлены в



виде

$$V^r = \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial z}, \quad V^z = -\frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r},$$

где  $\psi$  — функция тока.

Завихренность  $\boldsymbol{\omega} = \text{rot } \mathbf{V}$  определяется следующим образом:

$$\boldsymbol{\omega} = (0, \omega_\varphi, 0), \quad \omega_\varphi = \frac{\partial V^r}{\partial z} - \frac{\partial V^z}{\partial r}.$$

Для удобства в качестве неизвестной функции в уравнениях движения будем использовать  $\omega = -\omega_\varphi/r$ .

Конвективный тепломассоперенос в растворе описывается следующей системой уравнений:

- Уравнение переноса завихренности:

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \frac{1}{r} \mathcal{K}^{(r,z)}(\omega, \psi) = \frac{1}{r} \mathcal{D}^{(r,z)}(r^2 \omega) + \frac{1}{r} \mathcal{F}^{(r,z)}(T, C). \quad (1.1)$$

- Уравнение, связывающее завихренность и функцию тока:

$$-\omega = \frac{1}{r} \mathcal{D}^{(r,z)}(\psi). \quad (1.2)$$

- Уравнение конвективного теплопереноса:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{1}{r} \mathcal{K}^{(r,z)}(T, \psi) = \frac{1}{r} \mathcal{D}^{(r,z)}(T). \quad (1.3)$$

- Уравнение конвективного массопереноса:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{1}{r} \mathcal{K}^{(r,z)}(C, \psi) = \frac{1}{r} \mathcal{D}^{(r,z)}(C). \quad (1.4)$$

Здесь  $\mathcal{K}^{(r,z)}/r$  — оператор, описывающий конвективный перенос:

$$\mathcal{K}^{(r,z)}(f, \psi) = \frac{\partial}{\partial r} \mathcal{H}^r + \frac{\partial}{\partial z} \mathcal{H}^z, \quad f = \omega, T, C, \quad (1.5)$$

где компоненты конвективного потока  $\mathcal{H}^{(r,z)} = (\mathcal{H}^r, \mathcal{H}^z)$  имеют вид

$$\mathcal{H}^r(f) = rV^r f = \frac{\partial \psi}{\partial z} f, \quad \mathcal{H}^z(f) = rV^z f = -\frac{\partial \psi}{\partial r} f; \quad (1.6)$$

$\mathcal{D}^{(r,z)}/r$  — эллиптический оператор, описывающий диссипативные процессы в уравнениях переноса завихренности, тепло- и массопереноса:

$$\mathcal{D}^{(r,z)}(r^\beta f) = \frac{\partial}{\partial r} \mathcal{W}^r + \frac{\partial}{\partial z} \mathcal{W}^z, \quad f = \omega, \psi, T, C; \quad (1.7)$$

компоненты потока  $\mathcal{W}^{(r,z)} = (\mathcal{W}^r, \mathcal{W}^z)$  вычисляются следующим образом

$$\mathcal{W}^r(r^\beta f) = \varkappa r^\alpha \frac{\partial}{\partial r} (r^\beta f), \quad \mathcal{W}^z(r^\beta f) = \varkappa r^\alpha \frac{\partial}{\partial z} (r^\beta f), \quad (1.8)$$

значения параметров  $\varkappa$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$  приведены в таблице 1.1;

$\mathcal{F}^{(r,z)}$  — объемная сила:

$$\mathcal{F}^{(r,z)}(T, C) = \sum_{f=T, C} \text{Gr}_f \frac{\partial f}{\partial r}. \quad (1.9)$$

Таблица 1.1. Параметры диссипативного потока

| $f$      | $\varkappa$ | $\alpha$ | $\beta$ |
|----------|-------------|----------|---------|
| $\omega$ | 1           | -1       | 2       |
| $\psi$   | 1           | -1       | 0       |
| $T$      | k/Pr        | 1        | 0       |
| $C$      | D/Sc        | 1        | 0       |

**Тепломассоперенос в кристалле  $\Omega^{\text{cr}}$  и ампуле  $\Omega^{\text{amp}}$ .** Перенос теплоты в ампуле и кристалле описывается уравнением

$$c_p \rho \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r} \mathcal{D}^{(r,z)}(T), \quad (1.10)$$

диффузионный массоперенос компонента  $A$  в кристалле:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{1}{r} \mathcal{D}^{(r,z)}(C). \quad (1.11)$$

**Граничные условия.** Условия для функции тока, температуры и концентрации на оси ампулы вытекают из условий симметрии и имеют вид

$$\psi = \omega_\Phi = 0; \quad \frac{\partial T}{\partial r} = \frac{\partial C}{\partial r} = 0. \quad (1.12)$$

Граничные условия для функции тока на стенках ампулы и фронте

$$\psi = 0, \quad \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{n}} = 0. \quad (1.13)$$

Здесь  $\partial/\partial \mathbf{n}$  — производная по направлению нормали к соответствующей границе.

Внутренние стенки ампулы непроницаемы для вещества

$$D \frac{\partial C}{\partial \mathbf{n}} = 0. \quad (1.14)$$

Ампула и ее содержимое находятся в идеальном тепловом контакте

$$k \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} \Big|_{\text{лq}} = k \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} \Big|_{\text{amp}}, \quad k \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} \Big|_{\text{cr}} = k \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} \Big|_{\text{amp}}, \quad (1.15)$$

Температура на внешней границе ампулы зависит от времени

$$T|_{z=Z_0} = T_{\text{bot}}(t, r), \quad T|_{z=Z_4} = T_{\text{top}}(t, r), \quad T|_{r=R_{\text{out}}} = T_{\text{wall}}(t, z). \quad (1.16)$$

**Условия на межфазной границе.** Кинетические процессы на межфазной границе протекают бесконечно быстро, процесс кристаллизации происходит в квазиравновесном режиме [84]. То есть на границе раствор/кристалл составы твердой и жидкой фаз удовлетворяют фазовой диаграмме системы:

$$F_n(T, C_{\text{ph}}^{\text{cr}}, C_{\text{ph}}^{\text{lq}}) = 0, \quad n = 1, 2. \quad (1.17)$$

Здесь  $C_{\text{ph}}^{\text{lq}}$  и  $C_{\text{ph}}^{\text{cr}}$  — концентрации компонента  $A$  на фронте кристаллизации в твердой и жидкой фазах, [моль/см<sup>3</sup>]. Конкретный вид нелинейных уравнений (1.17) несущественен при построении разностной схемы.

На фронте кристаллизации выполняются балансы внутренней энергии и массы:

- Закон сохранения энергии (условие Стефана):

$$\frac{1}{\text{Pr}} \llbracket (k \nabla T \cdot \mathbf{N}) \rrbracket = \text{St } v_{\text{ph}} (\mathbf{e}_z \cdot \mathbf{N}). \quad (1.18)$$

Здесь  $\llbracket q \rrbracket = q^{\text{cr}} - q^{\text{lq}}$  — скачок величины  $q$  на фронте кристаллизации,  $v_{\text{ph}} = d\zeta/dt$  — скорость движения границы раздела фаз,  $\mathbf{N}$  — единичная нормаль

к фронту кристаллизации, направленная в жидкую фазу,  $\mathbf{e}_z$  — единичный вектор в направлении оси  $z$ .

- Закон сохранения массы для компонента  $A$ :

$$\frac{1}{S_c} \llbracket (\mathbf{D} \nabla C \cdot \mathbf{N}) \rrbracket = -(C_{\text{ph}}^{\text{cr}} - C_{\text{ph}}^{\text{lq}}) v_{\text{ph}} (\mathbf{e}_z \cdot \mathbf{N}). \quad (1.19)$$

### 1.1.2. Свойства математической модели

Определим скалярное произведение функций  $f, g$  интегрируемых с квадратом в области  $\Omega(r, z)$  следующим образом:

$$(f, g)_{\Omega} = \int_{\Omega} f g r d\Omega. \quad (1.20)$$

Здесь и далее  $d\Omega = dr dz$ .

Система уравнений (1.1)–(1.19) обладает следующими свойствами.

**Интегральное условие на завихренность.** Запишем уравнение (1.2), связывающее функцию тока и завихренность, в виде

$$-\omega = \frac{1}{r} \left[ \frac{\partial V^z}{\partial r} - \frac{\partial V^r}{\partial z} \right]. \quad (1.21)$$

Применяя теорему Остроградского — Гаусса, из уравнения (1.21) в силу условий прилипания (1.13) получим, что

$$-\int_{\Omega^{\text{lq}}} \omega r d\Omega = \int_{\Omega^{\text{lq}}} \left[ \frac{\partial V^z}{\partial r} - \frac{\partial V^r}{\partial z} \right] d\Omega = \int_{Z_2}^{Z_3} V^z \Big|_{r=0} dz.$$

**Закон сохранения кинетической энергии.** Кинетическая энергия в системе изменяется по закону

$$\frac{\partial E_{\text{kin}}}{\partial t} = - \int_{\Omega^{\text{lq}}} (r\omega)^2 r d\Omega, \quad \text{где} \quad E_{\text{kin}} = \frac{1}{2} \int_{\Omega^{\text{lq}}} [(V^r)^2 + (V^z)^2] r d\Omega. \quad (1.22)$$

Выражение (1.22) получается в результате умножения уравнения переноса завихренности (1.1) на  $\psi$  и интегрирования соотношения по области  $\Omega^{\text{lq}}$ . В силу

того, что жидкость является несжимаемой, имеет место равенство

$$\left( \frac{\mathcal{K}^{(r,z)}(\omega, \psi)}{r}, \psi \right)_{\Omega^{\text{лq}}} = \int_{\Omega^{\text{лq}}} \mathcal{K}^{(r,z)}(\omega, \psi) \psi d\Omega = 0,$$

обеспечивающее выполнение баланса кинетической энергии в форме (1.22).

**Законы сохранения теплоты и массы.** В рассматриваемой системе выполняются законы сохранения теплоты и массы. При этом для конвективных членов в уравнениях тепло- и массопереноса (1.3), (1.4) имеем

$$\left( \frac{\mathcal{K}^{(r,z)}(f, \psi)}{r}, 1 \right)_{\Omega^{\text{лq}}} = 0, \quad \left( \frac{\mathcal{K}^{(r,z)}(f, \psi)}{r}, f \right)_{\Omega^{\text{лq}}} = 0, \quad f = T, C.$$

**Свойства эллиптического оператора.** Оператор  $\mathcal{D}^{(r,z)}(f)/r$ , определенный в пространстве функций  $D(\Omega') = \{f \in C^2(\Omega') : f|_{\partial\Omega'} = 0\}$ , является самосопряженным

$$\left( \frac{\mathcal{D}^{(r,z)}(f)}{r}, g \right)_{\Omega'} = \left( f, \frac{\mathcal{D}^{(r,z)}(g)}{r} \right)_{\Omega'}, \quad f, g \in D(\Omega')$$

и отрицательно определенным

$$\left( \frac{\mathcal{D}^{(r,z)}(f)}{r}, f \right)_{\Omega'} < 0, \quad f \in D(\Omega')$$

относительно скалярного произведения (1.20).

## 1.2. Метод выпрямления фронта

Для решения задачи с внутренней подвижной границей, положение которой необходимо определять в ходе решения, применяется метод выпрямления фронта [59]. Основу метода выпрямления фронта составляет динамическая замена переменных специального вида. Физическая область  $\Omega(r, z)$  отображается в расчетную область  $S(\xi, \eta)$  так, что в новой системе координат положение границы раздела фаз фиксировано и совпадает с координатной линией  $\eta = \text{const}$ .

### 1.2.1. Преобразование системы координат.

Преобразование системы координат осуществляется следующим образом. Физическая область, изображенная на рисунке 1.2, *a*, разбивается на четыре подобласти:

1. Нижний торец ампулы:  $\Omega_0 = (0 \leq r \leq R_{\text{out}}, Z_0 \leq z \leq Z_1)$ .
2. Затравка и часть боковой стенки ампулы:  $\Omega_1 = (0 \leq r \leq R_{\text{out}}, Z_1 \leq z \leq Z_2(t, r))$ ;  $Z_2$  — фронт кристаллизации, доопределенный внутри стенки ампулы следующим образом:

$$Z_2(t, r) = \begin{cases} \zeta(t, r), & r < R_{\text{in}}, \\ \zeta(t, R_{\text{in}}), & R_{\text{in}} \leq r < R_{\text{out}}. \end{cases}$$

3. Раствор и соответствующая часть боковой стенки ампулы:  $\Omega_2 = (0 \leq r \leq R_{\text{out}}, Z_2 \leq z \leq Z_3)$ ;
4. Верхний торец ампулы:  $\Omega_3 = (0 \leq r \leq R_{\text{out}}, Z_3 \leq z \leq Z_4)$ .

Связь между системами координат выражается соотношениями

$$\tilde{t} = t, \quad \xi = r, \quad \eta = (z - Z_\gamma)/l^\gamma + \gamma, \quad \gamma = 0, 1, 2, 3, \quad (1.23)$$

где  $l^\gamma = Z_{\gamma+1} - Z_\gamma$  длина зоны  $\Omega_\gamma$ . Якобиан преобразования (1.23):

$$J_\gamma = \frac{\partial(\tilde{t}, \xi, \eta)}{\partial(t, r, z)} = \frac{1}{l^\gamma}.$$

Области  $\Omega_\gamma, \gamma = 0, 1, 2, 3$  в новой системе координат отображаются на прямоугольники  $S_\gamma$  (рис. 1.2, *b*), а границы областей —  $z = Z_0, z = Z_1, z = Z_2, z = Z_3, z = Z_4$  — переходят в прямые  $\eta = 0, \eta = 1, \eta = 2, \eta = 3$ , и  $\eta = 4$ , соответственно. (Для удобства образ жидкой фазы  $\Omega^{\text{лq}}$  в расчетной системе координат обозначим  $S^{\text{лq}}$ .)

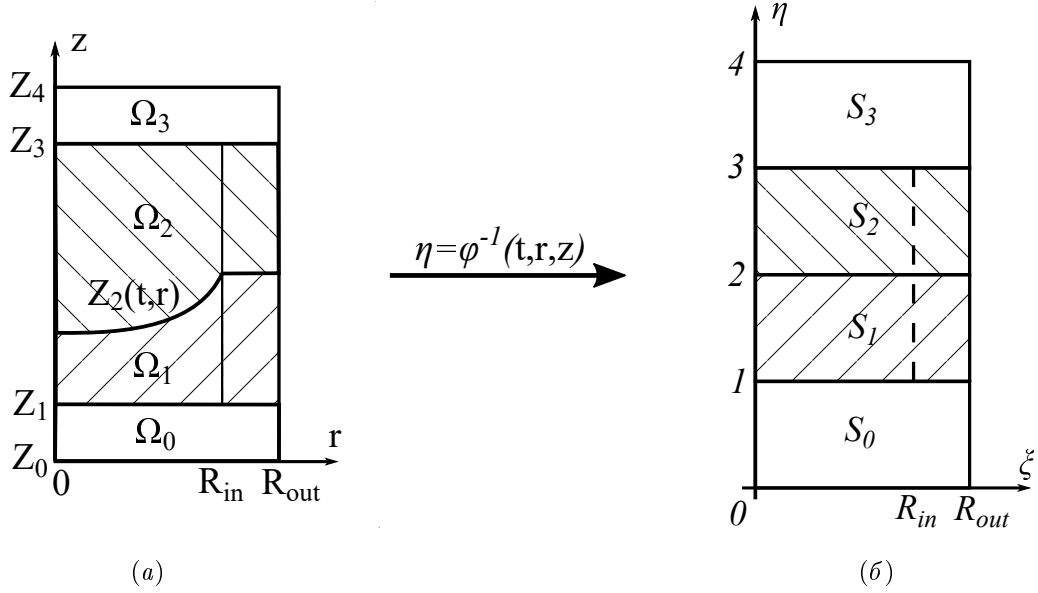


Рис. 1.2. Замена переменных: (а) физическая область; (б) расчетная область.

Частные производные неизвестных функций  $f = T, C, \omega, \psi$  преобразуются следующим образом

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial f}{\partial \tilde{t}} + \frac{\partial \eta}{\partial \tilde{t}} \frac{\partial f}{\partial \eta}, \quad \frac{\partial f}{\partial r} = \frac{\partial f}{\partial \xi} + \frac{\partial \eta}{\partial r} \frac{\partial f}{\partial \eta}, \quad \frac{\partial f}{\partial z} = \frac{\partial \eta}{\partial z} \frac{\partial f}{\partial \eta}. \quad (1.24)$$

Для вычисления производных  $\eta_t = \partial \eta / \partial t$ ,  $\eta_r = \partial \eta / \partial r$ ,  $\eta_z = \partial \eta / \partial z$  воспользуемся обратным преобразованием координат

$$t = \tilde{t}, \quad r = \xi, \quad z = \varphi^\gamma(\tilde{t}, \xi, \eta) = Z_\gamma + l^\gamma(\eta - \gamma), \quad \gamma = 0, 1, 2, 3. \quad (1.25)$$

Якобиан преобразования (1.25):

$$J_\gamma^{-1} = \frac{\partial(t, r, z)}{\partial(\tilde{t}, \xi, \eta)} = l^\gamma.$$

Нетрудно показать, что элементы матрицы Якоби вычисляются по формулам [85; 86]

$$\begin{aligned} \eta_t &= \frac{r_{\tilde{t}} z_\xi - r_\xi z_{\tilde{t}}}{J_\gamma^{-1}} = -\frac{z_{\tilde{t}}}{J_\gamma^{-1}} = -\frac{1}{l^\gamma} \varphi_{\tilde{t}}, & \eta_r &= \frac{t_\xi z_{\tilde{t}} - t_{\tilde{t}} z_\xi}{J_\gamma^{-1}} = -\frac{z_\xi}{J_\gamma^{-1}} = -\frac{1}{l^\gamma} \varphi_\xi, \\ \eta_z &= \frac{t_{\tilde{t}} r_\xi - t_\xi r_{\tilde{t}}}{J_\gamma^{-1}} = \frac{1}{J_\gamma^{-1}} = \frac{1}{l^\gamma}. \end{aligned} \quad (1.26)$$

В дальнейшем для краткости будем опускать волну над  $\tilde{t}$ . В таблице 1.2 приведены значения кусочных функций  $l$ ,  $\varphi_t$ ,  $\varphi_\xi$  в области  $S = \bigcup_{\gamma=0}^3 S_\gamma$ :  $l = l^\gamma$ ,  $\varphi_t = \varphi_t^\gamma$ ,  $\varphi_\xi = \varphi_\xi^\gamma$  при  $(\xi, \eta) \in S_\gamma$ .

Таблица 1.2. Параметры преобразования

| $S_\gamma$ | $J_\gamma^{-1} = l^\gamma$ | $\varphi_t^\gamma$  | $\varphi_\xi^\gamma$  |
|------------|----------------------------|---------------------|-----------------------|
| $S_0$      | $Z_1 - Z_0$                | 0                   | 0                     |
| $S_1$      | $Z_2(t, \xi) - Z_1$        | $(\eta - 1)Z_{2,t}$ | $(\eta - 1)Z_{2,\xi}$ |
| $S_2$      | $Z_3 - Z_2(t, \xi)$        | $(3 - \eta)Z_{2,t}$ | $(3 - \eta)Z_{2,\xi}$ |
| $S_3$      | $Z_4 - Z_3$                | 0                   | 0                     |

### 1.2.2. Дифференциальные операторы в расчетной области.

Используя соотношения (1.24), (1.26), преобразуем производную по времени, конвективные члены (1.5), эллиптический оператор (1.7) и объемную силу (1.9).

Для производной по времени получим

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{1}{\xi l} \left[ \xi l \frac{\partial f}{\partial \tilde{t}} - \xi \varphi_{\tilde{t}} \frac{\partial f}{\partial \eta} \right] = \frac{1}{\xi l} \mathcal{T}^{(\xi, \eta)}(f).$$

Воспользовавшись соотношением  $l_t = \varphi_{t\eta}$ , преобразуем выражение для  $\mathcal{T}^{(\xi, \eta)}(f)$  к дивергентному виду

$$\mathcal{T}^{(\xi, \eta)}(f) = \frac{\partial}{\partial t}(\xi l f) - \frac{\partial}{\partial \eta}(\xi \varphi_t f), \quad f = \omega, T, C.$$

Формулы для вычисления скорости движения жидкости преобразуются следующим образом

$$V^r = \frac{1}{\xi l} \frac{\partial \psi}{\partial \eta}, \quad V^z = -\frac{1}{\xi l} \left[ l \frac{\partial \psi}{\partial \xi} - \varphi_\xi \frac{\partial \psi}{\partial \eta} \right]. \quad (1.27)$$

Откуда для конвективных членов (1.5) имеем

$$\frac{1}{r} \mathcal{K}^{(r, z)}(f, \psi) = \frac{1}{\xi l} \mathcal{K}^{(\xi, \eta)}(f, \psi), \quad \mathcal{K}^{(\xi, \eta)}(f, \psi) = \frac{\partial}{\partial \xi} \mathcal{H}^\xi(f) + \frac{\partial}{\partial \eta} \mathcal{H}^\eta(f). \quad (1.28)$$

Компоненты конвективного потока  $\mathcal{H}^{(\xi, \eta)} = (\mathcal{H}^\xi, \mathcal{H}^\eta)$  в расчетной области:

$$\mathcal{H}^\xi = \xi l U^\xi f = \frac{\partial \psi}{\partial \eta} f, \quad \mathcal{H}^\eta = \xi l U^\eta f = -\frac{\partial \psi}{\partial \xi} f. \quad (1.29)$$



Здесь величины  $U^\xi$  и  $U^\eta$  равны скоростям переноса  $f$  вдоль соответствующих координатных направлений и вычисляются по формулам

$$U^\xi = \frac{1}{\xi l} \frac{\partial \psi}{\partial \eta}, \quad U^\eta = -\frac{1}{\xi l} \frac{\partial \psi}{\partial \xi}.$$

Важно отметить, что выражения (1.28), (1.29), полученные в расчетной системе координат  $(\tilde{t}, \xi, \eta)$  для конвективных членов, с точностью до якобиана совпадают с записью соответствующего оператора в физической области  $\Omega^{\text{Iq}}(t, r, z)$ .

Эллиптический оператор (1.7) принимает вид

$$\frac{1}{r} \mathcal{D}^{(r,z)}(r^\beta f) = \frac{1}{\xi l} \mathcal{D}^{(\xi,\eta)}(\xi^\beta f), \quad \mathcal{D}^{(\xi,\eta)}(\xi^\beta f) = \frac{\partial}{\partial \xi} \mathcal{W}^\xi + \frac{\partial}{\partial \eta} \mathcal{W}^\eta, \quad (1.30)$$

компоненты потока  $\mathcal{W}^{(\xi,\eta)} = (\mathcal{W}^\xi, \mathcal{W}^\eta)$  в расчетной системе координат

$$\mathcal{W}^\xi(\xi^\beta f) = \varkappa \xi^\alpha \left[ L^{\xi\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} (\xi^\beta f) + L^{\xi\eta} \frac{\partial}{\partial \eta} (\xi^\beta f) \right], \quad (1.31)$$

$$\mathcal{W}^\eta(\xi^\beta f) = \varkappa \xi^\alpha \left[ L^{\eta\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} (\xi^\beta f) + L^{\eta\eta} \frac{\partial}{\partial \eta} (\xi^\beta f) \right]. \quad (1.32)$$

Здесь метрические коэффициенты  $L^{\xi\xi}$ ,  $L^{\xi\eta}$ ,  $L^{\eta\xi}$ ,  $L^{\eta\eta}$  вычисляются следующим образом [85; 86]:

$$L^{\xi\xi} = \frac{r_\eta^2 + z_\eta^2}{J^{-1}} = \frac{z_\eta^2}{J^{-1}} = l, \quad L^{\xi\eta} = L^{\eta\xi} = -\frac{r_\xi r_\eta + z_\xi z_\eta}{J^{-1}} = -\frac{z_\xi z_\eta}{J^{-1}} = -\varphi_\xi, \\ L^{\eta\eta} = \frac{r_\xi^2 + z_\xi^2}{J^{-1}} = \frac{1 + \varphi_\xi^2}{l}.$$

Для объемной силы (1.9) получим

$$\frac{1}{r} \mathcal{F}^{(r,z)}(T, C) = \frac{1}{\xi l} \mathcal{F}^{(\xi,\eta)}(T, C), \quad \mathcal{F}^{(\xi,\eta)}(T, C) = \sum_{f=T,C} \text{Gr}_f \left[ \frac{\partial}{\partial \xi} (lf) - \frac{\partial}{\partial \eta} (\varphi_\xi f) \right].$$

Здесь использовалось равенство  $l_\xi = \varphi_{\xi\eta}$ .

### 1.2.3. Уравнения в расчетной области.

Запишем уравнения (1.1)–(1.11) в расчетной системе координат. Для уравнений Навье — Стокса (1.1), (1.2) получим

$$\frac{1}{\xi l} \mathcal{T}^{(\xi, \eta)}(\omega) + \frac{1}{\xi l} \mathcal{K}^{(\xi, \eta)}(\omega, \psi) = \frac{1}{\xi l} \mathcal{D}^{(\xi, \eta)}(\xi^2 \omega) + \frac{1}{\xi l} \mathcal{F}^{(\xi, \eta)}(T, C), \quad (1.33)$$

$$-\omega = \frac{1}{\xi l} \mathcal{D}^{(\xi, \eta)}(\psi). \quad (1.34)$$

Уравнения тепло- и массопереноса (1.3)–(1.4) в растворе записываются следующим образом

$$\frac{1}{\xi l} \mathcal{T}^{(\xi, \eta)}(f) + \frac{1}{\xi l} \mathcal{K}^{(\xi, \eta)}(f, \psi) = \frac{1}{\xi l} \mathcal{D}^{(\xi, \eta)}(f), \quad f = T, C. \quad (1.35)$$

Уравнение теплопроводности в кристалле и ампуле (1.10) имеет вид

$$c_p \rho \frac{1}{\xi l} \mathcal{T}^{(\xi, \eta)}(T) = \frac{1}{\xi l} \mathcal{D}^{(\xi, \eta)}(T). \quad (1.36)$$

Преобразование уравнения диффузии в кристалле (1.11) дает

$$\frac{1}{\xi l} \mathcal{T}^{(\xi, \eta)}(C) = \frac{1}{\xi l} \mathcal{D}^{(\xi, \eta)}(C). \quad (1.37)$$

### 1.2.4. Условия на границах.

Преобразуем условия на межфазной границе. Представим границу раздела в виде неявной кривой  $B(t, r, z) = 0 : B(t, r, z) = z - Z_2(t, r)$  и запишем условие Стефана (1.18) следующим образом [87]:

$$\left[ \left[ \frac{k}{Pr} \left( \frac{\partial T}{\partial r} \frac{\partial B}{\partial r} + \frac{\partial T}{\partial z} \frac{\partial B}{\partial z} \right) \right] \right] = -St \frac{\partial B}{\partial t}. \quad (1.38)$$

Преобразуем выражения для  $\partial T / \partial r$ ,  $\partial T / \partial z$  в уравнении (1.38):

$$\frac{1}{Pr} \left[ \left[ k \frac{\partial B}{\partial r} \frac{\partial T}{\partial \xi} + k \left( \frac{1}{l} \frac{\partial B}{\partial z} - \frac{\varphi_\xi}{l} \frac{\partial B}{\partial r} \right) \frac{\partial T}{\partial \eta} \right] \right] = -St \frac{\partial B}{\partial t}. \quad (1.39)$$

Подставляя в (1.39) значения частных производных  $\partial B / \partial t = -v_{ph}$ ,  $\partial B / \partial r = -\varphi_\xi$ ,  $\partial B / \partial z = 1$ , приходим к условию Стефана в расчетной системе координат

$$\frac{1}{Pr} \left[ \left[ k \left( L^{\eta\xi} \frac{\partial T}{\partial \xi} + L^{\eta\eta} \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) \right] \right] = St v_{ph}. \quad (1.40)$$

Для удобства запишем условие (1.40) в виде

$$\llbracket \mathcal{W}^n(T) \rrbracket = \text{St} \xi v_{\text{ph}}. \quad (1.41)$$

Аналогично, для закона сохранения массы (1.19) имеем

$$\llbracket \mathcal{W}^n(C) \rrbracket = -(C_{\text{ph}}^{\text{cr}} - C_{\text{ph}}^{\text{lq}}) \xi v_{\text{ph}}. \quad (1.42)$$

Преобразуем граничные условия (1.12)–(1.15). Для условий непротекания (1.13) получим

$$(\mathcal{W}^{(\xi, \eta)}(\psi), \tilde{\mathbf{n}}) = \mathbf{0}. \quad (1.43)$$

Здесь  $\tilde{\mathbf{n}}$  внешняя нормаль к соответствующей границе в расчетной области. Условия для концентрации (1.14) на внутренней поверхности ампулы примут вид

$$(\mathcal{W}^{(\xi, \eta)}(C), \tilde{\mathbf{n}}) = \mathbf{0}. \quad (1.44)$$

Условий идеального теплового контакта (1.15) между ампулой и содержимым преобразуются следующим образом

$$(\mathcal{W}^{(\xi, \eta)}(T), \tilde{\mathbf{n}}) \Big|_{\text{cr, lq}} = (\mathcal{W}^{(\xi, \eta)}(T), \tilde{\mathbf{n}}) \Big|_{\text{amp}}. \quad (1.45)$$

Условия на оси (1.12) преобразуются аналогично.

### 1.2.5. Свойства модели в расчетной системе координат.

Определим скалярное произведение функций  $f, g$  интегрируемых с квадратом в области  $S(\xi, \eta)$  следующим образом:

$$(f, g)_S = \int_S f g \xi l dS. \quad (1.46)$$

Здесь и далее  $dS = d\xi d\eta$ .

**Закон сохранения завихренности.** Уравнение (1.34), связывающее функцию тока и завихренность, может быть записано в виде

$$-\omega = \frac{1}{\xi l} \left[ \frac{\partial}{\partial \xi} (l V^z) - \frac{\partial}{\partial \eta} (V^r + \varphi_\xi V^z) \right].$$

Откуда в силу условий прилипания получаем закон сохранения завихренности (1.1.2) в неподвижной системе координат

$$-\int_{S^{lq}} \omega \xi l dS = \int_{S^{lq}} \left[ \frac{\partial}{\partial \xi} (lV^z) - \frac{\partial}{\partial \eta} (V^r + \varphi_\xi V^z) \right] dS = \int_2^3 (lV^z)|_{\xi=0} d\eta. \quad (1.47)$$

**Закон сохранения кинетической энергии.** В расчетной системе координат конвективные члены в уравнении переноса завихренности (1.33) не вносят вклад в баланс кинетической энергии

$$\left( \frac{1}{\xi l} \mathcal{K}^{(\xi, \eta)}(\omega, \psi), \psi \right)_{S^{lq}} = \int_{S^{lq}} \mathcal{K}^{(\xi, \eta)}(\omega, \psi) \psi dS = 0. \quad (1.48)$$

**Закон сохранения теплоты и массы.** Для конвективных членов в уравнениях тепло- и массопереноса (1.35) имеем

$$\left( \frac{1}{\xi l} \mathcal{K}^{(\xi, \eta)}(f, \psi), 1 \right)_{S^{lq}} = 0, \quad \left( \frac{1}{\xi l} \mathcal{K}^{(\xi, \eta)}(f, \psi), f \right)_{S^{lq}} = 0, \quad f = T, C. \quad (1.49)$$

**Свойства эллиптического оператора.** Оператор  $\frac{1}{\xi l} \mathcal{D}^{(\xi, \eta)}(f)$  является самосопряженным и отрицательно определенным в пространстве функций  $D(S') = \{f \in C^2(S') : f|_{\partial S'} = 0\}$  относительно скалярного произведения (1.46).

Покажем самосопряженность оператора. Воспользуемся тем, что на границе области функции  $f$  и  $g$  обращаются в нуль; дважды интегрируя по частям, получим:

$$\begin{aligned} \int_{S'} \left[ \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \kappa^{\xi\alpha} L^{\xi\xi} \frac{\partial f}{\partial \xi} + \kappa^{\xi\alpha} L^{\xi\eta} \frac{\partial f}{\partial \eta} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left( \kappa^{\xi\alpha} L^{\eta\eta} \frac{\partial f}{\partial \eta} + \kappa^{\xi\alpha} L^{\eta\xi} \frac{\partial f}{\partial \xi} \right) \right] g dS = \\ \int_{S'} \left[ \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \kappa^{\xi\alpha} L^{\xi\xi} \frac{\partial g}{\partial \xi} + \kappa^{\xi\alpha} L^{\xi\eta} \frac{\partial g}{\partial \eta} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left( \kappa^{\xi\alpha} L^{\eta\eta} \frac{\partial g}{\partial \eta} + \kappa^{\xi\alpha} L^{\eta\xi} \frac{\partial g}{\partial \xi} \right) \right] f dS. \end{aligned}$$

Самосопряженность оператора имеет место, в силу того что  $L^{\xi\eta} = L^{\eta\xi}$ :

$$\left( \frac{1}{\xi l} \mathcal{D}^{(\xi, \eta)}(f), g \right)_{S'} = \left( f, \frac{1}{\xi l} \mathcal{D}^{(\xi, \eta)}(g) \right)_{S'} \quad (1.50)$$

Покажем отрицательную определенность оператора:

$$\int_{S'} \mathcal{D}^{(\xi, \eta)}(f) f dS = - \int_{S'} \left[ \kappa^{\xi\alpha} L^{\xi\xi} \left( \frac{\partial f}{\partial \xi} \right)^2 + 2 \kappa^{\xi\alpha} L^{\xi\eta} \frac{\partial f}{\partial \xi} \frac{\partial f}{\partial \eta} + \kappa^{\xi\alpha} L^{\eta\eta} \left( \frac{\partial f}{\partial \eta} \right)^2 \right] dS.$$

В силу критерия Сильвестра подынтегральное выражение является положительно определенной квадратичной формой:

$$\varkappa \xi^\alpha L^{\xi\xi} = \varkappa \xi^\alpha l > 0, \quad (\varkappa \xi^\alpha)^2 [L^{\xi\xi} L^{\eta\eta} - (L^{\xi\eta})^2] = (\varkappa \xi^\alpha)^2 > 0.$$

Поэтому из свойств определенного интеграла следует, что оператор  $\frac{1}{\xi l} \mathcal{D}^{(\xi,\eta)}(f)$  — отрицательно определенный:

$$\left( \frac{1}{\xi l} \mathcal{D}^{(\xi,\eta)}(f), f \right)_{S'} < 0 \quad (1.51)$$

### 1.3. Разностная задача

#### 1.3.1. Сетка и сеточные функции

В расчетной области  $S(\xi, \eta)$  введем прямоугольную сетку  $\omega_h^{(\xi,\eta)} = \omega_h^\xi \times \omega_h^\eta$  таким образом, чтобы границы материалов располагались в узлах сетки:  $\omega_h^\xi = \{\xi_i, i = \overline{0, M}, \xi_0 = 0, \xi_{i'} = R_{\text{in}}, \xi_M = R_{\text{out}}\}$ ,  $\omega_h^\eta = \{\eta_j, j = \overline{0, N}, \eta_0 = 0, \eta_{j'} = 1, \eta_{j^*} = 2, \eta_{j''} = 3, \eta_N = 4\}$ ; шаги сетки  $\omega_h^{(\xi,\eta)}$ :  $h_{i+1/2}^\xi = \xi_{i+1} - \xi_i$ ,  $h_{j+1/2}^\eta = \eta_{j+1} - \eta_j$ . Введем также потоковые узлы с координатами:  $\xi_{i+1/2} = (\xi_{i+1} + \xi_i)/2$ ,  $\eta_{j+1/2} = (\eta_{j+1} + \eta_j)/2$ . Расчетную область  $S(\xi, \eta)$  разобьем на прямоугольные ячейки  $S_{ij}^{(\xi,\eta)} = [\xi_{i-1/2}, \xi_{i+1/2}] \times [\eta_{j-1/2}, \eta_{j+1/2}]$  с границами  $\partial S_{i+1/2,j}^{(\xi,\eta)}$ ,  $\partial S_{i,j-1/2}^{(\xi,\eta)}$ ,  $\partial S_{i-1/2,j}^{(\xi,\eta)}$ ,  $\partial S_{i,j+1/2}^{(\xi,\eta)}$ ; длины границ ячейки  $S_{ij}^{(\xi,\eta)}$  равны  $h_i^\xi = 0.5(h_{i+1/2}^\xi + h_{i-1/2}^\xi)$  и  $h_j^\eta = 0.5(h_{j+1/2}^\eta + h_{j-1/2}^\eta)$ , ее площадь  $dS_{ij}^{(\xi,\eta)} = h_i^\xi h_j^\eta$ . Также рассмотрим ячейки  $S_{i+1/2,j+1/2}^{(\xi,\eta)}$  с центрами в точках  $(\xi_{i+1/2}, \eta_{j+1/2})$  (см. рис. 1.3, а). Сетка по времени  $\omega_\tau = \{t_0=0, t_{k+1}=t_k+\tau, k = 0, 1, \dots\}$ , где  $\tau$  — шаг по времени.

Сеточные функцию  $f_{ij}^k = f(t_k, \xi_i, \eta_j)$ ,  $f = T, C, \psi, \omega$  будем относить к узлам сетки  $\omega_h^{(\xi,\eta)}$ . Доопределим эти функцию внутри расчетных ячеек:  $f(t_k, \xi, \eta) = f_{ij}^k$  при  $(\xi, \eta) \in S_{ij}^{(\xi,\eta)}$ . Длины фаз  $l_{ij+1/2}$  задаются в центрах горизонтальных границ ячеек  $S_{ij}^{(\xi,\eta)}$ , длина фазы в центре ячейки вычисляется с помощью линейной интерполяции:  $l_{ij} = (l_{ij+1/2} h_{j+1/2}^\eta + l_{ij-1/2} h_{j-1/2}^\eta) / (2h_{ij}^\eta)$ . Физические параметры областей  $\varkappa$  и метрические коэффициенты  $L^{\xi\xi}$ ,  $L^{\xi\eta}$ ,  $L^{\eta\eta}$  относятся к центрам ячеек  $S_{i+1/2,j+1/2}^{(\xi,\eta)}$  (см рис. 1.3, а).

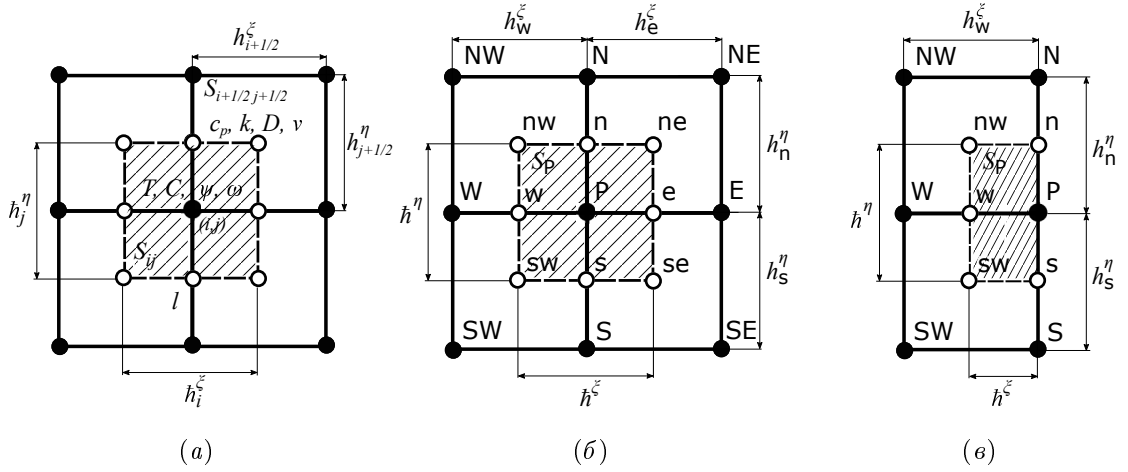


Рис. 1.3. (а) сеточные функции в регулярной ячейке; (б) локальная географическая нотация в регулярной ячейке; (в) приграничная ячейка на внешней стенке ампулы.

Подмножество узлов сетки  $\omega_h^{(\xi,\eta)}$ , принадлежащих жидкой фазе обозначим  $\omega_{lq}^{(\xi,\eta)}$ , твердой —  $\omega_{cr}^{(\xi,\eta)}$ . Введем множество индексов узлов сетки  $\omega_\gamma^{(\xi,\eta)}$ :  $(\overline{I}_\gamma \times \overline{J}_\gamma)$ ,  $\gamma = h, lq, cr$ , а также множество индексов внутренних узлов сетки  $\omega_\gamma^{(\xi,\eta)}$ :  $(I_\gamma \times J_\gamma)$ . Для проверки выполнения интегральных свойств разностных операторов определим скалярное произведение для сеточных функций заданных в центрах ячеек  $S_{ij}^{(\xi,\eta)}$ , следующим образом:

$$(f, g)_\gamma = \sum_{(i,j) \in (\overline{I}_\gamma \times \overline{J}_\gamma)} f_{ij} g_{ij} \xi_i l_{ij} d S_{ij}^{(\xi,\eta)}, \quad \gamma = h, lq, cr. \quad (1.52)$$

Для обозначения узлов сетки введем также локальную географическую нотацию [76] (рис. 1.3, б). Определим сеточные операторы разностного дифференцирования. Для пространственных производных в направлении оси  $\xi$  имеем  $f_{p,\xi} = (f_E - f_P)/h_E^\xi$ ,  $f_{p,\bar{\xi}} = f_{W,\xi}$ ; разностные аппроксимации пространственных производных в направлении оси  $\eta$ :  $f_{p,\eta} = (f_N - f_P)/h_N^\eta$ ,  $f_{p,\bar{\eta}} = f_{S,\eta}$ ,  $f_{p,\tilde{\eta}} = (f_n - f_P)/(0.5h_n^\eta)$ ,  $f_{p,\tilde{\bar{\eta}}} = f_{s,\tilde{\eta}}$ . Разностную производную по времени обозначим через  $f_t = (\hat{f}_P - f_P)/\tau$ , где  $\hat{f}_P = f(t_k + \tau, \xi_P, \eta_P)$ .

### 1.3.2. Построение разностной схемы

Разностную схему для рассматриваемой задачи построим интегро-интерполяционным методом [88]. Для удобства будем считать, что раствор, кристалл

и ампула имеют одинаковую удельную теплоемкость и плотность, при этом  $c_p \rho = 1$  (общий случай рассматривается аналогичным образом, но приводит к более громоздким выкладкам). Проинтегрируем уравнения (1.33)–(1.37) по ячейке  $S_p^{(\xi, \eta)}$ . В регулярных точках сетки для уравнений (1.33) и (1.35)–(1.37) получим

$$\int_{S_p^{(\xi, \eta)}} \mathcal{T}^{(\xi, \eta)}(f) dS + \int_{S_p^{(\xi, \eta)}} \mathcal{K}^{(\xi, \eta)}(f, \psi) dS - \int_{S_p^{(\xi, \eta)}} \mathcal{D}^{(\xi, \eta)}(\xi^\beta f) dS = 0. \quad (1.53)$$

Здесь и далее предполагается, что вне жидкой фазы конвективные члены тождественно равны нулю. Рассмотрим интегралы, входящие в уравнение (1.53):

$$\int_{S_p^{(\xi, \eta)}} \mathcal{T}^{(\xi, \eta)}(f) d\xi d\eta \approx \mathcal{T}_h^{(\xi, \eta)}(f) \hbar^\xi \hbar^\eta = \int_{S_p^{(\xi, \eta)}} \left[ \frac{\partial}{\partial t}(\xi l f) - \frac{\partial}{\partial \eta}(\xi \varphi_t f) \right] d\xi d\eta, \quad (1.54)$$

$$\int_{S_p^{(\xi, \eta)}} \mathcal{K}^{(\xi, \eta)}(f, \psi) d\xi d\eta \approx \mathcal{K}_h^{(\xi, \eta)}(f, \psi) \hbar^\xi \hbar^\eta = \int_{S_p^{(\xi, \eta)}} \left[ \frac{\partial}{\partial \xi} \mathcal{H}^\xi + \frac{\partial}{\partial \eta} \mathcal{H}^\eta \right] d\xi d\eta, \quad (1.55)$$

$$\int_{S_p^{(\xi, \eta)}} \mathcal{D}^{(\xi, \eta)}(\xi^\beta f) d\xi d\eta \approx \mathcal{D}_h^{(\xi, \eta)}(\xi^\beta f) \hbar^\xi \hbar^\eta = \int_{S_p^{(\xi, \eta)}} \left[ \frac{\partial}{\partial \xi} \mathcal{W}^\xi + \frac{\partial}{\partial \eta} \mathcal{W}^\eta \right] d\xi d\eta. \quad (1.56)$$

Аппроксимация объемной силы в уравнении переноса завихренности (1.33) строится стандартным образом и подробно не рассматривается.

Процесс построения аппроксимаций для операторов  $\mathcal{T}^{(\xi, \eta)}$ ,  $\mathcal{K}^{(\xi, \eta)}$  и  $\mathcal{D}^{(\xi, \eta)}$  сводится к вычислению значений соответствующих потоков в центрах границ ячейки  $S_p^{(\xi, \eta)}$ . При этом требуется вычислять значения сеточных функций, а также их производных, в узлах, в которых они не определены. Переинтерполяцию соответствующих величин можно осуществлять различными способами. Однако предпочтение следует отдавать аппроксимациям, обеспечивающим на разностном уровне выполнение дискретных аналогов свойств (1.47)–(1.51) дифференциальной задачи (1.33)–(1.37). В дальнейшем при выборе интерполяционных формул будем руководствоваться данным принципом.

## Аппроксимация производной по времени

Преобразуем правую часть выражения (1.54) следующим образом

$$\int_{S_P^{(\xi,\eta)}} \left[ \frac{\partial}{\partial t}(\xi l f) - \frac{\partial}{\partial \eta}(\xi \varphi_t f) \right] dS = \frac{\partial}{\partial t} \int_{S_P^{(\xi,\eta)}} \xi l f dS - \int_{S_P^{(\xi,\eta)}} \frac{\partial}{\partial \eta}(\xi \varphi_t f) dS. \quad (1.57)$$

Первый интеграл в правой части равенства (1.57) вычислим с помощью двумерного аналога квадратурной формулы центральных прямоугольников, для вычисления второго интеграла воспользуемся формулой Остроградского — Гаусса. Таким образом получим для аппроксимации производной по времени  $\mathcal{T}^{(\xi,\eta)}(f)$  следующее выражение

$$\mathcal{T}_h^{(\xi,\eta)}(f) dS_P^{(\xi,\eta)} = \frac{\partial}{\partial t} (l_P f_P) \xi_P \hbar^\xi \hbar^\eta - [(\varphi_t f)_n - (\varphi_t f)_s] \xi_P \hbar^\xi. \quad (1.58)$$

Здесь значения  $(\varphi_t f)_n = \varphi_{n,t} f_n$ ,  $(\varphi_t f)_s = \varphi_{s,t} f_s$ .

## Аппроксимация конвективных членов

Для оператора, описывающего конвективный перенос, применение теоремы Остроградского — Гаусса дает

$$\int_{S_P^{(\xi,\eta)}} \left[ \frac{\partial}{\partial \xi} \mathcal{H}^\xi + \frac{\partial}{\partial \eta} \mathcal{H}^\eta \right] dS = \int_{\partial S_e^{(\xi,\eta)}} \mathcal{H}^\xi d\eta - \int_{\partial S_w^{(\xi,\eta)}} \mathcal{H}^\xi d\eta + \int_{\partial S_n^{(\xi,\eta)}} \mathcal{H}^\eta d\xi - \int_{\partial S_s^{(\xi,\eta)}} \mathcal{H}^\eta d\xi.$$

Откуда следует, что выражение (1.55) можно представить в виде

$$\mathcal{K}_h^{(\xi,\eta)}(f, \psi) \hbar^\xi \hbar^\eta = (\mathcal{H}_e^\xi - \mathcal{H}_w^\xi) \hbar^\eta + (\mathcal{H}_n^\eta - \mathcal{H}_s^\eta) \hbar^\xi. \quad (1.59)$$

В уравнении переноса завихренности (1.33) конвективный поток в центрах границ ячейки будем аппроксимировать следующим образом

$$\mathcal{H}_e^\xi = 0.5 \left[ \psi_{E,\eta} \omega_E + \psi_{P,\eta} \omega_P \right], \quad \mathcal{H}_n^\eta = 0.5 \left[ \psi_{N,\xi} \omega_N + \psi_{P,\xi} \omega_P \right].$$

Потоки через «западную» и «южную» границы вычисляются аналогично. Таким образом, аппроксимация конвективных членов в уравнениях Навье–Стокса



имеет вид

$$\mathcal{K}_h^{(\xi, \eta)}(\omega, \psi) = (\psi_{\mathbf{P}, \tilde{\eta}} \circ \omega_{\mathbf{P}})_{\xi}^{\circ} - (\psi_{\mathbf{P}, \xi} \circ \omega_{\mathbf{P}})_{\tilde{\eta}}^{\circ}. \quad (1.60)$$

Выражение (1.60) совпадает с соотношением, предложенным А. Аракавой в работе [89], для аппроксимации конвективных членов в уравнении Навье — Стокса в декартовой системе координат. В работе [89] доказано следующее утверждение.

**Теорема 1.1.** *Конвективные члены в уравнении переноса завихренности (1.33), записанные в форме (1.60), не вносят вклад в баланс кинетической энергии, т.е.*

$$\left( \frac{\mathcal{K}_h^{(\xi, \eta)}(\omega, \psi)}{\xi l}, \psi \right)_{l_q} = 0.$$

В уравнениях тепло- и массопереноса (1.35) компоненты конвективного потока в центрах границ ячеек вычисляются следующим образом

$$\mathcal{H}_e^{\xi}(f) = \psi_{\mathbf{e}, \tilde{\eta}} f_{\mathbf{e}}, \quad \mathcal{H}_n^{\eta}(f) = \psi_{\mathbf{n}, \xi} f_{\mathbf{n}}, \quad f = T, C,$$

и конвективные члены записываются в виде

$$\mathcal{K}_h^{(\xi, \eta)}(f, \psi) = (\psi_{\mathbf{e}, \tilde{\eta}} f_{\mathbf{e}})_{\xi} - (\psi_{\mathbf{n}, \xi} f_{\mathbf{n}})_{\tilde{\eta}}, \quad f = T, C. \quad (1.61)$$

Выражение (1.61) также предложено в работе [89] для аппроксимации конвективных членов в уравнении теплопереноса в декартовой системе координат. Там же доказано следующее утверждение [89].

**Теорема 1.2.** *Конвективные члены в уравнениях тепло- и массопереноса, записанные в форме (1.61), не влияют на балансы теплоты и массы, а также на средние по области значения квадратов температуры и концентрации, т.е.*

$$\left( \frac{\mathcal{K}_h^{(\xi, \eta)}(f, \psi)}{\xi l}, 1 \right)_{l_q} = 0, \quad \left( \frac{\mathcal{K}_h^{(\xi, \eta)}(f, \psi)}{\xi l}, f \right)_{l_q} = 0, \quad f = T, C.$$

Таким образом, использование выражений (1.60), (1.61) для аппроксимации конвективных членов в уравнениях переноса завихренности и теплопереноса позволяет построить энергетически нейтральную вычислительную схему.

## Аппроксимация эллиптического оператора

Для оператора  $\mathcal{D}^{(\xi,\eta)}(f)$  из соотношения (1.56) получим, что

$$\mathcal{D}_h^{(\xi,\eta)}(\xi^\beta f) \hbar^\xi \hbar^\eta = (\mathcal{W}_e^\xi - \mathcal{W}_w^\xi) \hbar^\eta + (\mathcal{W}_n^\eta - \mathcal{W}_s^\eta) \hbar^\xi. \quad (1.62)$$

Аппроксимируем потоки в выражении (1.62) на границе ячейки  $S_p^{(\xi,\eta)}$ . Рассмотрим для определенности «восточную» грань

$$\mathcal{W}_e^\xi \hbar^\eta = \int_{\partial S_e^{(\xi,\eta)}} \mathcal{W}^\xi(\xi^\beta f) d\eta = \int_{\partial S_e^{(\xi,\eta)}} \left[ \mathcal{L}^{\xi\xi} \frac{\partial}{\partial \xi}(\xi^\beta f) + \mathcal{L}^{\xi\eta} \frac{\partial}{\partial \eta}(\xi^\beta f) \right] d\eta. \quad (1.63)$$

Здесь  $\mathcal{L}^{\xi\xi} = \xi^\alpha \kappa L^{\xi\xi}$ ,  $\mathcal{L}^{\xi\eta} = \xi^\alpha \kappa L^{\xi\eta}$ ;  $\mathcal{L}^{\eta\eta}$  и  $\mathcal{L}^{\eta\xi}$  определяются аналогично:  $\mathcal{L}^{\eta\eta} = \xi^\alpha \kappa L^{\eta\eta}$ ,  $\mathcal{L}^{\eta\xi} = \xi^\alpha \kappa L^{\eta\xi}$ . Для интегралов по границе ячейки в (1.63) имеем

$$\int_{\partial S_e^{(\xi,\eta)}} \mathcal{L}^{\xi\xi} \frac{\partial}{\partial \xi}(\xi^\beta f) d\eta \approx \mathcal{L}_e^{\xi\xi}(\xi^\beta f)_\xi \hbar^\eta, \quad \int_{\partial S_e^{(\xi,\eta)}} \mathcal{L}^{\xi\eta} \frac{\partial}{\partial \eta}(\xi^\beta f) d\eta \approx \frac{h_n^\eta \mathcal{L}_{ne}^{\xi\eta}(\xi^\beta f)_{e,\eta} + h_s^\eta \mathcal{L}_{se}^{\xi\eta}(\xi^\beta f)_{e,\bar{\eta}}}{2}.$$

Для вычисления метрических коэффициентов и разностных производных в центре границы  $\partial S_e^{(\xi,\eta)}$  будем использовать следующие интерполяционные формулы:

$$\mathcal{L}_e^{\xi\xi} = \frac{h_n^\eta \mathcal{L}_{ne}^{\xi\xi} + h_s^\eta \mathcal{L}_{se}^{\xi\xi}}{2\hbar^\eta}, \quad (\xi^\beta f)_{e,\eta} = \frac{(\xi^\beta f)_{P,\eta} + (\xi^\beta f)_{E,\eta}}{2}, \quad (\xi^\beta f)_{e,\bar{\eta}} = \frac{(\xi^\beta f)_{P,\bar{\eta}} + (\xi^\beta f)_{E,\bar{\eta}}}{2}.$$

Поток через «северную» границу  $\partial S_n^{(\xi,\eta)}$  вычисляется по формуле

$$\mathcal{W}_n^\eta \hbar^\xi = \int_{\partial S_n^{(\xi,\eta)}} \mathcal{W}^\eta(\xi^\beta f) d\xi \approx \mathcal{L}_n^{\eta\eta}(\xi^\beta f)_\eta \hbar^\xi + \frac{h_e^\xi \mathcal{L}_{ne}^{\eta\xi}(\xi^\beta f)_{n,\xi} + h_w^\xi \mathcal{L}_{nw}^{\eta\xi}(\xi^\beta f)_{n,\bar{\xi}}}{2},$$

в центре границы имеем

$$\mathcal{L}_n^{\eta\eta} = \frac{h_e^\xi \mathcal{L}_{ne}^{\eta\eta} + h_w^\xi \mathcal{L}_{nw}^{\eta\eta}}{2\hbar^\xi}, \quad (\xi^\beta f)_{n,\xi} = \frac{(\xi^\beta f)_{P,\xi} + (\xi^\beta f)_{N,\xi}}{2}, \quad (\xi^\beta f)_{n,\bar{\xi}} = \frac{(\xi^\beta f)_{P,\bar{\xi}} + (\xi^\beta f)_{N,\bar{\xi}}}{2}.$$

Выражения для потоков через «западную» и «южную» границы вычисляются аналогичным образом.

Рассмотрим пространство сеточных функций  $D_h(\omega_\gamma^{(\xi,\eta)}) = \{f_{ij}, (i,j) \in (\bar{I}_\gamma \times \bar{J}_\gamma) : f_{ij} = 0, (i,j) \in (\bar{I}_\gamma \times \bar{J}_\gamma) \setminus (I_\gamma \times J_\gamma)\}$ . Докажем следующие утверждения.

**Теорема 1.3.** Для сеточных функций из пространства  $D_h(\omega_\gamma^{(\xi,\eta)})$  разностный оператор  $\mathcal{D}_h^{(\xi,\eta)}(f_{ij})/(\xi l_{ij})$  является отрицательно определенным относительно сеточного скалярного произведения (1.52)

$$\left( \frac{\mathcal{D}_h^{(\xi,\eta)}(f)}{\xi l}, f \right)_\gamma < 0, \quad \gamma = h, lq, cr. \quad (1.64)$$

**Доказательство.** Левую часть неравенства (1.64) запишем в виде

$$\left( \frac{\mathcal{D}_h^{(\xi,\eta)}(f)}{\xi l}, f \right)_\gamma = \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} (\mathcal{W}_{i+\frac{1}{2}j}^\xi - \mathcal{W}_{i-\frac{1}{2}j}^\xi) f_{ij} \bar{h}_j^\eta + \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} (\mathcal{W}_{ij+\frac{1}{2}}^\eta - \mathcal{W}_{ij-\frac{1}{2}}^\eta) f_{ij} \bar{h}_i^\xi. \quad (1.65)$$

Рассмотрим первую сумму в правой части (1.65). Преобразуем в ней члены, содержащие коэффициент  $\mathcal{L}^{\xi\xi}$ . Представим эти члены в виде полусуммы разностных производных назад и вперед в направлении  $\xi$ :

$$\begin{aligned} & \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} \left[ \mathcal{L}_{i+\frac{1}{2}j}^{\xi\xi} f_\xi - \mathcal{L}_{i-\frac{1}{2}j}^{\xi\xi} f_{\bar{\xi}} \right] f_{ij} \bar{h}_j^\eta = \\ & = \frac{1}{2} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} \left[ h_{i-\frac{1}{2}}^\xi \left( \mathcal{L}_{i+\frac{1}{2}j}^{\xi\xi} f_\xi \right)_{\bar{\xi}} + h_{i+\frac{1}{2}}^\xi \left( \mathcal{L}_{i-\frac{1}{2}j}^{\xi\xi} f_{\bar{\xi}} \right)_\xi \right] f_{ij} \bar{h}_j^\eta. \end{aligned} \quad (1.66)$$

Используем в правой части равенства (1.66) формулу суммирования по частям [88] по индексу  $i$ . Учитывая условия на границе области, имеем

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \sum_{j \in J_\gamma} \sum_{i \in I_\gamma} \left[ h_{i-\frac{1}{2}}^\xi \left( \mathcal{L}_{i+\frac{1}{2}j}^{\xi\xi} f_\xi \right)_{\bar{\xi}} + h_{i+\frac{1}{2}}^\xi \left( \mathcal{L}_{i-\frac{1}{2}j}^{\xi\xi} f_{\bar{\xi}} \right)_\xi \right] f_{ij} \bar{h}_j^\eta = \\ & = -\frac{1}{2} \sum_{j \in J_\gamma} \sum_{i \in I_\gamma} \left[ h_{i+\frac{1}{2}}^\xi \mathcal{L}_{i+\frac{1}{2}j}^{\xi\xi} (f_\xi)^2 + h_{i-\frac{1}{2}}^\xi \mathcal{L}_{i-\frac{1}{2}j}^{\xi\xi} (f_{\bar{\xi}})^2 \right] \bar{h}_j^\eta. \end{aligned} \quad (1.67)$$

Запишем члены, содержащие смешанные производные в виде

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_1 &= \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i-\frac{1}{2}}^\xi h_{j+\frac{1}{2}}^\eta \left( \mathcal{L}_{i+\frac{1}{2}j+\frac{1}{2}}^{\xi\eta} f_\eta \right)_{\bar{\xi}} f_{ij} + \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i+\frac{1}{2}}^\xi h_{j+\frac{1}{2}}^\eta \left( \mathcal{L}_{i-\frac{1}{2}j+\frac{1}{2}}^{\xi\eta} f_\eta \right)_\xi f_{ij} \\ &+ \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i-\frac{1}{2}}^\xi h_{j-\frac{1}{2}}^\eta \left( \mathcal{L}_{i+\frac{1}{2}j-\frac{1}{2}}^{\xi\eta} f_{\bar{\eta}} \right)_{\bar{\xi}} f_{ij} + \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i+\frac{1}{2}}^\xi h_{j-\frac{1}{2}}^\eta \left( \mathcal{L}_{i-\frac{1}{2}j-\frac{1}{2}}^{\xi\eta} f_{\bar{\eta}} \right)_\xi f_{ij}. \end{aligned} \quad (1.68)$$

Применим к первому слагаемому в (1.68) формулу суммирования по частям по индексу  $i$ :

$$\frac{1}{4} \sum_{j \in J_\gamma} \sum_{i \in I_\gamma} h_{i-\frac{1}{2}}^\xi h_{j+\frac{1}{2}}^\eta \left( \mathcal{L}_{i+\frac{1}{2}j+\frac{1}{2}}^{\xi\eta} f_\eta \right)_{\bar{\xi}} f_{ij} = -\frac{1}{4} \sum_{j \in J_\gamma} \sum_{i \in I_\gamma} h_{i+\frac{1}{2}}^\xi h_{j+\frac{1}{2}}^\eta \mathcal{L}_{i+\frac{1}{2}j+\frac{1}{2}}^{\xi\eta} f_\xi f_\eta.$$

Преобразуя второе, третье и четвертое слагаемые в (1.68) аналогичным образом, получим, что

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_1 = & -\frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} \left[ h_{i+\frac{1}{2}}^\xi h_{j+\frac{1}{2}}^\eta \mathcal{L}_{i+\frac{1}{2}j+\frac{1}{2}}^{\xi\eta} f_\xi f_\eta + h_{i-\frac{1}{2}}^\xi h_{j+\frac{1}{2}}^\eta \mathcal{L}_{i-\frac{1}{2}j+\frac{1}{2}}^{\xi\eta} f_{\bar{\xi}} f_\eta \right] \\ & -\frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} \left[ h_{i-\frac{1}{2}}^\xi h_{j-\frac{1}{2}}^\eta \mathcal{L}_{i-\frac{1}{2}j-\frac{1}{2}}^{\xi\eta} f_{\bar{\xi}} f_{\bar{\eta}} + h_{i+\frac{1}{2}}^\xi h_{j-\frac{1}{2}}^\eta \mathcal{L}_{i+\frac{1}{2}j-\frac{1}{2}}^{\xi\eta} f_\xi f_{\bar{\eta}} \right]. \end{aligned} \quad (1.69)$$

Рассмотрим вторую сумму в правой части выражения (1.65). Для членов, содержащих коэффициент  $\mathcal{L}^{\eta\eta}$  имеем

$$\begin{aligned} & \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} [\mathcal{L}_{ij+\frac{1}{2}}^{\eta\eta} f_\eta - \mathcal{L}_{ij-\frac{1}{2}}^{\eta\eta} f_{\bar{\eta}}] f_{ij} \bar{h}_i^\xi = \\ & = -\frac{1}{2} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} \left[ h_{j+1/2}^\eta \mathcal{L}_{ij+\frac{1}{2}}^{\eta\eta} (f_\eta)^2 + h_{j-1/2}^\eta \mathcal{L}_{ij-\frac{1}{2}}^{\eta\eta} (f_{\bar{\eta}})^2 \right] \bar{h}_i^\xi, \end{aligned} \quad (1.70)$$

Члены, содержащие смешанные производные, представим в виде

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_2 = & \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i+\frac{1}{2}}^\xi h_{j-\frac{1}{2}}^\eta \left( \mathcal{L}_{i+\frac{1}{2}j+\frac{1}{2}}^{\eta\xi} f_\xi \right)_{\bar{\eta}} f_{ij} + \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i+\frac{1}{2}}^\xi h_{j+\frac{1}{2}}^\eta \left( \mathcal{L}_{i+\frac{1}{2}j-\frac{1}{2}}^{\eta\xi} f_\xi \right)_\eta f_{ij} \\ & + \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i-\frac{1}{2}}^\xi h_{j-\frac{1}{2}}^\eta \left( \mathcal{L}_{i-\frac{1}{2}j+\frac{1}{2}}^{\eta\xi} f_{\bar{\xi}} \right)_{\bar{\eta}} f_{ij} + \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i-\frac{1}{2}}^\xi h_{j+\frac{1}{2}}^\eta \left( \mathcal{L}_{i-\frac{1}{2}j-\frac{1}{2}}^{\eta\xi} f_{\bar{\xi}} \right)_\eta f_{ij}. \end{aligned} \quad (1.71)$$

Применим к первому слагаемому в (1.71) формулу суммирования по частям по индексу  $j$ :

$$\frac{1}{4} \sum_{i \in I_\gamma} \sum_{j \in J_\gamma} h_{i+\frac{1}{2}}^\xi h_{j-\frac{1}{2}}^\eta \left( \mathcal{L}_{i+\frac{1}{2}j+\frac{1}{2}}^{\eta\xi} f_\xi \right)_{\bar{\eta}} f_{ij} = -\frac{1}{4} \sum_{i \in I_\gamma} \sum_{j \in J_\gamma} h_{i+\frac{1}{2}}^\xi h_{j+\frac{1}{2}}^\eta \mathcal{L}_{i+\frac{1}{2}j+\frac{1}{2}}^{\eta\xi} f_\xi f_\eta.$$

Преобразуя оставшиеся слагаемые в (1.71), получим, что

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_2 = & -\frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} \left[ h_{i+\frac{1}{2}}^\xi h_{j+\frac{1}{2}}^\eta \mathcal{L}_{i+\frac{1}{2}j+\frac{1}{2}}^{\eta\xi} f_\xi f_\eta + h_{i+\frac{1}{2}}^\xi h_{j-\frac{1}{2}}^\eta \mathcal{L}_{i+\frac{1}{2}j-\frac{1}{2}}^{\eta\xi} f_\xi f_{\bar{\eta}} \right] \\ & -\frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} \left[ h_{i-\frac{1}{2}}^\xi h_{j+\frac{1}{2}}^\eta \mathcal{L}_{i-\frac{1}{2}j+\frac{1}{2}}^{\eta\xi} f_{\bar{\xi}} f_\eta + h_{i-\frac{1}{2}}^\xi h_{j-\frac{1}{2}}^\eta \mathcal{L}_{i-\frac{1}{2}j-\frac{1}{2}}^{\eta\xi} f_{\bar{\xi}} f_{\bar{\eta}} \right]. \end{aligned} \quad (1.72)$$

В силу того, что  $\mathcal{L}^{\xi\eta} = \mathcal{L}^{\eta\xi}$ , выражение (1.72) совпадает с (1.69), т.е.  $\mathcal{S}_1 = \mathcal{S}_2$ .

Заменяя в правой части соотношения (1.65) потоки их представлениями (1.67), (1.69), (1.70), (1.72), получим

$$\begin{aligned} \left( \frac{\mathcal{D}_h^{(\xi, \eta)}(f)}{\xi l}, f \right)_\gamma = & -\frac{1}{4} \sum_{(i, j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i+\frac{1}{2}}^\xi h_{j+\frac{1}{2}}^\eta \left[ \mathcal{L}_{i+\frac{1}{2}j+\frac{1}{2}}^{\xi\xi} (f_\xi)^2 + 2\mathcal{L}_{i+\frac{1}{2}j+\frac{1}{2}}^{\xi\eta} f_\xi f_\eta + \mathcal{L}_{i+\frac{1}{2}j+\frac{1}{2}}^{\eta\eta} (f_\eta)^2 \right] \\ & -\frac{1}{4} \sum_{(i, j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i-\frac{1}{2}}^\xi h_{j+\frac{1}{2}}^\eta \left[ \mathcal{L}_{i-\frac{1}{2}j+\frac{1}{2}}^{\xi\xi} (f_{\bar{\xi}})^2 + 2\mathcal{L}_{i-\frac{1}{2}j+\frac{1}{2}}^{\xi\eta} f_{\bar{\xi}} f_\eta + \mathcal{L}_{i-\frac{1}{2}j+\frac{1}{2}}^{\eta\eta} (f_\eta)^2 \right] \\ & -\frac{1}{4} \sum_{(i, j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i+\frac{1}{2}}^\xi h_{j-\frac{1}{2}}^\eta \left[ \mathcal{L}_{i+\frac{1}{2}j-\frac{1}{2}}^{\xi\xi} (f_\xi)^2 + 2\mathcal{L}_{i+\frac{1}{2}j-\frac{1}{2}}^{\xi\eta} f_\xi f_{\bar{\eta}} + \mathcal{L}_{i+\frac{1}{2}j-\frac{1}{2}}^{\eta\eta} (f_{\bar{\eta}})^2 \right] \\ & -\frac{1}{4} \sum_{(i, j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i-\frac{1}{2}}^\xi h_{j-\frac{1}{2}}^\eta \left[ \mathcal{L}_{i-\frac{1}{2}j-\frac{1}{2}}^{\xi\xi} (f_{\bar{\xi}})^2 + 2\mathcal{L}_{i-\frac{1}{2}j-\frac{1}{2}}^{\xi\eta} f_{\bar{\xi}} f_{\bar{\eta}} + \mathcal{L}_{i-\frac{1}{2}j-\frac{1}{2}}^{\eta\eta} (f_{\bar{\eta}})^2 \right]. \end{aligned}$$

В силу критерия Сильвестра квадратичные формы, находящиеся под знаками сумм, являются положительно определенными:

$$\mathcal{L}_{pq}^{\xi\xi} = l_{pq} > 0, \quad \mathcal{L}_{pq}^{\xi\xi} \mathcal{L}_{pq}^{\eta\eta} - (\mathcal{L}_{pq}^{\xi\eta})^2 = 1 > 0, \quad p = i \pm 1/2, \quad q = j \pm 1/2.$$

Откуда

$$\left( \frac{\mathcal{D}_h^{(\xi, \eta)}(f)}{\xi l}, f \right)_\gamma < 0, \quad \gamma = h, lq, cr.$$

Утверждение доказано ■

**Теорема 1.4.** Для сеточных функций из пространства  $D_h(\omega_\gamma^{(\xi, \eta)})$  разностный оператор  $\mathcal{D}_h^{(\xi, \eta)}(f_{ij})/(\xi l_{ij})$  является самосопряженным относительно сеточного скалярного произведения (1.52), т.е.

$$\left( \frac{\mathcal{D}_h^{(\xi, \eta)}(f)}{\xi l}, g \right)_\gamma = \left( \frac{\mathcal{D}_h^{(\xi, \eta)}(g)}{\xi l}, f \right)_\gamma, \quad \gamma = h, lq, cr. \quad (1.73)$$

**Доказательство.** Запишем левую часть равенства (1.73) следующим образом:

$$\begin{aligned} \left( \frac{\mathcal{D}_h^{(\xi, \eta)}(f)}{\xi l}, g \right)_\gamma &= \sum_{(i, j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} \mathcal{D}_h^{(\xi, \eta)}(f_{ij}) g_{ij} \hbar_i^\xi \hbar_j^\eta = \\ &= \sum_{(i, j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} (\mathcal{W}_{i+\frac{1}{2}j}^\xi - \mathcal{W}_{i-\frac{1}{2}j}^\xi) g_{ij} \hbar_j^\eta + \sum_{(i, j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} (\mathcal{W}_{ij+\frac{1}{2}}^\eta - \mathcal{W}_{ij-\frac{1}{2}}^\eta) g_{ij} \hbar_i^\xi. \end{aligned} \quad (1.74)$$

Рассмотрим первую сумму в правой части (1.74). Преобразуем в ней члены, содержащие коэффициент  $\mathcal{L}^{\xi\xi}$ . Для этого дважды воспользуемся формулой суммирования по частям по индексу  $i$ :

$$\begin{aligned} & \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i-\frac{1}{2}}^\xi \left( \mathcal{L}_{i+\frac{1}{2}j}^{\xi\xi} f_\xi \right)_{\bar{\xi}} g_{ij} \hbar_j^\eta = \\ & = - \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i+\frac{1}{2}}^\xi \mathcal{L}_{i+\frac{1}{2}j}^{\xi\xi} f_\xi g_\xi \hbar_j^\eta = \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i-\frac{1}{2}}^\xi \left( \mathcal{L}_{i+\frac{1}{2}j}^{\xi\xi} g_\xi \right)_{\bar{\xi}} f_{ij} \hbar_j^\eta. \end{aligned} \quad (1.75)$$

Применяя последовательно формулу суммирования по частям по индексам  $i$  и  $j$ , перепишем члены, содержащие смешанные производные, в виде:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i-\frac{1}{2}}^\xi h_{j+\frac{1}{2}}^\eta \left( \mathcal{L}_{i+\frac{1}{2}j+\frac{1}{2}}^{\xi\eta} f_\eta \right)_{\bar{\xi}} g_{ij} + \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i+\frac{1}{2}}^\xi h_{j+\frac{1}{2}}^\eta \left( \mathcal{L}_{i-\frac{1}{2}j+\frac{1}{2}}^{\xi\eta} f_\eta \right)_\xi g_{ij} + \\ & \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i-\frac{1}{2}}^\xi h_{j-\frac{1}{2}}^\eta \left( \mathcal{L}_{i+\frac{1}{2}j-\frac{1}{2}}^{\xi\eta} f_{\bar{\eta}} \right)_{\bar{\xi}} g_{ij} + \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i+\frac{1}{2}}^\xi h_{j-\frac{1}{2}}^\eta \left( \mathcal{L}_{i-\frac{1}{2}j-\frac{1}{2}}^{\xi\eta} f_{\bar{\eta}} \right)_\xi g_{ij} = \\ & \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i+\frac{1}{2}}^\xi h_{j-\frac{1}{2}}^\eta \left( \mathcal{L}_{i+\frac{1}{2}j+\frac{1}{2}}^{\xi\eta} g_\xi \right)_{\bar{\eta}} f_{ij} + \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i-\frac{1}{2}}^\xi h_{j-\frac{1}{2}}^\eta \left( \mathcal{L}_{i-\frac{1}{2}j+\frac{1}{2}}^{\xi\eta} g_{\bar{\xi}} \right)_{\bar{\eta}} f_{ij} + \\ & \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i+\frac{1}{2}}^\xi h_{j+\frac{1}{2}}^\eta \left( \mathcal{L}_{i+\frac{1}{2}j-\frac{1}{2}}^{\xi\eta} g_\xi \right)_\eta f_{ij} + \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i-\frac{1}{2}}^\xi h_{j+\frac{1}{2}}^\eta \left( \mathcal{L}_{i-\frac{1}{2}j-\frac{1}{2}}^{\xi\eta} g_{\bar{\xi}} \right)_\eta f_{ij}. \end{aligned} \quad (1.76)$$

Здесь мы воспользовались тем, что

$$\begin{aligned} & \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i-\frac{1}{2}}^\xi h_{j+\frac{1}{2}}^\eta \left( \mathcal{L}_{i+\frac{1}{2}j+\frac{1}{2}}^{\xi\eta} f_\eta \right)_{\bar{\xi}} g_{ij} = \\ & = - \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i+\frac{1}{2}}^\xi h_{j+\frac{1}{2}}^\eta \mathcal{L}_{i+\frac{1}{2}j+\frac{1}{2}}^{\xi\eta} f_\eta g_\xi = \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i+\frac{1}{2}}^\xi h_{j-\frac{1}{2}}^\eta \left( \mathcal{L}_{i+\frac{1}{2}j+\frac{1}{2}}^{\xi\eta} g_\xi \right)_{\bar{\eta}} f_{ij}, \end{aligned}$$

оставшиеся слагаемые в левой части равенства (1.76) преобразованы аналогично.

Рассмотрим вторую сумму в правой части (1.74). Для членов, содержащих коэффициент  $\mathcal{L}^{\eta\eta}$ , получим

$$\begin{aligned} & \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{j-\frac{1}{2}}^\eta \left( \mathcal{L}_{j+\frac{1}{2}}^{\eta\eta} f_\eta \right)_{\bar{\eta}} g_{ij} \hbar_i^\xi = \\ & = - \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{j+\frac{1}{2}}^\eta \mathcal{L}_{ij+\frac{1}{2}}^{\eta\eta} f_\eta g_\eta \hbar_i^\xi = \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{j-\frac{1}{2}}^\eta \left( \mathcal{L}_{ij+\frac{1}{2}}^{\eta\eta} g_\eta \right)_{\bar{\eta}} f_{ij} \hbar_i^\xi \end{aligned} \quad (1.77)$$

Аналогично (1.76) получим

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i+\frac{1}{2}}^\xi h_{j-\frac{1}{2}}^\eta \left( \mathcal{L}_{i+\frac{1}{2}j+\frac{1}{2}}^{\eta\xi} f_\xi \right)_{\bar{\eta}} g_{ij} + \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i+\frac{1}{2}}^\xi h_{j+\frac{1}{2}}^\eta \left( \mathcal{L}_{i+\frac{1}{2}j-\frac{1}{2}}^{\eta\xi} f_\xi \right)_\eta g_{ij} + \\
& \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i-\frac{1}{2}}^\xi h_{j-\frac{1}{2}}^\eta \left( \mathcal{L}_{i-\frac{1}{2}j+\frac{1}{2}}^{\eta\xi} f_\xi \right)_{\bar{\eta}} g_{ij} + \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i-\frac{1}{2}}^\xi h_{j+\frac{1}{2}}^\eta \left( \mathcal{L}_{i-\frac{1}{2}j-\frac{1}{2}}^{\eta\xi} f_\xi \right)_\eta g_{ij} = \\
& \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i-\frac{1}{2}}^\xi h_{j+\frac{1}{2}}^\eta \left( \mathcal{L}_{i+\frac{1}{2}j+\frac{1}{2}}^{\eta\xi} g_\eta \right)_{\bar{\xi}} f_{ij} + \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i-\frac{1}{2}}^\xi h_{j-\frac{1}{2}}^\eta \left( \mathcal{L}_{i+\frac{1}{2}j-\frac{1}{2}}^{\eta\xi} g_\eta \right)_{\bar{\xi}} f_{ij} + \\
& \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i+\frac{1}{2}}^\xi h_{j+\frac{1}{2}}^\eta \left( \mathcal{L}_{i-\frac{1}{2}j+\frac{1}{2}}^{\eta\xi} g_\eta \right)_\xi f_{ij} + \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in (I_\gamma \times J_\gamma)} h_{i+\frac{1}{2}}^\xi h_{j-\frac{1}{2}}^\eta \left( \mathcal{L}_{i-\frac{1}{2}j-\frac{1}{2}}^{\eta\xi} g_\eta \right)_\xi f_{ij}. \quad (1.78)
\end{aligned}$$

Подставим правые части выражений (1.75)–(1.78) в правую часть равенства (1.74). В силу того, что  $\mathcal{L}^{\xi\eta} = \mathcal{L}^{\eta\xi}$ , имеем

$$\left( \frac{\mathcal{D}_h^{(\xi,\eta)}(f)}{\xi l}, g \right)_\gamma = \left( f, \frac{\mathcal{D}_h^{(\xi,\eta)}(g)}{\xi l} \right)_\gamma, \quad \gamma = h, lq, cr.$$

Утверждение доказано ■

**Замечание.** Возможны и другие способы переинтерполяции искомых функций в потоковые точки. Соответствующие разностные выражения могут иметь тот же порядок аппроксимации, что и операторы (1.60), (1.61), (1.62). Однако построенные на их основе разностные уравнения не будут обладать свойствами аналогичными свойствам исходной дифференциальной задачи. В работе [65] предложена следующая аппроксимация оператора  $\mathcal{D}^{(\xi,\eta)}$

$$\widetilde{\mathcal{D}}_h^{(\xi,\eta)}(\xi^\beta f) \hbar^\xi \hbar^\eta = (\widetilde{\mathcal{W}}_e^\xi - \widetilde{\mathcal{W}}_w^\xi) \hbar^\eta + (\widetilde{\mathcal{W}}_n^\eta - \widetilde{\mathcal{W}}_s^\eta) \hbar^\xi,$$

$$\widetilde{\mathcal{W}}_e^\xi = \mathcal{L}_e^{\xi\xi}(\xi^\beta f)_\xi + \mathcal{L}_e^{\xi\eta}[(\xi^\beta f)_{ne} - (\xi^\beta f)_{se}] / \hbar^\eta,$$

$$\widetilde{\mathcal{W}}_n^\eta = \mathcal{L}_n^{\eta\eta}(\xi^\beta f)_\eta + \mathcal{L}_n^{\eta\xi}[(\xi^\beta f)_{ne} - (\xi^\beta f)_{nw}] / \hbar^\xi.$$

Нетрудно показать, что разностный оператор  $\widetilde{\mathcal{D}}_h^{(\xi,\eta)}(f_{ij}) / (\xi_i l_{ij})$  не является самосопряженным относительно сеточного скалярного произведения (1.52). При этом выражения, используемые в [65] для аппроксимации конвективных членов, не обеспечивают выполнение разностные аналогов законов сохранения кинетической энергии, массы и теплоты.

Рассмотрим особенности использования соотношений (1.58), (1.59), (1.62) при аппроксимации условий на фронте кристаллизации и граничных условий.

### Аппроксимация условий на фронте кристаллизации

Для аппроксимации условия Стефана (1.41) проинтегрируем уравнение (1.35) по ячейке  $S_P^{(\xi,\eta)}$ , содержащей границу раздела фаз. Область интегрирования разобьем на две подобласти:  $S_P^{(\xi,\eta)+}$  — расположенную в растворе и  $S_P^{(\xi,\eta)-}$  — лежащую в твердой фазе (рис. 1.4). Аппроксимация  $\mathcal{T}^{(\xi,\eta)}(T)$  на межфазной границе задается формулой (1.58). Однако стоит помнить, что  $l_n$ ,  $\varphi_{t,n}$  и  $l_s$ ,  $\varphi_{t,s}$  относятся к твердой и жидкой фазам, соответственно.

Проинтегрировав конвективные члены по области  $S_P^{(\xi,\eta)+}$ , получим

$$\mathcal{K}_h^{(\xi,\eta)}(f, \psi) \hbar^\xi \frac{h_n^\eta}{2} = [\mathcal{H}_e^\xi(T) - \mathcal{H}_w^\xi(T)] \frac{h_n^\eta}{2} + [\mathcal{H}_n^\eta(T) - \mathcal{H}_P^\eta(T)] \hbar^\xi. \quad (1.79)$$

Для вычисления  $\mathcal{H}_w^\xi(T)$ ,  $\mathcal{H}_e^\xi(T)$  используются следующие выражения:  $\mathcal{H}_w^\xi(T) = \psi_{w,\eta} T_w$ ,  $\mathcal{H}_e^\xi(T) = \psi_{e,\eta} T_e$ ; при этом компонента  $\mathcal{H}_P^\eta(T) = 0$ , так как  $\psi_{P,\xi} = 0$ . Интегрируя диссипативные члены по областям  $S_P^{(\xi,\eta)+}$  и  $S_P^{(\xi,\eta)-}$ , имеем

$$\mathcal{D}_h^{(\xi,\eta)+}(T) \hbar^\xi \frac{h_n^\eta}{2} \approx \int_{S_P^{(\xi,\eta)+}} \mathcal{D}^{(\xi,\eta)}(T) dS = [\mathcal{W}_{e^+}^\xi - \mathcal{W}_{w^+}^\xi] \frac{h_n^\eta}{2} + [\mathcal{W}_n^\eta - \mathcal{W}_{P^+}^\eta] \hbar^\xi, \quad (1.80)$$

$$\mathcal{D}_h^{(\xi,\eta)-}(T) \hbar^\xi \frac{h_s^\eta}{2} \approx \int_{S_P^{(\xi,\eta)-}} \mathcal{D}^{(\xi,\eta)}(T) dS = [\mathcal{W}_{e^-}^\xi - \mathcal{W}_{w^-}^\xi] \frac{h_s^\eta}{2} + [\mathcal{W}_{P^-}^\eta - \mathcal{W}_s^\eta] \hbar^\xi. \quad (1.81)$$

Здесь величины с индексами  $P^+$ ,  $e^+$ ,  $w^+$  принадлежат  $S_P^{(\xi,\eta)+}$ , а с индексами  $P^-$ ,  $e^-$ ,  $w^-$  располагаются в  $S_P^{(\xi,\eta)-}$ . Суммируя (1.80) и (1.81), получим следующую аппроксимацию

$$\mathcal{D}_h^{(\xi,\eta)}(T) \hbar^\xi \hbar^\eta = [\mathcal{W}_e^\xi - \mathcal{W}_w^\xi] \hbar^\eta + [\mathcal{W}_n^\eta - \mathcal{W}_s^\eta] \hbar^\xi + [\mathcal{W}_{P^-}^\eta - \mathcal{W}_{P^+}^\eta] \hbar^\xi,$$

Из условия Стефана (1.41) следует, что  $\mathcal{W}_{P^-}^\eta - \mathcal{W}_{P^+}^\eta = \text{St } \xi_P v_{ph}$ . Таким образом на границе раздела фаз аппроксимация диссипативных членов (1.62) дополняется слагаемым, описывающим выделение/поглощение теплоты при смене агрегатного состояния вещества.



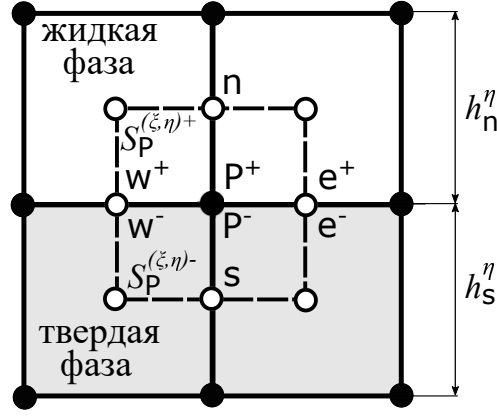


Рис. 1.4. Ячейка на фронте кристаллизации.

Построим аппроксимацию закона сохранения массы (1.42). В отличие от температуры, концентрация на границе раздела принимает два значения, соответствующие составам твердой и жидкой фаз. Поэтому, интегрируя  $\mathcal{T}^{(\xi,\eta)}(C)$  по ячейке  $S_P^{(\xi,\eta)}$ , получим

$$\int_{S_P^{(\xi,\eta)+}} \mathcal{T}^{(\xi,\eta)}(C^{\text{li}}) dS + \int_{S_P^{(\xi,\eta)-}} \mathcal{T}^{(\xi,\eta)}(C^{\text{cr}}) dS = \frac{\partial}{\partial t} (l_n C_P^{\text{li}}) \xi_P \hbar^\xi \frac{h_n^\eta}{2} + \frac{\partial}{\partial t} (l_s C_P^{\text{cr}}) \xi_P \hbar^\xi \frac{h_s^\eta}{2} -$$

$$- \left[ (\varphi_t C)_n - \varphi_{P,t} C_P^{\text{li}} \right] \xi_P \hbar^\xi - \left[ \varphi_{P,t} C_P^{\text{cr}} - (\varphi_t C)_s \right] \xi_P \hbar^\xi.$$

На фронте кристаллизации  $\varphi_t = v_{\text{ph}}$ . Откуда

$$\mathcal{T}_h^{(\xi,\eta)}(C) \hbar^\xi \hbar^\eta = \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{l_n h_n^\eta C_P^{\text{li}} + l_s h_s^\eta C_P^{\text{cr}}}{2 \hbar^\eta} \right) \xi_P \hbar^\xi \hbar^\eta -$$

$$- [(\varphi_t C)_n - (\varphi_t C)_s] \xi_P \hbar^\xi - (C_P^{\text{cr}} - C_P^{\text{li}}) v_{\text{ph}} \xi_P \hbar^\xi. \quad (1.82)$$

Конвективные члены на межфазной границе вычисляются аналогично выражению (1.79) в аппроксимации условия Стефана. Для диссипативных членов имеем

$$\mathcal{D}_h^{(\xi,\eta)+}(C^{\text{li}}) \hbar^\xi \frac{h_n^\eta}{2} = [\mathcal{W}_{e^+}^\xi(C^{\text{li}}) - \mathcal{W}_{w^+}^\xi(C^{\text{li}})] \frac{h_n^\eta}{2} + [\mathcal{W}_n^\eta(C^{\text{li}}) - \mathcal{W}_{p^+}^\eta(C^{\text{li}})] \hbar^\xi, \quad (1.83)$$

$$\mathcal{D}_h^{(\xi,\eta)-}(C^{\text{cr}}) \hbar^\xi \frac{h_s^\eta}{2} = [\mathcal{W}_{e^-}^\xi(C^{\text{cr}}) - \mathcal{W}_{w^-}^\xi(C^{\text{cr}})] \frac{h_s^\eta}{2} + [\mathcal{W}_{p^-}^\eta(C^{\text{cr}}) - \mathcal{W}_s^\eta(C^{\text{cr}})] \hbar^\xi. \quad (1.84)$$

Здесь

$$\mathcal{W}_{e^+}^\xi(C^{\text{li}}) = \mathcal{L}_{ne}^{\xi\xi} C_\xi^{\text{li}} + \mathcal{L}_{ne}^{\xi\eta} C_{e,\eta}^{\text{li}}, \quad \mathcal{W}_{e^-}^\xi(C^{\text{cr}}) = \mathcal{L}_{se}^{\xi\xi} C_\xi^{\text{cr}} + \mathcal{L}_{se}^{\xi\eta} C_{e,\eta}^{\text{cr}},$$

потоки  $\mathcal{W}_{w+}^{\xi}(C^{\text{dq}})$ ,  $\mathcal{W}_{w-}^{\xi}(C^{\text{cr}})$  аппроксимируются аналогично. Из закона сохранения массы (1.42) следует, что  $\mathcal{W}_{p-}^{\eta}(C^{\text{cr}}) - \mathcal{W}_{p+}^{\eta}(C^{\text{dq}}) = -(C_p^{\text{cr}} - C_p^{\text{dq}})v_{\text{ph}}$ . Откуда, суммируя (1.83) и (1.84), получим

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_h^{(\xi, \eta)}(C) \hbar^{\xi} \hbar^{\eta} = & [\mathcal{W}_{e+}^{\xi}(C^{\text{dq}}) - \mathcal{W}_{w+}^{\xi}(C^{\text{dq}})] \frac{h_n^{\eta}}{2} + [\mathcal{W}_{e-}^{\xi}(C^{\text{cr}}) - \mathcal{W}_{w-}^{\xi}(C^{\text{cr}})] \frac{h_s^{\eta}}{2} + \\ & [\mathcal{W}_n^{\eta}(C^{\text{dq}}) - \mathcal{W}_s^{\eta}(C^{\text{cr}})] \hbar^{\xi} - (C_p^{\text{cr}} - C_p^{\text{dq}}) v_{\text{ph}} \xi_P \hbar^{\xi}. \end{aligned} \quad (1.85)$$

Таким образом, в выражениях (1.82), (1.85) члены вида  $(C_p^{\text{cr}} - C_p^{\text{dq}})v_{\text{ph}}$  компенсируют друг друга: скорость движения границы раздела фаз в явном виде отсутствует в сеточном аналоге уравнения массопереноса.

Для аппроксимации граничных условий (1.44) уравнение массопереноса необходимо проинтегрировать по приграничным ячейкам.

Благодаря тому, что аппроксимации условий на границе раздела фаз и границах областей согласованы с аппроксимациями соответствующих уравнений во внутренних узлах сетки, на разностном уровне выполнены законы сохранения энергии и массы. Из выполнения дискретных аналогов законов сохранения для квадратов искомых величин следует, что температура и концентрация на протяжении всего расчета ограничены в любой точке сетки. Данное обстоятельство исключает возможность возникновения в расчете нелинейной вычислительной неустойчивости (nonlinear computational instability [89; 90]).

Заменив в выражении (1.53) интегралы их приближенными значениями, после деления на  $\hbar^{\xi} \hbar^{\eta}$  получим следующие дифференциально-разностные уравнения

$$\mathcal{T}_h^{(\xi, \eta)}(f) + \mathcal{K}_h^{(\xi, \eta)}(f, \psi) = \mathcal{D}_h^{(\xi, \eta)}(\xi^{\beta} f), \quad f = T, C, \omega. \quad (1.86)$$

В граничных узлах и на фронте кристаллизации в уравнениях (1.86) применяются особые аппроксимации  $\mathcal{T}_h^{(\xi, \eta)}$ ,  $\mathcal{K}_h^{(\xi, \eta)}$ ,  $\mathcal{D}_h^{(\xi, \eta)}$  рассмотренные выше.

## Аппроксимация уравнение переноса завихренности.

Проинтегрируем уравнение (1.34), связывающее значения завихренности и функции тока, по разностной ячейке  $S_P$ . Во внутренних точках области получим

$$-\omega_P \xi_P l_P dS_P^{(\xi, \eta)} = \mathcal{D}_h^{(\xi, \eta)}(\psi) dS_P^{(\xi, \eta)}. \quad (1.87)$$

Граничные условия для завихренности строятся следующим образом: уравнение (1.34) интегрируется по приграничным ячейкам с учетом условий прилипания и непротекания (1.43). Рассмотрим для определенности ячейку на вертикальной границе раствор/ампула (рис. 1.3, в). Получим

$$-\omega_P r_P l_P \frac{h_w^\xi}{2} \bar{h}^\eta = [\mathcal{W}_P^\xi(\psi) - \mathcal{W}_w^\xi(\psi)] \bar{h}^\eta + [\mathcal{W}_n^\eta(\psi) - \mathcal{W}_s^\eta(\psi)] \frac{h_w^\xi}{2}.$$

В силу условия (1.43) на границе раствор/ампула имеем  $\psi = 0$ ,  $\mathcal{W}_P^\xi(\psi) = 0$ ,  $\psi_{P,\xi} = \psi_{N,\xi} = \psi_{S,\xi} = 0$ . Откуда

$$-\omega_P r_P l_P \frac{h_w^\xi}{2} \bar{h}^\eta = \frac{\mathcal{L}_{nw}^{\xi\xi} h_n^\eta + \mathcal{L}_{sw}^{\xi\xi} h_s^\eta}{2h_w^\xi} \psi_W - \frac{\mathcal{L}_{nw}^{\xi\eta}}{2} \psi_{NW} + \frac{\mathcal{L}_{sw}^{\xi\eta}}{2} \psi_{SW}. \quad (1.88)$$

В декартовой системе координат  $\mathcal{L}^{\xi\xi} = 1$ ,  $\mathcal{L}^{\xi\eta} = \mathcal{L}^{\eta\xi} = 0$  и условие (1.88) преобразуется в известное условие А. Тома [91]. Уравнения для завихренности на фронте кристаллизации и верхней границе жидкой фазы аппроксимируются аналогичным образом

$$-\omega_P r_P l_P \bar{h}^\xi \frac{h_n^\eta}{2} = [\mathcal{W}_e^\xi(\psi) - \mathcal{W}_w^\xi(\psi)] \frac{h_n^\eta}{2} + \mathcal{W}_n^\eta(\psi) \bar{h}^\xi, \quad (1.89)$$

$$-\omega_P r_P l_P \bar{h}^\xi \frac{h_s^\eta}{2} = [\mathcal{W}_e^\xi(\psi) - \mathcal{W}_w^\xi(\psi)] \frac{h_s^\eta}{2} - \mathcal{W}_s^\eta(\psi) \bar{h}^\xi. \quad (1.90)$$

В дальнейшем для удобства условия типа Тома (1.88)–(1.90) в граничных узлах также будем записывать в форме (1.87).

**Теорема 1.5.** Пусть сеточная функция  $\omega_{ij}$  удовлетворяет уравнению (1.87). Тогда выполнен разностный аналог закона сохранения завихренности в форме

$$-\sum_{(i,j) \in (\bar{I}_{lq} \times \bar{J}_{lq})} \omega_{ij} \xi_i l_{ij} dS_{ij}^{(\xi, \eta)} = \sum_{j \in \bar{J}_{lq}} (V^z l)_{1/2j} \bar{h}_j^\eta.$$

**Доказательство.** Из уравнения (1.87) следует, что

$$\begin{aligned}
& - \sum_{(i,j) \in (\bar{I}_{lq} \times \bar{J}_{lq})} \omega_{ij} \xi_i l_{ij} dS_{ij}^{(\xi, \eta)} = \sum_{(i,j) \in (I_{lq} \times J_{lq})} \left[ (\mathcal{W}_{i+\frac{1}{2}j}^\xi - \mathcal{W}_{i-\frac{1}{2}j}^\xi) \hbar_j^\eta + (\mathcal{W}_{ij+\frac{1}{2}}^\eta - \mathcal{W}_{ij-\frac{1}{2}}^\eta) \hbar_i^\xi \right] - \\
& \sum_{j \in J_{lq}} \left[ \omega_{0j} \xi_0 l_{0j} dS_{0j}^{(\xi, \eta)} + \omega_{i'j} \xi_{i'} l_{i'j} dS_{i'j}^{(\xi, \eta)} \right] - \sum_{i \in I_{lq}} \left[ \omega_{ij^*} \xi_0 l_{0j^*} dS_{ij^*}^{(\xi, \eta)} + \omega_{ij''} \xi_i l_{ij''} dS_{ij''}^{(\xi, \eta)} \right]. \quad (1.91)
\end{aligned}$$

Сумму потоков, протекающих через грани внутренних ячеек сетки, можно свести к следующей сумме по граничным контрольным объемам:

$$\begin{aligned}
& \sum_{(i,j) \in (I_{lq} \times J_{lq})} \left[ (\mathcal{W}_{i+\frac{1}{2}j}^\xi - \mathcal{W}_{i-\frac{1}{2}j}^\xi) \hbar_j^\eta + (\mathcal{W}_{ij+\frac{1}{2}}^\eta - \mathcal{W}_{ij-1/2}^\eta) \hbar_i^\xi \right] = \\
& = \sum_{j \in J_{lq}} \left[ \mathcal{W}_{i'-\frac{1}{2}j}^\xi - \mathcal{W}_{\frac{1}{2}j}^\xi \right] \hbar_j^\eta + \sum_{i \in I_{lq}} \left[ \mathcal{W}_{ij''-\frac{1}{2}}^\eta - \mathcal{W}_{ij^*+\frac{1}{2}}^\eta \right] \hbar_i^\xi. \quad (1.92)
\end{aligned}$$

Подставляя (1.91) в (1.92), получим:

$$\begin{aligned}
& - \sum_{(i,j) \in (\bar{I}_{lq} \times \bar{J}_{lq})} \omega_{ij} \xi_i l_{ij} dS_{ij}^{(\xi, \eta)} = - \sum_{j \in J_{lq}} \left[ \omega_{0j} \xi_0 l_{0j} dS_{0j}^{(\xi, \eta)} + \mathcal{W}_{\frac{1}{2}j}^\xi \hbar_j^\eta \right] - \sum_{j \in J_{lq}} \left[ \omega_{i'j} \xi_{i'} l_{i'j} dS_{i'j}^{(\xi, \eta)} - \mathcal{W}_{i'-\frac{1}{2}j}^\xi \hbar_j^\eta \right] \\
& - \sum_{i \in I_{lq}} \left[ \omega_{ij^*} \xi_i l_{ij^*+0} dS_{ij^*}^{(\xi, \eta)} + \mathcal{W}_{ij^*+\frac{1}{2}}^\eta \hbar_i^\xi \right] - \sum_{i \in I_{lq}} \left[ \omega_{ij''} \xi_i l_{ij''} dS_{ij''}^{(\xi, \eta)} - \mathcal{W}_{ij''-\frac{1}{2}}^\eta \hbar_i^\xi \right]. \quad (1.93)
\end{aligned}$$

Завихренность на оси  $\omega_{0j} = 0$ , и в силу граничных условий (1.88)–(1.90) вторая, третья и четвертая суммы в правой части (1.93) также обращаются в нуль.

Откуда

$$- \sum_{(i,j) \in (\bar{I}_{lq} \times \bar{J}_{lq})} \omega_{ij} \xi_i l_{ij} dS_{ij}^{(\xi, \eta)} = \sum_{j \in \bar{J}_{lq}} -\mathcal{W}_{1/2j}^\xi \hbar_j^\eta$$

Сравнивая выражение (1.27) для скорости  $V^z$  и соотношение (1.31) для потока  $\mathcal{W}^\xi$  получим, что  $V^z l = -\mathcal{W}^\xi(\psi)$ . Откуда

$$- \sum_{(i,j) \in (\bar{I}_{lq} \times \bar{J}_{lq})} \omega_{ij} \xi_i l_{ij} dS_{ij}^{(\xi, \eta)} = \sum_{j \in \bar{J}_{lq}} (V^z l)_{1/2j} \hbar_j^\eta.$$

Утверждение доказано ■

## Аппроксимация по времени

Проведем дискретизацию уравнений (1.86), (1.87) по времени. Проинтегрируем (1.86) по отрезку  $[t_k, t_{k+1}]$ , полученное выражение разделим на шаг  $\tau$ .

$$\frac{1}{\tau} \int_{t_k}^{t_{k+1}} \left[ \frac{\partial}{\partial t} (l_P f_P) - \frac{(\varphi_t f)_n - (\varphi_t f)_s}{\hbar^\eta} \right] dt + \frac{1}{\tau} \int_{t_k}^{t_{k+1}} \mathcal{K}_h^{(\xi, \eta)}(f, \psi) dt = \frac{1}{\tau} \int_{t_k}^{t_{k+1}} \mathcal{D}_h^{(\xi, \eta)}(\xi^\beta f) dt. \quad (1.94)$$

Для первого слагаемого в выражении (1.94) получим

$$\mathcal{T}_{h, \tau}^{(\xi, \eta)}(f) = (l_P f_P)_t - [(\varphi_t \widehat{f})_n - (\varphi_t \widehat{f})_s] / \hbar^\eta. \quad (1.95)$$

Аппроксимация (1.95) содержит нелинейный член  $\widehat{l_P f_P}$ . Для удобства перепишем (1.95) в недивергентной форме. Сначала рассмотрим случай  $f = T, \omega$ . Преобразуем аппроксимацию производной по времени к виду

$$\mathcal{T}_{h, \tau}^{(\xi, \eta)}(f) = (l_P f_P)_t - [(\varphi_t \widehat{f})_{\tilde{n}} h_n^\eta + (\varphi_t \widehat{f})_{\tilde{s}} h_s^\eta] / (2\hbar^\eta).$$

Воспользуемся формулами разностного дифференцирования произведения [88]:

$$\begin{aligned} (l_P f_P)_t &= l_{P, t} \widehat{f_P} + l_P f_{P, t} = [l_{n, t} h_n^\eta + l_{s, t} h_s^\eta] / (2\hbar^\eta) \widehat{f_P} + [l_n h_n^\eta + l_s h_s^\eta] / (2\hbar^\eta) f_{P, t}, \\ [(\varphi_t \widehat{f})_{\tilde{n}} h_n^\eta + (\varphi_t \widehat{f})_{\tilde{s}} h_s^\eta] / (2\hbar^\eta) &= [(\varphi_{t, \tilde{n}} \widehat{f_P} + \varphi_{t, n} \widehat{f_{\tilde{n}}}) h_n^\eta + (\varphi_{t, \tilde{s}} \widehat{f_P} + \varphi_{t, s} \widehat{f_{\tilde{s}}}) h_s^\eta] / (2\hbar^\eta). \end{aligned}$$

Откуда, учитывая что  $l_{n, t} = \varphi_{t, \tilde{n}}$ ,  $l_{s, t} = \varphi_{t, \tilde{s}}$ , приходим к недивергентной форме записи производной по времени

$$\mathcal{T}_{h, \tau}^{(\xi, \eta)}(f) = l_P f_{P, t} - [\varphi_{t, n} \widehat{f_{\tilde{n}}} h_n^\eta + \varphi_{t, s} \widehat{f_{\tilde{s}}} h_s^\eta] / (2\hbar^\eta). \quad (1.96)$$

В регулярной точке производная по времени в уравнении массопереноса также вычисляется по формуле (1.96). Однако на фронте кристаллизации имеем

$$\mathcal{T}_{h, \tau}^{(\xi, \eta)}(C) = \frac{l_n h_n^\eta C_{P, t}^{\text{liq}} + l_s h_s^\eta C_{P, t}^{\text{cr}}}{2\hbar^\eta} - \frac{\varphi_{t, n} \widehat{C_{\tilde{n}}^{\text{liq}}} h_n^\eta + \varphi_{t, s} \widehat{C_{\tilde{s}}^{\text{cr}}} h_s^\eta}{2\hbar^\eta} + \frac{(C^{\text{cr}} - C^{\text{liq}}) v_{\text{ph}}}{\hbar^\eta}.$$

В уравнении массопереноса вновь возникает член, в явном виде содержащий скорость движения межфазной границы.

Конвективные члены в уравнении переноса завихренности аппроксимируем следующим образом

$$\frac{1}{\tau} \int_{t_k}^{t_{k+1}} \mathcal{K}_h^{(\xi, \eta)}(\omega, \psi) dt = \mathcal{K}_h^{(\xi, \eta)}(\widehat{\omega}, \psi);$$

в уравнениях тепло- и массопереноса

$$\frac{1}{\tau} \int_{t_k}^{t_{k+1}} \mathcal{K}_h^{(\xi, \eta)}(f, \psi) dt = \mathcal{K}_h^{(\xi, \eta)}(\widehat{f}, \widehat{\psi}), \quad f = T, C.$$

Диссипативные члены аппроксимируем неявным образом, при этом метрические коэффициенты  $\mathcal{L}^{\xi\xi}$ ,  $\mathcal{L}^{\xi\eta}$ ,  $\mathcal{L}^{\eta\eta}$  будем вычислять с помощью известного положения границы раздела фаз на текущем временном слое  $t = t_k$ .

## Разностные уравнения

Сеточный аналог уравнений Навье-Стокса имеет вид

$$\mathcal{T}_{h,\tau}^{(\xi, \eta)}(\omega_{ij}) + \mathcal{K}_h^{(\xi, \eta)}(\widehat{\omega}_{ij}, \psi_{ij}) = \mathcal{D}_h^{(\xi, \eta)}(\xi_i^2 \widehat{\omega}_{ij}) + \sum_{f=T, C} \mathcal{F}^{(\xi, \eta)}(f_{ij}), \quad (i, j) \in (I_{lq} \times J_{lq}); \quad (1.97)$$

$$\widehat{\omega}_{ij} \xi_i^{lq} = \mathcal{D}_h^{(\xi, \eta)}(\widehat{\psi}_{ij}), \quad (i, j) \in \{(\bar{I}_{lq} \times \bar{J}_{lq}) : i \neq 0\}; \quad (1.98)$$

$$\widehat{\omega}_{0j} = 0, \quad j \in \bar{J}_{lq}; \quad \widehat{\psi}_{ij} = 0, \quad (i, j) \in \{(\bar{I}_{lq} \times \bar{J}_{lq}) \setminus (I_{lq} \times J_{lq})\}. \quad (1.99)$$

(Здесь уравнения (1.98) в граничных узлах записаны в виде аналогов условий Тома (1.88)–(1.90).) Сеточный аналог уравнений, описывающих тепло- и массоперенос в растворе, кристалле и ампуле, записывается следующим образом

$$\mathcal{T}_{h,\tau}^{(\xi, \eta)}(T_{ij}) + \mathcal{K}_h^{(\xi, \eta)}(\widehat{T}_{ij}, \widehat{\psi}_{ij}) = \mathcal{D}_h^{(\xi, \eta)}(\widehat{T}_{ij}), \quad (i, j) \in (\bar{I}_h \times J_h) : i \neq M; \quad (1.100)$$

$$\mathcal{T}_{h,\tau}^{(\xi, \eta)}(C_{ij}) + \mathcal{K}_h^{(\xi, \eta)}(\widehat{C}_{ij}, \widehat{\psi}_{ij}) = \mathcal{D}_h^{(\xi, \eta)}(\widehat{C}_{ij}), \quad (i, j) \in (\bar{I}_{cr} \times \bar{J}_{cr}) \cup (\bar{I}_{lq} \times \bar{J}_{lq}); \quad (1.101)$$

$$F_n(T_{ij^*}, C_{ij^*}^{cr}, C_{ij^*}^{lq}) = 0, \quad n = 1, 2, \quad i \in \bar{I}_{cr}; \quad (1.102)$$

$$\widehat{T}_{ij} = T_{\text{bound}}, \quad (i, j) \in \{(\bar{I}_h \times \bar{J}_h) \setminus (I_h \times J_h) : i \neq 0\}. \quad (1.103)$$

В граничных узлах и на фронте кристаллизации в уравнениях (1.100), (1.101) применяются особые аппроксимации  $\mathcal{T}_{h,\tau}^{(\xi, \eta)}$ ,  $\mathcal{K}_h^{(\xi, \eta)}$ ,  $\mathcal{D}_h^{(\xi, \eta)}$ , рассмотренные выше; конвективные члены в кристалле и ампуле равны нулю.

Для решения системы нелинейных алгебраических уравнений (1.97)–(1.103) используется метод, в основе которого лежит расщепление по физическим процессам: сначала из уравнений (1.97)–(1.99), аппроксимирующих уравнения Навье — Стокса, определяется поле скоростей жидкости; затем из уравнений (1.100)–(1.103) вычисляются распределение температуры в области, состав кристалла и раствора, скорость границы раздела фаз.

## Глава 2

# Методы решения системы сеточных уравнений, возникающей при моделировании процесса кристаллизации многокомпонентного раствора

В Главе 1 для задачи о фазовом переходе в многокомпонентном растворе построена консервативная разностная схема, наследующая основные свойства исходной дифференциальной задачи. Однако выполнение на разностном уровне сеточных аналогов законов сохранения теплоты, массы и кинетической энергии не гарантирует получение решения с высокой точностью. На надежность вычислительного алгоритма существенным образом влияет выбор итерационного метода решения соответствующей системы нелинейных разностных уравнений.

После применения процедуры расщепления по физическим процессам во внутренних точках твердой и жидкой фаз сеточные уравнений теплопереноса и массопереноса становятся независимыми. Однако на фронте кристаллизации температура и концентрации связаны условиями баланса теплоты и массы, фазовой диаграммой системы. Известно, что способ численной реализации условий на границе раздела фаз является одним из основных факторов, определяющих сходимость итерационных методов решения системы нелинейных сеточных уравнений (1.100)–(1.103).

Широкое распространение получили алгоритмы, в которых аппроксимация граничных условий позволяет на каждом временном слое решать уравнения переноса теплоты и массы последовательно. Для этого в аппроксимацию граничных условий вносится элемент явности. Например, на фронте кристаллизации значение одной из искоемых функций на новом временном слое выражается через значения с предыдущего слоя остальных функций, входящих в соответствующее граничное условие. Затем оставшиеся уравнения решают по-



следовательно с использованием в граничных условиях значений функций, уже найденных на текущем слое. Эти методы экономичны и просты в реализации, однако, обеспечивая получение решения в одном диапазоне параметров (начальные данные, фазовая диаграмма, термодинамические константы и т.д.), в другом — они оказываются неустойчивыми или дают правдоподобные, но неверные результаты [77; 78; 92]. В работе [78] исследовалась сходимость вычислительного алгоритма решения задачи о кристаллизации тройных соединений (теплоперенос в системе и массоперенос в твердой фазе не учитывались) и было показано, что существуют области изменения термодинамических параметров задачи, при которых методы последовательного определения искомых функций расходятся при любых параметрах сетки.

## 2.1. Численное решение сеточных уравнений тепломассопереноса

Теоретический анализ сходимости алгоритма решения системы сеточных уравнений (1.100)–(1.103) в силу нелинейности задачи связан со значительными трудностями. Поэтому рассмотрим упрощенную математическую модель, отражающую характерные особенности соответствующей задачи и поддающуюся исследованию классическими методами.

### 2.1.1. Упрощенная математическая модель

Рассмотрим одномерную модель процесса кристаллизации бинарного соединения  $A_xB_{1-x}$  из раствора компонента  $A$  в расплаве  $B$ , учитывающую диффузионный теплоперенос в твердой и жидкой фазах:

$$\frac{\partial C^{\text{cr}}}{\partial t} = D^{\text{cr}} \frac{\partial^2 C^{\text{cr}}}{\partial z^2}, \quad c_p^{\text{cr}} \frac{\partial T}{\partial t} = \kappa^{\text{cr}} \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}, \quad 0 < z < \zeta, \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial C^{\text{liq}}}{\partial t} = D^{\text{liq}} \frac{\partial^2 C^{\text{liq}}}{\partial z^2}, \quad c_p^{\text{liq}} \frac{\partial T}{\partial t} = \kappa^{\text{liq}} \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}, \quad \zeta < z < L. \quad (2.2)$$

Здесь  $z$  – декартова координата,  $t$  – время,  $\zeta$  – координата границы раздела фаз,  $L$  – размер всей области, область  $z \in [0, \zeta]$  соответствует твердой фазе,  $z \in [\zeta, L]$  – жидкой,  $C^{\text{лq}}$  – концентрация компонента в жидкой фазе,  $C^{\text{cr}}$  – концентрация компонента  $A$  в твердой фазе,  $T = (T^{\text{д}} - T_B)$  – отклонение температуры (здесь  $T^{\text{д}}$  – температура,  $T_B$  – температура плавления чистого вещества  $B$ ),  $\varkappa^{\text{cr}} = k^{\text{cr}}/\rho$ ,  $\varkappa^{\text{лq}} = k^{\text{лq}}/\rho$  (предполагается, что плотность  $\rho$  твердой и жидкой фазы одинакова).

На границе раздела фаз  $z = \zeta$  выполнены следующие условия

- Закон сохранения энергии

$$\varkappa^{\text{cr}} \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=\zeta-0} - \varkappa^{\text{лq}} \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=\zeta+0} = \lambda v_{\text{ph}}, \quad (2.3)$$

- Закон сохранения массы

$$D^{\text{cr}} \frac{\partial C^{\text{cr}}}{\partial z} \Big|_{z=\zeta-0} - D^{\text{лq}} \frac{\partial C^{\text{лq}}}{\partial y} \Big|_{z=\zeta+0} = (C_{\text{ph}}^{\text{лq}} - C_{\text{ph}}^{\text{cr}}) v_{\text{ph}}, \quad (2.4)$$

- Условия фазового равновесия

$$C^{\text{cr}}|_{z=\zeta} = C_{\text{ph}}^{\text{cr}} = \mathcal{K} C^{\text{лq}}|_{z=\zeta}, \quad (2.5)$$

$$C^{\text{лq}}|_{z=\zeta} = C_{\text{ph}}^{\text{лq}} = A_l T|_{z=\zeta}, \quad (2.6)$$

где  $\mathcal{K}$  – коэффициент сегрегации,  $A_l$  – угол наклона фазовой диаграммы.

Краевые условия для концентрации и температуры имеют вид:

$$D^{\text{cr}} \frac{\partial C^{\text{cr}}}{\partial z} \Big|_{z=0} = 0, \quad D^{\text{лq}} \frac{\partial C^{\text{лq}}}{\partial z} \Big|_{z=L} = 0, \quad (2.7)$$

$$\varkappa^{\text{cr}} \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=0} = 0, \quad \varkappa^{\text{лq}} \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=L} = 0. \quad (2.8)$$

Будем считать, что скорость движения фронта кристаллизации мала, изменение размеров жидкой и твердой фаз в ходе процесса кристаллизации незначительно, поэтому  $\zeta = \text{const}$ . Исключим из системы уравнений (2.1) – (2.8)

неизвестную скорость движения фронта, и условия баланса энергии и массы запишем в виде

$$\frac{D^{\text{cr}} \frac{\partial C^{\text{cr}}}{\partial z} \Big|_{z=\xi-0} - D^{\text{lq}} \frac{\partial C^{\text{lq}}}{\partial z} \Big|_{z=\zeta+0}}{C_{\text{ph}}^{\text{lq}} - C_{\text{ph}}^{\text{cr}}} = \frac{\varkappa^{\text{cr}} \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=\zeta-0} - \varkappa^{\text{lq}} \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=\zeta+0}}{\lambda}$$

### 2.1.2. Разностная схема

Введем на отрезке  $[0, L]$  сетку с шагом  $h_{\text{cr}}$  в твердой фазе и с шагом  $h_{\text{lq}}$  в жидкой фазе:  $\omega_z^h = \{z_i = ih_{\text{cr}}, i = \overline{0, i^*}, h_{\text{cr}} = \zeta/i^*; z_i = \zeta + (i - i^*)h_{\text{lq}}, i = \overline{i^* + 1, N}, h_{\text{lq}} = (L - \zeta)/(N - i^*)\}$ , узел с номером  $i^*$  попадает на границу раздела фаз, т.е.  $z_{i^*} = \zeta$ . Сетка по времени  $\omega_t = \{t_j = j\tau, j = 0, 1, \dots\}$ . Запишем неявную разностную схему для задачи (2.1) – (2.8):

$$C_t^{\text{cr}} = D^{\text{cr}} \widehat{C}_{\bar{z}z}^{\text{cr}}, \quad i = \overline{1, i^* - 1}, \quad (2.9)$$

$$c_p^{\text{cr}} T_t = \varkappa^{\text{cr}} \widehat{T}_{\bar{z}z}, \quad i = \overline{1, i^* - 1}, \quad (2.10)$$

$$C_t^{\text{lq}} = D^{\text{lq}} \widehat{C}_{\bar{z}z}^{\text{lq}}, \quad i = \overline{i^* + 1, N - 1}, \quad (2.11)$$

$$c_p^{\text{lq}} T_t = \varkappa^{\text{lq}} \widehat{T}_{\bar{z}z}, \quad i = \overline{i^* + 1, N - 1}, \quad (2.12)$$

$$v_{\text{ph}} = \frac{D^{\text{cr}} \widehat{C}_{\bar{z}}^{\text{cr}} - D^{\text{lq}} \widehat{C}_z^{\text{lq}}}{\widehat{C}_{i^*}^{\text{lq}} - \widehat{C}_{i^*}^{\text{cr}}} = \frac{\varkappa^{\text{cr}} \widehat{T}_{\bar{z}} - \varkappa^{\text{lq}} \widehat{T}_z}{\lambda}, \quad i = i^*, \quad (2.13)$$

$$\widehat{C}_{i^*}^{\text{lq}} = A_l \widehat{T}_{i^*}, \quad (2.14)$$

$$\widehat{C}_{i^*}^{\text{cr}} = \mathcal{K} \widehat{C}_{i^*}^{\text{lq}}, \quad (2.15)$$

$$D^{\text{cr}} \widehat{C}_z \Big|_{i=0} = D^{\text{lq}} \widehat{C}_{\bar{z}} \Big|_{i=N} = \varkappa^{\text{cr}} \widehat{T}_z \Big|_{i=0} = \varkappa^{\text{lq}} \widehat{T}_{\bar{z}} \Big|_{i=N} = 0. \quad (2.16)$$

Решение нелинейной системы сеточных уравнений (2.9) – (2.16) можно организовать следующим образом.

Метод 1. Выберем в качестве начального приближения для температуры ее значение с предыдущего временного слоя. Организуем следующий итерационный процесс

- Из уравнения (2.11) с граничными условиями (2.14), (2.16), куда температура входит с предыдущей итерации, найдем распределение состава жидкой фазы.

- Найденные значения концентрации подставим в граничное условие (2.15). Вычислим распределение концентрации в твердой фазе из уравнения (2.9) с граничными условиями (2.15), (2.16).
- На границе раздела фаз используем условие (2.13) с уже найденными значениями концентрации на фронте кристаллизации. Определим распределение температуры во всей области из уравнений (2.10), (2.12), (2.13) с граничными условиями (2.16).

Вся процедура повторяется до тех пор, пока не будут выполнены условия сходимости

$$\max_i \left| \widehat{C}_i^{\text{cr}(k+1)} - \widehat{C}_i^{\text{cr}(k)} \right| < \varepsilon, \quad \max_i \left| \widehat{C}_i^{\text{lq}(k+1)} - \widehat{C}_i^{\text{lq}(k)} \right| < \varepsilon, \quad \max_i \left| \widehat{T}_i^{(k+1)} - \widehat{T}_i^{(k)} \right| < \varepsilon, \quad (2.17)$$

где  $k$  — номер итерации, а  $\varepsilon$  — точность сходимости итераций. Затем происходит переход на следующий временной слой.

С помощью встречных прогонок решение уравнений (2.9) – (2.16) можно свести к решению нелинейной системы на фронте кристаллизации. Пусть искомые функции удовлетворяют соотношениям:

$$\widehat{f}_i = \alpha_{i+1}^f \widehat{f}_{i+1} + \beta_{i+1}^f, \quad i = \overline{0, i^* - 1}, \quad f = T, C^{\text{cr}}, \quad (2.18)$$

$$\widehat{f}_i = \mu_{i-1}^f \widehat{f}_{i-1} + \nu_{i-1}^f, \quad i = \overline{i^* + 1, N}, \quad f = T, C^{\text{lq}}, \quad (2.19)$$

где прогоночные коэффициенты вычисляются по формулам [77; 93]

$$\alpha_1^f = 1, \quad \alpha_{i+1}^f = \frac{1}{2 + h_{\text{cr}}^2 / (\mathcal{D}_{\text{cr}} \tau) - \alpha_i^f}, \quad \beta_1^f = 0, \quad \beta_{i+1}^f = \alpha_{i+1}^f \left( \beta_i^f + f_i \frac{h_{\text{cr}}^2}{\mathcal{D}_{\text{cr}} \tau} \right),$$

$$f = C^{\text{cr}}, T, \quad \mathcal{D}_{\text{cr}} = D^{\text{cr}} \text{ при } f = C^{\text{cr}}, \quad \mathcal{D}_{\text{cr}} = \kappa^{\text{cr}} / c_{\text{p}}^{\text{cr}} \text{ при } f = T, \quad i = \overline{1, i^* - 1}, \quad (2.20)$$

$$\mu_{N-1}^f = 1, \quad \mu_{i-1}^f = \frac{1}{2 + h_{\text{lq}}^2 / (\mathcal{D}_{\text{lq}} \tau) - \mu_i^f}, \quad \nu_{N-1}^f = 0, \quad \nu_{i-1}^f = \mu_{i-1}^f \left( \nu_i^f + f_i \frac{h_{\text{lq}}^2}{\mathcal{D}_{\text{lq}} \tau} \right),$$

$$f = C^{\text{lq}}, T, \quad \mathcal{D}_{\text{lq}} = D^{\text{lq}} \text{ при } f = C^{\text{lq}}, \quad \mathcal{D}_{\text{lq}} = \kappa^{\text{lq}} / c_{\text{p}}^{\text{lq}} \text{ при } f = T, \quad i = \overline{N-1, i^* + 1}. \quad (2.21)$$

Тогда на фронте кристаллизации получим систему уравнений относительно неизвестных  $\widehat{C}_{i^*}^{\text{cr}}, \widehat{C}_{i^*}^{\text{liq}}, \widehat{T}_{i^*}$

$$\frac{M^C \widehat{C}_{i^*}^{\text{liq}} - N^C}{(1 - \mathcal{K}) \widehat{C}_{i^*}^{\text{liq}}} = \frac{M^T \widehat{T}_{i^*} - N^T}{\lambda}, \quad (2.22)$$

$$\widehat{C}_{i^*}^{\text{liq}} = A_l \widehat{T}_{i^*}, \quad (2.23)$$

$$\widehat{C}_{i^*}^{\text{cr}} = \mathcal{K} \widehat{C}_{i^*}^{\text{liq}}. \quad (2.24)$$

Здесь

$$M^C = \frac{D^{\text{cr}}}{h_{\text{cr}}} [1 - \alpha_{i^*}^C] \mathcal{K} + \frac{D^{\text{liq}}}{h_{\text{liq}}} [1 - \mu_{i^*}^C], \quad N^C = \frac{D^{\text{cr}}}{h_{\text{cr}}} \beta_{i^*}^C + \frac{D^{\text{liq}}}{h_{\text{liq}}} \nu_{i^*}^C, \quad (2.25)$$

$$M^T = \frac{\varkappa^{\text{cr}}}{h_{\text{cr}}} [1 - \alpha_{i^*}^T] + \frac{\varkappa^{\text{liq}}}{h_{\text{liq}}} [1 - \mu_{i^*}^T], \quad N^T = \frac{\varkappa^{\text{cr}}}{h_{\text{cr}}} \beta_{i^*}^T + \frac{\varkappa^{\text{liq}}}{h_{\text{liq}}} \nu_{i^*}^T. \quad (2.26)$$

Решив систему (2.22)–(2.24), можно определить состав и температуру твердой и жидкой фаз с помощью соотношений (2.18), (2.19).

Итерационный процесс *Метода 1* эквивалентен следующему итерационному алгоритму решения системы (2.22)–(2.24):

$$\widehat{C}_{i^*}^{\text{liq}(k+1)} = A_l \widehat{T}_{i^*}^{(k)}, \quad (2.27)$$

$$\widehat{C}_{i^*}^{\text{s}(k+1)} = \mathcal{K} \widehat{C}_{i^*}^{\text{liq}(k+1)}, \quad (2.28)$$

$$\frac{M^C \widehat{C}_{i^*}^{\text{liq}(k+1)} - N^C}{(1 - \mathcal{K}) \widehat{C}_{i^*}^{\text{liq}(k+1)}} = \frac{M^T \widehat{T}_{i^*}^{(k+1)} - N^T}{\lambda}. \quad (2.29)$$

При вычислении коэффициентов  $M^f, N^f, f = T, C$  используются значения температуры и концентрации, полученные на соответствующих итерациях.

**Теорема 2.1.** *Метод 1 сходится, если*

$$\mathcal{S}_1 = \left| \frac{\lambda N^C}{M^T (1 - \mathcal{K}) A_l \left( \min_{t_j} |T_{i^*}| \right)^2} \right| < 1. \quad (2.30)$$

**Доказательство.** Анализ сходимости *Метода 1* сводится к исследованию сходимости метода простой итерации для решения уравнения

$$\frac{M^C A_l \widehat{T}_{i^*}^{(k)} - N^C}{(1 - \mathcal{K}) A_l \widehat{T}_{i^*}^{(k)}} = \frac{M^T \widehat{T}_{i^*}^{(k+1)} - N^T}{\lambda}. \quad (2.31)$$

Запишем уравнение (2.31) в виде

$$\Theta_1 \left( \widehat{T}_{i^*}^{(k+1)} \right) = \Theta_2 \left( \widehat{T}_{i^*}^{(k)} \right), \quad (2.32)$$

здесь

$$\Theta_1(T) = \frac{M^T}{\lambda} T, \quad \Theta_2(T) = -\frac{N^C}{(1 - \mathcal{K}) A_l T} + \frac{M^C \lambda + N^T (1 - \mathcal{K})}{\lambda (1 - \mathcal{K})}.$$

Итерационный процесс сходится, если  $\mathcal{S}_1 = |\Theta_2'/\Theta_1'| < 1$  [88], то есть

$$\left| \frac{\lambda N^C}{M^T (1 - \mathcal{K}) A_l \left( \widehat{T}_{i^*}^{(k)} \right)^2} \right| < \left| \frac{\lambda N^C}{M^T (1 - \mathcal{K}) A_l \left( \min_{t_j} |T_{i^*}| \right)^2} \right| < 1 \quad \blacksquare$$

Из условия (2.30) следует, что *Метод 1*, сходится в области

$$-\frac{1}{d} < I < \frac{1}{d}, \quad \text{где} \quad I = \frac{\lambda}{(1 - \mathcal{K}) A_l T_{i^*}^2}, \quad d = \frac{N^C}{M^T}. \quad (2.33)$$

Величина  $I$  в оценке (2.33) определяется параметрами фазовой диаграммы системы и температурой фазового перехода. При этом значение параметра  $d$  зависит не только от свойств твердой и жидкой фазы, но и от величины шага по времени. Данное обстоятельство позволяет управлять сходимостью *Метода 1*. В ходе процесса кристаллизации угол наклона линии ликвидуса  $A_l$ , коэффициент сегрегации  $\mathcal{K}$  и температура на фронте могут значительно изменяться. Поэтому расчет необходимо вести с шагом  $\tau$ , обеспечивающим сходимость итерационного алгоритма во всем диапазоне изменения параметров на межфазной границе. Для некоторых веществ и режимов выращивания соответствующее

ограничение на величину шага по времени может оказаться весьма обременительным.

Рассмотрим еще один итерационный процесс, в котором последовательно определяется сначала поле температуры, затем распределение концентрации.

Метод 2. Выберем в качестве начального приближения для концентрации компонента  $A$  в жидкой фазе ее значение с предыдущего временного слоя. Итерационный процесс организуем следующим образом:

- Для определения температуры подставим в уравнение (2.14) значение концентрации с предыдущей итерации. Из уравнений (2.10), (2.12), (2.14) с граничными условиями (2.16) найдем распределение температуры во всей области.
- Найденные значения температуры подставим в условие (2.13). Вычислим распределение концентраций в твердой и жидкой фазе из уравнений (2.9), (2.11), (2.13), (2.15) с граничными условиями (2.16).

Вся процедура повторяется до сходимости.

С помощью соотношений (2.18)–(2.24) можно показать, что *Метод 2* эквивалентен итерационному алгоритму решения уравнения

$$\frac{M^C \widehat{C}_{i*}^{\text{лq}(k+1)} - N^C}{(1 - \mathcal{K}) \widehat{C}_{i*}^{\text{лq}(k+1)}} = \frac{M^T \widehat{C}_{i*}^{\text{лq}(k)} / A_l - N^T}{\lambda}. \quad (2.34)$$

**Теорема 2.2.** *Метод 2 сходится, если*

$$\mathcal{S}_2 = \left| \frac{M^T (1 - \mathcal{K}) A_l \left( \max_{t_j} |T_{i*}| \right)^2}{\lambda N^C} \right| < 1. \quad (2.35)$$

Доказательство теоремы 2.2 аналогично доказательству теоремы 2.1.

В *Методах 1 и 2* на первом этапе итерационного процесса для вычисления искоемых функций используется фазовая диаграмма системы (2.14). Рассмотрим методы, в которых итерационный процесс начинается с решения уравнений для температуры (концентраций) с заданным на фронте кристаллизации скачком потока теплоты (массы).

Метод 3. Для определения температуры подставим в уравнение (2.13) распределение концентрации с предыдущей итерации. Из уравнений (2.10), (2.12), (2.13) находится распределение температуры во всей области. Состав жидкой фазы вычисляется по найденному полю температуры из уравнений (2.11), (2.14), а состав твердой — из уравнений (2.9), (2.15) и вся процедура повторяется. В этом случае нелинейная система (2.22) – (2.24) на границе раздела фаз решается следующим образом

$$\frac{M^T \widehat{T}_{i^*}^{(k+1)} - N^T}{\lambda} = \frac{D^{\text{cr}} \widehat{C}_{\bar{y}}^{\text{cr}(k)} - D^{\text{liq}} \widehat{C}_y^{\text{liq}(k)}}{\widehat{C}_{i^*}^{\text{liq}(k)} - \widehat{C}_{i^*}^{\text{cr}(k)}}, \quad (2.36)$$

$$\widehat{C}_{i^*}^{\text{liq}(k+1)} = A_l \widehat{T}_{i^*}^{(k+1)}, \quad (2.37)$$

$$\widehat{C}_{i^*}^{\text{cr}(k+1)} = \mathcal{K} \widehat{C}_{i^*}^{\text{liq}(k+1)}. \quad (2.38)$$

Можно показать, что итерационный *Метод 3* для системы уравнений (2.9) – (2.16) сходится, если выполнено условие (2.30).

Метод 4. Данный алгоритм отличается от *Метода 3* тем, что на границе по известному распределению температуры вычисляется скачок потока массы. В таком случае сначала определяются составы твердой и жидкой фазы, а затем находится распределение температуры во всей области. Нелинейная система (2.22) – (2.24) на границе раздела фаз решается следующим образом

$$\frac{M^C \widehat{C}_{i^*}^{\text{liq}(k+1)} - N^C}{(1 - \mathcal{K}) \widehat{C}_{i^*}^{\text{liq}(k+1)}} = \frac{\varkappa^s \widehat{T}_{\bar{y}}^{(k)} - \varkappa^{\text{liq}} \widehat{T}_y^{(k)}}{\lambda}, \quad (2.39)$$

$$\widehat{C}_{i^*}^{s(k+1)} = \mathcal{K} \widehat{C}_{i^*}^{\text{liq}(k+1)}, \quad (2.40)$$

$$\widehat{T}_{i^*}^{(k+1)} = \widehat{C}_{i^*}^{\text{liq}(k+1)} / A_l, \quad (2.41)$$

Предложенный итерационный метод сходится, если выполнено условие (2.35).

Таким образом, область сходимости *Метода 1* совпадает с областью сходимости *Метода 3*, а область сходимости *Метода 2* — с областью сходимости *Метода 4*. Поэтому в дальнейшем ограничимся рассмотрением *Методов 1* и *2*.

**Замечание.** Для решения задачи (2.9) – (2.16) часто используют методы,



построенные на основе процедуры расщепления по физическим процессам, в которых последовательно определяются поля температуры и концентраций. Такие подходы соответствуют выполнению на каждом временном слое одной итерации одного из рассмотренных методов. Области параметров, в которых методы расщепления расходятся, практически совпадают с областями, в которых соответствующие итерационные алгоритмы (Метод 1–4) неустойчивы.

Метод 5. Рассмотрим совместный алгоритм решения задачи (2.9) – (2.16). Для решения системы уравнений на фронте кристаллизации (2.22)–(2.24) используем метод Ньютона [88]. Такой подход эквивалентен применению метода Ньютона к уравнению

$$\frac{M^C A_l \widehat{T}_{i*} - N^C}{(1 - \mathcal{K}) A_l \widehat{T}_{i*}} = \frac{M^T \widehat{T}_{i*} - N^T}{\lambda}, \quad (2.42)$$

которое можно свести к квадратному уравнению  $\mathcal{A}T^2 + \mathcal{B}T + \mathcal{C} = 0$ . Здесь

$$\mathcal{A} = M^T, \quad \mathcal{B} = - \left[ N^T + \frac{\lambda}{1 - \mathcal{K}} M^C \right], \quad \mathcal{C} = \frac{\lambda N^C}{(1 - \mathcal{K}) A^l}.$$

Данное уравнение имеет решение при  $\mathcal{B}^2 - 4\mathcal{A}\mathcal{C} \geq 0$ .

Покажем, что коэффициент  $\mathcal{A} = \frac{\varkappa^s}{h_{cr}}[1 - \alpha_{i*}^T] + \frac{\varkappa^{lq}}{h_{lq}}[1 - \mu_{i*}^T]$  всегда положителен. В книге [94, с. 556] доказано, что  $0 < \alpha_*^T < \alpha_{i*}^T < 1$ ,  $0 < \mu_*^T < \mu_{i*}^T < 1$ , где

$$\alpha_*^T = 1 + \frac{1}{2} \frac{h_{cr}^2}{\varkappa^{cr}/c_p^{cr}\tau} - \sqrt{\frac{h_{cr}^2}{\varkappa^{cr}/c_p^{cr}\tau} + \frac{1}{4} \left( \frac{h_{cr}^2}{\varkappa^{cr}/c_p^{cr}\tau} \right)^2},$$

$$\mu_*^T = 1 + \frac{1}{2} \frac{h_{lq}^2}{\varkappa^{lq}/c_p^{lq}\tau} - \sqrt{\frac{h_{lq}^2}{\varkappa^{lq}/c_p^{lq}\tau} + \frac{1}{4} \left( \frac{h_{lq}^2}{\varkappa^{lq}/c_p^{lq}\tau} \right)^2}.$$

Откуда  $\mathcal{A} > 0$ .

Покажем, что коэффициент  $\mathcal{C}$  всегда отрицателен. Из формул (2.25), (2.26), следует, что коэффициент  $N^C = \frac{D^s}{h_s} \beta_{i*}^C + \frac{D^{lq}}{h_{lq}} \nu_{i*}^C$  положителен при  $C^{cr} > 0$ ,

$C^{lq} > 0$ . Из физических соображений следует, что на фазовой диаграмме линия ликвидуса  $T = F^{lq}(C)$  всегда располагается выше линии солидуса  $T = F^{cr}(C)$ . При этом возможны два варианта:

- Компонент А более тугоплавкий, чем компонент В ( $T_A > T_B$ ).

Типичная фазовая диаграмма такого двухкомпонентного соединения приведена на рисунке 2.1, а. В этом случае в любой момент времени угол наклона линии ликвидуса  $A_l > 0$ , коэффициент сегрегации  $\mathcal{K} > 1$ ,  $T|_{z=\zeta} > 0$  и  $C_{ph}^{cr} > 0$ ,  $C_{ph}^{lq} > 0$ . Таким образом, коэффициент  $\mathcal{C} < 0$ .

- Компонент В более тугоплавкий, чем компонент А ( $T_A < T_B$ ).

Соответствующая фазовая диаграмма приведена на рисунке 2.1, б. В таком случае  $A_l < 0$ ,  $0 < \mathcal{K} < 1$ , при этом  $T|_{z=\zeta} < 0$ ,  $C_{ph}^{cr} > 0$ ,  $C_{ph}^{lq} > 0$ , коэффициент  $\mathcal{C}$  отрицателен.

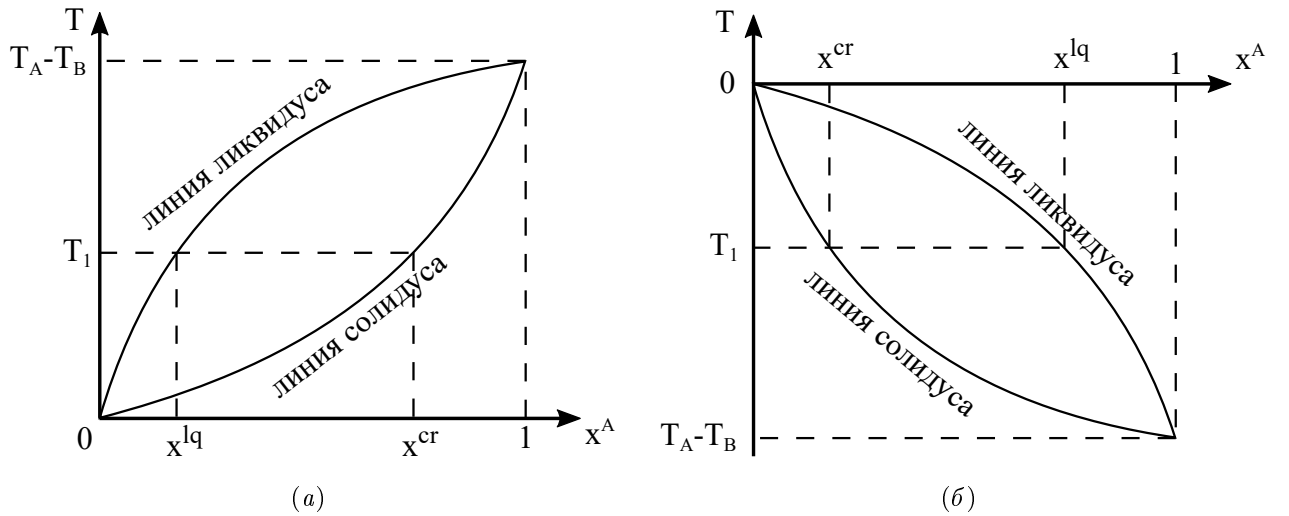


Рис. 2.1. Фазовая диаграмма двухкомпонентного соединения: (а)  $T_A > T_B$ ; (б)  $T_A < T_B$ .

Таким образом, квадратное уравнение, возникающее при решении задачи (2.9) – (2.16) с помощью метода Ньютона, всегда имеет два действительных корня разного знака ( $\mathcal{C}/\mathcal{A} < 0$ ). В случае  $A_l > 0$  необходимо выбирать положительный корень ( $T|_{z=\zeta} > 0$ , см. рис. 2.1, а), при  $A_l < 0$  — отрицательный ( $T|_{z=\zeta} < 0$ , см. рис. 2.1, б). При хорошем начальном приближении итерацион-

ный процесс по методу Ньютона будет сходиться. В качестве начального приближения можно выбрать  $\hat{T}_{i*}^{(0)} = T_{i*}$ .

### 2.1.3. Результаты расчетов

Приведем результаты расчетов, иллюстрирующие полученные выше теоретические оценки.

**Пример 1.** Рассмотрим задачу о росте кристалла. В начальный момент времени кристалл состава  $A_x B_{1-x}$  приводится в контакт с раствором компонента  $A$  в расплаве вещества  $B$ . Состав жидкой фазы на фронте кристаллизации ( $z = \zeta$ ) при начальной температуре равновесен составу твердой фазы. Температура на внешних границах области понижается по закону:  $T(t, 0) = T_{\text{left}} - \mu t$ ,  $T(t, L) = T_{\text{right}} - \mu t$ ,  $T_{\text{left}} < T_{\text{right}}$ . Охлаждение приводит к пересыщению раствора вблизи границы раздела фаз, начинается процесс кристаллизации.

Предполагается, что изменение размеров жидкой и твердой фаз в ходе процесса кристаллизации незначительно, поэтому  $\zeta = \text{const}$ . Длина области  $L = 4$  см, толщина твердой фазы  $\zeta = 2$  см, толщина раствора 2 см. Начальное распределение температуры в каждой из фаз — линейное и выбрано таким образом, чтобы при отсутствии охлаждения фронт кристаллизации был неподвижен. Параметры температурного режима приведены в таблице 2.1 (Как и ранее  $T$  — отклонение температуры, т.е.  $T = T^d - T_B$ ,  $T_B$  — температура плавления чистого вещества  $B$ ,  $T_B = 693$  K)

Таблица 2.1. Параметры температурного режима

| $T_{\text{left}}$ | $T_{\text{right}}$ | $T(0, \xi)$ | $\Delta T$ | $\mu$     | Длительность |
|-------------------|--------------------|-------------|------------|-----------|--------------|
| 60 K              | 106 K              | 100 K       | 46 K       | 0.1 K/мин | 200 мин      |

Рассматривается соединение с линейной фазовой диаграммой, при этом с ростом концентрации компонента  $A$  температура фазового перехода возрас-

тает. Используются физические параметры фаз близкие к параметрам, приведенным в работе [95] (см. Таблица 2.2). Рассматриваются различные значения коэффициента диффузия компонента А в растворе ( $D^{\text{лq}} = 5 \cdot 10^{-3} \text{см}^2/\text{с}$ ;  $D^{\text{лq}} = 5 \cdot 10^{-4} \text{см}^2/\text{с}$ ;  $D^{\text{лq}} = 5 \cdot 10^{-5} \text{см}^2/\text{с}$ ).

Таблица 2.2. Параметры кристалла и раствора

| $A_l$             | $\mathcal{K}$ | $\text{St} = \lambda / (c_p^{\text{лq}} \Delta T)$ | $\varkappa^{\text{с}} c_p^{\text{лq}} / (\varkappa^{\text{лq}} c^{\text{с}})$ | $D^{\text{сr}}$                         |
|-------------------|---------------|----------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------|
| $5 \cdot 10^{-5}$ | 2.6           | 21.7                                               | 0.1875                                                                        | $5 \cdot 10^{-12} \text{см}^2/\text{с}$ |

Общее число узлов сетки  $N = 11000$ , число узлов в твердой фазе  $i^* = 10000$ . Шаг по времени  $\tau = 1t_D$ . В качестве временного масштаба использовался  $t_D = c_p^{\text{лq}} l_0^2 / \varkappa^{\text{лq}} = 100 \text{ с}$ ,  $l_0 = 1 \text{ см}$  — пространственный масштаб. Точность сходимости итераций  $\varepsilon = 10^{-6}$ .

**Метод 1.** Решим предложенную задачу с помощью *Метода 1*.

Случай  $D^{\text{лq}} = 5 \cdot 10^{-5} \text{см}^2/\text{с}$ . В примере 1 параметры расчета таковы, что в случае  $D^{\text{лq}} = 5 \cdot 10^{-5} \text{см}^2/\text{с}$  условие сходимости *Метода 1* (2.30) выполнено при  $\tau = 1t_D$ . На рисунке 2.2 приведены распределения концентрации в жидкой и твердой фазах на различные моменты времени. Температура на фронте кристаллизации понижается, и в соответствии с фазовой диаграммой системы, концентрация компонента А на границе раздела фаз уменьшается. Изменение состава, происходящее на фронте кристаллизации, механизмом диффузии переносится вглубь твердой и жидкой фаз. Профиль температуры в каждой из фаз близок к линейному.

Случай  $D^{\text{лq}} = 5 \cdot 10^{-4} \text{см}^2/\text{с}$ . Результаты расчетов показывают, что условие сходимости *Метода 1* (2.30) выполнено лишь при  $\tau = 0.0001t_D$ . На рисунке 2.3 на плоскости  $\{d, I\}$  для различных значений шага по времени  $\tau$  построены траектории движения точки  $P(t) = (d(t), I(t))$  и граница области сходимости *Метода 1* — кривая  $I = -1/d$  (стрелка на рисунке указывает направление движения

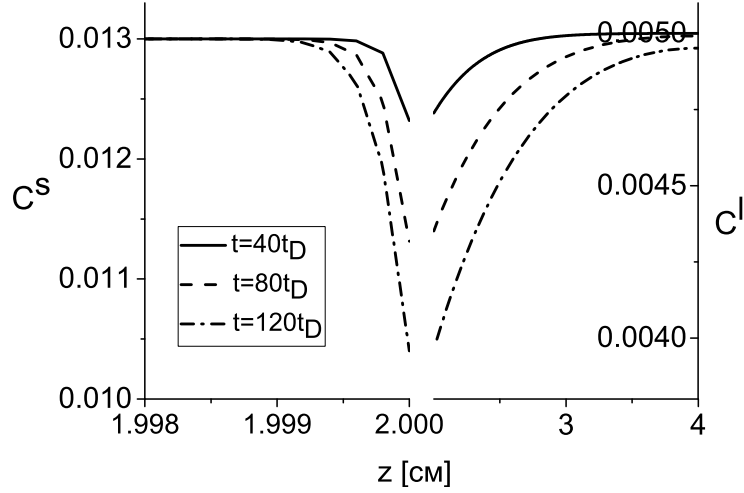


Рис. 2.2. Состав твердой и жидкой фазы на различные моменты времени. Расчет с помощью *Метода 1* ( $D^l = 5 \cdot 10^{-5} \text{см}^2/\text{с}$ ,  $\tau = 1t_D$ ).

и соединяет точки, соответствующие началу расчета и моменту времени, когда алгоритм расходится или расчет окончен). В начальный момент времени точка  $P(0)$  лежит на изотерме, соответствующей начальной температуре на фронте кристаллизации  $T_{i^*} = 100 \text{ К}$ . При охлаждении на  $20 \text{ К}$  ( $t_{\text{end}} = 120t_D$ ) точка  $P(t_{\text{end}})$  должна находиться на изотерме  $T_{i^*} = 80 \text{ К}$ . Заметим, что часть изотермы  $T_{i^*} = 80 \text{ К}$  лежит в области, в которой метод расходится. Видно, что траектория  $P(t)$  не покидает область сходимости на протяжении всего расчета лишь в случае  $\tau = 0.0001t_D$  (см. рис. 2.3). Расчет с шагом по времени  $\tau = 0.001t_D$  теряет устойчивость при  $T_{i^*} \approx 86.7$  ( $t^* \approx 86t_D$ ), с шагом  $\tau = 0.01t_D$  — при  $T_{i^*} \approx 92.5$  ( $t^* \approx 45t_D$ ). При  $\tau = 0.1t_D$  начальная точка  $P(0)$  лежит в области, в которой метод расходится. На ранней стадии расчета неустойчивость итерационного алгоритма не проявляется, так как величина множителя перехода  $\mathcal{S}_1$  близка к единице. Однако с понижением температуры на фронте точка  $P$  все дальше сдвигается в область неустойчивости, и при  $T_{i^*} = 94.2 \text{ К}$ , в момент времени  $t^* = 35t_D$ , итерации начинают расходиться. Важно отметить, что увеличение точности сходимости итераций не позволяет увеличить  $t^*$  и отложить момент потери устойчивости.

Проиллюстрируем механизм потери устойчивости *Метода 1*. Пусть на каж-

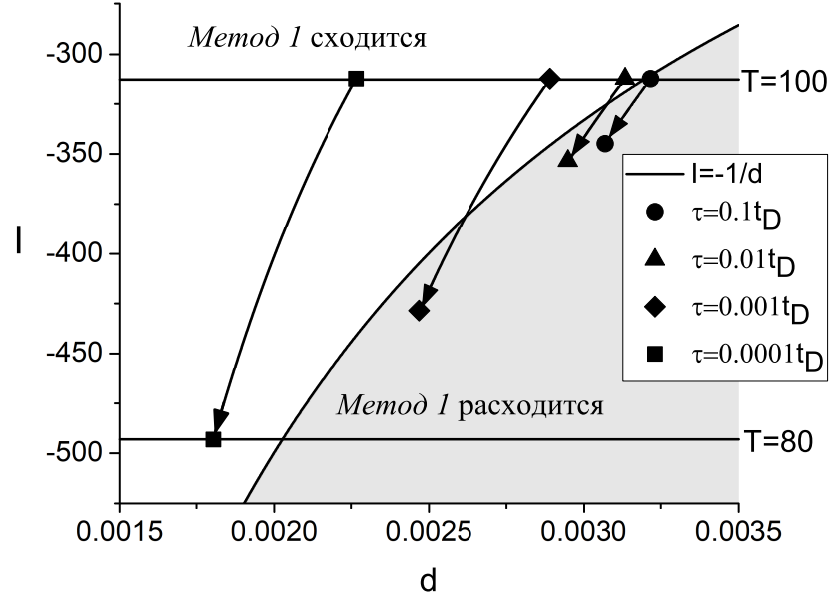


Рис. 2.3. Траектория движения точки  $P(t)$  относительно границы области сходимости Метода 1 в случае  $D^{\text{л}} = 5 \cdot 10^{-4} \text{ см}^2/\text{с}$  для различных значений шага по времени  $\tau$ .

дом шаге по времени выполняется три итерации, что в случае сходящегося расчета дает решение с точностью  $\varepsilon = 10^{-6}$ . Проведем расчеты с  $\tau = 0.01t_D$  и  $\tau = 0.0001t_D$ . На рисунке 2.4 приведены графики зависимости толщины твердой фазы  $H(t) = \zeta + \int_0^t v_{\text{ph}}(\theta) d\theta$  от времени. При  $t < t^* \approx 45t_D$  результаты для  $\tau = 0.01t_D$  и  $\tau = 0.0001t_D$  совпадают. При  $t > t^*$  расчет с  $\tau = 0.01t_D$  становится неустойчивым: вместо увеличения толщины кристалла на каждом шаге по времени наблюдается смена растворения ростом (см. рисунок 2.4 при  $45t_D < t < 47t_D$ ). Постоянное изменение направления движения фронта кристаллизации отражается на распределении состава и температуры в системе. Это приводит к тому, что в момент времени  $t \approx 47t_D$  параметры  $I(t)$  и  $d(t)$  принимают значения, при которых метод вновь становится устойчивым, колебания затухают. Из рисунка 2.4 видно, что при  $47t_D < t < 60t_D$  происходит рост кристалла, однако полученные результаты заметно отличаются от результатов устойчивого расчета. Отметим, что из-за понижения температуры на фронте кристаллизации в момент времени  $t \approx 60t_D$  расчет с  $\tau = 0.01t_D$  снова теряет устойчивость, и описанный выше процесс повторяется.

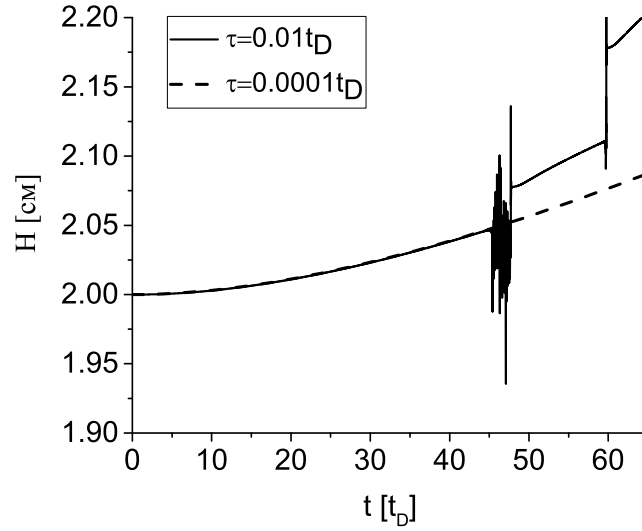


Рис. 2.4. Зависимость толщины твердой фазы от времени. Расчеты с помощью *Метода 1*.

Случай  $D^{lq} = 5 \cdot 10^{-3} \text{ см}^2/\text{с}$ . Задачу не удастся решить с помощью *Метода 1*. На рисунке 2.5 приведены зависимости параметра  $S_1$  от величины шага по времени для различных температур на фронте кристаллизации. Из рисунка видно, что при любом значении  $\tau$  (шаг  $\tau$  дробился до  $10^{-10}t_D$ ) в начальный момент времени (изотерма  $T = 100$ ) параметры задачи располагаются в области неустойчивости *Метода 1* ( $S_1 > 2.5$ ). Поэтому, соответствующий итерационный процесс расходится уже на первых шагах расчета.

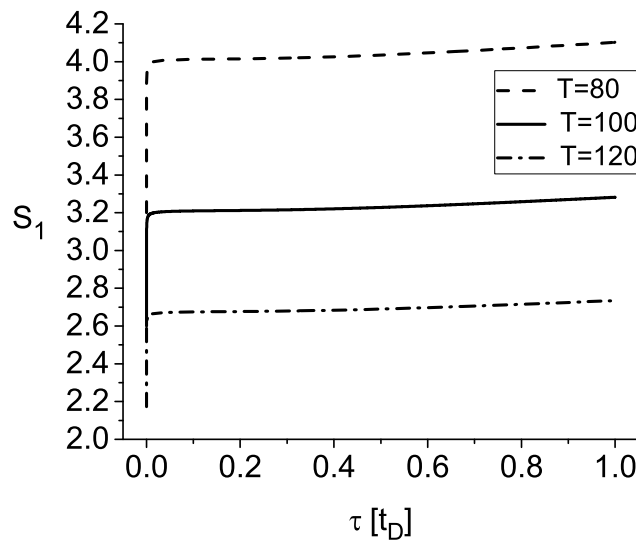


Рис. 2.5. Зависимости параметра  $S_1$  от величины шага по времени  $\tau$  для различных значений температуры на фронте ( $D^{lq} = 5 \cdot 10^{-3} [\text{см}^2/\text{с}]$ ).

**Метод 2.** Решим задачу о росте кристалла с помощью *Метода 2*. Область сходимости этого метода определяется соотношением  $I < -1/d$  и совпадает с областью, в которой *Метода 1* расходится.

Случай  $D^{lq} = 5 \cdot 10^{-5} \text{ см}^2/\text{с}$ . В данном случае решить задачу о росте кристалла с помощью *Метода 2* не удастся. На рисунке 2.6, а для различных температур на фронте кристаллизации приведены зависимости параметра  $\mathcal{S}_2$  от величины шага по времени. Из рисунка видно, что при любом значении  $\tau$  в начальный момент времени параметры задачи располагаются в области неустойчивости *Метода 2* ( $\mathcal{S}_2 > 3$ ). Поэтому итерационный процесс, соответствующий *Методу 2* расходится уже на первых шагах расчета.

Случай  $D^{lq} = 5 \cdot 10^{-4} \text{ см}^2/\text{с}$ . Начальные данные находятся в области сходимости *Метода 2* при  $\tau = 1t_D$  (рис. 2.6, б, изотерма  $T = 100$ ). Понижение температуры приводит к уменьшению параметра  $\mathcal{S}_2$ , а значит, в силу оценки (2.35), не приводит к потере устойчивости этого алгоритма (рис. 2.6, б, изотерма  $T = 80$ ). При этом результаты расчетов, совпадают с результатами, полученными с помощью *Метода 1* с шагом  $\tau = 0.0001t_D$ .

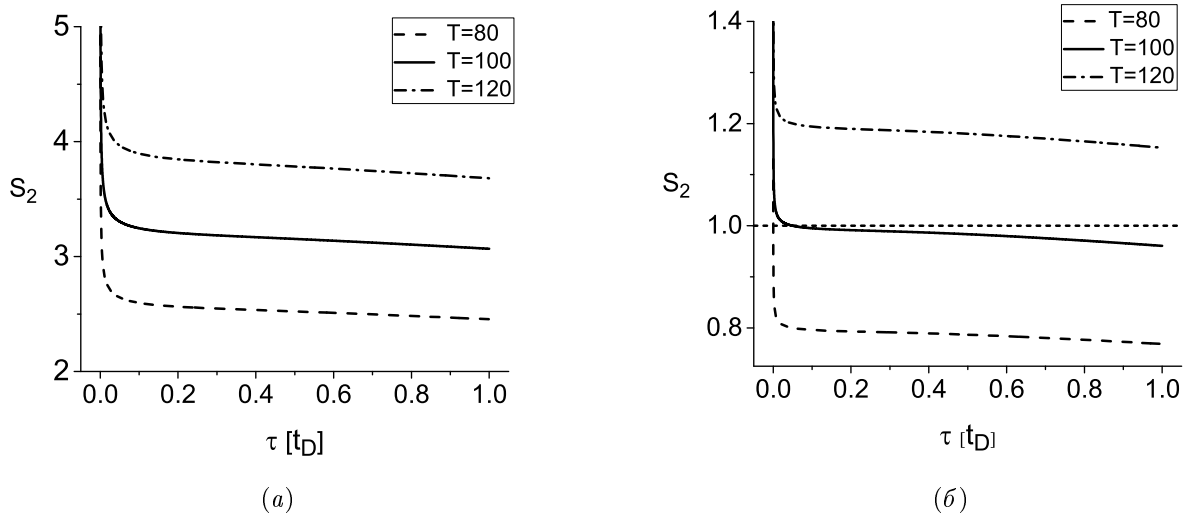


Рис. 2.6. Зависимость параметра  $\mathcal{S}_2$  от величины шага по времени  $\tau$  для различных значений температуры на фронте: (а)  $D^{lq} = 5 \cdot 10^{-5} \text{ см}^2/\text{с}$ ; (б)  $D^{lq} = 5 \cdot 10^{-4} \text{ см}^2/\text{с}$ .

Случай  $D^{lq} = 5 \cdot 10^{-3} \text{ см}^2/\text{с}$ . Параметр  $\mathcal{S}_2 < 1$  при  $\tau = 1t_D$  и *Метод 2* устойчив на протяжении всего расчета (см. рис. 2.5,  $\mathcal{S}_2 = 1/\mathcal{S}_1$ ).



**Пример 2.** Рассмотрим режим, при котором происходит растворение твердой фазы. Пусть внешние границы области нагреваются со скоростью  $\mu = 0.1\text{K}/\text{мин}$  на 20 К (остальные параметры такие же, как и в *Примере 1*). В этом случае из-за повышения температуры на фронте кристаллизации раствор становится недосыщенным, происходит растворение твердой фазы.

**Метод 1.** Результаты расчетов показывают, что в случае  $D^{\text{лq}} = 5 \cdot 10^{-5}\text{см}^2/\text{с}$  и  $D^{\text{лq}} = 5 \cdot 10^{-4}\text{см}^2/\text{с}$  *Метод 1* позволяет моделировать растворение кристалла с шагом по времени  $\tau = 1t_D$ . Распределения состава жидкой и твердой фазы в различные моменты времени для  $D^{\text{лq}} = 5 \cdot 10^{-5}\text{см}^2/\text{с}$  приведены на рисунке 2.7. В случае  $D^{\text{лq}} = 5 \cdot 10^{-3}\text{см}^2/\text{с}$  решить рассмотренную задачу с помощью *Метода 1* не удастся (см. рис. 2.5).

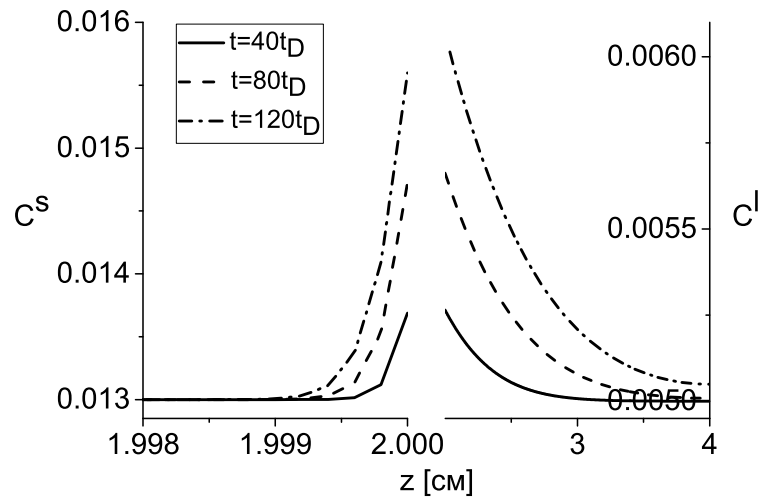


Рис. 2.7. Состав твердой и жидкой фазы на различные моменты времени. Расчет с помощью *Метода 1* ( $D^{\text{лq}} = 5 \cdot 10^{-5}\text{см}^2/\text{с}$ ,  $\tau = 1t_D$ ).

**Метод 2.** В случае  $D^{\text{лq}} = 5 \cdot 10^{-5}\text{см}^2/\text{с}$  и  $D^{\text{лq}} = 5 \cdot 10^{-4}\text{см}^2/\text{с}$  задачу о растворении кристалла не удастся решить с помощью *Метода 2*, так как соответствующий итерационный процесс расходится (см. рис. 2.6, изотерма  $T = 120$ ). Однако для  $D^{\text{лq}} = 5 \cdot 10^{-3}\text{см}^2/\text{с}$  *Метод 2* позволяет рассчитывать растворение твердой фазы с шагом  $\tau = 1t_D$ .

**Последовательные алгоритмы. Область применимости.** Выводы о сходимости *Методов 1* и *2*, полученные в *Примерах 1* и *2* обобщены на рис. 2.8:

- В случае  $D^{lq} = 5 \cdot 10^{-5} \text{см}^2/\text{с}$ , в рассмотренном диапазоне температур *Метод 2* расходится при любом значении шага  $\tau$ . При этом *Метод 1* позволяет моделировать как рост, так и растворение кристалла с крупным шагом по времени.
- При  $D^{lq} = 5 \cdot 10^{-4} \text{см}^2/\text{с}$ , *Метод 1* сходится только в случае моделирования растворения твердой фазы, а *Метода 2* сходится только при моделировании роста кристалла.
- В случае  $D^{lq} = 5 \cdot 10^{-3} \text{см}^2/\text{с}$ , в рассмотренном диапазоне температур *Метод 1* расходится при любом значении шага  $\tau$ . При этом *Метод 2* позволяет моделировать как рост, так и растворение кристалла с крупным шагом по времени.

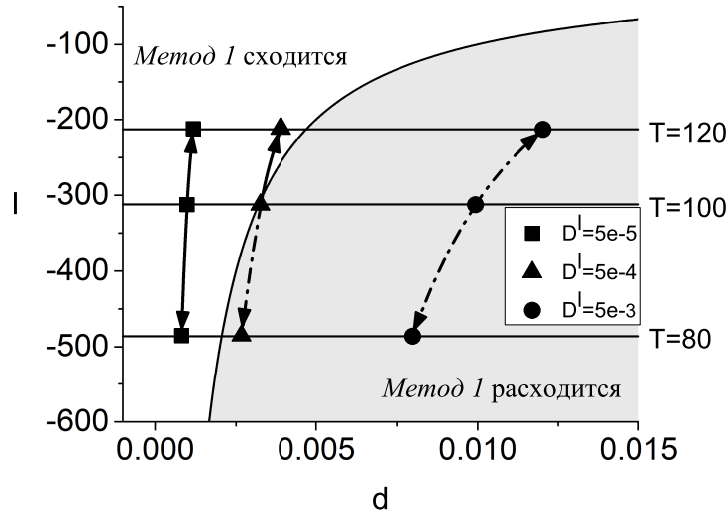


Рис. 2.8. Траектория движения точки  $P(t)$  относительно границы области сходимости *Метода 1* для различных значений коэффициента диффузии  $D^{lq}$  при  $\tau = 1t_D$  (Сплошная линия — расчет по методу 1, штрих-пунктирная линия — расчет по методу 2).

Результаты расчетов показывают, что каждый из *Методов 1* и *2* имеет свою область применимости, которая определяется физическими свойствами рассматриваемых веществ, а также параметрами технологического режима. В рассмотренных численных экспериментах параметры фазовой диаграммы были

постоянными. Однако в реальности угол наклона линии ликвидуса  $A_l$  и коэффициент сегрегации  $K$  зависят от температуры и могут значительно изменяться в ходе процесса кристаллизации. Данное обстоятельство существенным образом влияет на сходимость рассмотренных итерационных методов — существуют вещества, для которых последовательный алгоритм оказывается неустойчивым при любых значениях шага по времени. Для изучения реальных технологических процессов необходимы алгоритмы, позволяющие в широком диапазоне физических параметров с одинаковой надежностью моделировать процессы роста и растворения для веществ со сложными нелинейными фазовыми диаграммами. С этой точки зрения ни один из методов типа 1–4 не может быть рекомендован для изучения промышленных режимов выращивания.

**Совместный алгоритм. Область применимости.** Задачи, рассмотренные в *Примерах 1 и 2*, были решены с помощью совместного алгоритма. Расчеты показали, что *Метод 5* устойчив при  $\tau = 1t_D$ , как в случае роста кристалла, так и при растворении твердой фазы для всех рассмотренных значений  $D^l$ . Поэтому, несмотря на большую, по сравнению с *Методами 1 – 4*, вычислительную сложность, совместный алгоритм является более надежным и гибким инструментом исследования процессов кристаллизации.

Основываясь на полученных в данном разделе выводах, систему нелинейных сеточных уравнений (1.100)–(1.103) будем решать совместно с помощью метода Ньютона относительно вектора неизвестных, компонентами которого являются концентрация  $A$  в твердой и жидкой фазах, температура во всей расчетной области и скорость движения фронта.

## 2.2. Численное решение сеточных уравнений

### Навье — Стокса

Рассмотренный совместный алгоритм решения сеточных уравнений тепло- и массопереноса обладает значительным запасом устойчивости в широком диа-

пазоне физических параметров. Поэтому для решения сеточных уравнений Навье — Стокса необходимо использовать алгоритмы, которые при разумных вычислительных затратах позволяют с крупным шагом по времени на подробных пространственных сетках рассчитывать течения различной интенсивности.

В данной работе используется следующий численный алгоритм решения сеточных уравнений (1.97)–(1.99). Для линеаризации уравнения переноса завихренности (1.97) функция тока в конвективных членах берется с нижнего временного слоя, объемная сила  $\mathcal{F}_h^{(\xi,\eta)}$  вычисляется по значениям температуры и концентрации, полученным на предыдущем шаге по времени. Для повышения устойчивости вычислительного алгоритма в уравнениях (1.98), связывающих значения функции тока и завихренности во внутренних точках области и на границе жидкой фазы, все неизвестные отнесены к верхнему временному слою. Система уравнений (1.97)–(1.99) решается совместно относительно вектора неизвестных, компонентами которого являются функция тока и завихренность. В работах [96; 97] показано, что рассмотренный алгоритм решения уравнений Навье — Стокса является практически безусловно устойчивым.

В работе [98] показано, что для выполнения дискретного аналога закона сохранения кинетической энергии все неизвестные в уравнении переноса завихренности должны быть отнесены к промежуточному временному слою  $t_{k+1/2}$ , т.е.  $f_{ij}^{k+1/2} = 0.5[f_{ij}^{k+1} + f_{ij}^k]$ . Однако известно [99], что использование схем типа Кранка — Николсон может приводить к получению нефизичных осциллирующих решений в областях, в которых велики градиенты искомых функций. Вычислительные эксперименты [7] показывают, что во избежании возникновения осцилляций, расчеты по симметричной схеме необходимо проводить с шагом как правило меньшим, чем шаг, обеспечивающий устойчивость расчетов по предложенной неявной схеме.

## 2.3. Методы решения систем линейных алгебраических уравнений

Дискретный аналог уравнений Навье — Стокса (1.97)–(1.99) запишем в виде

$$A^{\text{NS}}x^{\text{NS}} = f^{\text{NS}}. \quad (2.43)$$

Для сеточных уравнений (1.100)–(1.103), описывающих тепло- и массоперенос в ростовой камере, на каждой итерации метода Ньютона имеем

$$A^{\text{TC}}x^{\text{TC}} = f^{\text{TC}}. \quad (2.44)$$

Здесь  $A^\alpha \in \mathbb{R}^{N_\alpha} \times \mathbb{R}^{N_\alpha}$ ;  $x^\alpha, f^\alpha \in \mathbb{R}^{N_\alpha}$ ,  $N_\alpha$  — размерность соответствующей задачи,  $\alpha = \text{NS}, \text{TC}$ . Так как рассматриваемая задача является нелинейной, значения ненулевых элементов матриц  $A^{\text{NS}}$ ,  $A^{\text{TC}}$  изменяются с течением времени. Матрицы  $A^{\text{NS}}$ ,  $A^{\text{TC}}$  не являются симметричными и положительно определенными, для них не выполняется свойство диагонального преобладания. Эти обстоятельства значительно сужают круг методов решения уравнений (2.43), (2.44). В данной работе для решения разреженных систем линейных алгебраических уравнений (2.43), (2.44) применяется прямой метод.

Вопрос эффективности применения итерационных методов решения СЛАУ рассматривался в работе [8]. В качестве итерационных решателей использовались предобусловленные методы GMRES (обобщенный метод минимальных невязок) с рестартами [100; 101] и BiCGStab (стабилизированный метод бисопряженных градиентов) [100; 101], реализованные в открытой библиотеке PETSc [102–104].

Известно, что дискретная система уравнений Навье — Стокса является плохо обусловленной на подробных сетках. Расчеты показали (см. [8]), что применение к системе (2.43) широко распространенного блочного диагонального предобуславливателя с неполным разложением каждого из блоков не позволяет получать надежные результаты с помощью итерационных методов GMRES и

BiCGStab. Однако при моделировании некоторых режимов выращивания применение в качестве предобуславливателя аддитивного метода Шварца в сочетании с итерационным методом GMRES позволяет ускорить расчет в 2.5 – 5 раз, по сравнению со случаем, когда система линейных алгебраических уравнений решается прямым методом.

Построение эффективного предобуславливателя для системы (2.43), позволяющего для широкого круга веществ получать надежные результаты, является отдельной задачей, которая не рассматривается в рамках диссертационной работы. Поэтому для повышения надежности численного метода в расчетах, приведенных в работе, используется прямой метод решения СЛАУ. В качестве прямого метода применяется решатель PARDISO 7 из библиотеки PARDISO 7.2 solver project [105–107].

## 2.4. Результаты численного моделирования

Продemonстрируем возможности построенного вычислительного метода (используется разностная схема (1.97)–(1.103), сеточные уравнения решаются с помощью совместного алгоритма, соответствующие системы линейных алгебраических уравнений обращаются с помощью прямого метода). Для этого проведем численное моделирование процесса выращивания двухкомпонентного соединения  $A_xB_{1-x}$  с линейной фазовой диаграммой

$$T = \alpha x_{\text{eq}}^{\text{li}}, \quad x_{\text{eq}}^{\text{cr}} = k_{\text{seg}} x_{\text{eq}}^{\text{li}}.$$

(Здесь и далее используются обозначения и обезразмеривание приведенные в Главе 1).

Распределение температуры на боковой поверхности ампулы имеет вид

$$T_{\text{wall}}^{\text{d}}(t, z) = \begin{cases} T_{\text{bot}}^{\text{d}}, & z \in [Z_0, z_{\text{g}}^{\text{bot}}(t)), \\ T_{\text{bot}}^{\text{d}} + \frac{T_{\text{top}}^{\text{d}} - T_{\text{bot}}^{\text{d}}}{L_{\text{g}}} z, & z \in [z_{\text{g}}^{\text{bot}}(t), z_{\text{g}}^{\text{top}}(t)], \\ T_{\text{top}}^{\text{d}}, & z \in [z_{\text{g}}^{\text{top}}(t), Z_4), \end{cases}$$

Здесь  $z_{\text{g}}^{\text{top}}(t) = z_{\text{g}}^{\text{top}}(0) + V_{\text{g}}^{\text{d}} \cdot t$ ,  $z_{\text{g}}^{\text{bot}}(t)$  определяется аналогичным образом,  $L_{\text{g}} = z_{\text{g}}^{\text{top}}(0) - z_{\text{g}}^{\text{bot}}(0)$  — длина градиентной зоны (см. рис. 2.9). Начальное распределение температуры в области  $T(0, r, z) = T_{\text{wall}}(0, z)$ ,  $T_{\text{top}}^{\text{d}} = 1138$  К,  $T_{\text{bot}}^{\text{d}} = 738$  К, скорость протяжки ампулы  $V_{\text{g}}^{\text{d}} = 9.5$  см/сутки. Температура на фронте кристаллизации в начальный момент времени  $T \approx 1058$  К  $< T_{\text{eq}}^{\text{d}} = 1073$  К (раствор пересыщен). Содержание компонента  $A$  в затравке  $x^{\text{cr}} = 0.52$ , содержание компонента  $A$  в растворе  $x^{\text{li}} = 0.2$ .

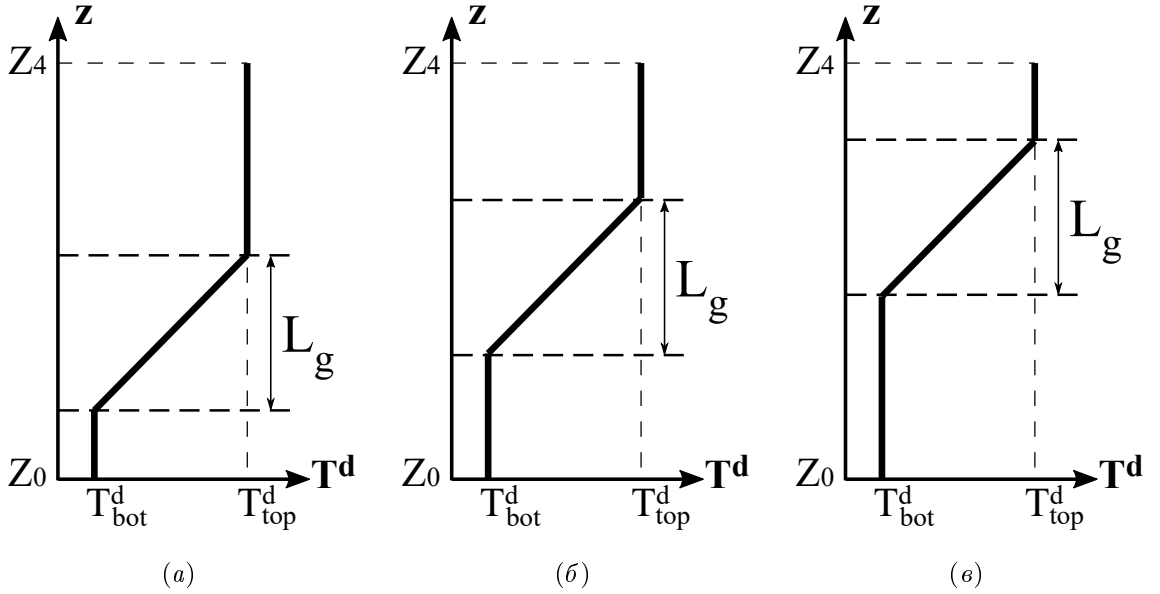


Рис. 2.9. Распределение температуры на боковой поверхности ампулы в различные моменты времени  $t_1 < t_2 < t_3$ .

Геометрические параметры ростовой камеры приведены в приложении Б в таблице Б.1, значения параметров задачи указаны в таблицах Б.2 и Б.3. Физические параметры ампулы, фаз и печи заимствованы из работ [42; 95].

В расчетах используется равномерная в радиальном направлении сетка: число узлов внутри ампулы равно 25, внутри боковой стенки — 25. Сетка в вер-

тикальном направлении равномерна внутри торцов ампулы (20 узлов в каждом) и сгущается к фронту кристаллизации внутри ампулы (250 узлов в каждой из фаз). Шаг по времени  $\tau = 0.005t_\nu \approx 60$  сек,  $t_\nu = R_{\text{in}}^2/\nu$ .

На начальном этапе процесса тепловое поле в установке перестраивается (рис. 2.10), так как ампула, раствор и кристалл имеют различные коэффициенты температуропроводности. Вблизи фронта кристаллизации в центре ампулы раствор становится недосыщенным, а у боковой стенки — пересыщенным. В результате на ранней стадии процесса в центре ростовой камеры затравка растворяется, а у стенки начинается процесс кристаллизации.

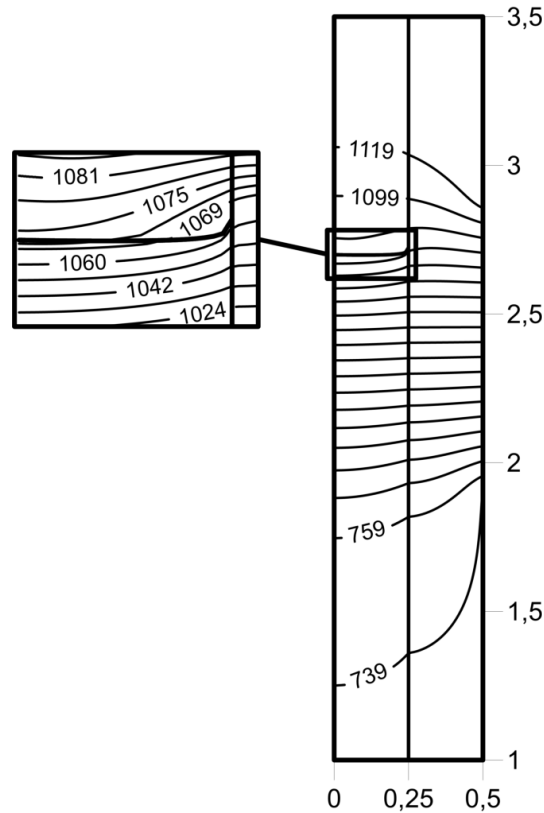


Рис. 2.10. Распределение температуры в области при  $t = 1t_\nu$ .

Предложенный совместный вычислительный алгоритм позволяет получать физически обоснованные результаты даже в случае когда начальные составы не удовлетворяют условиям фазового равновесия; при этом не требуется проводить специальное согласование начальных данных, о котором, например, упоминается в работах [108; 109]. На рисунке 2.11 представлены распределения составов твердой и жидкой фазы на оси ампулы. На ранней стадии растворения



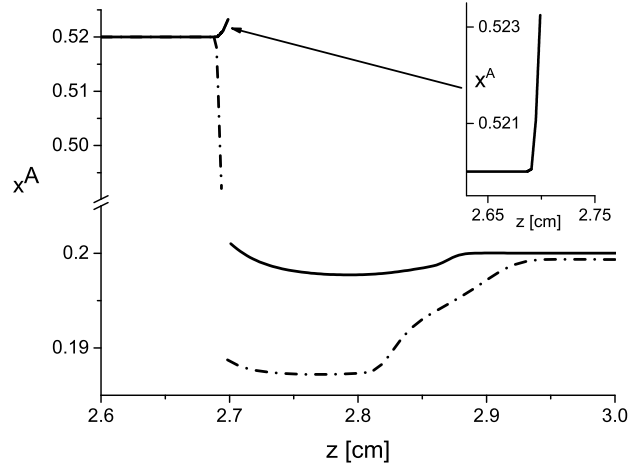


Рис. 2.11. Распределение концентрации компонента  $A$  в твердой и жидкой фазах вдоль оси ампулы в моменты  $t = 0.5t_v$  (сплошная линия) и  $t = 5t_v$  (штрих-пунктирная линия).

( $t = 0.5t_v$ ) в твердой фазе в окрестности фронта кристаллизации формируется тонкий диффузионный слой, содержание компонента  $A$  в затравке увеличивается в соответствии с фазовой диаграммой системы [110]. Перемещение ампулы в печи приводит к тому, что температура на фронте понижается (рис. 2.11,  $t = 5t_v$ ), и при  $t \approx 12t_v$  растворение в центре сменяется ростом кристалла.

В установке образуется радиальный температурный градиент, который приводит к возникновению конвективного движения в растворе. На начальном этапе процесса течение состоит из двух тороидальных валов (рис. 2.12, *a*). Нижний вал вращается таким образом, что раствор поднимается в центре ампулы и опускается вдоль ее боковой стенки, верхний вал вращается в противоположном направлении. Возникновение нижнего вала обусловлено не только радиальным температурным градиентом, но и поступлением более легкого компонента  $A$  в жидкую фазу при растворении затравки. На этапе роста кристалла, в окрестности границы раздела фаз образуется стабилизирующий концентрационный градиент, и нижний конвективный вал затухает ( $t \approx 15t_v$ ). Постоянное уменьшение концентрации компонента  $A$  в растворе приводит к тому, что интенсивность конвективного переноса уменьшается (рис. 2.12, *б*). При  $t \approx 65t_v$  течение в растворе перестраивается, верхний конвективный вал также затухает [41; 95].

Структура течения на развитом этапе процесса приведена на рисунке 2.12, в.

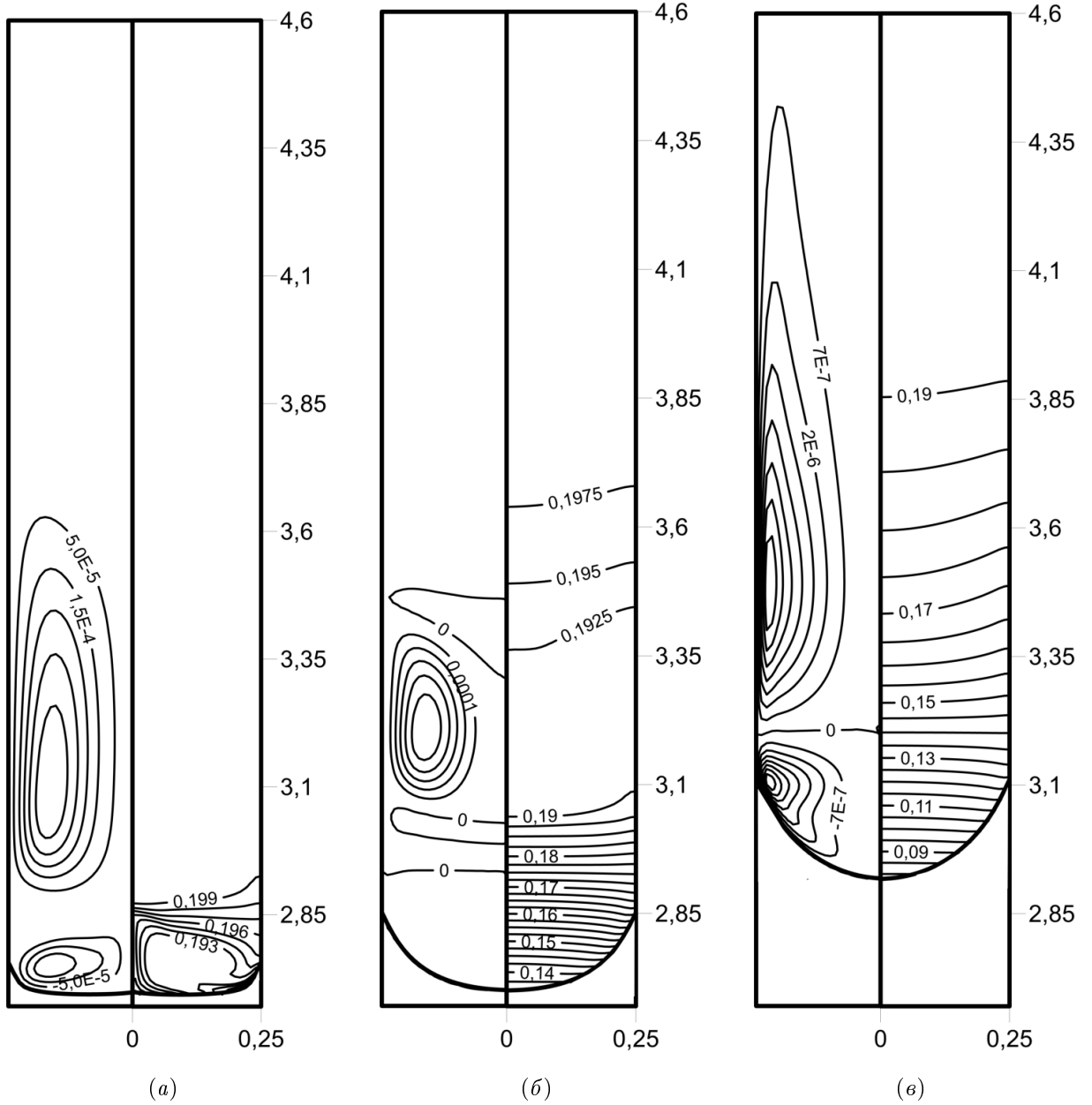


Рис. 2.12. Распределение функции тока [ $\text{см}^3/\text{сек}$ ] (слева) и содержание компонента в  $A$  растворе [мольная доля] (справа) в различные моменты времени: (а)  $t = 2.5t_\nu$  ( $\psi_{\min} = -2 \cdot 10^{-4}$ ,  $\psi_{\max} = 5.4 \cdot 10^{-4}$ ); (б)  $t = 25t_\nu$  ( $\psi_{\min} = -10^{-5}$ ,  $\psi_{\max} = 5.9 \cdot 10^{-4}$ ); (в)  $t = 75t_\nu$  ( $\psi_{\min} = -5.7 \cdot 10^{-6}$ ,  $\psi_{\max} = 5.8 \cdot 10^{-6}$ ).

Положения фронта кристаллизации в различные моменты времени приведены на рисунке 2.13. Известно, что средняя скорость движения границы раздела фаз стремится к скорости протяжки [95], данный факт подтверждается расчетами. Падение скорости движения фронта на интервале времени  $65t_\nu < t < 70t_\nu$  связано с ослаблением влияния конвекции на процесс кристаллизации

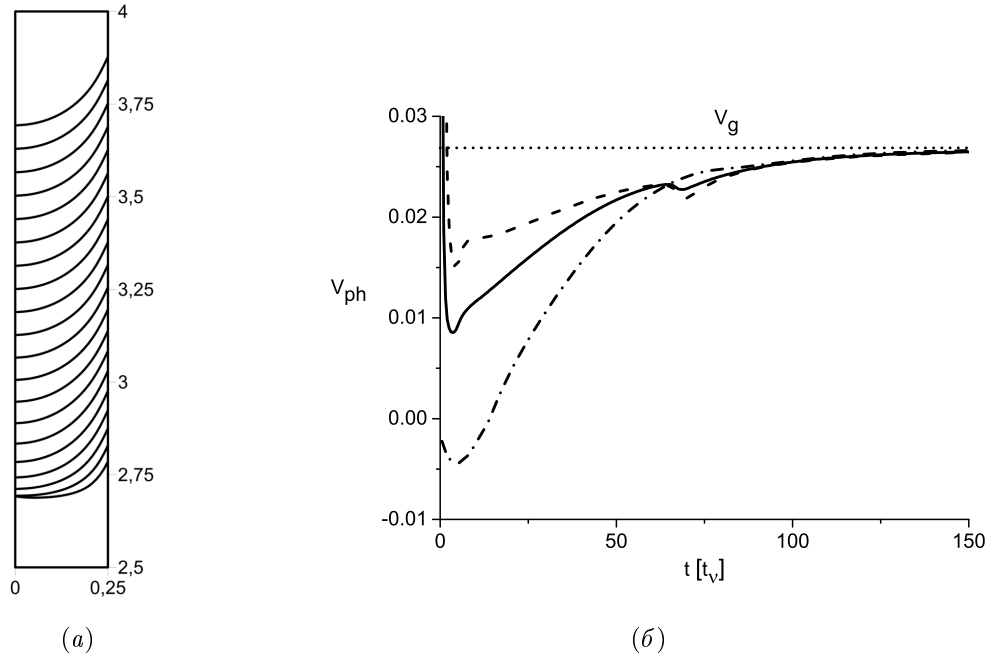


Рис. 2.13. (а) Положение фронта кристаллизации в различные моменты времени (контуры приведены для  $10t_\nu \leq t \leq 200t_\nu$  с шагом  $10t_\nu$ ). (б) Зависимость от времени безразмерной скорости фронта при  $r = 0$  (штрих-пунктирная линия), при  $r = R_{in}$  (штриховая линия), и средней скорости фронта (сплошная линия).

и переходом к росту в диффузионном режиме [37; 38].

Содержание компонента А в кристалле в различные моменты времени приведено на рисунке 2.14. При  $t = 60t_\nu$  перепад температуры вдоль фронта кристаллизации составляет более 30 К, распределение состава является неоднородным:  $x_{eq}^{cr}|_{r=R_{in}} - x_{eq}^{cr}|_{r=0} = 0.125$  мольной доли. На поздних этапах процесса при  $t > 100t_\nu$  фронт кристаллизации движется практически с постоянной скоростью, равной скорости протяжки, поэтому распределения температуры и концентрации на фронте с течением времени изменяются незначительно. Таким образом градиент состава по высоте кристалла практически отсутствует, изолинии концентрации близки к вертикальным (Рис. 4.19, а).

В рамках численного эксперимента на каждом шаге по времени осуществлялся контроль выполнения сеточных аналогов законов сохранения. Расчеты показывают, что разностный аналог закона сохранения завихренности выпол-

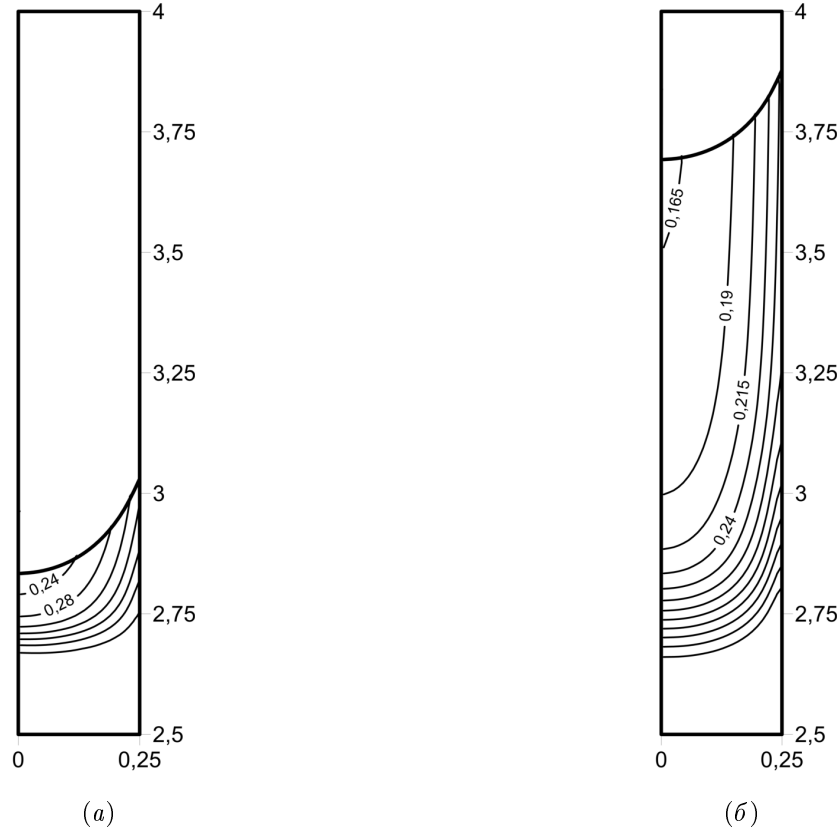


Рис. 2.14. Содержание компонента А в кристалле [мольная доля] в моменты времени (а)  $t = 60t_\nu$ , (б)  $t = 200t_\nu$ .

няется с высокой точностью:

$$\left| \sum_{(i,j) \in (\bar{I}_{lq} \times \bar{J}_{lq})} \omega_{ij} l_{ij} dS_{ij}^{(\xi, \eta)} + \sum_{j \in \bar{J}_{lq}} (V^z l)_{1/2j} \hbar_j^\eta \right| \sim 10^{-12}.$$

Вклад конвективного переноса в балансы теплоты, массы и кинетической энергии на протяжении всего процесса остается на уровне машинной погрешности:

$$\sum_{(i,j) \in (\bar{I}_f \times \bar{J}_f)} \frac{1}{\xi_i} \mathcal{K}_h^{(\xi, \eta)}(f_{ij}, \psi_{ij}) f_{ij}^\gamma dS_{ij}^{(\xi, \eta)} \sim 10^{-15}, \quad f = T, C, \quad \gamma = 0, 1,$$

$$\sum_{(i,j) \in (\bar{I}_{lq} \times \bar{J}_{lq})} \frac{1}{\xi_i} \mathcal{K}_h^{(\xi, \eta)}(\omega_{ij}, \psi_{ij}) \psi_{ij} dS_{ij}^{(\xi, \eta)} \sim 10^{-15}.$$

В системе выполняется закон сохранения «массы» для компонента А, т.е.

$$m(t) = m(0), \quad m(t) = \int_{\Omega^{\text{cr}}(t)} C^{\text{cr}}(t, r, z) d\Omega + \int_{\Omega^{\text{lq}}(t)} C^{\text{lq}}(t, r, z) d\Omega.$$

Расчеты показывают, что за  $200t_\nu$  система теряет менее 0.0001 % от начальной «массы».

Для того, чтобы подтвердить достоверность полученных результатов рассмотренный численный эксперимент был повторен на двух более подробных сетках: число узлов в каждом направлении увеличивалось в 2 и 4 раза, соответственно. Было проведено сравнение зависимостей интегральных характеристик процесса, полученных в ходе расчета, от времени (сравнивались внутренняя и кинетическая энергия, общая «масса» компонента А, «масса» твердой и жидкой фаз, средняя скорость фронта, положение границы раздела, среднее содержание компонента А на границы раздела фаз). Численные эксперименты показали, что проведение расчетов на самой подробной сетке позволяет уточнить получаемые результаты менее чем на 1%. Моделирование проводилось на персональном компьютере. Длительность процесса кристаллизации составляла  $200t_v \approx 3,5$  часа, на базовой сетке результаты расчетов были получены менее чем за 30 минут.

В работе [11] вычислительный алгоритм, предложенный в Главах 1 и 2, применялся для исследования процесса получения чистого вещества в присутствии примеси методом вертикальной направленной кристаллизации. Проведено сопоставление результатов расчетов с аналитическими решениями одномерных задач о росте кристалла в диффузионном режиме [111] и в условиях полного перемешивания раствора [112; 113]. Указаны диапазоны параметров (скорость протяжки, радиус ампулы, сила тяжести), при которых соответствующие аналитические решения применимы для изучения реальных технологических процессов.

## Глава 3

# Построение разностных схем для решения задачи Стефана эквивалентных на подвижной и фиксированной сетках

Для решения задачи о фазовом переходе в Главе 1 применяется метод выпрямления фронта. Разностная схема построена на неподвижной прямоугольной сетке в специальной системе координат, положение фронта в которой фиксировано. При этом широкое распространение имеет подход, в рамках которого разностные схемы для задачи о фазовом переходе строятся в физической системе координат на подвижных сетках, согласованных с формой границы раздела. На дифференциальном уровне задачи в физической и расчетной системах координат эквиваленты и переходят друг в друга с помощью замены переменных типа Ландау. В данной главе рассматривается вопрос о наличии аналогичного соответствия на разностном уровне. Для удобства изложение ведется на примере задачи о фазовом переходе в чистом веществе в прямоугольной области. Однако полученные в данном разделе результаты очевидным образом можно обобщить на случай процесса кристаллизации многокомпонентного соединения.

## 3.1. Математическая модель

Задача о фазовом переходе в чистом веществе рассматривается в рамках следующих предположений. Как и ранее твёрдая и жидкая фазы имеют одинаковую плотность и удельную теплоемкость, но различные коэффициенты теплопроводности. Расплавленный материал является вязкой несжимаемой жидкостью. Моделирование осуществляется в декартовой системе координат в области  $\Omega(t, x, y) = [0, H_1] \times [0, H_2]$ . В подобласти  $\Omega^1(t, x, y) = [0, H_1] \times [0, \zeta(t, x)]$  находится твердая фаза, в подобласти  $\Omega^2(t, x, y) = [0, H_1] \times [\zeta(t, x), H_2]$  распо-

лагается жидкая фаза. Здесь  $y = \zeta(t, x)$  — граница раздела фаз, положение которой изменятся в ходе процесса (рис. 3.1).

Уравнения, описывающие эволюцию системы, записываются в безразмерном виде. В качестве пространственного масштаба используется высота области  $H_2$ , временной масштаб  $t_\nu = H_2^2/\nu$ . Безразмерная температура определяется соотношением  $T = (T^d - T_{\text{melt}}^d)/\Delta T^d$ ,  $T_{\text{melt}}^d$  — температура плавления чистого вещества,  $\Delta T^d = T_{\text{top}}^d - T_{\text{bot}}^d$  — характерный перепад температуры в ампуле.

Движение жидкости описывается уравнениями Навье–Стокса, записанными в переменных «функция тока – завихренность»:

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \mathcal{K}^{(x,y)}(\omega, \psi) = \mathcal{D}^{(x,y)}(\omega) + \text{Gr}_T \frac{\partial T}{\partial x}, \quad (3.1)$$

$$-\omega = \mathcal{D}^{(x,y)}(\psi), \quad (3.2)$$

$$V^x = \frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad V^y = -\frac{\partial \psi}{\partial x}, \quad (3.3)$$

уравнение конвективного теплопереноса в декартовой системе координат имеет вид

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathcal{K}^{(x,y)}(T, \psi) = \mathcal{D}^{(x,y)}(T). \quad (3.4)$$

Здесь  $\mathcal{K}^{(x,y)}$  — конвективные члены:

$$\mathcal{K}^{(x,y)}(f, \psi) = \frac{\partial}{\partial x} \mathcal{H}^x + \frac{\partial}{\partial y} \mathcal{H}^y, \quad f = \omega, T, \quad (3.5)$$

где конвективный поток  $\mathcal{H}^{(x,y)} = (\mathcal{H}^x, \mathcal{H}^y)$  выражается формулами

$$\mathcal{H}^x(f) = V^x f = \frac{\partial \psi}{\partial y} f, \quad \mathcal{H}^y(f) = V^y f = -\frac{\partial \psi}{\partial x} f; \quad (3.6)$$

$\mathcal{D}^{(x,y)}$  — диссипативные члены:

$$\mathcal{D}^{(x,y)}(f) = \frac{\partial}{\partial x} \mathcal{W}^x + \frac{\partial}{\partial y} \mathcal{W}^y, \quad f = \omega, \psi, T; \quad (3.7)$$

диссипативный поток  $\mathcal{W}^{(x,y)} = (\mathcal{W}^x, \mathcal{W}^y)$ :

$$\mathcal{W}^x(f) = \varkappa \frac{\partial f}{\partial x}, \quad \mathcal{W}^y(f) = \varkappa \frac{\partial f}{\partial y}. \quad (3.8)$$

Распределение температуры в твердой фазе описывается уравнением теплопроводности

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \mathcal{D}^{(x,y)}(T). \quad (3.9)$$

На межфазной границе температура равна температуре плавления чистого вещества

$$T|_{y=\zeta(t,x)} = 0, \quad (3.10)$$

и выполняется закон сохранения энергии (условие Стефана):

$$\frac{1}{\text{Pr}} \llbracket (\mathbf{k} \nabla T \cdot \mathbf{N}) \rrbracket = \text{St} v^{\text{ph}}(\mathbf{e}_y \cdot \mathbf{N}). \quad (3.11)$$

Здесь  $v^{\text{ph}} = v^{\text{ph}}(t, x) = \partial \zeta / \partial t$  — скорость движения границы раздела фаз,  $\nabla = (\partial_x, \partial_y)$ ,  $\mathbf{e}_y$  — единичный вектор в направлении оси  $y$ .

На горизонтальных границах области  $\Omega$  задана температура

$$T|_{\partial\Omega} = T_b, \quad (3.12)$$

а вертикальные границы теплоизолированы

$$\mathbf{k} \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=0, H_1} = 0. \quad (3.13)$$

Граничные условия для функции тока на стенках ростовой камеры и фронте имеют вид

$$\psi = 0, \quad \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{n}} = 0. \quad (3.14)$$

Построим консервативные разностные схемы для задачи (3.1)–(3.14) на фиксированной сетке и подвижной сетке, согласованной с формой границы раздела фаз.

## 3.2. Метод выпрямления фронта

Для решения задачи с внутренней подвижной границей, как и ранее в Главе 1, воспользуемся методом выпрямления фронта. Такой подход позволя-



ет построить вычислительную схему на неподвижной прямоугольной сетке в расчетной системе координат.

### 3.2.1. Преобразование системы координат

Используется замена переменных, при которой области  $\Omega^m, m = 1, 2$ , в новой системе координат становятся прямоугольниками (рис. 3.1), а границы областей  $y = Y_0 = 0$ ,  $y = Y_1 = \zeta(t, x)$ ,  $y = Y_2 = H_2$  переходят в прямые  $\eta = 0$ ,  $\eta = 1$ ,  $\eta = 2$ , соответственно. Связь между системами координат имеет вид

$$\tilde{t} = t, \quad \xi = x, \quad \eta = (y - Y_{m-1})/l^m + (m - 1), \quad m = 1, 2, \quad (3.15)$$

где  $l^m = l^m(t, \xi) = Y_m - Y_{m-1}$  — толщина зоны  $\Omega^m$ .

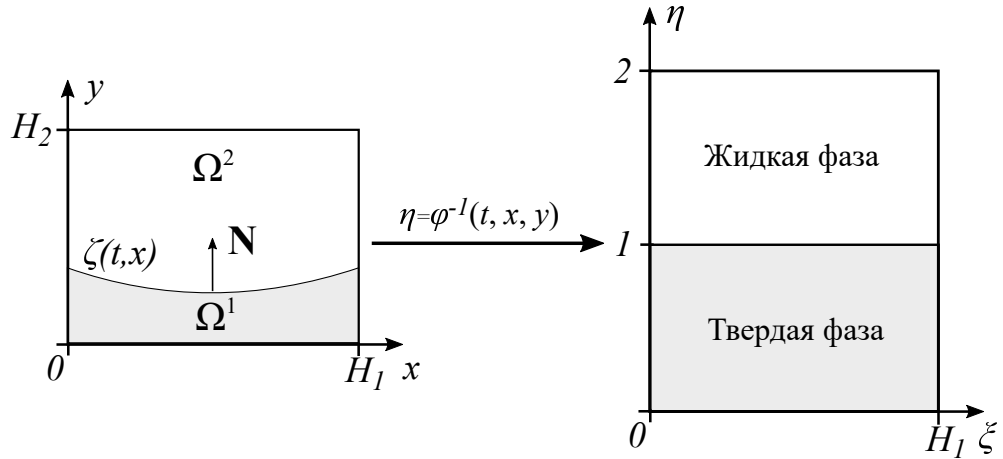


Рис. 3.1. Преобразование системы координат.

Для вычисления метрических коэффициентов  $\partial\eta/\partial t$ ,  $\partial\eta/\partial x$ ,  $\partial\eta/\partial y$  воспользуемся обратным преобразованием координат.

$$t = \tilde{t}, \quad x = \xi, \quad y = \varphi^m(\tilde{t}, \xi, \eta) = Y_{m-1} + l^m(\eta - m + 1), \quad m = 1, 2. \quad (3.16)$$

Преобразуем дифференциальные операторы в уравнениях (3.1)–(3.9). Для производной по времени получим

$$\mathcal{T}^{(x,y)}(f) = \frac{\partial f}{\partial t} = \frac{1}{l} \left[ \frac{\partial}{\partial \tilde{t}}(lf) - \frac{\partial}{\partial \eta}(\varphi_{\tilde{t}} f) \right] = \frac{1}{l} \mathcal{T}^{(\xi,\eta)}(f). \quad (3.17)$$

Для конвективных членов (3.5) имеем

$$\mathcal{K}^{(x,y)}(f, \psi) = \frac{1}{l} \mathcal{K}^{(\xi,\eta)}(f, \psi), \quad \mathcal{K}^{(\xi,\eta)}(f, \psi) = \frac{\partial}{\partial \xi} \mathcal{H}^\xi + \frac{\partial}{\partial \eta} \mathcal{H}^\eta. \quad (3.18)$$

Конвективный поток  $\mathcal{H}^{(\xi,\eta)} = (\mathcal{H}^\xi, \mathcal{H}^\eta)$  в расчетной области:

$$\mathcal{H}^\xi = \frac{\partial \psi}{\partial \eta} f, \quad \mathcal{H}^\eta = -\frac{\partial \psi}{\partial \xi} f. \quad (3.19)$$

Диссипативные члены (3.7) преобразуются к виду

$$\mathcal{D}^{(x,y)}(f) = \frac{1}{l} \mathcal{D}^{(\xi,\eta)}(f), \quad \mathcal{D}^{(\xi,\eta)}(f) = \frac{\partial}{\partial \xi} \mathcal{W}^\xi + \frac{\partial}{\partial \eta} \mathcal{W}^\eta, \quad (3.20)$$

диссипативный поток  $\mathcal{W}^{(\xi,\eta)} = (\mathcal{W}^\xi, \mathcal{W}^\eta)$  в неподвижной системе координат

$$\mathcal{W}^\xi(f) = \varkappa \left[ L^{\xi\xi} \frac{\partial f}{\partial \xi} + L^{\xi\eta} \frac{\partial f}{\partial \eta} \right], \quad \mathcal{W}^\eta(f) = \varkappa \left[ L^{\eta\xi} \frac{\partial f}{\partial \xi} + L^{\eta\eta} \frac{\partial f}{\partial \eta} \right], \quad (3.21)$$

где коэффициенты  $L^{\xi\xi}$ ,  $L^{\xi\eta}$ ,  $L^{\eta\xi}$ ,  $L^{\eta\eta}$  вычисляются по формулам (1.2.2).

Для объемной силы получим

$$\mathcal{F}^{(x,y)}(T) = \frac{1}{l} \mathcal{F}^{(\xi,\eta)}(T), \quad \mathcal{F}^{(\xi,\eta)}(T) = \text{Gr}_T \left[ \frac{1}{l} \frac{\partial}{\partial \xi} (lT) - \frac{1}{l} \frac{\partial}{\partial \eta} (\varphi_\xi T) \right]. \quad (3.22)$$

Таким образом, уравнения Навье–Стокса в расчетной системе координат принимают вид

$$\frac{1}{l} \mathcal{T}^{(\xi,\eta)}(\omega) + \frac{1}{l} \mathcal{K}^{(\xi,\eta)}(\omega, \psi) = \frac{1}{l} \mathcal{D}^{(\xi,\eta)}(\omega) - \frac{1}{l} \mathcal{F}^{(\xi,\eta)}(T), \quad (3.23)$$

$$-\omega = \frac{1}{l} \mathcal{D}^{(\xi,\eta)}(\psi), \quad (3.24)$$

Для уравнения теплопереноса получим

$$\frac{1}{l} \mathcal{T}^{(\xi,\eta)}(T) + \frac{1}{l} \mathcal{K}^{(\xi,\eta)}(T, \psi) = \frac{1}{l} \mathcal{D}^{(\xi,\eta)}(T). \quad (3.25)$$

Здесь и далее предполагается, что вне жидкой фазы конвективные члены тождественно равны нулю.

Условие Стефана (3.11) записывается следующим образом (см. Глава 1, с. 34)

$$\frac{1}{\text{Pr}} \left[ \left( L^{\eta\xi} \frac{\partial T}{\partial \xi} + L^{\eta\eta} \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) \right] = \text{St} v_{\text{ph}}. \quad (3.26)$$

Граничные условия для температуры и функции тока преобразуются аналогично тому, как это сделано в Главе 1 (см с. 35).

### 3.2.2. Сетка и сеточные функции

В расчетной области  $\Omega(t, \xi, \eta)$  введем прямоугольную сетку  $\omega_h^{(\xi, \eta)} = \omega_h^\xi \times \omega_h^\eta$ , где  $\omega_h^\xi = \{\xi_i, i = \overline{0, M}, \xi_0 = 0, \xi_M = H_1\}$ ,  $\omega_h^\eta = \{\eta_j, j = \overline{0, N}, \eta_0 = 0, \eta_{j^*} = 1, \eta_N = 2\}$ , шаги сетки:  $h_{i+1/2}^\xi = \xi_{i+1} - \xi_i$ ,  $h_{j+1/2}^\eta = \eta_{j+1} - \eta_j$ . Введем также потоковые узлы с координатами:  $\xi_{i+1/2} = (\xi_{i+1} + \xi_i)/2$ ,  $\eta_{j+1/2} = (\eta_{j+1} + \eta_j)/2$ . Расчетную область  $\Omega(t, \xi, \eta)$  разобьем на прямоугольные ячейки  $S_{ij}^{(\xi, \eta)} = [\xi_{i-1/2}, \xi_{i+1/2}] \times [\eta_{j-1/2}, \eta_{j+1/2}]$ ; длины граней ячейки  $S_{ij}^{(\xi, \eta)}$  равны  $\bar{h}_i^\xi = 0.5(h_{i+1/2}^\xi + h_{i-1/2}^\xi)$  и  $\bar{h}_j^\eta = 0.5(h_{j+1/2}^\eta + h_{j-1/2}^\eta)$ , ее площадь  $dS_{ij}^{(\xi, \eta)} = \bar{h}_i^\xi \bar{h}_j^\eta$ . Также рассмотрим ячейки  $S_{i+1/2, j+1/2}^{(\xi, \eta)}$  с центрами в точках  $(\xi_{i+1/2}, \eta_{j+1/2})$  (см. рис. 3.2). Контрольный объем  $S_P^{(\xi, \eta)} = \bigcup_{q=1}^4 S_q^{(\xi, \eta)}$ . Сетка по времени  $\omega_\tau = \{t_0=0, t_{k+1}=t_k+\tau, k = 0, 1, \dots\}$ , где  $\tau$  — шаг по времени.

Сеточную функцию  $f_{ij}^k = f(t_k, \xi_i, \eta_j)$ , будем относить к узлам сетки  $\omega_h^{(\xi, \eta)}$ . Доопределим эту функцию внутри расчетных ячеек:  $f(t_k, \xi, \eta) = f_{ij}^k$  при  $(\xi, \eta) \in S_{ij}^{(\xi, \eta)}$ . Длины фаз  $l$  и скорость движения границы раздела  $v^{\text{ph}}$  внутри ячеек доопределим следующим образом:

$$\begin{aligned} l(t_k, \xi, \eta_{j+1/2}) &= l_{ij+1/2}^k + [l_{i+1, j+1/2}^k - l_{ij+1/2}^k](\xi - \xi_i)/h_{i+1/2}^\xi, \\ v^{\text{ph}}(t_k, \xi) &= (v^{\text{ph}})_i^k + [(v^{\text{ph}})_{i+1}^k - (v^{\text{ph}})_i^k](\xi - \xi_i)/h_{i+1/2}^\xi, \quad \text{при } \xi \in [\xi_i, \xi_{i+1}]. \end{aligned} \quad (3.27)$$

Физические параметры  $\varkappa$  и метрические коэффициенты  $L^{\xi\xi}$ ,  $L^{\xi\eta}$ ,  $L^{\eta\eta}$  относятся к центрам ячеек  $S_{i+1/2, j+1/2}^{(\xi, \eta)}$  (см рис. 3.2).

### 3.2.3. Разностная схема

Построим консервативную разностную схему интегро–интерполяционным методом. Проинтегрируем уравнения (3.23)–(3.25) по ячейке  $S_P^{(\xi, \eta)}$ :

$$\int_{S_P^{(\xi, \eta)}} \mathcal{T}^{(\xi, \eta)}(f) d\xi d\eta + \int_{S_P^{(\xi, \eta)}} \mathcal{K}^{(\xi, \eta)}(f, \psi) d\xi d\eta = \int_{S_P^{(\xi, \eta)}} \mathcal{D}^{(\xi, \eta)}(f) d\xi d\eta. \quad (3.28)$$

Для **диссипативных членов** имеем

$$\mathcal{D}_h^{(\xi, \eta)}(f) dS_P^{(\xi, \eta)} = (\mathcal{W}_n^\eta - \mathcal{W}_s^\eta) \bar{h}^\xi + (\mathcal{W}_e^\xi - \mathcal{W}_w^\xi) \bar{h}^\eta. \quad (3.29)$$

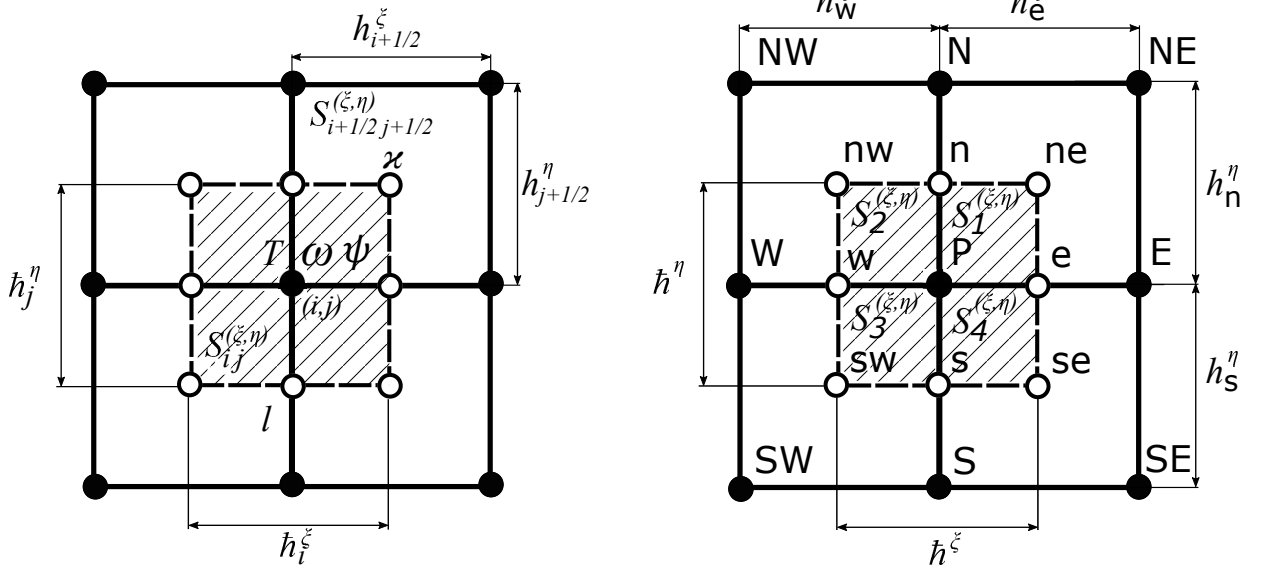


Рис. 3.2. Сетка и сеточные функции.

Аппроксимация потоков  $\mathcal{W}_n^\eta$ ,  $\mathcal{W}_e^\xi$  задается формулами

$$\mathcal{W}_n^\eta \bar{h}^\xi = 0.5 [h_e^\xi \mathcal{L}_{ne}^{\eta\eta} + h_w^\xi \mathcal{L}_{nw}^{\eta\eta}] f_{P,\eta} + 0.5 [h_e^\xi \mathcal{L}_{ne}^{\eta\xi} f_{n,\xi} + h_w^\xi \mathcal{L}_{nw}^{\eta\xi} f_{n,\bar{\xi}}], \quad (3.30)$$

$$\mathcal{W}_e^\xi \bar{h}^\eta = 0.5 [h_n^\eta \mathcal{L}_{ne}^{\xi\xi} + h_s^\eta \mathcal{L}_{se}^{\xi\xi}] f_{P,\xi} + 0.5 [h_n^\eta \mathcal{L}_{ne}^{\xi\eta} f_{e,\eta} + h_s^\eta \mathcal{L}_{se}^{\xi\eta} f_{e,\bar{\eta}}]. \quad (3.31)$$

Здесь  $f_{n,\xi} = 0.5(f_{P,\xi} + f_{N,\xi})$ ,  $f_{n,\bar{\xi}} = 0.5(f_{P,\bar{\xi}} + f_{N,\bar{\xi}})$ ,  $f_{e,\eta} = 0.5(f_{P,\eta} + f_{E,\eta})$ ,  $f_{e,\bar{\eta}} = 0.5(f_{P,\bar{\eta}} + f_{E,\bar{\eta}})$ . Метрические коэффициенты вычисляются следующим образом

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{ne}^{\xi\xi} &= \kappa_{ne} l_{ne}, \quad \mathcal{L}_{se}^{\xi\xi} = \kappa_{se} l_{se}, \quad \mathcal{L}_{ne}^{\eta\eta} = \kappa_{ne} [1 + (\varphi_{n,\xi})^2] / l_n, \quad \mathcal{L}_{nw}^{\eta\eta} = \kappa_{nw} [1 + (\varphi_{n,\bar{\xi}})^2] / l_n, \\ L_{ne}^{\xi\eta} &= \mathcal{L}_{ne}^{\eta\xi} = \kappa_{ne} (-\varphi_{n,\xi}), \quad \mathcal{L}_{se}^{\xi\eta} = \kappa_{se} (-\varphi_{s,\xi}), \quad \mathcal{L}_{nw}^{\eta\xi} = \kappa_{nw} (-\varphi_{n,\bar{\xi}}). \end{aligned} \quad (3.32)$$

Потоки  $\mathcal{W}_s^\eta$ ,  $\mathcal{W}_w^\xi$  вычисляются аналогично.

На межфазной границе в уравнении теплопереноса (3.25) в разностной аппроксимации диссипативных членов (3.29) возникает слагаемое, обеспечивающее выполнение условия Стефана (3.11). Данное слагаемое имеет вид

$$\mathcal{E}_{P^*}^{(\xi,\eta)}(T) dS_{P^*}^{(\xi,\eta)} = \bar{h}^\xi \text{St} (\bar{v}^{\text{ph}})^\eta. \quad (3.33)$$

Здесь  $P^*$  — индекс узлов сетки, лежащих на границе раздела фаз,

$$(\bar{v}^{\text{ph}})^\eta = \left( 0.5[v_P^{\text{ph}} + v_w^{\text{ph}}] h_w^\xi + 0.5[v_P^{\text{ph}} + v_e^{\text{ph}}] h_e^\xi \right) / (2\bar{h}^\xi). \quad (3.34)$$

Значения  $v_w^{\text{ph}}$  и  $v_e^{\text{ph}}$  вычисляются по формуле (3.27).

Рассмотренную аппроксимацию диссипативных членов (3.29) можно получить из разностной аппроксимации (1.62), построенной в Главе 1 (см. с. 42), если в последней положить  $\xi_P = 1$ . Таким образом, из доказательств теорем 1.3 и 1.4 следует, что рассмотренный в данном разделе дискретный оператор  $\mathcal{D}_h^{(\xi, \eta)}(f)/l_P$  также является самосопряженным и отрицательно определенным.

**Конвективных члены** в уравнении переноса завихренности (3.23) аппроксимируем следующим образом

$$\mathcal{K}_h^{(\xi, \eta)}(\psi, \omega) dS_{P^*}^{(\xi, \eta)} = \left[ \psi_{E, \eta} \omega_E - \psi_{W, \eta} \omega_W \right] \frac{\hbar^\eta}{2} - \left[ \psi_{N, \xi} \omega_N - \psi_{S, \xi} \omega_S \right] \frac{\hbar^\xi}{2}. \quad (3.35)$$

Аппроксимация конвективных членов в уравнении теплопереноса (3.25) имеет вид

$$\mathcal{K}_h^{(\xi, \eta)}(\psi, T) dS_{P^*}^{(\xi, \eta)} = \left[ \psi_{e, \eta} T_e - \psi_{w, \eta} T_w \right] \hbar^\eta - \left[ \psi_{n, \xi} T_n - \psi_{s, \xi} T_s \right] \hbar^\xi. \quad (3.36)$$

Выражения (3.35), (3.36) были предложены А. Аракавой в работе [89]. Известно, что соответствующие разностные операторы не вносят вклад в балансы теплоты и кинетической энергии (см. теоремы 1.1 и 1.2).

Пространственная аппроксимация **объемной силы** имеет вид

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_P^{(\xi, \eta)}(T) dS_P^{(\xi, \eta)} &= \int_{S_P^{(\xi, \eta)}} \text{Gr}_T \left[ \frac{\partial}{\partial \xi}(lT) - \frac{\partial}{\partial \eta}(\varphi_\xi T) \right] d\xi d\eta = \\ &= \text{Gr}_T \left( [l_e T_e - l_w T_w] \hbar^\eta - [(\overline{\varphi_\xi})_n T_n - (\overline{\varphi_\xi})_s T_s] \hbar^\xi \right). \end{aligned} \quad (3.37)$$

Здесь

$$(\overline{\varphi_\xi})_n = \frac{(\varphi_{n, \xi}) \hbar_e^\xi + (\varphi_{n, \bar{\xi}}) \hbar_w^\xi}{2 \hbar^\xi}, \quad (\overline{\varphi_\xi})_s = \frac{(\varphi_{s, \xi}) \hbar_e^\xi + (\varphi_{s, \bar{\xi}}) \hbar_w^\xi}{2 \hbar^\xi}.$$

Построим пространственную аппроксимацию **производной по времени**. Для этого проинтегрируем выражение (3.17) по ячейке  $S_P^{(\xi, \eta)}$ . Для удобства, интеграл по ячейке  $S^{(\xi, \eta)}$  представим в виде суммы интегралов по ячейкам  $S_q^{(\xi, \eta)}$ ,

$q = \overline{1, 4}$ :

$$\int_{S_P^{(\xi, \eta)}} \mathcal{T}^{(\xi, \eta)}(f) d\xi d\eta = \sum_{q=1}^4 \left[ \frac{\partial}{\partial t} \int_{S_q^{(\xi, \eta)}} l f d\xi d\eta - \int_{S_q^{(\xi, \eta)}} \frac{\partial(\varphi_t f)}{\partial \eta} d\xi d\eta \right]. \quad (3.38)$$

Интегрируя первое слагаемое в (3.38) по ячейке  $S_1^{(\xi, \eta)}$ , с учетом формулы (3.27), получим

$$\int_{S_1^{(\xi, \eta)}} l f d\xi d\eta = \frac{l_n + l_{ne}}{2} f_P \frac{h_e^\xi h_n^\eta}{4},$$

Интегралы по  $S_2^{(\xi, \eta)}$ ,  $S_3^{(\xi, \eta)}$  и  $S_4^{(\xi, \eta)}$  вычисляются аналогичным образом. Для второго слагаемого в (3.38) имеем

$$\begin{aligned} \int_{S_1^{(\xi, \eta)}} \frac{\partial(\varphi_t f)}{\partial \eta} d\xi d\eta + \int_{S_4^{(\xi, \eta)}} \frac{\partial(\varphi_t f)}{\partial \eta} d\xi d\eta &= \frac{(\varphi_t)_n + (\varphi_t)_{ne}}{2} f_n \frac{h_e^\xi}{2} - \frac{(\varphi_t)_s + (\varphi_t)_{se}}{2} f_s \frac{h_e^\xi}{2}, \\ \int_{S_2^{(\xi, \eta)}} \frac{\partial(\varphi_t f)}{\partial \eta} d\xi d\eta + \int_{S_3^{(\xi, \eta)}} \frac{\partial(\varphi_t f)}{\partial \eta} d\xi d\eta &= \frac{(\varphi_t)_n + (\varphi_t)_{nw}}{2} f_n \frac{h_w^\xi}{2} - \frac{(\varphi_t)_s + (\varphi_t)_{sw}}{2} f_s \frac{h_w^\xi}{2}. \end{aligned}$$

Откуда, пространственная аппроксимация производной по времени может быть записана в виде

$$\int_{S_P^{(\xi, \eta)}} \mathcal{T}^{(\xi, \eta)}(f) d\xi d\eta = \frac{\partial}{\partial t} (\bar{l}_P f_P) dS_P^{(\xi, \eta)} - [(\overline{\varphi_t})_n f_n - (\overline{\varphi_t})_s f_s] \hbar^\xi. \quad (3.39)$$

Здесь используются следующие интерполяционные формулы

$$\begin{aligned} \bar{l}_P &= \frac{(0.5[l_n + l_{ne}]h_e^\xi + 0.5[l_n + l_{nw}]h_w^\xi) h_n^\eta + (0.5[l_s + l_{se}]h_e^\xi + 0.5[l_s + l_{sw}]h_w^\xi) h_s^\eta}{4\hbar^\xi \hbar^\eta}, \\ (\overline{\varphi_t})_n &= \frac{0.5[(\varphi_t)_n + (\varphi_t)_{ne}]h_e^\xi + 0.5[(\varphi_t)_n + (\varphi_t)_{nw}]h_w^\xi}{2\hbar^\xi}. \end{aligned}$$

Пространственные аппроксимации операторов (3.17), (3.18), (3.20) и (3.22) проинтегрируем по отрезку  $[t_k, t_{k+1}]$ , полученные выражения разделим на шаг по времени  $\tau$ . В результате получим следующую аппроксимацию по времени оператора (3.39):

$$\mathcal{T}_P^{(\xi, \eta)}(f) dS_P^{(\xi, \eta)} = (\bar{l}_P f_P)_t dS_P^{(\xi, \eta)} - [(\overline{\varphi_t})_n \hat{f}_n - (\overline{\varphi_t})_s \hat{f}_s] \hbar^\xi. \quad (3.40)$$

Во внутренних точках сетки разностная схема для уравнений теплопереноса, полученная с помощью метода выпрямления фронта, имеет вид

$$\mathcal{T}_P^{(\xi,\eta)}(T) dS_P^{(\xi,\eta)} + \mathcal{K}_P^{(\xi,\eta)}(\widehat{\psi}, \widehat{T}) dS_P^{(\xi,\eta)} = \left[ \mathcal{D}_P^{(\xi,\eta)}(\widehat{T}) + \mathcal{E}_{P^*}^{(\xi,\eta)}(\widehat{T}) \delta_{PP^*} \right] dS_P^{(\xi,\eta)}. \quad (3.41)$$

Здесь  $\delta_{PP^*} = 1$ , если  $P = P^*$ , в противном случае  $\delta_{PP^*} = 0$ . Разностная схема (3.41) является консервативной, метрические коэффициенты  $L^{\xi\xi}$ ,  $L^{\xi\eta}$ ,  $L^{\eta\eta}$  в ней взяты с верхнего временного слоя. Для уравнений Навье–Стокса получим следующую разностную схему

$$\mathcal{T}_P^{(\xi,\eta)}(\omega) dS_P^{(\xi,\eta)} + \mathcal{K}_P^{(\xi,\eta)}(\widehat{\psi}, \widehat{\omega}) dS_P^{(\xi,\eta)} = \mathcal{D}_P^{(\xi,\eta)}(\widehat{\omega}) dS_P^{(\xi,\eta)} - \mathcal{F}_P^{(\xi,\eta)}(T) dS_P^{(\xi,\eta)}, \quad (3.42)$$

$$-\widehat{\omega} \bar{l}_P dS_P^{(\xi,\eta)} = \mathcal{D}_P^{(\xi,\eta)}(\widehat{\psi}) dS_P^{(\xi,\eta)}. \quad (3.43)$$

Как и ранее можно показать (см. Глава 1, с. 53), что в регулярной точке выражение (3.40) преобразуется к виду

$$\mathcal{T}_P^{(\xi,\eta)}(f) dS_P^{(\xi,\eta)} = \bar{l}_P f_{P,t} dS_P^{(\xi,\eta)} - 0.5 \left[ h_n^\eta(\overline{\varphi}_t)_n \widehat{f}_{\bar{\eta}} + h_s^\eta(\overline{\varphi}_t)_s \widehat{f}_{\bar{\eta}} \right] \hbar^\xi. \quad (3.44)$$

Подставив соотношение (3.44) в систему уравнений (3.41)–(3.43), получим разностную схему, аппроксимирующую недивергентную форму записи рассматриваемой задачи в расчетной области.

### 3.3. Метод расчета на подвижной сетке

Построим консервативную разностную схему для задачи (3.1)–(3.14) на подвижной сетке, согласованной с формой границы раздела фаз.

#### 3.3.1. Сетка и сеточные функции

Введем в физической области  $\Omega(t, x, y)$  подвижную сетку  $\omega_h^{(x,y)}(t) = \{(x_i, y_j(t, x_i)), i = \overline{0, M}, j = \overline{0, N}\}$ , таким образом, чтобы  $y_0(t, x_i) = 0$ ,  $y_N(t, x_i) = H_2$ ,  $y_{j^*}(t, x_i) = \zeta(t, x_i)$  для любого  $x_i$ . Сетка по времени  $\omega_\tau = \{t_0=0, t_{k+1}=t_k+\tau, k = 0, 1, \dots\}$ , где  $\tau$  — шаг по времени.

**Лемма 3.1.** Если в начальный момент времени координаты узлов сеток  $\omega_h^{(x,y)}(0)$  и  $\omega_h^{(\xi,\eta)}$  связаны соотношениями

$$x_i = \xi_i, \quad y_j(0, x_i) = \varphi(0, \xi_i, \eta_j), \quad i = \overline{0, M}, \quad j = \overline{0, N}, \quad (3.45)$$

и движение узлов сетки  $\omega_h^{(x,y)}(t)$  определяется выражением

$$y_j(t_{k+1}, x_i) = y_j(t_k, x_i) + \tau v_j^y(x_i), \quad v_j^y(x_i) = \begin{cases} \frac{y_j}{\zeta_i} v_i^{\text{ph}}, & 0 < j \leq j^*, \\ \frac{H_2 - y_j}{H_2 - \zeta_i} v_i^{\text{ph}}, & j^* < j < N, \end{cases} \quad (3.46)$$

то координаты узлов сеток  $\omega_h^{(x,y)}(t)$  и  $\omega_h^{(\xi,\eta)}$  связаны соотношениями

$$x_i = \xi_i, \quad y_j(t_k, x_i) = \varphi(t_k, \xi_i, \eta_j), \quad i = \overline{0, M}, \quad j = \overline{0, N} \quad (3.47)$$

для любого  $k > 0$ .

**Доказательство.** Для определенности рассмотрим узлы сетки, расположенные в твердой фазе. Доказательство утверждения проведем методом математической индукции. Из условия утверждения следует, что в начальный момент времени (т.е. при  $k = 0$ ) равенство (3.47) выполнено. Пусть соотношение (3.47) выполнено на  $k$ -ом временном слое, т.е.  $y_j(t_k, x_i) = \varphi(t_k, \xi_i, \eta_j) = \eta_j l(t_k, \xi_i)$ . Покажем, что оно выполняется и в момент времени  $t_{k+1} = t_k + \tau$ . Из (3.15) и (3.46) следует, что  $v_j^y(x_i) = \eta_j v_i^{\text{ph}}$ , поэтому в момент времени  $t_{k+1}$  имеем

$$y_j(t_{k+1}, x_i) = y_j(t_k, x_i) + \tau v_j^y(x_i) = \left[ l(t_k, \xi_i) + \tau v_i^{\text{ph}} \right] \eta_j = l(t_{k+1}, \xi_i) \eta_j = \varphi(t_{k+1}, \xi_i, \eta_j).$$

Для узлов сетки, лежащих в жидкой фазе, утверждение доказывается аналогично ■

В дальнейшем в физической области будем использовать сетку  $\omega_h^{(x,y)}(t)$ , удовлетворяющую условиям (3.45), (3.46). Поточковые узлы подвижной сетки определим как

$$x_{i+1/2} = \xi_{i+1/2}, \quad y_j(t, x_{i+1/2}) = \varphi(t, \xi_{i+1/2}, \eta_j), \quad y_{j+1/2}(t, x_{i+1/2}) = \varphi(t, \xi_{i+1/2}, \eta_{j+1/2}).$$



Шаги подвижной сетки равны

$$h_{i+1/2}^x = x_{i+1} - x_i, \quad h_{i,j+1/2}^y(t_k) = y_{j+1}(t_k, x_i) - y_j(t_k, x_i),$$

$$h_{i+1/2,j+1/2}^y(t_k) = y_{j+1}(t_k, x_{i+1/2}) - y_j(t_k, x_{i+1/2}), \quad \bar{h}_i^x = x_{i+1/2} - x_{i-1/2},$$

$$\bar{h}_{i+1/2,j}^y(t_k) = y_{j+1/2}(t_k, x_{i+1/2}) - y_{j-1/2}(t_k, x_{i+1/2}).$$

В общем случае  $h_{i,j+1/2}^y \neq h_{i+1/2,j+1/2}^y \neq h_{i+1,j+1/2}^y$ .

Сетка  $\omega_h^{(x,y)}(t)$  разбивает физическую область на четырёхугольные ячейки  $S_{i+1/2,j+1/2}^{(x,y)}(t)$  с вершинами в точках  $(x_{i+\alpha}, y_{j+\beta}(t, x_{i+\alpha}))$ ,  $\alpha, \beta = 0, 1$ . Соединим середины противоположащих границ данных ячеек отрезками прямых. Полученные отрезки разбивают область на шестиугольные ячейки  $S_{ij}^{(x,y)}(t)$ ,  $i = \overline{0, M}$ ,  $j = \overline{0, N}$  (заштрихованная область на рис. 3.3). Из соотношения (3.47) следует, что  $S_{ij}^{(x,y)}(t_k) = \{\{x = \xi, y = \varphi(t_k, \xi, \eta)\} : (\xi, \eta) \in S_{ij}^{(\xi, \eta)}\}$ . Поэтому неизвестные функции внутри расчетной ячейки  $S_{ij}^{(x,y)}(t)$  доопределим так же как на фиксированной сетке  $\omega_h^{(\xi, \eta)}$ .

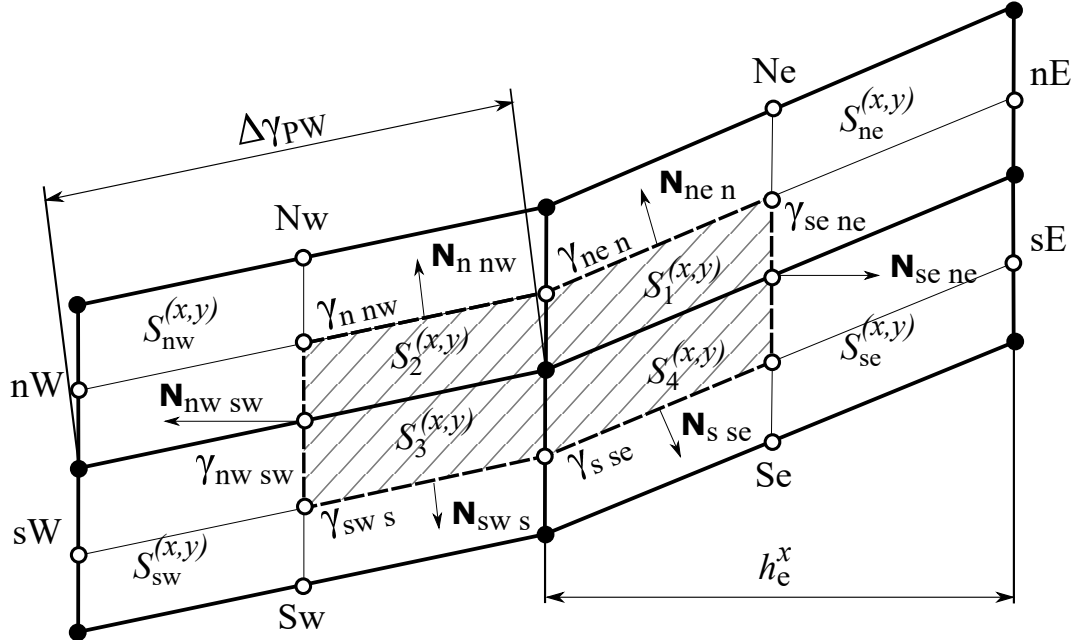


Рис. 3.3. Подвижная сетка.

Далее для обозначения узлов сетки будем использовать локальную географическую нотацию. Обозначим  $S_p^{(x,y)} = \bigcup_{q=1}^4 S_q^{(x,y)}$  (рис. 3.3) и  $dS_q^{(x,y)}$  — площадь

ячейки  $S_q^{(x,y)}$ . Границу ячейки  $S_p^{(x,y)}$  будем считать положительно ориентированной и введем упорядоченное в соответствии с ориентацией границы множество вершин  $V = \{ne, n, nw, sw, s, se\}$ . Пусть  $\gamma_{\alpha\beta}$  — участок границы ячейки с началом в точке  $\alpha$  и концом в точке  $\beta$  ( $\alpha, \beta \in V$ );  $\Delta\gamma_{\alpha\beta}$  — длина отрезка  $\gamma_{\alpha\beta}$ ,  $\Delta\gamma_{\alpha\beta} = \sqrt{\delta x_{\alpha\beta}^2 + \delta y_{\alpha\beta}^2}$ , где  $\delta x_{\alpha\beta} = x_\beta - x_\alpha$ ,  $\delta y_{\alpha\beta} = y_\beta - y_\alpha$ ;  $N_{\alpha\beta}$  — вектор внешней единичной нормали к границе  $\gamma_{\alpha\beta}$  с координатами  $(N_{\alpha\beta}^x, N_{\alpha\beta}^y)$ ,  $\mu_{\alpha\beta}$  — единичный направляющий вектор границы,  $(\mu_{\alpha\beta}^x, \mu_{\alpha\beta}^y)$ . В нашем случае

$$\mu_{\alpha\beta}^x = -N_{\alpha\beta}^y, \quad \mu_{\alpha\beta}^y = N_{\alpha\beta}^x, \quad (3.48)$$

где  $N_{\alpha\beta}^x = \delta y_{\alpha\beta} / \Delta\gamma_{\alpha\beta}$ ,  $N_{\alpha\beta}^y = -\delta x_{\alpha\beta} / \Delta\gamma_{\alpha\beta}$ .

Производная вдоль участка границы  $\gamma_{\alpha\beta}$  вычисляется по формуле

$$f_{\mu_{\alpha\beta}} = (f_\beta - f_\alpha) / \Delta\gamma_{\alpha\beta}.$$

Наряду с множеством  $V$ , введем упорядоченное множество

$$\tilde{V} = \{nE, n, nW, sW, s, sE\},$$

образованное серединами вертикальных границ ячеек основной сетки  $S_\nu^{(x,y)}$ ,  $\nu \in \{ne, nw, sw, se\}$ . Доопределим функцию  $f$  в серединах границ ячейки основной сетки  $S_\nu^{(x,y)}$  как полусумму ее значений на концах соответствующих границ, т.е.  $f_n = 0.5[f_P + f_N]$ ,  $f_{nE} = 0.5[f_E + f_{nE}]$ ,  $f_e = 0.5[f_P + f_E]$ ,  $f_{nE} = 0.5[f_N + f_{nE}]$  и т.д; значение искомой функции в центре ячейки основной сетки  $S_\nu^{(x,y)}$  равно среднему значению, вычисленному по значениям  $f$  в вершинах данной ячейки, т.е.  $f_{ne} = 0.25[f_P + f_E + f_N + f_{nE}]$  и т.д. При такой переинтерполяции на «северных» и «южных» границах ячейки  $S_p^{(x,y)}$  для сонаправленных  $\mu_{\alpha\beta}$  и  $\mu_{\tilde{\alpha}\tilde{\beta}}$ ,  $\alpha, \beta \in V$ ,  $\tilde{\alpha}, \tilde{\beta} \in \tilde{V}$  имеем

$$f_{\mu_{\alpha\beta}} = f_{\mu_{\tilde{\alpha}\tilde{\beta}}} = (f_{\tilde{\beta}} - f_{\tilde{\alpha}}) / (2\Delta\gamma_{\alpha\beta}), \quad (3.49)$$

например,  $f_{\mu_{nen}} = (f_n - f_{nE}) / (2\Delta\gamma_{nen}) = ([f_P + f_N] - [f_{nE} + f_E]) / (4\Delta\gamma_{nen})$ . Производную  $\partial_y f$  в центрах ячеек основной сетки  $S_\nu^{(x,y)}$  аппроксимируем следующим

образом

$$[\partial_y f]_{\text{ne}}^h = f_{\text{e},y} = \frac{f_{\text{Ne}} - f_{\text{e}}}{h_{\text{ne}}^y}, \quad [\partial_y f]_{\text{se}}^h = f_{\text{e},\bar{y}} = \frac{f_{\text{e}} - f_{\text{se}}}{h_{\text{se}}^y}, \quad [\partial_y f]_{\text{nw}}^h = f_{\text{w},y}, \quad [\partial_y f]_{\text{sw}}^h = f_{\text{w},\bar{y}}. \quad (3.50)$$

Остальные разностные аппроксимации пространственных производных на подвижной сетке вычисляются стандартным образом.

### 3.3.2. Разностная схема

Разностную схему будем строить интегро–интерполяционным методом. Проинтегрируем эволюционные уравнения (3.1) и (3.4), (3.9) по контрольному объёму  $S_{\mathbf{p}}^{(x,y)}(t)$

$$\int_{t_k}^{t_{k+1}} \int_{S_{\mathbf{p}}^{(x,y)}(t)} \frac{\partial f}{\partial t} dx dy dt + \int_{t_k}^{t_{k+1}} \int_{S_{\mathbf{p}}^{(x,y)}(t)} \mathcal{K}^{(x,y)}(f, \psi) dx dy dt = \int_{t_k}^{t_{k+1}} \int_{S_{\mathbf{p}}^{(x,y)}(t)} \mathcal{D}^{(x,y)}(f) dx dy dt. \quad (3.51)$$

Построим пространственную аппроксимацию **диссипативных членов**

$$\mathcal{D}_{\mathbf{p}}^{(x,y)}(f) dS_{\mathbf{p}}^{(x,y)} = \int_{S_{\mathbf{p}}^{(x,y)}(t)} \left[ \frac{\partial}{\partial x} \mathcal{W}^x + \frac{\partial}{\partial y} \mathcal{W}^y \right] dx dy. \quad (3.52)$$

Из формулы Остроградского–Гаусса имеем

$$\int_{S_{\mathbf{p}}^{(x,y)}(t)} \left[ \frac{\partial}{\partial x} \mathcal{W}^x + \frac{\partial}{\partial y} \mathcal{W}^y \right] dx dy = \sum_{\alpha, \beta \in V} \int_{\gamma_{\alpha\beta}} \left[ \mathcal{W}^x N_{\alpha\beta}^x + \mathcal{W}^y N_{\alpha\beta}^y \right] d\gamma. \quad (3.53)$$

Вычислим интегралы вдоль «горизонтальных» границ  $\gamma_{\text{ne n}}, \gamma_{\text{n nw}}, \gamma_{\text{sw s}}, \gamma_{\text{s se}}$ .

Воспользуемся тем, что

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{1}{\mu_{\alpha\beta}^x} \left( \frac{\partial f}{\partial \mu_{\alpha\beta}} - \mu_{\alpha\beta}^y \frac{\partial f}{\partial y} \right). \quad (3.54)$$

Используя (3.54), перепишем интеграл вдоль границы следующим образом

$$\int_{\gamma_{\alpha\beta}} \left[ \kappa \frac{\partial f}{\partial x} N_{\alpha\beta}^x + \kappa \frac{\partial f}{\partial y} N_{\alpha\beta}^y \right] d\gamma = \int_{\gamma_{\alpha\beta}} \frac{N_{\alpha\beta}^x}{\mu_{\alpha\beta}^x} \kappa \frac{\partial f}{\partial \mu_{\alpha\beta}} d\gamma + \int_{\gamma_{\alpha\beta}} \left[ N_{\alpha\beta}^y - \frac{\mu_{\alpha\beta}^y}{\mu_{\alpha\beta}^x} N_{\alpha\beta}^x \right] \kappa \frac{\partial f}{\partial y} d\gamma. \quad (3.55)$$

Для первого слагаемого в (3.55), с учетом соотношения (3.48), получим

$$\int_{\gamma_{\alpha\beta}} \frac{N_{\alpha\beta}^x}{\mu_{\alpha\beta}^x} \kappa \frac{\partial f}{\partial \mu_{\alpha\beta}} d\gamma = \int_{\gamma_{\alpha\beta}} -\frac{N_{\alpha\beta}^x}{N_{\alpha\beta}^y} \kappa \frac{\partial f}{\partial \mu_{\alpha\beta}} d\gamma \approx \Delta\gamma_{\alpha\beta} \left( \frac{\delta y_{\alpha\beta}}{\delta x_{\alpha\beta}} [\kappa]^h f_{\mu_{\alpha\beta}} \right). \quad (3.56)$$

Для второго слагаемого в (3.55) имеем

$$\begin{aligned} \int_{\gamma_{\alpha\beta}} \left[ N_{\alpha\beta}^y - \frac{\mu_{\alpha\beta}^y}{\mu_{\alpha\beta}^x} N_{\alpha\beta}^x \right] \kappa \frac{\partial f}{\partial y} d\gamma &= \int_{\gamma_{\alpha\beta}} \frac{(N_{\alpha\beta}^x)^2 + (N_{\alpha\beta}^y)^2}{N_{\alpha\beta}^y} \kappa \frac{\partial f}{\partial y} d\gamma = \int_{\gamma_{\alpha\beta}} \frac{1}{N_{\alpha\beta}^y} \kappa \frac{\partial f}{\partial y} d\gamma \approx \\ &\approx \Delta\gamma_{\alpha\beta} \left( -\frac{\Delta\gamma_{\alpha\beta}}{\delta x_{\alpha\beta}} [\kappa]^h [\partial_y f]_P^h \right) = -\delta x_{\alpha\beta} \left[ 1 + (\delta y_{\alpha\beta}/\delta x_{\alpha\beta})^2 \right] [\kappa]^h [\partial_y f]_P^h. \end{aligned} \quad (3.57)$$

Здесь  $[\kappa]^h = \kappa_{ne}$  для  $\gamma_{nen}$ ,  $[\kappa]^h = \kappa_{nw}$  для  $\gamma_{nnw}$ ,  $[\kappa]^h = \kappa_{se}$  для  $\gamma_{ses}$  и  $[\kappa]^h = \kappa_{sw}$  для  $\gamma_{ssw}$ ;  $[\partial_y f]_P^h$  — разностная аппроксимация  $\partial_y f$ ,  $[\partial_y f]_P^h = f_{P,y}$  для «северных» границ  $\gamma_{nen}$  и  $\gamma_{nnw}$ ,  $[\partial_y f]_P^h = f_{P,\bar{y}}$  для «южных» границ  $\gamma_{ses}$  и  $\gamma_{ssw}$ .

Преобразуем теперь правые части в (3.56) и (3.57) к виду, удобному для сравнения с аппроксимацией теплового потока (3.30) через образ отрезка  $\gamma_{\alpha\beta}$  в расчетной системе координат  $(t, \xi, \eta)$ . На границе  $\gamma_{nen}$  для ориентированной разности имеем  $\delta x_{nen} = -h_e/2$ ;  $\delta y_{nen}/\delta x_{nen} = y_{n,x} = (y_{nE} - y_n)/h_e^x$  и, учитывая равенство (3.49), получаем  $f_{\mu_{nen}} = -f_{n,\mu}$ , где

$$f_{n,\mu} = (f_{nE} - f_n)/(2\Delta\gamma_{nen}) = ([f_E + f_{NE}] - [f_P + f_N])/(4\Delta\gamma_{nen}).$$

На  $\gamma_{nnw}$  справедливы равенства

$$\delta x_{nnw} = -h_w/2, \quad \delta y_{nnw}/\delta x_{nnw} = y_{n,\bar{x}} = (y_n - y_{nW})/h_w^x \quad \text{и} \quad f_{\mu_{nnw}} = -f_{n,\bar{\mu}},$$

где  $f_{n,\bar{\mu}} = [f_n - f_{nW}]/(2\Delta\gamma_{nnw})$ . Таким образом поток через «северную» границу записывается в виде

$$\mathcal{I}_n = 0.5 [h_e^x M_{ne}^{yy} + h_w^x M_{nw}^{yy}] f_{P,y} + \Delta\gamma_{nen} M_{ne}^{y\mu} f_{n,\mu} + \Delta\gamma_{nnw} M_{nw}^{y\mu} f_{n,\bar{\mu}}, \quad (3.58)$$

где коэффициенты  $M^{yy}$  и  $M^{y\mu}$  вычисляются по формулам

$$M_{ne}^{yy} = \kappa_{ne} [1 + (y_{n,x})^2], \quad M_{nw}^{yy} = \kappa_{nw} [1 + (y_{n,\bar{x}})^2], \quad M_{ne}^{y\mu} = \kappa_{ne} (-y_{n,x}), \quad M_{nw}^{y\mu} = \kappa_{nw} (-y_{n,\bar{x}}). \quad (3.59)$$

На южных границах  $\gamma_{sws}$  и  $\gamma_{sse}$  выполняются равенства:

$$\begin{aligned}\delta x_{sws} &= h_w/2, & \delta y_{sws}/\delta x_{sws} &= y_{s,\bar{x}}, & f_{\mu_{sws}} &= f_{s,\bar{\mu}} = [f_s - f_{sw}]/(2\Delta\gamma_{sws}); \\ \delta x_{sse} &= h_e/2, & \delta y_{sse}/\delta x_{sse} &= y_{s,x}, & f_{\mu_{sse}} &= f_{s,\mu} = [f_{se} - f_s]/(2\Delta\gamma_{sse}).\end{aligned}$$

Поток через «южную» границу представляется в виде

$$\mathcal{I}_s = -0.5 [h_e^x M_{se}^{yy} + h_w^x M_{sw}^{yy}] f_{P,\bar{y}} - \Delta\gamma_{sse} M_{se}^{y\mu} f_{s,\mu} - \Delta\gamma_{sws} M_{sw}^{y\mu} f_{s,\bar{\mu}}, \quad (3.60)$$

где коэффициенты  $M^{yy}$  и  $M^{y\mu}$  вычисляются по формулам

$$M_{se}^{yy} = \varkappa_{se} [1 + (y_{s,x})^2], \quad M_{sw}^{yy} = \varkappa_{sw} [1 + (y_{s,\bar{x}})^2], \quad M_{se}^{y\mu} = \varkappa_{se} (-y_{s,x}), \quad M_{sw}^{y\mu} = \varkappa_{sw} (-y_{s,\bar{x}}).$$

Запишем интегралы вдоль вертикальных границ  $\gamma_{nwsw}$  и  $\gamma_{sene}$ . В этом случае  $N_{\alpha\beta}^x = \delta y_{\alpha\beta}/|\delta y_{\alpha\beta}|$ ,  $N_{\alpha\beta}^y = 0$  и

$$\int_{\gamma_{\alpha\beta}} \left[ \varkappa \frac{\partial f}{\partial x} N_{\alpha\beta}^x + \varkappa \frac{\partial f}{\partial y} N_{\alpha\beta}^y \right] d\gamma = \int_{\gamma_{\alpha\beta}} \frac{\delta y_{\alpha\beta}}{|\delta y_{\alpha\beta}|} \varkappa \frac{\partial f}{\partial x} dy. \quad (3.61)$$

Как и раньше производную  $\partial_x f$  выразим через производную по некоторому направлению. В качестве такого направления выберем  $\mu = \mu_{PE}$  на «восточной» границе  $\gamma_{sene}$  и  $\mu = \mu_{PW}$  на «западной» границе  $\gamma_{nwsw}$ . Для «восточной» границы  $\gamma_{sene}$  получим

$$\int_{\gamma_{sene}} \frac{\delta y_{sene}}{|\delta y_{sene}|} \varkappa \frac{\partial f}{\partial x} dy = \int_{\gamma_{sene}} \frac{1}{\mu_{PE}^x} \varkappa \frac{\partial f}{\partial \mu_{PE}} dy + \int_{\gamma_{sene}} \left( -\frac{\mu_{PE}^y}{\mu_{PE}^x} \right) \varkappa \frac{\partial f}{\partial y} dy. \quad (3.62)$$

Первое слагаемое в правой части равенства (3.62) аппроксимируем следующим образом

$$\begin{aligned}\int_{\gamma_{sene}} \frac{1}{\mu_{PE}^x} \varkappa \frac{\partial f}{\partial \mu_{PE}} dy &= \int_{\gamma_{sene}} \frac{\Delta\gamma_{PE}}{\delta x_{PE}} \varkappa \frac{\partial f}{\partial \mu_{PE}} dy \approx \frac{1}{2} [h_{ne}^y \varkappa_{ne} + h_{se}^y \varkappa_{se}] \frac{\Delta\gamma_{PE}}{\delta x_{PE}} f_{\mu_{PE}} = \\ &= 0.5 [h_{ne}^y \varkappa_{ne} + h_{se}^y \varkappa_{se}] (|\delta x_{PE}|/\delta x_{PE}) \sqrt{1 + (\delta y_{PE}/\delta x_{PE})^2} f_{\mu_{PE}}.\end{aligned} \quad (3.63)$$

Для аппроксимации второго слагаемого в правой части равенства (3.62) вос-

пользуемся следующей квадратурной формулой

$$\begin{aligned} \int_{\gamma_{se\ ne}} \left( -\frac{\mu_{PE}^y}{\mu_{PE}^x} \right) \kappa \frac{\partial f}{\partial y} dy &\approx \frac{1}{2} \left[ h_{ne}^y \left( -\frac{\mu_{ne}^y}{\mu_{ne}^x} \right) \kappa_{ne} \frac{\partial f}{\partial y} \Big|_{ne} + h_{se}^y \left( -\frac{\mu_{se}^y}{\mu_{se}^x} \right) \kappa_{se} \frac{\partial f}{\partial y} \Big|_{se} \right] = \\ &= 0.5 \left[ h_{ne}^y (-\delta y_{ne}/\delta x_{ne}) \kappa_{ne} [\partial_y f]_{ne}^h + h_{se}^y (-\delta y_{se}/\delta x_{se}) \kappa_{se} [\partial_y f]_{se}^h \right]. \end{aligned} \quad (3.64)$$

Интеграл вдоль «западной» границы  $\gamma_{nw\ sw}$  вычисляется аналогично:

$$\begin{aligned} \int_{\gamma_{nw\ sw}} \frac{\delta y_{nw\ sw}}{|\delta y_{nw\ sw}|} \kappa \frac{\partial f}{\partial x} dy &= -0.5 [h_{nw}^y \kappa_{nw} + h_{sw}^y \kappa_{sw}] (|\delta x_{PW}|/\delta x_{PW}) \sqrt{1 + (\delta y_{PW}/\delta x_{PW})^2} f_{\mu_{PW}} \\ &- 0.5 \left[ h_{nw}^y (-\delta y_{nw}/\delta x_{nw}) \kappa_{nw} [\partial_y f]_{nw}^h + h_{sw}^y (-\delta y_{sw}/\delta x_{sw}) \kappa_{sw} [\partial_y f]_{sw}^h \right]. \end{aligned} \quad (3.65)$$

Преобразуем правые части равенств (3.63), (3.64) и (3.65) к виду удобному для сравнения с аппроксимацией теплового потока (3.31) в расчетной области.

На границе  $\gamma_{se\ ne}$  имеем:  $\delta x_{PE} = h_e^x$ ,  $\delta y_{PE}/\delta x_{PE} = y_{P,x} = [y_E - y_P]/h_e^x$ ,  $f_{\mu_{PE}} = f_{P,\mu} = [f_E - f_P]/\Delta\gamma_{PE}$  и, учитывая (3.50),  $[\partial_y f]_{ne}^h = f_{e,y}$ ,  $[\partial_y f]_{se}^h = f_{e,\bar{y}}$ . Поэтому поток  $\mathcal{I}_e$  через «восточную» границу ячейки можно представить в виде

$$\mathcal{I}_e = 0.5 [h_{ne}^y M_{ne}^{\mu\mu} + h_{se}^y M_{se}^{\mu\mu}] f_{P,\mu} + 0.5 [h_{ne}^y M_{ne}^{\mu y} f_{e,y} + h_{se}^y M_{se}^{\mu y} f_{e,\bar{y}}], \quad (3.66)$$

где

$$M_{ne}^{\mu\mu} = \kappa_{ne} \sqrt{1 + (y_{P,x})^2}, \quad M_{se}^{\mu\mu} = \kappa_{se} \sqrt{1 + (y_{P,x})^2}, \quad M_{ne}^{\mu y} = M_{ne}^{y\mu}, \quad M_{se}^{\mu y} = M_{se}^{y\mu}. \quad (3.67)$$

На границе  $\gamma_{nw\ sw}$  имеем:  $\delta x_{PW} = -h_w^x$ ,  $\delta y_{PW}/\delta x_{PW} = y_{P,\bar{x}} = [y_P - y_W]/h_w^x$ ,  $f_{\mu_{PW}} = -f_{P,\bar{\mu}}$ , где  $f_{P,\bar{\mu}} = [f_P - f_W]/\Delta\gamma_{PW}$  и  $[\partial_y f]_{nw}^h = f_{w,y}$ ,  $[\partial_y f]_{sw}^h = f_{w,\bar{y}}$ . Таким образом, поток  $\mathcal{I}_w$  через «западную» границу вычисляется по формуле

$$\mathcal{I}_w = -0.5 [h_{nw}^y M_{nw}^{\mu\mu} + h_{sw}^y M_{sw}^{\mu\mu}] f_{P,\bar{\mu}} - 0.5 [h_{nw}^y M_{nw}^{\mu y} f_{w,y} + h_{sw}^y M_{sw}^{\mu y} f_{w,\bar{y}}], \quad (3.68)$$

где

$$M_{nw}^{\mu\mu} = \kappa_{nw} \sqrt{1 + (y_{P,\bar{x}})^2}, \quad M_{sw}^{\mu\mu} = \kappa_{sw} \sqrt{1 + (y_{P,\bar{x}})^2}, \quad M_{nw}^{\mu y} = M_{nw}^{y\mu}, \quad M_{sw}^{\mu y} = M_{sw}^{y\mu}.$$

Аппроксимация диссипативных членов на подвижной сетке имеет вид

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_P(f) dS_P = & 0.5 [h_e^x M_{ne}^{yy} + h_w^x M_{nw}^{yy}] f_{P,y} + \Delta \gamma_{ne} n M_{ne}^{y\mu} f_{n,\mu} + \Delta \gamma_{n nw} M_{nw}^{y\mu} f_{n,\bar{\mu}} - \\ & - (0.5 [h_e^x M_{se}^{yy} + h_w^x M_{sw}^{yy}] f_{P,\bar{y}} + \Delta \gamma_{se s} M_{se}^{y\mu} f_{s,\mu} + \Delta \gamma_{s sw} M_{sw}^{y\mu} f_{s,\bar{\mu}}) + \\ & + 0.5 [h_{ne}^y M_{ne}^{\mu\mu} + h_{se}^y M_{se}^{\mu\mu}] f_{P,\mu} + 0.5 [h_{ne}^y M_{ne}^{\mu y} f_{e,y} + h_{se}^y M_{se}^{\mu y} f_{e,\bar{y}}] - \\ & - (0.5 [h_{nw}^y M_{nw}^{\mu\mu} + h_{sw}^y M_{sw}^{\mu\mu}] f_{P,\bar{\mu}} + 0.5 [h_{nw}^y M_{nw}^{\mu y} f_{w,y} + h_{sw}^y M_{sw}^{\mu y} f_{w,\bar{y}}]) . \end{aligned} \quad (3.69)$$

В уравнении теплопереноса (3.4) на фронте кристаллизации в аппроксимации диссипативных членов возникает дополнительное слагаемое. Из условия Стефана (3.11) получим, что скачок равен

$$\mathcal{E}_{P^*}^{(x,y)}(T) dS_{P^*}^{(x,y)} = \int_{\gamma_{wP}} \tilde{\lambda} v^{\text{ph}} N_{wP}^y d\gamma + \int_{\gamma_{Pe}} \tilde{\lambda} v^{\text{ph}} N_{Pe}^y d\gamma \approx \hbar^x \tilde{\lambda} (\bar{v}^{\text{ph}})^y. \quad (3.70)$$

Здесь

$$(\bar{v}^{\text{ph}})^y = \frac{0.5[v_P^{\text{ph}} + v_w^{\text{ph}}]h_w^x + 0.5[v_P^{\text{ph}} + v_e^{\text{ph}}]h_e^x}{2\hbar_P^x}. \quad (3.71)$$

Рассмотрим пространственную аппроксимацию **конвективных членов**

$$\mathcal{K}_P^{x,y}(f, \psi) dS_P^{(x,y)} = \int_{S_P^{(x,y)}(t)} \left[ \frac{\partial}{\partial x} \mathcal{H}^x(f) + \frac{\partial}{\partial y} \mathcal{H}^y(f) \right] d\Omega. \quad (3.72)$$

Из формулы Остроградского–Гаусса для конвективных членов имеем

$$\int_{S_P^{(x,y)}(t)} \left[ \frac{\partial}{\partial x} \mathcal{H}^x(f) + \frac{\partial}{\partial y} \mathcal{H}^y(f) \right] d\Omega = \sum_{\alpha, \beta \in V_{\gamma_{\alpha\beta}}} \int_{\gamma_{\alpha\beta}} \left[ \mathcal{H}^x(f) N_{\alpha\beta}^x + \mathcal{H}^y(f) N_{\alpha\beta}^y \right] d\gamma. \quad (3.73)$$

Вычислим интегралы вдоль «горизонтальных» границ  $\gamma_{ne n}$ ,  $\gamma_{n nw}$ ,  $\gamma_{sw s}$ ,  $\gamma_{sse}$ . С помощью соотношения (3.54) преобразуем контурные интегралы, входящие в правую часть равенства (3.73), следующим образом

$$\int_{\gamma_{\alpha\beta}} \left[ f \frac{\partial \psi}{\partial y} N_{\alpha\beta}^x - f \frac{\partial \psi}{\partial x} N_{\alpha\beta}^y \right] d\gamma = - \int_{\gamma_{\alpha\beta}} \frac{N_{\alpha\beta}^y}{\mu_{\alpha\beta}^x} f \frac{\partial \psi}{\partial \mu_{\alpha\beta}} d\gamma + \int_{\gamma_{\alpha\beta}} \left[ N_{\alpha\beta}^x + \frac{\mu_{\alpha\beta}^y}{\mu_{\alpha\beta}^x} N_{\alpha\beta}^y \right] f \frac{\partial \psi}{\partial y} d\gamma. \quad (3.74)$$

Второе слагаемое в правой части соотношения (3.74) обращается в ноль в силу ортогональности  $N_{\alpha\beta}$  и  $\mu_{\alpha\beta}$ . При этом, для первого слагаемого в (3.74) имеем

$$-\int_{\gamma_{\alpha\beta}} \frac{N_{\alpha\beta}^y}{\mu_{\alpha\beta}^x} f \frac{\partial\psi}{\partial\mu_{\alpha\beta}} d\gamma = \int_{\gamma_{\alpha\beta}} f \frac{\partial\psi}{\partial\mu_{\alpha\beta}} d\gamma \approx \Delta\gamma_{\alpha\beta} \left[ f \frac{\partial\psi}{\partial\mu_{\alpha\beta}} \right]^h. \quad (3.75)$$

Здесь  $[f\partial\psi/\partial\mu_{\alpha\beta}]^h$  — разностная аппроксимация  $f\partial\psi/\partial\mu_{\alpha\beta}$ , которая вычисляется на «горизонтальных» границах ячейки  $S_p^{(x,y)}(t)$  следующим образом. На границе  $\gamma_{ne n}$  положим

$$\left[ T \frac{\partial\psi}{\partial\mu_{ne n}} \right]^h = T_n \psi_{\mu_{ne n}}, \quad \left[ \omega \frac{\partial\psi}{\partial\mu_{ne n}} \right]^h = \frac{0.5 [\Delta\gamma_{EP} \omega_P \psi_{\mu_{EP}} + \Delta\gamma_{NE} \omega_N \psi_{\mu_{NE}}]}{2\Delta\gamma_{ne n}},$$

где  $\psi_{\mu_{NE}} = (\psi_N - \psi_{NE})/\Delta\gamma_{NE}$ . На границе  $\gamma_{n nw}$  будем вычислять соответствующие производные как

$$\left[ T \frac{\partial\psi}{\partial\mu_{n nw}} \right]^h = T_n \psi_{\mu_{n nw}}, \quad \left[ \omega \frac{\partial\psi}{\partial\mu_{n nw}} \right]^h = \frac{0.5 [\Delta\gamma_{PW} \omega_P \psi_{\mu_{PW}} + \Delta\gamma_{NW} \omega_N \psi_{\mu_{NW}}]}{2\Delta\gamma_{n nw}},$$

где  $\psi_{\mu_{NW}} = (\psi_{NW} - \psi_N)/\Delta\gamma_{NW}$ . Аналогично, на границе  $\gamma_{sw, s}$  зададим

$$\left[ T \frac{\partial\psi}{\partial\mu_{sw s}} \right]^h = T_s \psi_{\mu_{sw s}}, \quad \left[ \omega \frac{\partial\psi}{\partial\mu_{sw s}} \right]^h = \frac{0.5 [\Delta\gamma_{WP} \omega_P \psi_{\mu_{WP}} + \Delta\gamma_{WS} \omega_S \psi_{\mu_{WS}}]}{2\Delta\gamma_{sw s}},$$

на границе  $\gamma_{s se}$  воспользуемся формулами

$$\left[ T \frac{\partial\psi}{\partial\mu_{s se}} \right]^h = T_s \psi_{\mu_{s se}}, \quad \left[ \omega \frac{\partial\psi}{\partial\mu_{s se}} \right]^h = \frac{0.5 [\Delta\gamma_{PE} \omega_P \psi_{\mu_{PE}} + \Delta\gamma_{SE} \omega_S \psi_{\mu_{SE}}]}{2\Delta\gamma_{s se}}.$$

Здесь  $\psi_{\mu_{sw s}} = (\psi_s - \psi_{sw})/\Delta\gamma_{sw s}$ ,  $\psi_{\mu_{s se}} = (\psi_{se} - \psi_s)/\Delta\gamma_{se}$ .

Вычислим контурные интегралы, входящие в правую часть соотношения (3.74), вдоль «вертикальных» границ  $\gamma_{nw sw}$  и  $\gamma_{se ne}$ . Воспользуемся тем, что на «вертикальных» границах  $N_{\alpha\beta}^x = \delta y_{\alpha\beta}/|\delta y_{\alpha\beta}|$  и  $N_{\alpha\beta}^y = 0$ , откуда

$$\int_{\gamma_{\alpha\beta}} \left[ f \frac{\partial\psi}{\partial y} N_{\alpha\beta}^x - f \frac{\partial\psi}{\partial x} N_{\alpha\beta}^y \right] d\gamma = \int_{\gamma_{\alpha\beta}} f \frac{\partial\psi}{\partial y} \frac{\delta y_{\alpha\beta}}{|\delta y_{\alpha\beta}|} d\gamma \approx \Delta\gamma_{\alpha\beta} \left[ f \frac{\partial\psi}{\partial y} \right]^h \frac{\delta y_{\alpha\beta}}{|\delta y_{\alpha\beta}|}. \quad (3.76)$$

Разностные аппроксимации операторов  $f\partial\psi/\partial y$  будем вычислять следующим образом. На границе  $\gamma_{se ne}$  зададим

$$\left[ T \frac{\partial\psi}{\partial y} \right]_e^h = T_e \psi_{e, \dot{y}}, \quad \left[ \omega \frac{\partial\psi}{\partial y} \right]_e^h = \frac{0.5 [\hbar_P^y \omega_P \psi_{P, \dot{y}} + \hbar_E^y \omega_E \psi_{E, \dot{y}}]}{\hbar_e^y},$$



на противоположащей границе  $\gamma_{nw\,sw}$  воспользуемся формулами

$$\left[ T \frac{\partial \psi}{\partial y} \right]_w^h = T_w \psi_{w,y}, \quad \left[ \omega \frac{\partial \psi}{\partial y} \right]_w^h = \frac{0.5[\bar{h}_P^y \omega_P \psi_{P,y} + \bar{h}_W^y \omega_E \psi_{E,y}]}{\bar{h}_W^y}.$$

При этом  $\delta y_{se\,ne}/|\delta y_{se\,ne}| = 1$ ,  $\delta y_{nw\,sw}/|\delta y_{nw\,sw}| = -1$ . Таким образом, аппроксимация конвективных членов в уравнении теплопереноса имеет вид

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_P^{(x,y)}(T, \psi) dS_P^{(x,y)} = & T_e \psi_{e,y} \bar{h}_e^y - T_w \psi_{w,y} \bar{h}_w^y - \\ & - (T_n [\psi_{n,\mu} \Delta \gamma_{ne\,n} + \psi_{n,\bar{\mu}} \Delta \gamma_{n\,nw}] - T_s [\psi_{s,\mu} \Delta \gamma_{s\,se} + \psi_{s,\bar{\mu}} \Delta \gamma_{sw\,s}]) . \end{aligned} \quad (3.77)$$

Для уравнения переноса завихренности получаем

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_P^{(x,y)}(\omega, \psi) dS_P^{(x,y)} = & \omega_E \psi_{E,y} \frac{\bar{h}_E^y}{2} - \omega_W \psi_{W,y} \frac{\bar{h}_W^y}{2} - \\ & - \left( \omega_N \left[ \psi_{N,\mu} \frac{\Delta \gamma_{NE\,N}}{2} + \psi_{N,\bar{\mu}} \frac{\Delta \gamma_{N\,NW}}{2} \right] - \omega_S \left[ \psi_{S,\mu} \frac{\Delta \gamma_{S\,SE}}{2} + \psi_{S,\bar{\mu}} \frac{\Delta \gamma_{SW\,S}}{2} \right] \right) . \end{aligned} \quad (3.78)$$

Важно отметить, что аппроксимации (3.77), (3.78) конвективных членов не зависят от шагов сетки по пространству. Данное свойство предложенных разностных соотношений будет использовано в дальнейшем.

Рассмотрим пространственную аппроксимацию **объемной силы**

$$\mathcal{F}_P^{x,y}(T) dS_P^{(x,y)} = \int_{S_P^{(x,y)}(t)} \text{Gr}_T \frac{\partial T}{\partial x} d\Omega = \sum_{\alpha, \beta \in V_{\gamma_{\alpha\beta}}} \int \text{Gr}_T T N_{\alpha\beta}^x d\gamma. \quad (3.79)$$

Вычислим интегралы вдоль границ ячейки  $S_P^{(x,y)}(t)$

$$\int_{\gamma_{\alpha\beta}} \text{Gr}_T T N_{\alpha\beta}^x d\gamma = \int_{\gamma_{\alpha\beta}} \text{Gr}_T T \frac{\delta y_{\alpha\beta}}{\Delta \gamma_{\alpha\beta}} d\gamma \approx \text{Gr}_T [T]^h \delta y_{\alpha\beta}. \quad (3.80)$$

Здесь  $[T]^h = T_n$  на «северных» границах  $\gamma_{ne\,n}$ , и  $\gamma_{n\,nw}$ ,  $[T]^h = T_s$  на «южных» границах  $\gamma_{sw\,s}$ , и  $\gamma_{s\,se}$ ,  $[T]^h = T_e$  на «восточной» границе  $\gamma_{se\,ne}$ ,  $[T]^h = T_w$  на «западной» границе  $\gamma_{nw\,sw}$ . Подставляя в правую часть формулы (3.80) соответствующие значения  $\delta y_{\alpha\beta}$ , можно показать, что аппроксимация объемной силы имеет вид

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_P^{x,y}(T) dS_P^{(x,y)} = & \text{Gr}_T (T_e \bar{h}_e^y - T_w \bar{h}_w^y) + \\ & + \text{Gr}_T (T_n [(-y_{n,x}) h_e^x + (-y_{n,\bar{x}}) h_w^x] - T_s [(-y_{s,x}) h_e^x + (-y_{s,\bar{x}}) h_w^x]) . \end{aligned} \quad (3.81)$$

Здесь мы воспользовались тем, что  $\delta y_{ne n} = -y_{n,x} h_e^x$ ,  $\delta y_{n nw} = -y_{n,\bar{x}} h_w^x$ ,  $\delta y_{sw s} = -y_{s,\bar{x}} h_w^x$ ,  $\delta y_{s se} = -y_{s,x} h_e^x$ .

Для построения аппроксимации *производной по времени* воспользуемся транспортной теоремой Рейнольдса

$$\frac{d}{dt} \int_{S_P^{(x,y)}(t)} f dx dy = \int_{S_P^{(x,y)}(t)} \frac{\partial f}{\partial t} dx dy + \int_{\partial S_P^{(x,y)}(t)} (f v \cdot N) d\gamma. \quad (3.82)$$

Здесь  $v$  — скорость движения границы ячейки  $S_P^{(x,y)}(t)$ . Проинтегрировав соотношение (3.82) по отрезку  $[t_k, t_{k+1}]$ , получим

$$\int_{t_k}^{t_{k+1}} \int_{S_P^{(x,y)}(t)} \frac{\partial f}{\partial t} dx dy dt = \int_{t_k}^{t_{k+1}} \frac{d}{dt} \int_{S_P^{(x,y)}(t)} f dx dy dt - \int_{t_k}^{t_{k+1}} \int_{\partial S_P^{(x,y)}(t)} (f v \cdot N) d\gamma dt. \quad (3.83)$$

Рассмотрим слагаемые, стоящие в правой части равенства (3.83). Первое слагаемое аппроксимируем следующим образом

$$\int_{t_k}^{t_{k+1}} \frac{d}{dt} \int_{S_P^{(x,y)}(t)} f dx dy dt = \hat{f}_P \sum_{q=1}^4 \widehat{dS}_q^{(x,y)} - f_P \sum_q dS_q^{(x,y)}. \quad (3.84)$$

Площадь ячеек  $dS_q^{(x,y)}$ ,  $\widehat{dS}_q^{(x,y)}$  будем вычислять по формуле трапеций, используя значения координат вершин этих ячеек на слое  $t_k$  и  $t_{k+1}$ , соответственно. Для  $dS_q^{(x,y)}$ ,  $q = \overline{1, 4}$  имеем

$$\begin{aligned} dS_1^{(x,y)} &= \frac{(y_n - y_P) + (y_{ne} - y_e) h_e^x}{2} \frac{h_e^x}{2} = \frac{[h_n^y + h_{ne}^y] h_e^x}{8}, \\ dS_2^{(x,y)} &= \frac{[h_n^y + h_{nw}^y] h_w^x}{8}, \quad dS_3^{(x,y)} = \frac{[h_s^y + h_{sw}^y] h_w^x}{8}, \quad dS_4^{(x,y)} = \frac{[h_s^y + h_{se}^y] h_e^x}{8}. \end{aligned} \quad (3.85)$$

Расчетная ячейка  $S_P^{(x,y)}(t)$  перемещается только в направлении оси  $y$ , т.е.  $v = (0, v^y)$ . Поэтому для второго слагаемого в правой части равенства (3.83) справедливо соотношение

$$\int_{t_k}^{t_{k+1}} \int_{\partial S_P^{(x,y)}(t)} (f v \cdot N) d\gamma dt = \int_{t_k}^{t_{k+1}} \sum_{\alpha, \beta \in V_{\gamma_{\alpha\beta}}} \int f v^y N_{\alpha\beta}^y d\gamma dt. \quad (3.86)$$

Для интегралов вдоль «горизонтальных» границ получаем

$$\int_{t_k}^{t_{k+1}} \int_{\gamma_{\alpha\beta}} f v^y N_{\alpha\beta}^y d\gamma dt \approx \tau \left( \Delta \gamma_{\alpha\beta} [f]^h \frac{v_\alpha^y + v_\beta^y}{2} N_{\alpha\beta}^y \right) \Big|_{t=t_{k+1}} = \tau \left( -\delta x_{\alpha\beta} [\hat{f}]^h \frac{v_\alpha^y + v_\beta^y}{2} \right). \quad (3.87)$$

Здесь  $[\hat{f}]^h = \hat{f}_n$  для «северных» границ  $\gamma_{ne}$ ,  $\gamma_{nw}$  и  $[\hat{f}]^h = \hat{f}_s$  для «южных» границ  $\gamma_{sw}$ ,  $\gamma_{se}$ . Скорости движения  $v_\alpha^y$ ,  $\alpha \in V$  вершин контрольного объема равны средним значениям, вычисленным по соответствующим значениям скоростей узлов сетки, например,  $v_n^y = 0.5[v_P^y + v_N^y]$ ,  $v_{ne} = 0.25[v_P^y + v_N^y + v_E^y + v_{NE}^y]$  и т.д. Суммируя равенства (3.87) по «северным» и «южным» границам ячейки, приходим к следующей формуле для приближенного вычисления интеграла (3.86)

$$\int_{t_k}^{t_{k+1}} \int_{\partial S_P^{(x,y)}(t)} (f v \cdot N) d\gamma dt \approx -\tau \left( \bar{v}_n^y \hat{f}_n - \bar{v}_s^y \hat{f}_s \right) \hbar_P^x. \quad (3.88)$$

Здесь скорость  $\bar{v}^y$  вычисляется как

$$\bar{v}_n^y = \frac{0.5[v_n^y + v_{ne}^y]h_e^x + 0.5[v_n^y + v_{nw}^y]h_w^x}{2\hbar_P^x}, \quad \bar{v}_s^y = \frac{0.5[v_s^y + v_{se}^y]h_e^x + 0.5[v_s^y + v_{sw}^y]h_w^x}{2\hbar_P^x}.$$

Разделив равенства (3.84) и (3.88) на шаг  $\tau$ , получим аппроксимацию производной по времени на подвижной сетке  $\omega^{(x,y)}(t)$ :

$$\mathcal{T}_P^{(x,y)}(f) dS_P^{(x,y)} = \left( f_P dS_P^{(x,y)} \right)_t - \left( \bar{v}_n^y \hat{f}_n - \bar{v}_s^y \hat{f}_s \right) \hbar_P^x. \quad (3.89)$$

Разностный оператор (3.89) можно преобразовать к виду

$$\mathcal{T}_P^{(x,y)}(f) dS_P^{(x,y)} = \left( f_P dS_P^{(x,y)} \right)_t - 0.5 \left[ \hat{h}_n^y \left( \hat{f}_P \bar{v}_P^y \right)_{\tilde{y}} + \hat{h}_s^y \left( \hat{f}_P \bar{v}_P^y \right)_{\tilde{y}} \right] \hbar_P^x, \quad (3.90)$$

где  $\bar{v}_P^y = (0.5[v_P^y + v_e^y]h_e^x + 0.5[v_P^y + v_w^y]h_w^x)/(2\hbar_P^x)$ .

По аналогии с [114] преобразуем аппроксимацию производной по времени (3.90) к недивергентному виду. Рассмотрим верхнюю часть ячейки  $S_P^{(x,y)}$ , т.е.  $S_1^{(x,y)} \cup S_2^{(x,y)}$ . Воспользуемся формулами разностного дифференцирования произведения [88]. Для разностной производной по времени получим

$$\left( [dS_1^{(x,y)} + dS_2^{(x,y)}] f_P \right)_t = \left( dS_1^{(x,y)} + dS_2^{(x,y)} \right) f_{P,t} + \left( \frac{h_e^x [h_{n,t}^y + h_{ne,t}^y]}{8} + \frac{h_w^x [h_{n,t}^y + h_{nw,t}^y]}{8} \right) \hat{f}_P.$$

Для разностной производной по  $y$  имеем

$$\left(\widehat{f\bar{v}_P^y}\right)_{\tilde{y}} = \bar{v}_{P,\tilde{y}}^y \widehat{f}_P + \bar{v}_n^y \widehat{f}_{P,\tilde{y}}.$$

В силу соотношения (3.47) производная по времени от шага по пространству выражается равенствами

$$\begin{aligned} 0.5(h_{n,t}^y + h_{ne,t}^y) &= [y_{n,t} - y_{P,t}] + [y_{ne,t} - y_{e,t}] = [v_n^y - v_P^y] + [v_{ne}^y - v_e^y], \\ 0.5(h_{n,t}^y + h_{nw,t}^y) &= [y_{n,t} - y_{P,t}] + [y_{nw,t} - y_{w,t}] = [v_n^y - v_P^y] + [v_{nw}^y - v_w^y], \end{aligned}$$

из которых вытекает, что

$$\left(\frac{h_e^x[h_{n,t}^y + h_{ne,t}^y]}{8} + \frac{h_w^x[h_{n,t}^y + h_{nw,t}^y]}{8}\right) \widehat{f}_P = \frac{\hbar_P^x \widehat{h}_n^y}{2} \bar{v}_{P,\tilde{y}}^y \widehat{f}_P.$$

Откуда, приводя подобные члены, в регулярной точке сетки получим

$$\left([dS_1^{(x,y)} + dS_2^{(x,y)}]f_P\right)_t - \frac{\hbar_P^x \widehat{h}_n^y}{2} \left(\widehat{f}_P \bar{v}_P^y\right)_{\tilde{y}} = \left(dS_1^{(x,y)} + dS_2^{(x,y)}\right) f_{P,t} - \frac{\hbar_P^x \widehat{h}_n^y}{2} \bar{v}_n^y \widehat{f}_{P,\tilde{y}}. \quad (3.91)$$

Аналогично, для нижней части ячейки  $S_P^{x,y}$  имеем

$$\left([dS_3^{(x,y)} + dS_4^{(x,y)}]f_P\right)_t - \frac{\hbar_P^x \widehat{h}_s^y}{2} \left(\widehat{f}_P \bar{v}_P^y\right)_{\tilde{y}} = \left(dS_3^{(x,y)} + dS_4^{(x,y)}\right) f_{P,t} - \frac{\hbar_P^x \widehat{h}_s^y}{2} \bar{v}_s^y \widehat{f}_{P,\tilde{y}}. \quad (3.92)$$

Используя выражения (3.90)–(3.92), получим недивергентную форму записи аппроксимации производной по времени:

$$\mathcal{T}_P^{(x,y)}(f) dS_P^{(x,y)} = f_{P,t} dS_P^{(x,y)} - 0.5[\widehat{h}_n^y \bar{v}_n^y \widehat{f}_{P,\tilde{y}} + \widehat{h}_s^y \bar{v}_s^y \widehat{f}_{P,\tilde{y}}] \hbar_P^x. \quad (3.93)$$

Во внутренних точках сетки  $\omega_h^{(x,y)}(t)$  разностная схема для уравнения теплопереноса имеет вид

$$\mathcal{T}_P^{(x,y)}(T) \widehat{dS}_P^{(x,y)} + \mathcal{K}_P^{(x,y)}(\widehat{T}, \widehat{\psi}) \widehat{dS}_P^{(x,y)} = \left[\mathcal{D}_P^{(x,y)}(\widehat{T}) + \mathcal{E}_{P*}^{(x,y)}(\widehat{T}) \delta_{PP*}\right] \widehat{dS}_P^{(x,y)}. \quad (3.94)$$

Разностная схема (3.94) является консервативной, коэффициенты  $M^{\mu\mu}$ ,  $M^{\mu y}$ ,  $M^{yy}$  в ней взяты с верхнего временного слоя. Соответствующую систему нелинейных сеточных уравнений необходимо решать совместно, относительно вектора неизвестных, компонентами которого являются температура в твердой и жидкой фазах и скорость межфазной границы.

Для уравнений Навье–Стокса на подвижной сетке  $\omega_h^{(x,y)}(t)$  получим следующую разностную схему

$$\mathcal{T}_P^{(x,y)}(\omega) \widehat{dS}_P^{(x,y)} + \mathcal{K}_P^{(x,y)}(\widehat{\omega}, \widehat{\psi}) \widehat{dS}_P^{(x,y)} = \mathcal{D}_P^{(x,y)}(\widehat{\omega}) \widehat{dS}_P^{(x,y)} - \mathcal{F}_{P^*}^{(x,y)}(T) \widehat{dS}_P^{(x,y)}, \quad (3.95)$$

$$-\widehat{\omega} \widehat{dS}_P^{(x,y)} = \mathcal{D}_P^{(x,y)}(\widehat{\psi}) \widehat{dS}_P^{(x,y)}. \quad (3.96)$$

Систему нелинейных сеточных уравнений (3.95), (3.96) необходимо решать совместно, относительно вектора неизвестных, компонентами которого являются функция тока и завихренность.

### 3.4. Эквивалентность подходов

**Теорема 3.1.** *Разностная схема (3.41)–(3.43), построенная с помощью метода выпрямления фронта, и разностная схема (3.94)–(3.96), построенная на подвижной сетке, удовлетворяющей соотношению (3.47), алгебраически эквивалентны.*

**Доказательство.** Выполним в разностной схеме (3.94)–(3.96) дискретный аналог замены переменных (3.15). Нетрудно проверить, что шаги сеток  $\omega_h^{(x,y)}$  и  $\omega_h^{(\xi,\eta)}$  связаны следующими соотношениями

$$h_e^x = h_e^\xi, \quad h_w^x = h_w^\xi, \quad (3.97)$$

$$h_n^y = y_N - y_P = \varphi(t_k, \xi_P, \eta_N) - \varphi(t_k, \xi_P, \eta_P) = l_n(\eta_N - \eta_P) = l_n h_n^\eta,$$

$$h_\alpha^y = l_\alpha h_\alpha^\eta, \quad \widehat{h}_\alpha^y = \widehat{l}_\alpha h_\alpha^\eta, \quad \alpha \in V. \quad (3.98)$$

В силу равенств (3.16), (3.46) скорости движения вершин контрольного объема  $v_\alpha^y$ ,  $\alpha \in V$  можно записать следующим образом

$$v_\alpha^y = \varphi_{\alpha,t}, \quad \alpha \in V. \quad (3.99)$$

Выполним замену переменных в разностном операторе  $\mathcal{D}_P^{(x,y)}(\widehat{f}) \widehat{dS}_P^{(x,y)}$ . Последовательно рассмотрим потоки через все границы ячейки  $S_P^{(x,y)}$ . Начнем с

«северной» границы, поток через которую определяется выражением (3.58). Замена переменных в разностных аналогах смешанных производных, входящих в (3.58), приводит к следующему равенству

$$\widehat{\Delta}\gamma_{\text{nen}}M_{\text{ne}}^{y\mu}\widehat{f}_{\text{n},\mu} + \widehat{\Delta}\gamma_{\text{nnw}}M_{\text{nw}}^{y\mu}\widehat{f}_{\text{n},\bar{\mu}} = 0.5 \left[ h_{\text{e}}^{\xi}L_{\text{ne}}^{\eta\xi}\widehat{f}_{\text{n},\xi} + h_{\text{w}}^{\xi}L_{\text{nw}}^{\eta\xi}\widehat{f}_{\text{n},\bar{\xi}} \right], \quad (3.100)$$

так как  $\widehat{\Delta}\gamma_{\text{nen}}\widehat{f}_{\text{n},\mu} = 0.5h_{\text{e}}^{\xi}\widehat{f}_{\text{n},\xi}$ ,  $\widehat{\Delta}\gamma_{\text{nnw}}\widehat{f}_{\text{n},\bar{\mu}} = 0.5h_{\text{w}}^{\xi}\widehat{f}_{\text{n},\bar{\xi}}$  и

$$\begin{aligned} M_{\text{ne}}^{y\mu} &= \varkappa_{\text{ne}}(-\widehat{y}_{\text{n},x}) = \varkappa_{\text{ne}}(\widehat{y}_{\text{nE}} - \widehat{y}_{\text{n}})/h_{\text{e}}^x = -\varkappa_{\text{ne}}[\varphi(t_{k+1}, \xi_E, \eta_{\text{n}}) - \varphi(t_{k+1}, \xi_{\text{P}}, \eta_{\text{n}})]/h_{\text{e}}^{\xi} = \\ &= \varkappa_{\text{ne}}(-\widehat{\varphi}_{\text{n},\xi}) = L_{\text{ne}}^{\eta\xi}, \quad M_{\text{nw}}^{y\mu} = L_{\text{nw}}^{\eta\xi}. \end{aligned}$$

С помощью соотношений (3.98) преобразуем члены, связанные с  $\widehat{f}_{\text{P},y}$ , к виду

$$\begin{aligned} M_{\text{ne}}^{yy}\widehat{f}_{\text{P},y} &= \varkappa_{\text{ne}}[1 + (\widehat{y}_{\text{n},x})^2]\widehat{f}_{\text{P},y} = \varkappa_{\text{ne}}[1 + (\widehat{\varphi}_{\text{n},\xi})^2](\widehat{f}_{\text{N}} - \widehat{f}_{\text{P}})/\widehat{h}_{\text{n}}^y = \\ &= \varkappa_{\text{ne}}[1 + (\widehat{\varphi}_{\text{n},\xi})^2]/(\widehat{l}_{\text{n}})\widehat{f}_{\text{P},\eta} = L_{\text{ne}}^{yy}\widehat{f}_{\text{P},\eta}, \quad M_{\text{nw}}^{yy}\widehat{f}_{\text{P},y} = L_{\text{nw}}^{yy}\widehat{f}_{\text{P},\eta}, \end{aligned}$$

откуда

$$0.5 [h_{\text{e}}^x M_{\text{ne}}^{yy} + h_{\text{w}}^x M_{\text{nw}}^{yy}] \widehat{T}_{\text{P},y} = 0.5 [h_{\text{e}}^{\xi} L_{\text{ne}}^{\eta\eta} + h_{\text{w}}^{\xi} L_{\text{nw}}^{\eta\eta}] \widehat{T}_{\text{P},\eta}. \quad (3.101)$$

Аналогично выполним замену переменных в выражении (3.60) для потока через «южную» границу:

$$\widehat{\Delta}\gamma_{\text{sse}}M_{\text{se}}^{y\mu}\widehat{f}_{\text{s},\mu} + \widehat{\Delta}\gamma_{\text{sws}}M_{\text{sw}}^{y\mu}\widehat{f}_{\text{s},\bar{\mu}} = 0.5 \left[ h_{\text{e}}^{\xi}L_{\text{se}}^{\eta\xi}\widehat{f}_{\text{s},\xi} + h_{\text{w}}^{\xi}L_{\text{sw}}^{\eta\xi}\widehat{f}_{\text{s},\bar{\xi}} \right], \quad (3.102)$$

$$0.5 [h_{\text{e}}^x M_{\text{se}}^{yy} + h_{\text{w}}^x M_{\text{sw}}^{yy}] \widehat{f}_{\text{P},\bar{y}} = 0.5 [h_{\text{e}}^{\xi} L_{\text{se}}^{\eta\eta} + h_{\text{w}}^{\xi} L_{\text{sw}}^{\eta\eta}] \widehat{f}_{\text{P},\bar{\eta}}. \quad (3.103)$$

Рассмотрим поток (3.66) через «восточную» границу. Так как  $\widehat{h}_{\text{ne}}^y\widehat{f}_{\text{e},y} = h_{\text{n}}^{\eta}\widehat{f}_{\text{e},\eta}$ ,  $\widehat{h}_{\text{se}}^y\widehat{f}_{\text{e},\bar{y}} = h_{\text{s}}^{\eta}\widehat{f}_{\text{e},\bar{\eta}}$  и  $M_{\text{ne}}^{\mu y} = L_{\text{ne}}^{\xi\eta}$ ,  $M_{\text{se}}^{\mu y} = L_{\text{se}}^{\xi\eta}$ , то для смешанных производных в (3.66) получим

$$0.5 \left[ \widehat{h}_{\text{ne}}^y M_{\text{ne}}^{\mu y} \widehat{f}_{\text{e},y} + \widehat{h}_{\text{se}}^y M_{\text{se}}^{\mu y} \widehat{f}_{\text{e},\bar{y}} \right] = 0.5 \left[ h_{\text{n}}^{\eta} L_{\text{ne}}^{\xi\eta} \widehat{f}_{\text{e},\eta} + h_{\text{s}}^{\eta} L_{\text{se}}^{\xi\eta} \widehat{f}_{\text{e},\bar{\eta}} \right]. \quad (3.104)$$

Для производной в направлении  $\mu$  будем иметь

$$0.5 \left[ \widehat{h}_{\text{ne}}^y M_{\text{ne}}^{\mu\mu} + \widehat{h}_{\text{se}}^y M_{\text{se}}^{\mu\mu} \right] \widehat{f}_{\text{P},\mu} = 0.5 \left[ h_{\text{n}}^{\eta} L_{\text{ne}}^{\xi\xi} + h_{\text{s}}^{\eta} L_{\text{se}}^{\xi\xi} \right] \widehat{f}_{\text{P},\xi}. \quad (3.105)$$

Здесь воспользовались тем, что в силу соотношений (3.97) и (3.98) справедливы равенства:

$$\begin{aligned}\widehat{h}_{\text{ne}}^y M_{\text{ne}}^{\mu\mu} \widehat{f}_{\text{P},\mu} &= \widehat{h}_{\text{ne}}^y \varkappa_{\text{ne}} \sqrt{1 + (\widehat{y}_{\text{P},x})^2} \widehat{f}_{\text{P},\mu} = \widehat{h}_{\text{ne}}^y \varkappa_{\text{ne}} (\widehat{f}_{\text{E}} - \widehat{f}_{\text{P}}) / h_{\text{e}}^x = \widehat{l}_{\text{ne}} h_{\text{n}}^{\eta} \varkappa_{\text{ne}} \widehat{f}_{\text{P},\xi} = \\ &= h_{\text{n}}^{\eta} L_{\text{ne}}^{\xi\xi} \widehat{f}_{\text{P},\xi}, \quad \widehat{h}_{\text{se}}^y M_{\text{se}}^{\mu\mu} \widehat{f}_{\text{P},\mu} = h_{\text{s}}^{\eta} L_{\text{se}}^{\xi\xi} \widehat{f}_{\text{P},\xi}.\end{aligned}$$

Для потока (3.68) на «западной» границе имеем:

$$0.5 \left[ \widehat{h}_{\text{nw}}^y M_{\text{nw}}^{\mu y} \widehat{f}_{\text{w},y} + \widehat{h}_{\text{sw}}^y M_{\text{sw}}^{\mu y} \widehat{f}_{\text{w},\bar{y}} \right] = 0.5 \left[ h_{\text{n}}^{\eta} L_{\text{nw}}^{\xi\eta} \widehat{f}_{\text{w},\eta} + h_{\text{s}}^{\eta} L_{\text{sw}}^{\xi\eta} \widehat{f}_{\text{w},\bar{\eta}} \right], \quad (3.106)$$

$$0.5 \left[ \widehat{h}_{\text{nw}}^y M_{\text{nw}}^{\mu\mu} + \widehat{h}_{\text{sw}}^y M_{\text{sw}}^{\mu\mu} \right] \widehat{f}_{\text{P},\bar{\mu}} = 0.5 \left[ h_{\text{n}}^{\eta} L_{\text{nw}}^{\xi\xi} + h_{\text{s}}^{\eta} L_{\text{sw}}^{\xi\xi} \right] \widehat{f}_{\text{P},\bar{\xi}}. \quad (3.107)$$

Учитывая соотношения (3.100)–(3.107) в формуле (3.69), получаем

$$\mathcal{D}_{\text{P}}^{(x,y)}(\widehat{f}) \widehat{dS}_{\text{P}}^{(x,y)} = \mathcal{D}_{\text{P}}^{(\xi,\eta)}(\widehat{f}) dS_{\text{P}}^{(\xi,\eta)}. \quad (3.108)$$

На фронте кристаллизации в уравнение (3.94) входит слагаемое, отвечающее за выполнение условия Стефана и описывающее скачок теплового потока при изменении агрегатного состояния вещества. Из формул (3.34) и (3.71) следует, что  $(\bar{v}^{\text{ph}})^y = (\bar{v}^{\text{ph}})^{\eta}$ , откуда вытекает, что на границе раздела фаз выполняется равенство

$$\mathcal{E}^{(x,y)}(\widehat{T}) \widehat{dS}_{\text{P}}^{(x,y)} = \mathcal{E}^{(\xi,\eta)}(\widehat{T}) dS_{\text{P}}^{(\xi,\eta)}. \quad (3.109)$$

Выполним замену переменных в  $\mathcal{K}_{\text{P}}^{(x,y)}(\widehat{T}, \widehat{\psi}) \widehat{dS}_{\text{P}}^{(x,y)}$ . Последовательно рассмотрим конвективные потоки через «вертикальные» и «горизонтальные» границы ячейки  $S_{\text{P}}^{(x,y)}$ . Для «вертикальных» границ  $\gamma_{\text{se ne}}$  и  $\gamma_{\text{nw sw}}$  получим

$$\widehat{T}_{\text{e}} \widehat{\psi}_{\text{e},y} \widehat{h}_{\text{e}}^y - \widehat{T}_{\text{w}} \widehat{\psi}_{\text{w},y} \widehat{h}_{\text{w}}^y = \left[ \widehat{T}_{\text{e}} \widehat{\psi}_{\text{e},\eta} - \widehat{T}_{\text{w}} \widehat{\psi}_{\text{w},\eta} \right] \hbar^{\eta}, \quad (3.110)$$

так как  $\widehat{\psi}_{\text{e},y} \widehat{h}_{\text{e}}^y = (\widehat{\psi}_{\text{Ne}} - \widehat{\psi}_{\text{Se}})/2 = \widehat{\psi}_{\text{e},\eta} \hbar^{\eta}$  и  $\widehat{\psi}_{\text{w},y} \widehat{h}_{\text{w}}^y = (\widehat{\psi}_{\text{Nw}} - \widehat{\psi}_{\text{Sw}})/2 = \widehat{\psi}_{\text{w},\eta} \hbar^{\eta}$ . Для «горизонтальных» границ  $\gamma_{\text{ne n}}$ ,  $\gamma_{\text{n nw}}$ ,  $\gamma_{\text{sw s}}$ ,  $\gamma_{\text{se se}}$  имеем

$$\begin{aligned}\left( \widehat{T}_{\text{n}} [\widehat{\psi}_{\mu_{\text{ne}}} \widehat{\Delta} \gamma_{\text{ne n}} + \widehat{\psi}_{\mu_{\text{nw}}} \widehat{\Delta} \gamma_{\text{n nw}}] - \widehat{T}_{\text{s}} [\widehat{\psi}_{\mu_{\text{sw}}} \widehat{\Delta} \gamma_{\text{sw s}} + \widehat{\psi}_{\mu_{\text{se}}} \widehat{\Delta} \gamma_{\text{se se}}] \right) = \\ = \left[ \widehat{T}_{\text{n}} \widehat{\psi}_{\text{n},\xi} - \widehat{T}_{\text{s}} \widehat{\psi}_{\text{s},\xi} \right] \hbar^{\xi}.\end{aligned} \quad (3.111)$$

Здесь мы воспользовались тем, что  $\widehat{\psi}_{\mu_{\alpha\beta}}\widehat{\Delta}\gamma_{\alpha\beta} = (\widehat{\psi}_{\tilde{\beta}} - \widehat{\psi}_{\tilde{\alpha}})/2$ . Подставляя равенства (3.110) и (3.111) в аппроксимацию (3.77) получаем, что

$$\mathcal{K}_{\mathbf{P}}^{(x,y)}(\widehat{T}, \widehat{\psi}) \widehat{dS}_{\mathbf{P}}^{(x,y)} = \mathcal{K}_{\mathbf{P}}^{(\xi,\eta)}(\widehat{T}, \widehat{\psi}) dS_{\mathbf{P}}^{(\xi,\eta)}. \quad (3.112)$$

Аналогичным образом можно показать, что для конвективных членов в уравнении переноса завихренности имеет место равенство

$$\mathcal{K}_{\mathbf{P}}^{(x,y)}(\widehat{\omega}, \widehat{\psi}) \widehat{dS}_{\mathbf{P}}^{(x,y)} = \mathcal{K}_{\mathbf{P}}^{(\xi,\eta)}(\widehat{\omega}, \widehat{\psi}) dS_{\mathbf{P}}^{(\xi,\eta)}. \quad (3.113)$$

Равенства (3.112), (3.113) вытекают из того, что в предложенные аппроксимации конвективных членов в явном виде не входят шаги сетки по пространству.

Выполним замену переменных в  $\mathcal{F}_{\mathbf{P}}^{(x,y)}(T) \widehat{dS}_{\mathbf{P}}^{(x,y)}$ . Из соотношения (3.98) следует, что

$$\text{Gr}_T \left( T_{\mathbf{e}} \widehat{h}_{\mathbf{e}}^y - T_{\mathbf{w}} \widehat{h}_{\mathbf{w}}^y \right) = \text{Gr}_T \left( T_{\mathbf{e}} \widehat{l}_{\mathbf{e}} \widehat{h}^{\eta} - T_{\mathbf{w}} \widehat{l}_{\mathbf{w}} \widehat{h}^{\eta} \right). \quad (3.114)$$

В силу того, что  $(-\widehat{y}_{\mathbf{n},x})h_{\mathbf{e}}^x + (-\widehat{y}_{\mathbf{n},\bar{x}})h_{\mathbf{w}}^x = -(\widehat{\varphi}_{\xi})_{\mathbf{n}}\widehat{h}^{\xi}$  и  $(-\widehat{y}_{\mathbf{s},x})h_{\mathbf{e}}^x + (-\widehat{y}_{\mathbf{s},\bar{x}})h_{\mathbf{w}}^x = -(\widehat{\varphi}_{\xi})_{\mathbf{s}}\widehat{h}^{\xi}$  имеем

$$\begin{aligned} \text{Gr}_T (T_{\mathbf{n}} [(-\widehat{y}_{\mathbf{n},x})h_{\mathbf{e}}^x + (-\widehat{y}_{\mathbf{n},\bar{x}})h_{\mathbf{w}}^x] - T_{\mathbf{s}} [(-\widehat{y}_{\mathbf{s},x})h_{\mathbf{e}}^x + (-\widehat{y}_{\mathbf{s},\bar{x}})h_{\mathbf{w}}^x]) = \\ = -\text{Gr}_T \left[ (\widehat{\varphi}_{\xi})_{\mathbf{n}} T_{\mathbf{n}} - (\widehat{\varphi}_{\xi})_{\mathbf{s}} T_{\mathbf{s}} \right] \widehat{h}^{\xi} \end{aligned} \quad (3.115)$$

Подставляя соотношения (3.114), (3.115) в оператор (3.81), получим, что

$$\mathcal{F}_{\mathbf{P}}^{(x,y)}(T) \widehat{dS}_{\mathbf{P}}^{(x,y)} = \mathcal{F}_{\mathbf{P}}^{(\xi,\eta)}(T) dS_{\mathbf{P}}^{(\xi,\eta)}. \quad (3.116)$$

Выполним замену переменных в  $\mathcal{T}_{\mathbf{P}}^{(x,y)}(f) \widehat{dS}_{\mathbf{P}}^{(x,y)}$ . В силу соотношений (3.97) и (3.98) имеем

$$dS_1^{(x,y)} = (h_{\mathbf{n}}^y + h_{\mathbf{ne}}^y)h_{\mathbf{e}}^x/8 = (l_{\mathbf{n}} + l_{\mathbf{ne}})h_{\mathbf{e}}^{\xi}h_{\mathbf{n}}^{\eta}/8.$$

Площади остальных четвертей ячейки преобразуются аналогичным образом. Поэтому первое слагаемое в аппроксимации (3.93) запишется в виде

$$f_{\mathbf{P},t} dS_{\mathbf{P}}^{(x,y)} = f_{\mathbf{P},t} \bar{l}_{\mathbf{P}} dS_{\mathbf{P}}^{(\xi,\eta)}. \quad (3.117)$$



Воспользовавшись формулой (3.99), для второго слагаемого в (3.93) получим

$$0.5[\widehat{h}_n^y \widehat{v}_n^y \widehat{f}_{P,\tilde{y}} + \widehat{h}_s^y \widehat{v}_s^y \widehat{f}_{P,\tilde{y}}] \widehat{h}_P^x = 0.5 \left[ h_n^\eta(\overline{\varphi}_t)_n \widehat{f}_{P,\tilde{\eta}} + h_s^\eta(\overline{\varphi}_t)_s \widehat{f}_{P,\tilde{\eta}} \right] \widehat{h}_P^\xi. \quad (3.118)$$

Замена слагаемых в аппроксимации (3.93) их выражениями (3.117) и (3.118) приводит к равенству

$$\mathcal{T}_P^{(x,y)}(f) \widehat{dS}_P^{(x,y)} = \mathcal{T}_P^{(\xi,\eta)}(f) dS_P^{(\xi,\eta)}. \quad (3.119)$$

В результате показано, что

$$\begin{aligned} & \left[ \mathcal{T}_P^{(x,y)}(T) + \mathcal{K}_P^{(x,y)}(\widehat{T}, \widehat{\psi}) - \mathcal{D}_P^{(x,y)}(\widehat{T}) - \mathcal{E}_{P^*}^{(x,y)}(\widehat{T}) \delta_{PP^*} \right] \widehat{dS}_P^{(x,y)} = \\ & = \left[ \mathcal{T}_P^{(\xi,\eta)}(T) + \mathcal{K}_P^{(\xi,\eta)}(\widehat{T}, \widehat{\psi}) - \mathcal{D}_P^{\xi,\eta}(\widehat{T}) - \mathcal{E}_{P^*}^{(\xi,\eta)}(\widehat{T}) \delta_{PP^*} \right] dS_P^{(\xi,\eta)}, \end{aligned} \quad (3.120)$$

$$\begin{aligned} & \left[ \mathcal{T}_P^{(x,y)}(\omega) + \mathcal{K}_P^{(x,y)}(\widehat{\omega}, \widehat{\psi}) - \mathcal{D}_P^{(x,y)}(\widehat{\omega}) + \mathcal{F}_{P^*}^{(x,y)}(T) \right] \widehat{dS}_P^{(x,y)} = \\ & = \left[ \mathcal{T}_P^{(\xi,\eta)}(\omega) + \mathcal{K}_P^{(\xi,\eta)}(\widehat{\omega}, \widehat{\psi}) - \mathcal{D}_P^{\xi,\eta}(\widehat{\omega}) + \mathcal{F}_{P^*}^{(\xi,\eta)}(T) \right] dS_P^{(\xi,\eta)}, \end{aligned} \quad (3.121)$$

$$\left[ \widehat{\omega}_P + \mathcal{D}_P^{(x,y)}(\widehat{\psi}) \right] \widehat{dS}_P^{(x,y)} = \left[ \widehat{\omega}_P \widehat{l}_P + \mathcal{D}_P^{(\xi,\eta)}(\widehat{\psi}) \right] dS_P^{(\xi,\eta)}. \quad (3.122)$$

Таким образом, доказано, что схемы (3.94)–(3.96) и (3.41)–(3.43) алгебраически эквивалентны.

Для задачи о фазовом переходе в чистом веществе выделен класс консервативных разностных схем, для которых метод выпрямления фронта и метод основанный на использовании подвижных сеток алгебраически эквивалентны. Получены дивергентная и недивергентная формы записи, аппроксимирующие соответствующие формы записи исходной дифференциальной задачи. Разностный оператор, аппроксимирующий на неподвижной сетке диссипативные члены, является самосопряженным и отрицательно определённым, дискретные аналоги конвективных членов не вносят вклад в балансы теплоты и кинетической энергии. В силу алгебраической эквивалентности предложенных разностных схем аналогичными свойствами обладает и разностные операторы на подвижной сетке. Таким образом построенный класс схем наследует основные свойства исходной дифференциальной задачи.

Результаты, полученные в Главе 3, использовались в работе [12] для решения задачи о кристаллизации трехкомпонентного раствора в прямоугольной ростовой камере. На подвижной сетке построена консервативная разностная схема, обеспечивающая выполнение дискретных аналогов законов сохранения кинетической энергии и массы. Рассмотренный вычислительный алгоритм применялся для изучения влияния размеров ростовой камеры на ход процесса кристаллизации.

## Глава 4

# Численное моделирование процесса получения многокомпонентных соединений методом направленной кристаллизации

В Главах 1 и 2 рассмотрена модельная задача о направленной кристаллизации многокомпонентного раствора. При построении математической модели использовался ряд существенных допущений. Предполагалось, что распределение температуры на поверхности ампулы известно. В начальный момент времени твердая и жидкая фазы имеют сопоставимые размеры, скорость движения границы раздела невысока — рост кристалла происходит в условиях квазиравновесия. В натурных экспериментах измерить температуру ампулы крайне затруднительно. Как правило, исследователю доступны лишь косвенные данные о температуре на стенках печи. Во многих технологических режимах на начальной стадии процесса жидкая фаза в ростовой камере отсутствует, ее необходимо сформировать, растворив материал заданного состава. Фазовые переходы могут протекать в неравновесных условиях, в таком случае существенную роль начинают играть поверхностные процессы на межфазной границе. Таким образом для исследования реальных технологических режимов выращивания предложенную математическую модель и численный метод ее исследования необходимо модифицировать.

В главах 1–3 изложены принципы построения надежного вычислительного алгоритма решения задачи о фазовом переходе в многокомпонентном растворе. Основу предложенной вычислительной стратегии составляют

- применение алгоритмов, основанных на явном выделении границы раздела фаз;
- использование консервативных разностных схем, наследующих основные свой-

ства исходной дифференциальной задачи;

- совместное решение нелинейных сеточных уравнений, описывающих тепло-массоперенос в системе.

Покажем, как на основе данной стратегии можно модифицировать ранее предложенный численный алгоритм для расчета реальных технологических процессов.

## 4.1. Постановка задачи

Рассмотрим процесс получения двухкомпонентного соединения  $A_xB_{1-x}$  методом направленной кристаллизации. Рост полупроводникового соединения осуществляется за счет протяжки ампулы с кристаллом-затравкой и растворенным материалом вдоль вертикальной оси цилиндрической печи (рис. 4.1, *а*) с неравномерным распределением температуры по высоте (рис. 4.1, *б*). Перед началом процесса внутрь ампулы помещают тигль, на дне которого находится кристалл-затравка однородного состава. Оставшуюся часть тигля заполняют поликристаллическим материалом из компонентов  $A$  и  $B$  (рис. 4.1, *в*).

На следующем этапе процесса температуру в печи повышают таким образом, чтобы произошло плавление поликристаллической загрузки, и в тигле образовалась жидкая фаза, состоящая из компонентов  $A$  и  $B$  (рис. 4.2). На данной стадии процесса требуется полностью расплавить загрузку, минимизировав при этом плавление кристалла-затравки.

По окончании плавления необходимо обеспечить рост кристалла с заданным распределением состава и выпуклой в жидкую фазу поверхностью. Пересыщение в растворе вблизи границы раздела фаз поддерживается за счет понижения температуры в печи и одновременного перемещения ампулы вниз вдоль вертикальной оси установки (рис. 4.3).

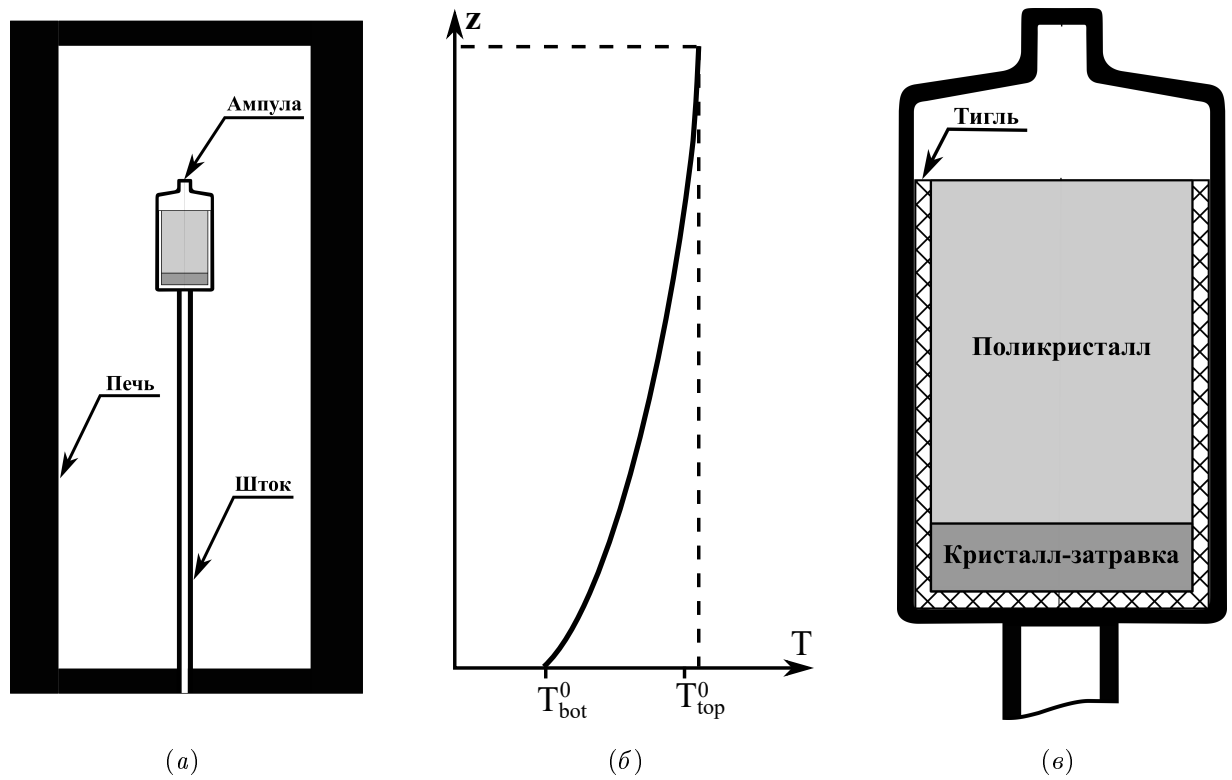


Рис. 4.1. Начальная стадия: а) Положение ампулы в печи, б) Профиль температуры на боковой стенке печи, в) Ампула и ее содержимое.

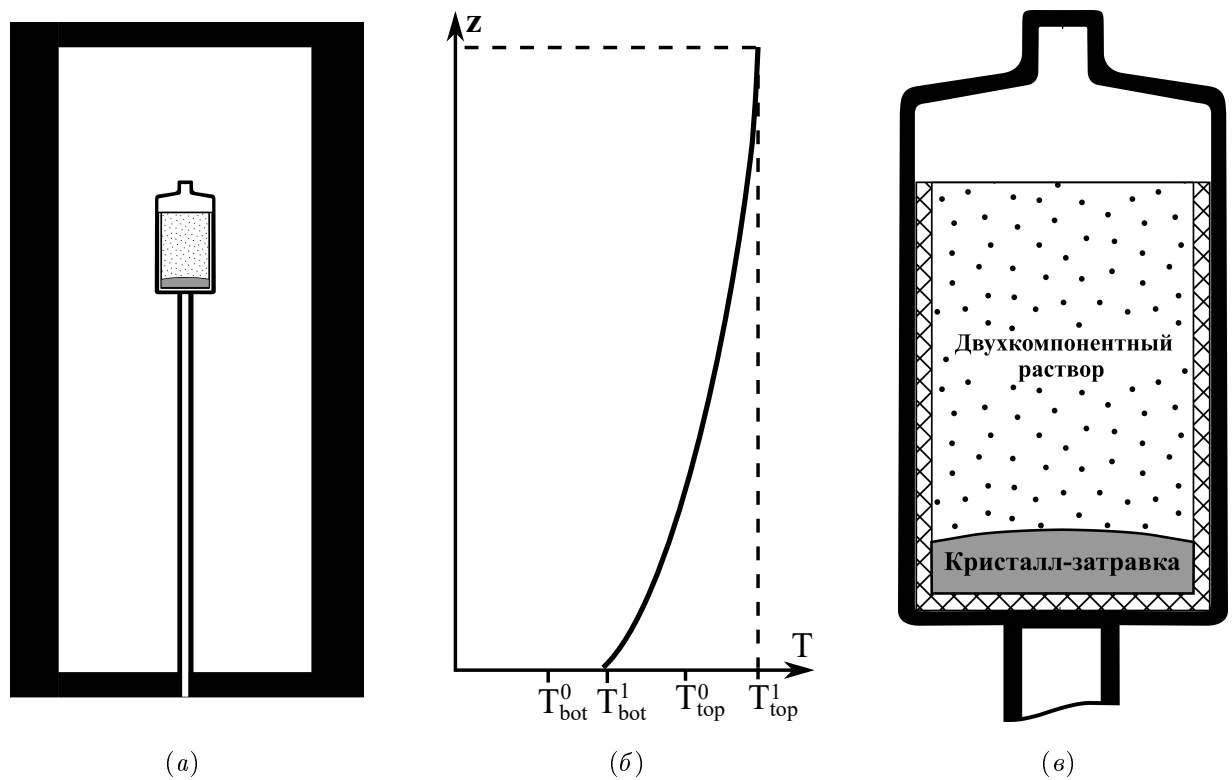


Рис. 4.2. Стадия растворения: а) Положение ампулы в печи, б) Профиль температуры на боковой стенке печи, в) Ампула и ее содержимое.

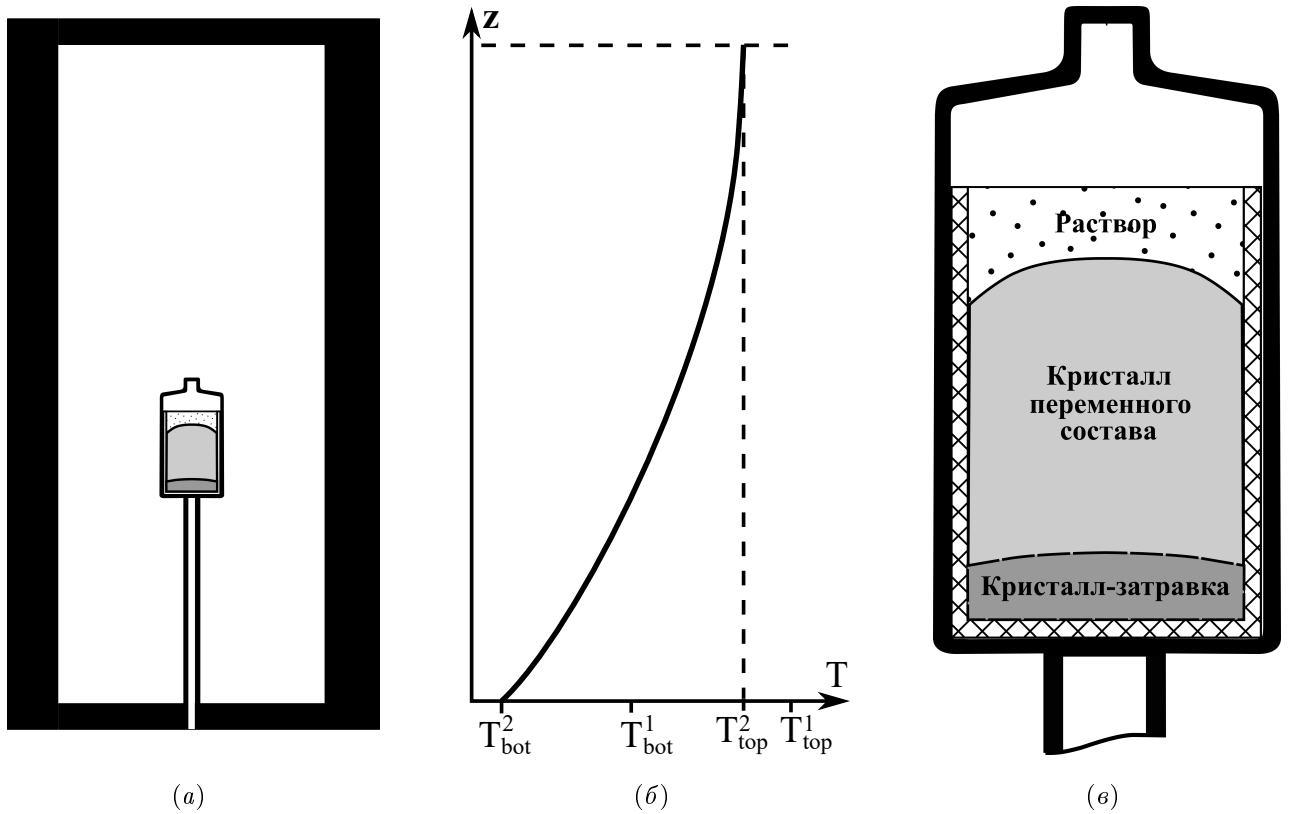


Рис. 4.3. Стадия роста: а) Положение ампулы в печи, б) Профиль температуры на боковой стенке печи, в) Ампула и ее содержимое.

### Математическая модель

Как и ранее в Главе 1 поля температуры, концентрации и скоростей жидкости предполагаются осесимметричными. Расчет ведется в области  $\Omega(r, z)$ , расположенной в плоскости  $(r, z)$  и состоящей из четырех подобластей: затравки и кристалла  $\Omega^{cr}(t, r, z)$ , жидкой фазы  $\Omega^{lq}(t, r, z)$ , тигля  $\Omega^{cruc}(r, z)$  и ампулы  $\Omega^{amp}(r, z)$  (см. рис. 4.4).

Тепломассоперенос в жидкой фазе  $\Omega^{lq}$  описывается с помощью уравнений Навье — Стокса (1.1), (1.2) и уравнений конвективного тепло- и массообмена (1.3), (1.4). Теплоперенос в твердой фазе  $\Omega^{cr}$ , ампуле  $\Omega^{amp}$  и тигле  $\Omega^{cruc}$  осуществляется механизмом теплопроводности. Учитывается диффузионный массоперенос компонента  $A$  в твердой фазе.

На фронте кристаллизации и внутренней стенке тигля в жидкой фазе выполняются условия прилипания и непротекания, верхняя граница жидкости

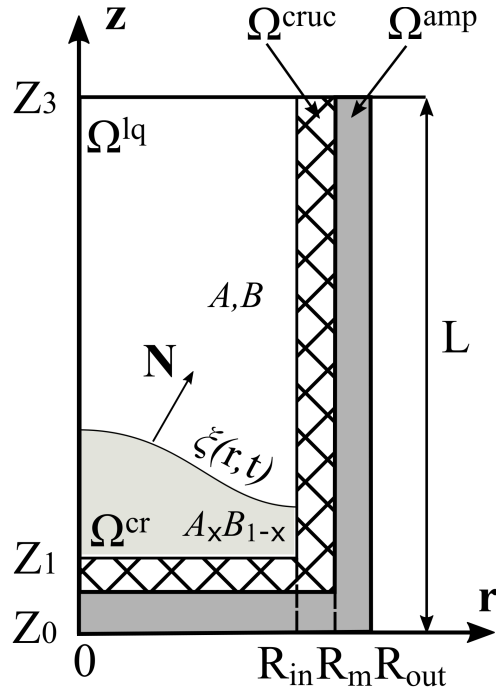


Рис. 4.4. Цилиндрическая ампула.

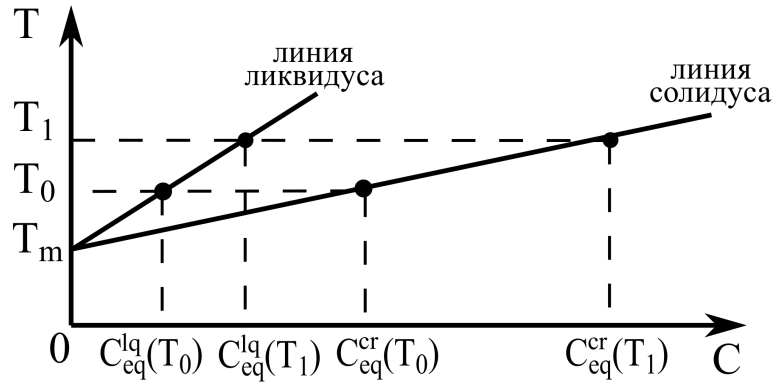


Рис. 4.5. Линейная фазовая диаграмма

считается свободной, т.е.

$$\psi|_{z=Z_3} = 0, \quad \omega|_{z=Z_3} = 0.$$

Внутренние стенки тигля непроницаемы для вещества. Ампула, тигль и его содержимое находятся в идеальном тепловом контакте.

На поверхности ампулы  $\partial\Omega$  задается следующее граничное условие для температуры

$$k \frac{\partial T}{\partial n} = q_{\text{rad}}(M). \quad (4.1)$$

Здесь  $q_{\text{rad}}(M)$  — плотность потока теплового излучения, падающего с печи на

поверхность ампулы в точке  $M \in \partial\Omega$ . Из экспериментов известно, что излучение практически не взаимодействует со средой, заполняющей зазор между ампулой и нагревателем. Поэтому для вычисления  $q_{\text{rad}}$  используется аналитический подход, основанный на определении угловых коэффициентов излучения экспериментальной установки [115]. Поток излучения вычисляется по формуле

$$q_{\text{rad}}(M) = \sigma\varepsilon [T(M)^4 - T_{\text{equiv}}(M)^4], \quad (4.2)$$

где  $\sigma$  — постоянная Стефана — Больцмана,  $\varepsilon$  — степень черноты ампулы,  $T_{\text{equiv}}(M)$  — эквивалентная температура среды в точке  $M$ :

$$T_{\text{equiv}}(M)^4 = \int_{\Gamma_h} F_c(M, M') T_h^4(M') r d\gamma. \quad (4.3)$$

Здесь  $\Gamma_h$  — внутренняя поверхность печи,  $T_h$  — температура на  $\Gamma_h$ ,  $F_c(M, M')$  — угловой коэффициент между точками  $M \in \partial\Omega$  и  $M' \in \Gamma_h$  (см. рис. 4.6). В работе

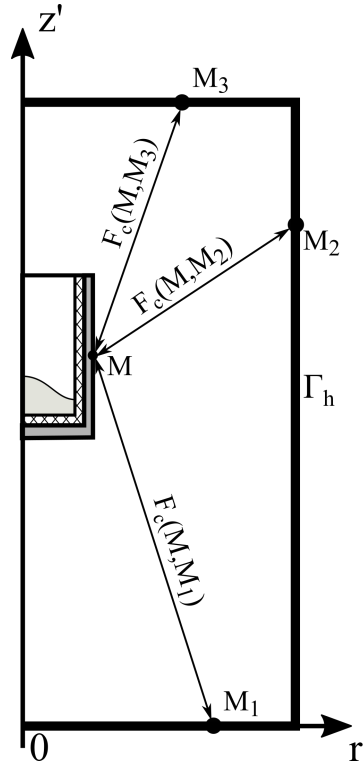


Рис. 4.6. Угловые коэффициенты установки.

[115] представлены громоздкие аналитические формулы для вычисления угловых коэффициентов в случае рассматриваемой конфигурации установки. Пока-



зано, что результаты полученные с помощью формул (4.2), (4.3) хорошо согласуются с результатами, полученными в ходе численного решения интегрального уравнения переноса излучения методом дискретных направлений в программной среде Comsol Multiphysics. Данное обстоятельство свидетельствует в пользу надежности рассматриваемого подхода.

Эквивалентная температура  $T_{\text{equiv}}$  в каждой точке поверхности ампулы вычисляется по формуле (4.3); интеграл в правой части равенства (4.3) определяется численно, с помощью квадратурной формулы центральных прямоугольников. Использование граничного условия в форме (4.1)–(4.3) позволяет описать эффекты, вызванные неоднородностью распределения температуры на боковой поверхности и торцах ампулы.

## 4.2. Результаты численного моделирования

В рамках численного моделирования рассмотрим основные этапы процесса: растворение загрузки, смену растворения ростом, кристаллизацию двухкомпонентного соединения. В расчетах будем использовать реальные параметры установки, материалов, внешних температурных режимов.

### 4.2.1. Численное моделирование растворения загрузки

Для исследования рассмотренной модели процесса направленной кристаллизации, численный алгоритм предложенный в Главах 1–3 необходимо модифицировать. В задаче возникает новая расчетная подобласть — тигель. Однако данное обстоятельство не приводит к усложнению вычислительного процедуры. По существу, ампула и тигель отличаются лишь физическими параметрами. Поэтому использование метода контрольных объемов позволяет естественным образом построить однородную разностную схему для соответствующей задачи теплопроводности.

Физические и геометрические параметры твердой и жидкой фаз, заправки,

ампулы и тигля приведены в таблицах В.1, В.2, В.3 в приложении В. Предполагается, что в начальный момент времени высота расплава составляет менее одного процента от общей высоты области, при этом по окончании процесса растворения жидкая фаза занимает большую часть ростовой камеры. Таким образом размеры области, в которой необходимо моделировать процессы конвективного переноса в ходе расчета изменяются в десятки раз. Поэтому к качеству алгоритма решения соответствующих сеточных уравнений возникают повышенные требования.

Начальное распределение температуры в области является однородным по радиусу и линейным по высоте. Расплав и кристалл находятся в равновесии (рис. (4.5)):  $x^{\text{cr}} = 0.04$ ,  $x^{\text{лq}} = 0.04/1.4$ . Температура плавления загрузки составляет 1371.3 К. Параметры теплового режима на этапе растворения приведены в таблице В.4 в приложении В. Сначала температуру в печи повышают, затем систему выдерживают при постоянной температуре, для того чтобы переходные процессы, протекающие в ампуле, установились. Затем описанный процесс повторяют. Скорость нагрева и длительность выдержки подобраны таким образом, чтобы минимизировать плавление затравки по окончании процесса. Длительность процесса составляет 14.5 часов.

Предварительные расчеты показали, что моделирование процесса растворения в квазиравновесном приближении приводит к возникновению в твердой фазе области, температура в которой выше температуры плавления загрузки. На рисунке 4.7 приведены распределения температуры и состава твердой и жидкой фазы по высоте области в начальный момент времени (штрих-пунктирные кривые) и на более позднем этапе процесса (сплошные кривые). При  $t = 0$  составы фаз однородны и находятся в равновесии на границе раздела при температуре  $T_{eq} = T_0$  равной температуре плавления загрузки (рис. 4.7, квадратные маркеры). На более поздней стадии температуру в печи повышают, растворенное вещество поступает в жидкую фазу, содержание компонента А в расплаве в окрестности границы раздела фаз увеличивается, в соответствии с условия-

ми фазового равновесия (рис. 4.5) концентрация компонента А в твердой фазе также увеличивается, данное обстоятельство приводит к росту температуры фазового перехода (рис. 4.7, круглые маркеры). Из-за перестройки поля температуры, внутри твердой фазы возникает зона, температура которой выше температуры плавления загрузки  $T_0$  (серая область на рис. 4.7). Массоперенос не способен компенсировать данный эффект, так как ширина диффузионного слоя, образующегося в загрузке в окрестности границы раздела, существенно меньше ширины перегретой области. Существование “перегретой твердой фазы”

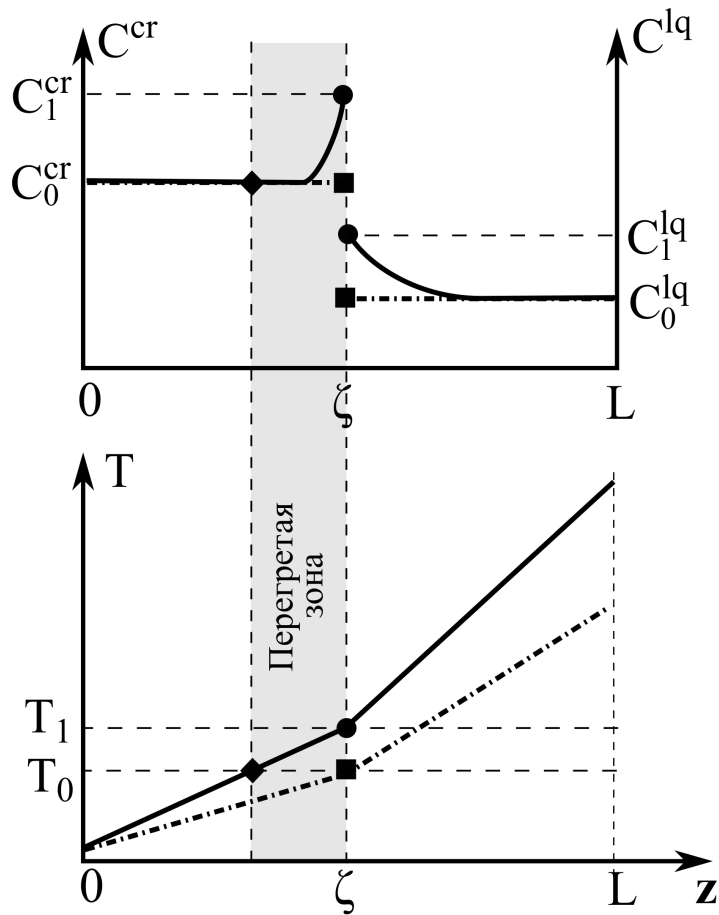


Рис. 4.7. Образование перегретой зоны в твердой фазе.

зы” в течение длительного отрезка времени противоречит законам термодинамики. Поэтому при исследовании растворения квазиравновесное приближение является некорректным. Рассмотренную математическую модель необходимо модифицировать: далее при описании процесса растворения будем считать, что фазовый переход происходит при постоянной температуре равной температуре

плавления загрузки, и состав твердой и жидкой фаз связан соотношением

$$x^{lq} = k_{\text{seg}} x^{\text{cr}}.$$

Важно отметить, что физическая постановка задачи о растворении твердой фазы требует дополнительного исследования. Однако включение в математическую модель условий на границе раздела, обеспечивающих самосогласованное описание процесса фазового перехода, скорее всего не приведет к значительному усложнению вычислительной процедуры. Алгоритм решения сеточных уравнений тепломассопереноса обладает значительным запасом устойчивости и допускает модификацию разностной модели на межфазной границе.

На рисунке 4.8 приведены распределения температуры в области в различные моменты времени. Результаты моделирования показывают, что практиче-

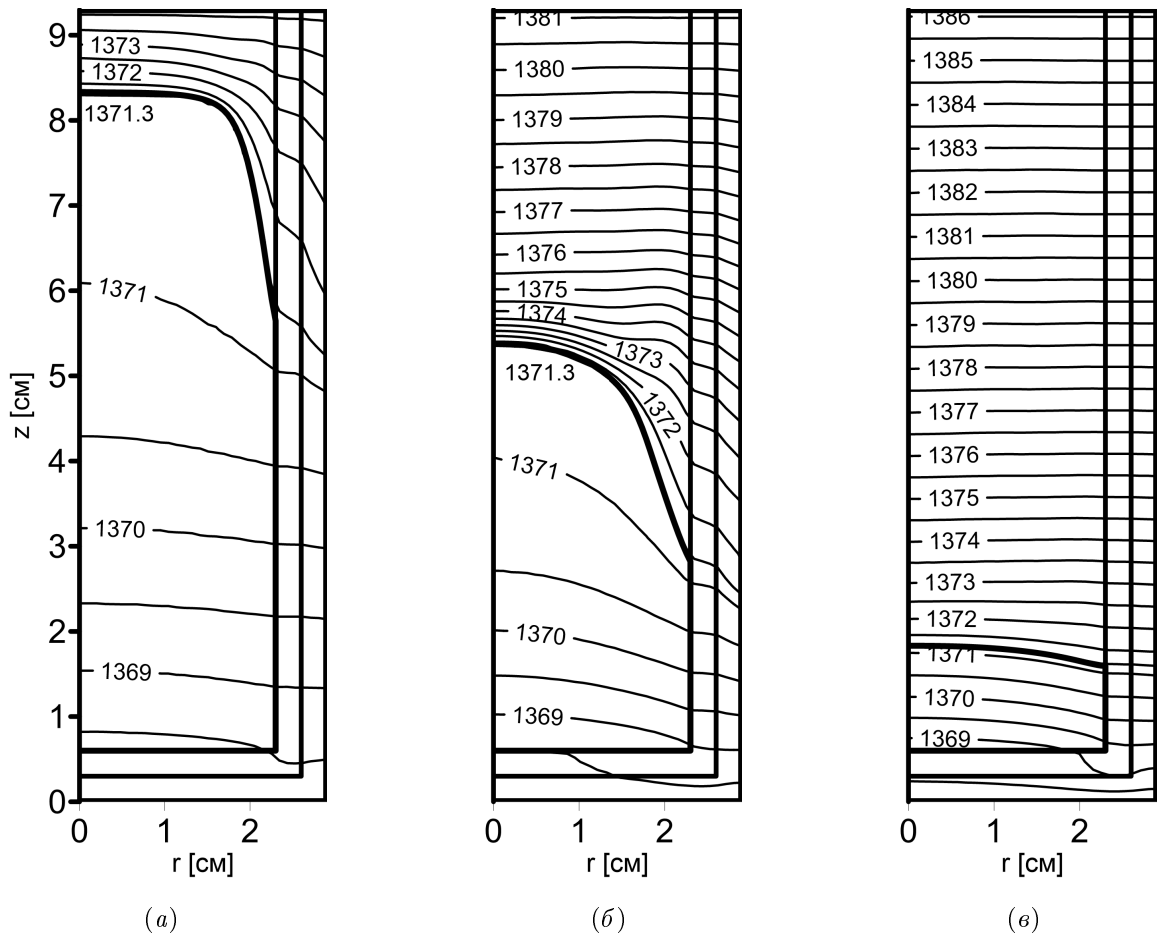


Рис. 4.8. Распределение температуры в различные моменты времени: (а)  $t = 2$  часа; (б)  $t = 6$  часов; (в)  $t = 14$  часов.

ски на протяжении всего процесса граница раздела фаз значительно искривлена, наиболее глубокое растворение происходит вблизи стенки тигля.

Форма границы раздела в различные моменты времени приведена на рисунке 4.9. С течением времени, в силу того что после нагрева система выдерживается при постоянной температуре, кривизна фронта уменьшается. Результаты расчетов показывают, что используемые параметры внешнего температурного режима обеспечивают незначительную глубину растворения затравки.

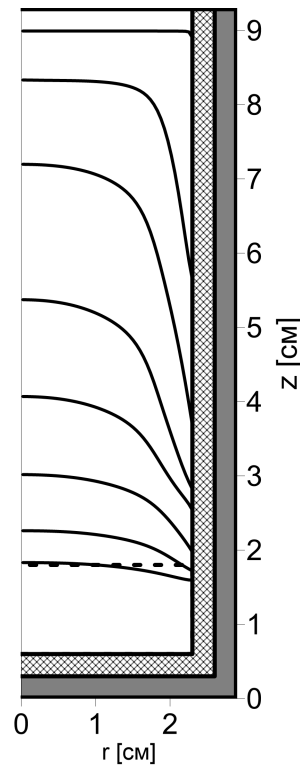


Рис. 4.9. Положения границы раздела фаз в различные моменты времени. Контуры приведены для  $0 \leq t \leq 14$  часов с шагом 2 часа. (Пунктирная линия - граница загрузки и затравки.)

Относительная плотность компонента  $A$  ниже, чем у компонента  $B$ . Поэтому при растворении загрузки из-за поступления более легкого компонента жидкая фаза становится неустойчиво стратифицированной по высоте, в расплаве возникает конвективное движение. Образуется течение состоящее из системы вложенных тороидальных валов (рис. 4.10). Распределение концентрации компонента  $A$  на начальном этапе процесса приведено на рисунке (4.11). Аналогичные конвективные структуры и распределения состава жидкой фазы на-

блюдаются при выращивании тонких пленок методом жидкофазной эпитаксии [108; 109; 116; 117]. Из-за нагрева системы в расплаве образуется радиальный температурный градиент. У стенки ампулы возникает вихрь, который с течением времени вытесняет остальные конвективные структуры и заполняет всю жидкую фазу.

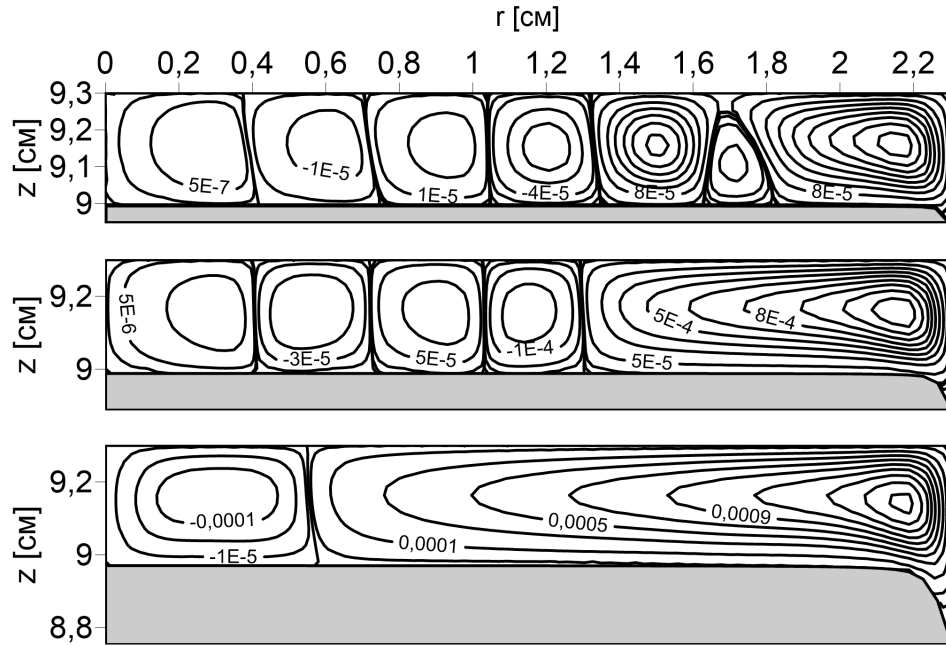


Рис. 4.10. Распределение функции тока на начальном этапе процесса ( $t = 3; 7; 14$  мин).

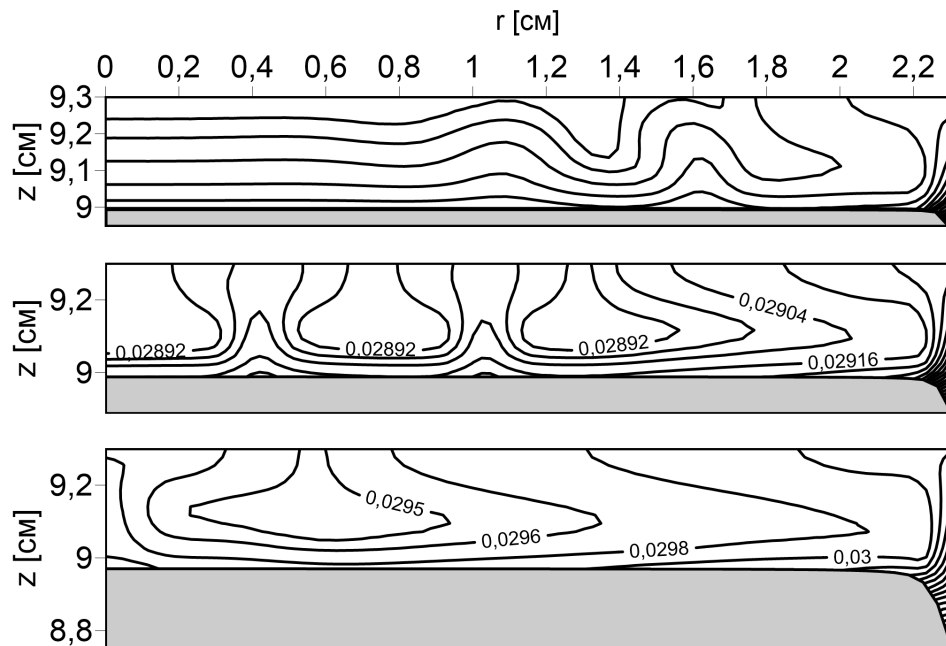


Рис. 4.11. Концентрация компонента А в расплаве на начальном этапе процесса ( $t = 3; 7; 14$  мин).

На развитой стадии процесса концентрация компонента  $A$  в расплаве становится практически постоянной и в соответствии с законом сохранения массы равной содержанию компонента  $A$  в загрузке (рис. 4.12 ).

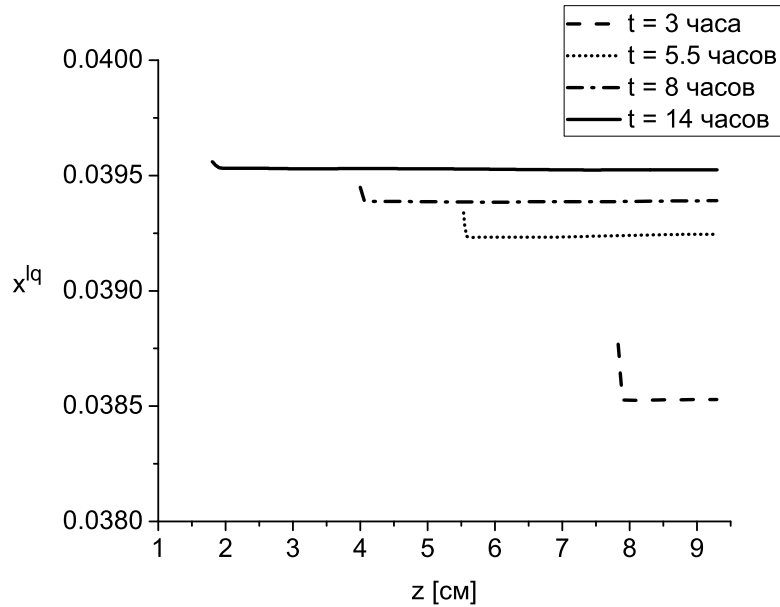


Рис. 4.12. Распределение концентрации компонента  $A$  по высоте жидкой фазы при  $r = 0$ .

Распределение функции тока в различные моменты времени приведено на рисунке 4.13. Видно, что сначала течение состоит из одного вихря (рис. 4.13, *а* и 4.13, *б*). Однако на более позднем этапе процесса из-за увеличения высоты жидкой фазы, в верхнем углу области возникает вторичное течение, при этом периодически в расплаве образуется холодная область более высокой плотности, движущаяся от верхней границы к фронту кристаллизации (рис. 4.13, *в*).

Результаты расчетов показывают, что предложенный численный алгоритм позволяет моделировать возникновение конвективного движения в тонком слое жидкости, перестройку течения, вызванную увеличением высоты расплава, нестационарные процессы тепломассопереноса, протекающие в жидкой фазе на развитой стадии растворения. Работоспособность вычислительного алгоритма в достаточно широком диапазоне изменения параметров течения обусловлена выполнением на разностном уровне аналогов законов сохранения завихренности, кинетической и внутренней энергии, массы.

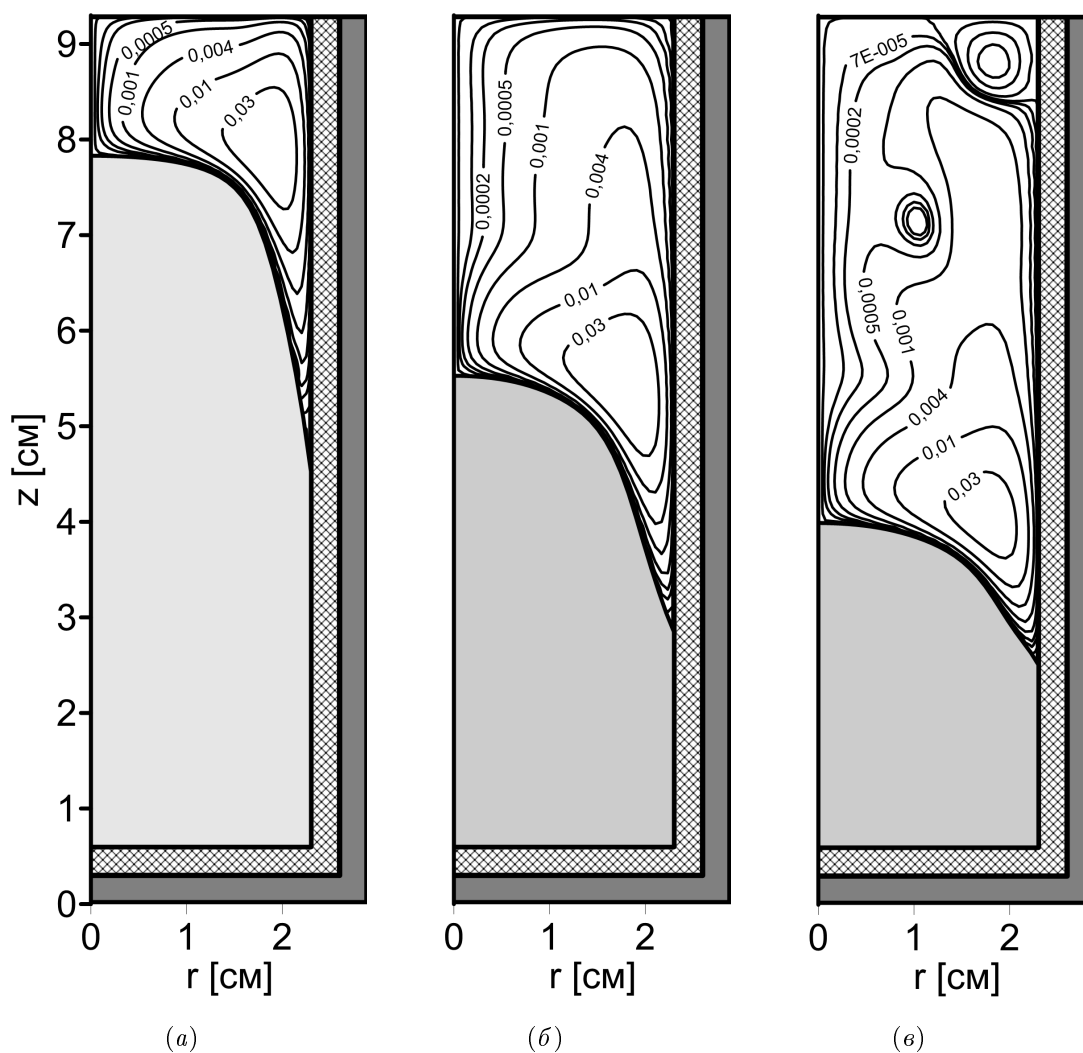


Рис. 4.13. Распределение функции тока в различные моменты времени: (а)  $t = 3$  часа; (б)  $t = 5.5$  часов; (в)  $t = 8$  часов.

В расчетах использовалась равномерная в радиальном направлении сетка: число узлов внутри тигля равно 30, внутри боковой стенки тигля — 10, внутри боковой стенки ампулы — 10. Сетка в вертикальном направлении равномерна внутри торцов ампулы и тигля (10 узлов в каждом) и сгущается к межфазной границе внутри раствора и кристалла (100 узлов в каждой из фаз). Шаг по времени  $\tau = 0.001t_\nu \approx 1.3$  сек. Длительность процесса составляет 14.5 часов, результаты расчетов были получены за 20 минут. Использование более подробных сеток не приводило к существенному уточнению результатов расчетов.



#### 4.2.2. Численное моделирование роста кристалла

Известно, что для получения полупроводниковых материалов высокого качества направленную кристаллизацию жидкой фазы необходимо осуществлять таким образом, чтобы на протяжении всего процесса граница раздела была выпуклой в раствор/расплав. Дефекты кристаллической решетки, как правило, образуются на фронте кристаллизации и движутся по нормали к границе раздела. Поэтому в случае выпуклой межфазной границы дефекты, образовавшиеся в центральной части кристалла, с течением времени перемещаются к боковой границе твердой фазы. Данное обстоятельство приводит к существенному улучшению характеристик материалов. Возникает задача об определении параметров внешнего температурного режима, обеспечивающего рост кристалла с заданными свойствами и поверхностью необходимой формы.

В работе [43] на основе анализа упрощенной модели процесса показано, что рост кристалла с выпуклой границей раздела будет происходить, только в том случае, если радиальная компонента теплового потока вблизи фронта кристаллизации является отрицательной (см. рис. 4.14). Там же показано, что в этом случае профиль температуры по высоте жидкой фазы должен быть выпуклым вверх, т.е.

$$\frac{\partial^2 T}{\partial z^2} < 0, \quad z > \zeta(t, r). \quad (4.4)$$

Перейдем к рассмотрению результатов расчетов. Начальное распределение температуры в области является однородным по радиусу и линейным по высоте. На стадии роста температуру в печи понижают, одновременно с этим осуществляя протяжку ампулы вниз вдоль вертикальной оси установки. Скорость движения ампулы и закон, по которому происходит понижение температуры в печи, подбираются таким образом, чтобы охлаждение торцов ампулы происходило практически с постоянной скоростью. В ходе процесса дно ампулы охлаждается на 90 К, свободная поверхность жидкой фазы — на 20 К. Длительность процесса составляет 140 часов. Толщина затравки — 0.5 см. Моделирова-

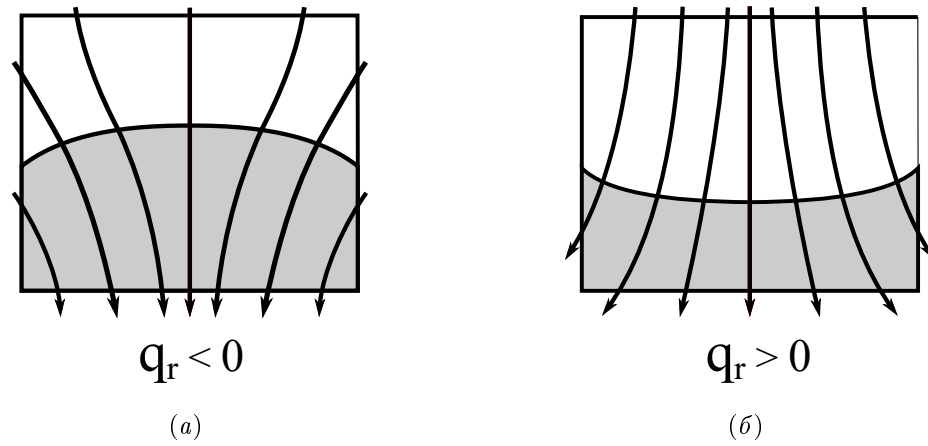


Рис. 4.14. Рост кристалла: а) с выпуклой поверхностью, б) с вогнутой поверхностью. Стрелками изображены линии тока  $\mathbf{q} = -k\nabla T = (q_r, q_z)$ .

ние роста кристалла осуществляется в рамках квазиравновесного приближения: состав фаз и температура на фронте кристаллизации удовлетворяют фазовой диаграмме системы. Содержание компонента  $A$  в твердой и жидкой фазах в начальный момент времени:  $x^{\text{cr}} = 0.04$ ,  $x^{\text{li}} = 0.04$ . Раствор является насыщенным при  $t = 0$ .

На рисунке (4.15) приведены распределения температуры в области в различные моменты времени. В силу условий фазового равновесия фронт кристаллизации не является изотермическим, температура на нем меняется с течением времени. Использование сравнительно простого и нетребовательного к вычислительным ресурсам аналитического подхода для расчета радиационного теплообмена между печью и ее содержимым позволяет описывать эффекты вызванные неоднородностью распределения температуры на поверхности ампулы. Результаты моделирования показывают, что при выбранных параметрах внешнего температурного режима, охлаждение системы преимущественно осуществляется через дно ампулы, радиальная компонента теплового потока в окрестности границы раздела является отрицательной, на протяжении почти всего процесса происходит рост кристалла с выпуклой поверхностью. На поздней стадии роста ( $t > 120$  часов) поле температуры вблизи фронта кристаллизации определяется процессами протекающими в верхней части ампулы, влияние дна ослабевает,

межфазная граница становится вогнутой.

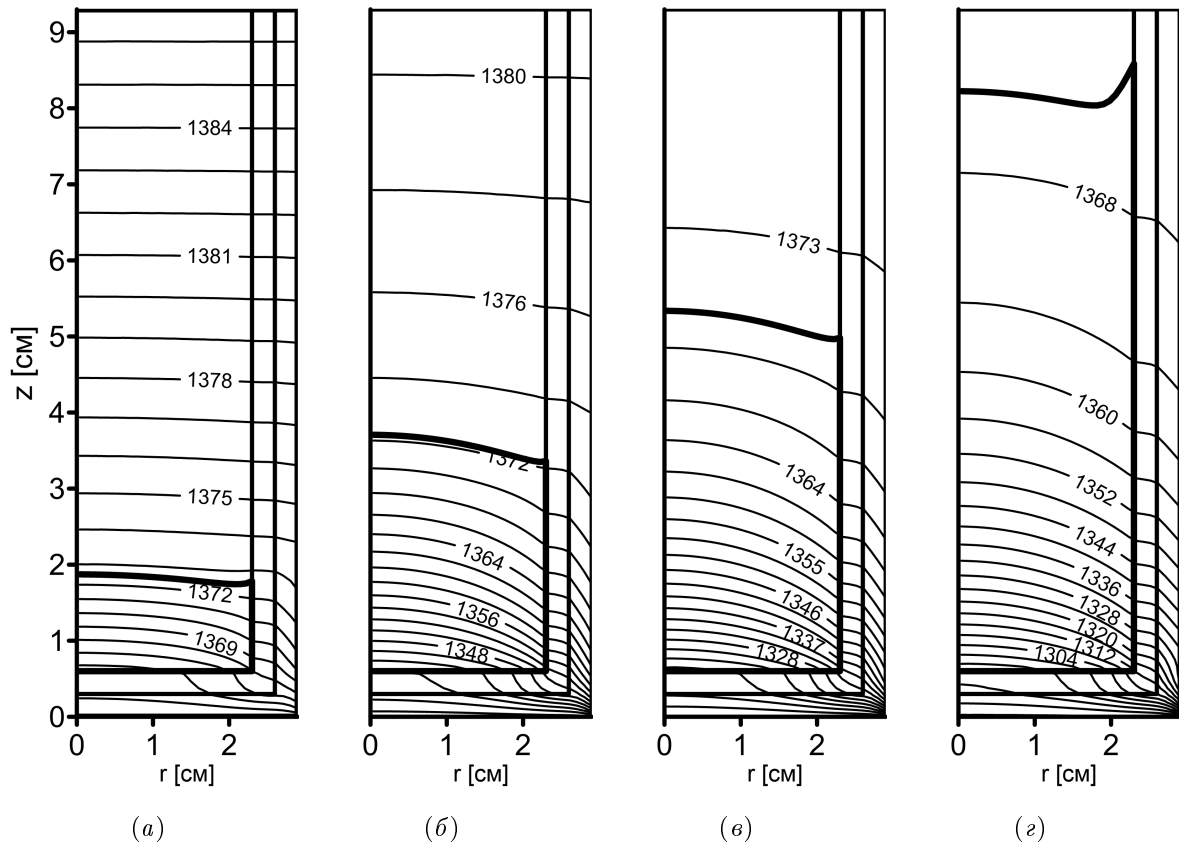


Рис. 4.15. Распределение температуры в области в различные моменты времени: (а)  $t = 10$  часов, (б)  $t = 50$  часов, (в)  $t = 90$  часов, (г)  $t = 130$  часов.

Распределение температуры по высоте жидкой фазы в различные моменты времени приведено на рисунке 4.16. Результаты расчетов согласуются с вы-

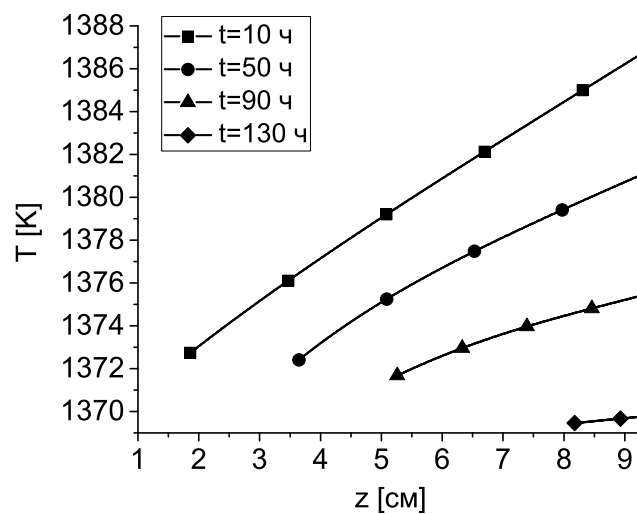


Рис. 4.16. Распределение температуры по высоте жидкой фазы в сечении  $r = 1$  см .

водами полученными в работе [43]: при  $t < 120$  часов профиль температуры является выпуклым вверх (см. формула (4.4)).

В результате понижения температуры в ампуле образуется радиальный температурный градиент, в жидкой фазе начинается конвективное движение. Однако в ходе роста кристалла содержание легкого компонента  $A$  в расплаве вблизи границы раздела уменьшается, в жидкой фазе возникает стабилизирующий вертикальный концентрационный градиент. В результате чего на развитой стадии процесса интенсивность конвективного переноса значительно уменьшается. На рисунке 4.17 приведены распределения функции тока и концентрации компонента  $A$  в жидкой фазе в момент времени  $t = 30$  часов. Видно, что жидкость поднимается вверх вдоль боковой стенки тигля, и опускается вниз в центре расплава. Наблюдается незначительное искривление изолиний концентрации в пристеночной области. Рост кристалла происходит в режиме близком к диффузионному.

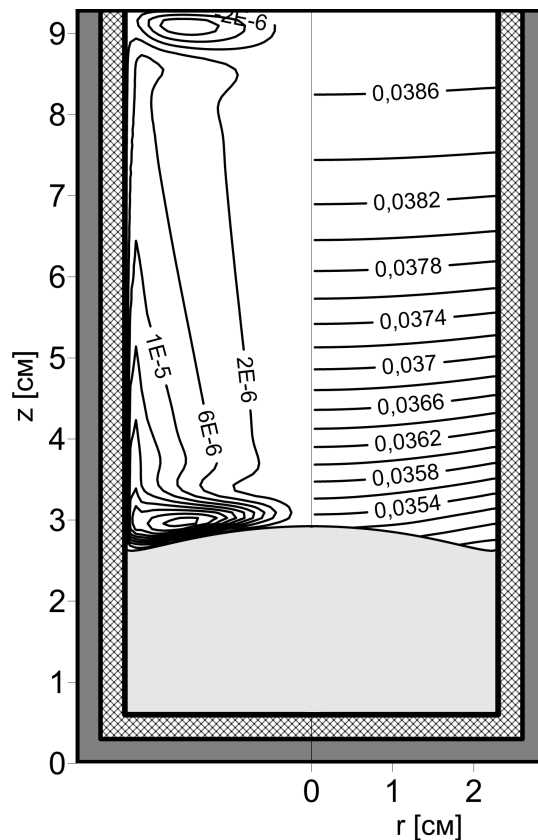


Рис. 4.17. Функция тока (левая часть) и содержание компонента  $A$  в растворе (правая часть) в момент времени  $t = 30$  часов.

Положение границы раздела в различные моменты времени приведено на рисунке 4.18, *а*. Расчеты показывают, что при  $40 < t < 100$  часов скорость движения границы раздела является практически постоянной по радиусу кристалла (рис. 4.18, *б*). Однако на поздней стадии процесса рассмотренный температурный режим не позволяет управлять формой межфазной границы. При  $100 < t < 125$  часов поле температуры вблизи фронта кристаллизации в основном определяется процессами теплопереноса, протекающими в верхней части ампулы, скорость фронта значительно увеличивается. Падение скорости при  $t > 125$  часов связано с обеднением расплава и значительным уменьшением объема жидкой фазы на завершающем этапе процесса.

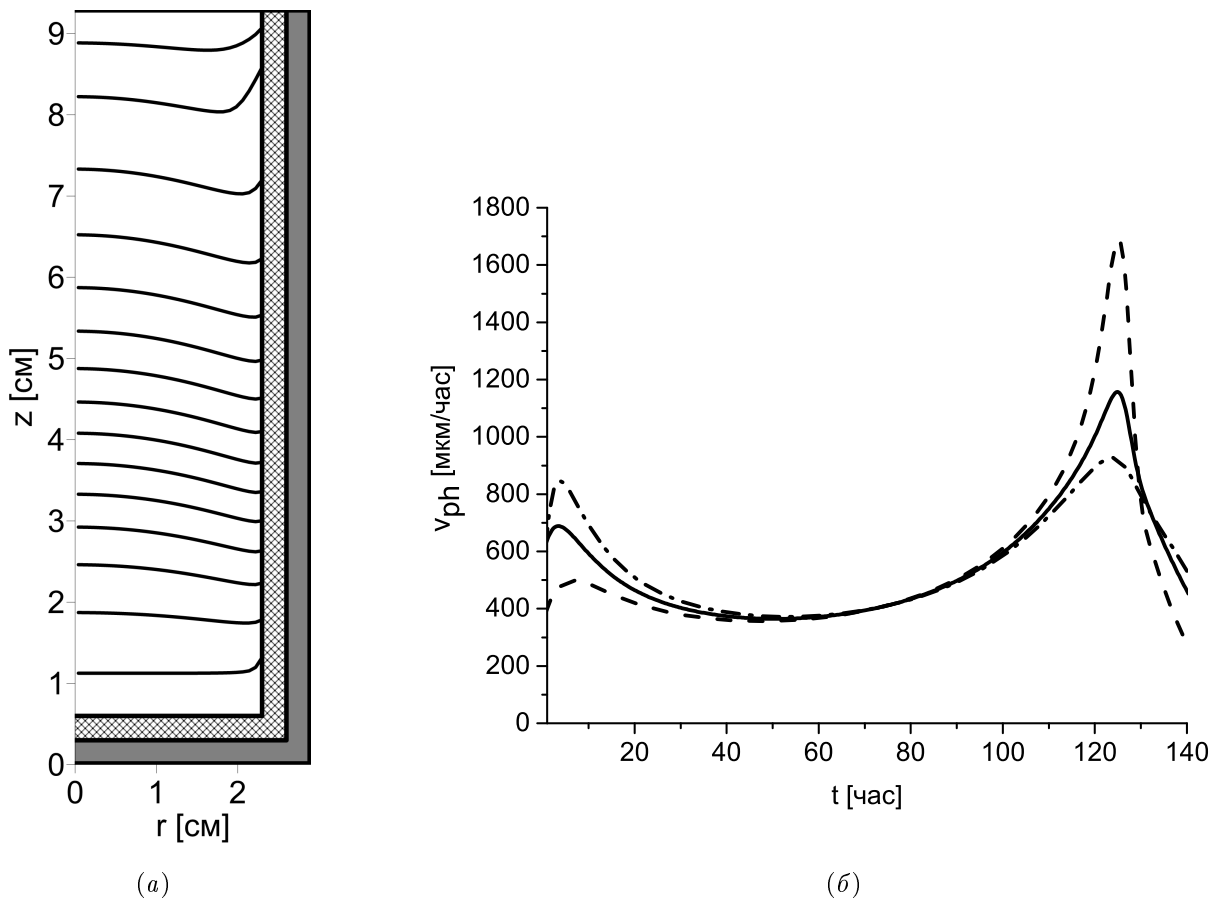


Рис. 4.18. Рост кристалла: (а) Положение фронта кристаллизации в различные моменты времени (контуры приведены для  $0 \leq t \leq 140$  часов с шагом 10 часов). (б) Зависимость от времени скорости фронта при  $r = 0$  (штрих-пунктирная линия), при  $r = R_{in}$  (штриховая линия), и средней скорости фронта (сплошная линия).

Содержание компонента  $A$  в выросшем кристалле приведено на рисунке 4.19, *а*. Концентрация компонента  $A$  в твердой фазе уменьшается по высоте кристалла и изменяется в диапазоне от 0.05 до 0.02 мольной доли (рис. 4.19, *б*). Полученные результаты расчетов согласуются с имеющимися теоретическими и экспериментальными данными [118].

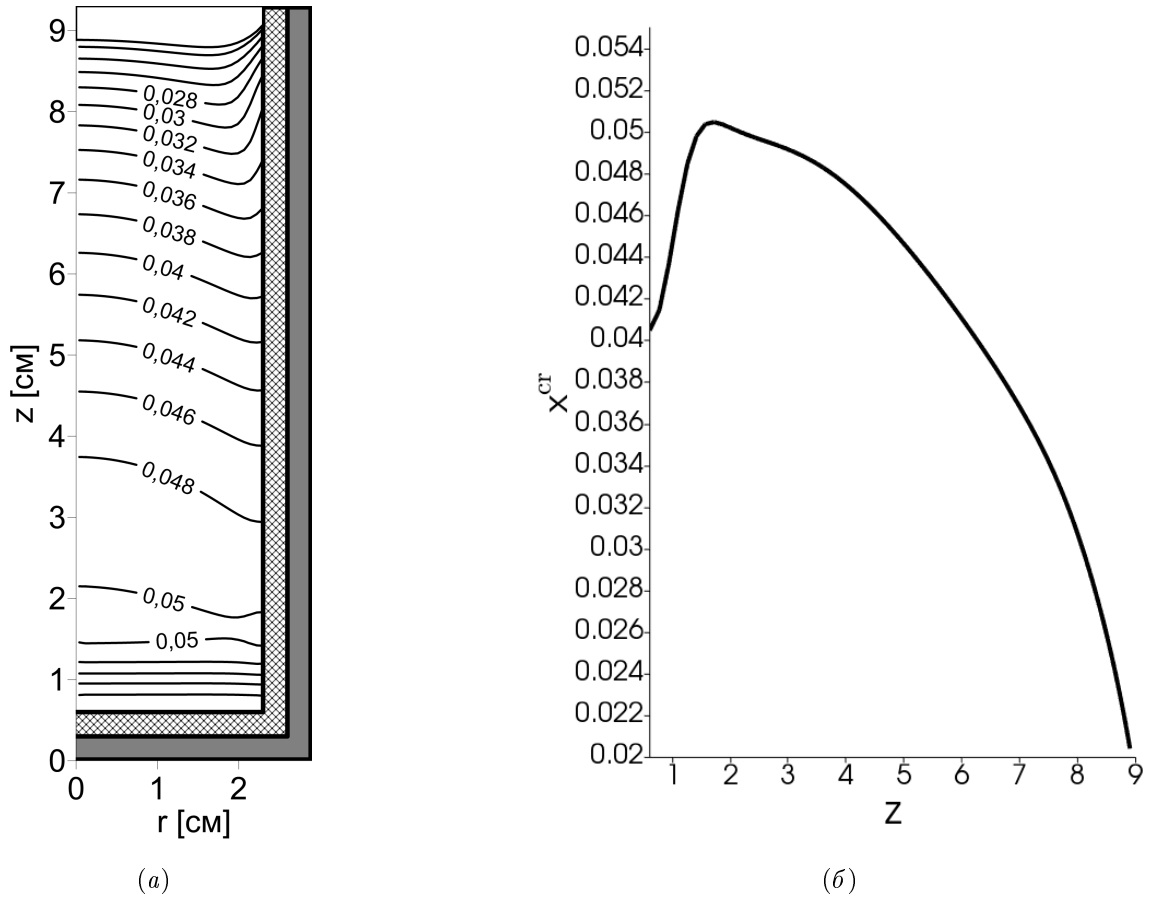


Рис. 4.19. (а) Содержание компонента  $A$  в кристалле [мольная доля], (б) Концентрация компонента  $A$  по высоте кристалла при  $r = 0$ .

Расчеты проводились на той же пространственной сетке, что и в случае моделирования растворения загрузки, использовался шаг по времени  $\tau = 0.001t_v$ . Длительность процесса составляет 140 часов, результаты расчетов были получены на персональном компьютере за 3.5 часа.

### 4.2.3. Численное моделирование смены растворения ростом

При моделировании роста кристалла предполагалось, что в начальный момент времени расплав является насыщенным. Однако по окончании расплавления загрузки жидкая фаза вблизи границы раздела становится пересыщенной. Поэтому на начальной стадии роста фронт кристаллизации движется с очень высокой скоростью, условия квазиравновесия нарушаются — на межфазной границе составы кристалла и раствора больше не удовлетворяют равновесной фазовой диаграмме, существенную роль начинают играть поверхностные процессы: захват частиц из раствора, зародышеобразование, химические реакции, возникновение дислокаций, адсорбция, десорбция и т.д.

Детальное описание процессов, протекающих на межфазной границе, в рамках механики сплошной среды сопряжено со значительными трудностями и не всегда возможно. Однако на качественном уровне влияние поверхностных эффектов на течение процесса кристаллизации можно учесть с помощью специального обобщенного параметра — скорости кинетических процессов  $k_{\text{kin}}$ . На рисунке 4.20 приведены распределения концентрации компонента  $A$  в жидкой фазе для различных значений параметра  $k_{\text{kin}}$ . В случае  $k_{\text{kin}} = \infty$  (штрих-пунк-

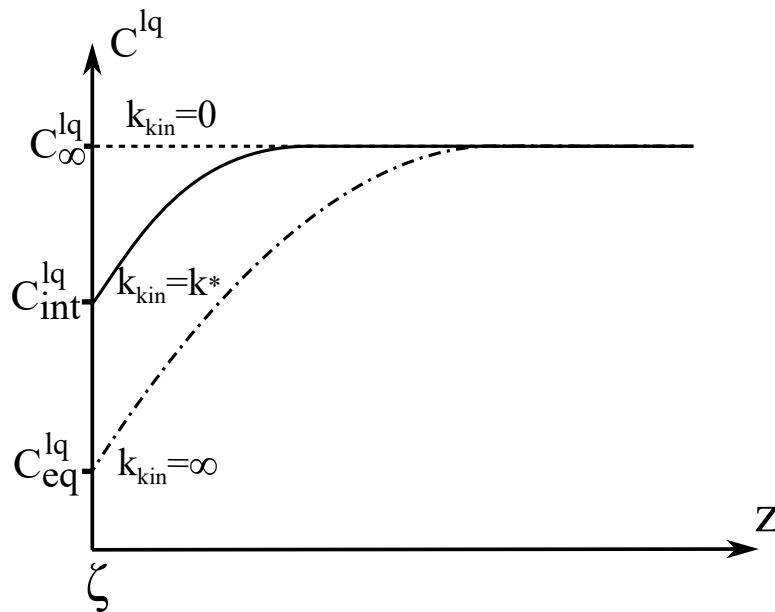


Рис. 4.20. Влияние кинетических процессов на распределение концентрации по высоте жидкой фазы.

тирная линия) поверхностные процессы протекают бесконечно быстро, рост происходит в квазиравновесном режиме, концентрация на фронте  $C_{\text{int}}^{\text{lq}}$  совпадает с равновесной  $C_{\text{eq}}^{\text{lq}}$ . При  $k_{\text{kin}} = 0$  (штриховая линия) поверхностные явления длятся бесконечно долго, отсутствует захват частиц из раствора, граница раздела остается неподвижной на протяжении всего процесса. В случае когда  $k_{\text{kin}}$  принимает некоторое конечное значение  $k_{\text{kin}} = k^*$  (сплошная линия), наличие поверхностных эффектов приводит к тому, что концентрация на фронте  $C_{\text{int}}^{\text{lq}}$  отличается от равновесной  $C_{\text{eq}}^{\text{lq}}$ , рост кристалла замедляется. В работах А.А. Чернова [119] для ступенчатого роста кристалла показано, что степень отклонения концентрации на фронте от равновесной пропорциональна скорости движения границы раздела фаз, т.е.

$$C_{\text{int}}^{\text{lq}} - C_{\text{eq}}^{\text{lq}} \sim v_{\text{ph}}. \quad (4.5)$$

В работах [120] из более общих соображений предложено следующее граничное условие для  $C_{\text{int}}^{\text{lq}}$

$$D^{\text{lq}} \frac{\partial C}{\partial n} \Big|_{z=\zeta} = k_{\text{kin}} (C_{\text{int}}^{\text{lq}} - C_{\text{eq}}^{\text{lq}})^{\beta}. \quad (4.6)$$

Здесь  $\beta$  — степень реакции.

Модифицируем математическую модель, предложенную в Главе 1, для того чтобы учесть влияние поверхностных эффектов. Внутри кристалла и раствора уравнения тепло- и массопереноса остаются неизменными. Условия на фронте кристаллизации имеют вид

- Условие Стефана

$$(k^{\text{cr}} \nabla T \cdot \mathbf{N})|_{z=\zeta(t,r)-} - (k^{\text{lq}} \nabla T \cdot \mathbf{N})|_{z=\zeta(t,r)+} = \lambda \rho^{\text{cr}} v_{\text{ph}} (\mathbf{e}_z \cdot \mathbf{N}).$$

- Закон сохранения массы

$$(D^{\text{cr}} \nabla C^{\text{cr}} \cdot \mathbf{N})|_{z=\zeta(t,r)-} - (D^{\text{lq}} \nabla C^{\text{lq}} \cdot \mathbf{N})|_{z=\zeta(t,r)+} = (C_{\text{int}}^{\text{lq}} - C_{\text{eq}}^{\text{cr}}) v_{\text{ph}} (\mathbf{e}_z \cdot \mathbf{N}).$$

- Условие, учитывающее поверхностные процессы

$$C_{\text{int}}^{\text{lq}} = C_{\text{eq}}^{\text{lq}} + \frac{D^{\text{lq}}}{k_{\text{kin}}} (\nabla C^{\text{lq}} \cdot \mathbf{N}) \Big|_{z=\zeta(t,r)+}. \quad (4.7)$$



Выражение (4.7) получено из условия (4.6) при  $\beta = 1$ . Второе слагаемое в правой части равенства (4.7) пропорционально скорости движения границы раздела. В том случае, когда скорость фронта мала, поверхностные эффекты перестают играть существенную роль, и значение концентрации  $C_{\text{int}}^{\text{li}}$  на границе раствора становится близким к равновесному  $C_{\text{eq}}^{\text{li}}$ .

- Равновесная фазовая диаграмма

$$C_{\text{eq}}^{\text{li}} = \alpha(T - T_{\text{m}}), \quad C_{\text{eq}}^{\text{cr}} = k_{\text{seg}} C_{\text{int}}^{\text{li}}.$$

Для численного исследования неравновесной модели разностную схему (1.97)–(1.103) необходимо дополнить дискретным аналогом уравнения (4.7). В силу того, что уравнения тепло- и массопереноса решаются совместно, возникновение дополнительного условия на фронте кристаллизации практически не влияет на сходимость соответствующего итерационного процесса. Выбор  $\beta = 1$  в условии (4.6) продиктован физическими соображениями. Однако предварительные расчеты показали, что применение других степенных зависимостей не накладывает существенных ограничений на устойчивость используемого алгоритма. Данное обстоятельство в очередной раз подтверждает надежность и гибкость предложенной вычислительной стратегии.

Экспериментальное определение параметра  $k_{\text{kin}}$  для конкретных соединений является дорогостоящим и трудоемким. Однако известно, что для полупроводниковых материалов скорость кинетических процессов лежит в диапазоне  $10^{-5} < k_{\text{kin}} < 10^{-1}$  [см/сек] (см. [84]). Для изучения влияния поверхностных процессов на ход кристаллизации расчеты проводились при различных значениях коэффициента  $k_{\text{kin}}$ .

Дискретная модель, учитывающая поверхностные процессы, протекающие на межфазной границе, позволяет в рамках одного расчета исследовать стадии растворения загрузки и роста кристалла. Численные эксперименты показали, что на этапе растворения в соответствии с имеющимися теоретическим и экс-

периментальными данными, поверхностный эффект не оказывают существенного влияния на течение процесса.

По окончании растворения загрузки жидкая фаза пересыщена в окрестности границы раздела фаз. В случае когда кинетические процессы протекают бесконечно быстро, на начальной стадии роста скорость движения фронта вблизи стенки ампулы гораздо выше чем в центре кристалла, в пристеночной области на поверхности соединения образуется «зубец» (см. рис. 4.21, *а*, сплошная линия). При уменьшении  $k_{\text{kin}}$  роль поверхностных процессов становится более существенной, они тормозят движение фронта кристаллизации, размер «зубца» уменьшается (рис. 4.21, *б* и 4.21, *в*). В случае  $k_{\text{kin}} = 10^{-4}$ , «зубец» на поверхности кристалла не образуется (рис. 4.21, *г*). На развитой стадии роста, когда граница раздела движется с умеренной скоростью, в соответствии с формулой (4.7), влияние поверхностных эффектов ослабевает, процесс кристаллизации происходит в режиме близком к квазиравновесному. Из рисунка (4.21) видно, что при  $t > 35$  четыре рассмотренные системы эволюционируют практически одинаково.

В натурных экспериментах не наблюдается появление «зубца» на поверхности кристалла. Поэтому математическая модель наиболее правдоподобно описывает процесс при  $k_{\text{kin}} = 10^{-4}$ . Поверхностные эффекты играют существенную роль на ранней стадии роста рассмотренного соединения.

Таким образом, предложенная в главах 1–3 вычислительная стратегия является достаточно гибким инструментом исследования фазовых переходов и допускает внесение существенных изменений в дискретную модель процесса кристаллизации. Разработанные на основе данной стратегии вычислительные алгоритмы могут быть использованы для исследования и оптимизации реальных технологических режимов. Для иллюстрации данного утверждения в рамках численного моделирования были рассмотрены основные этапы выращивания двухкомпонентного соединения методом Бриджмена: растворение загруз-

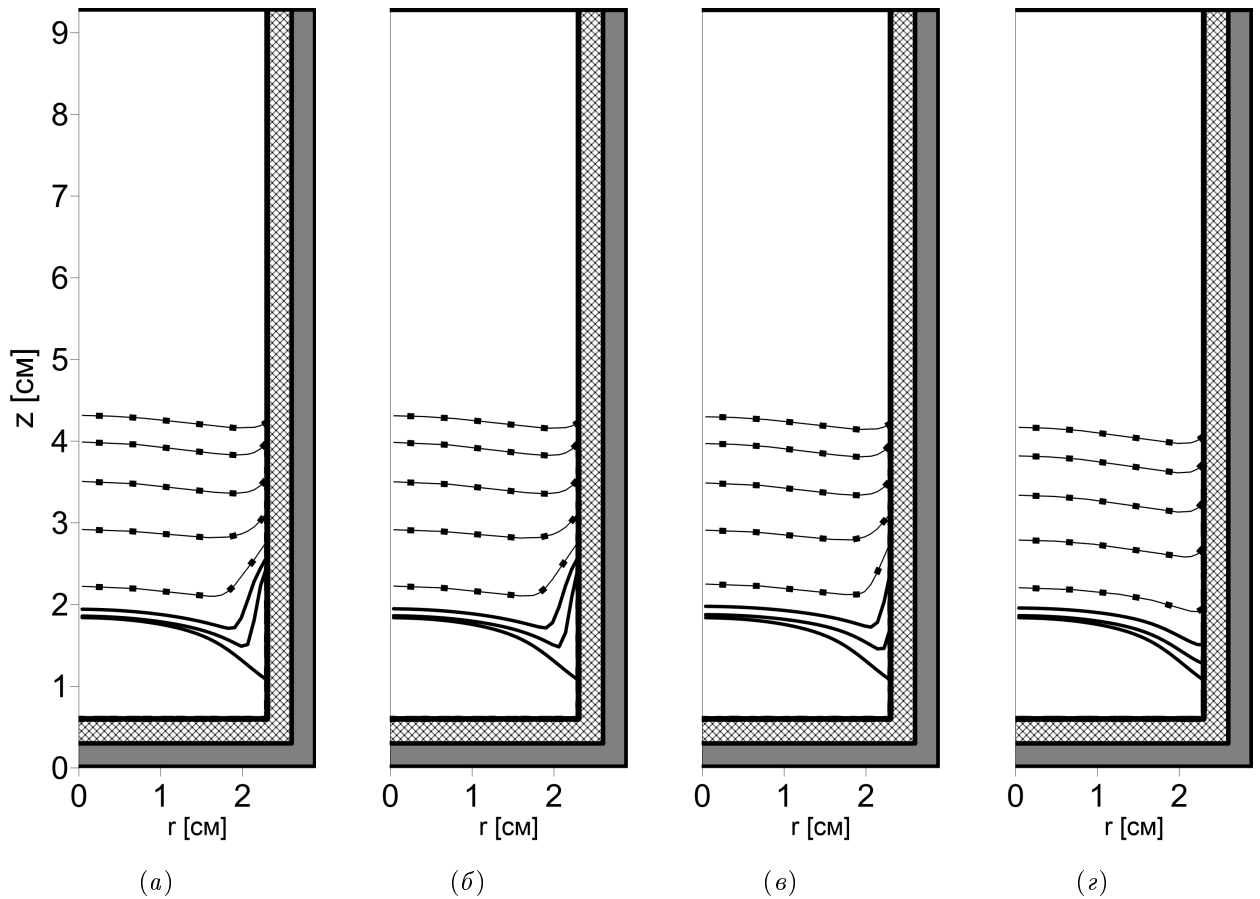


Рис. 4.21. Положение фронта в различные моменты времени при различных значениях  $k_{\text{kin}}$ : (а)  $k_{\text{kin}} = \infty$ , (б)  $k_{\text{kin}} = 10^{-2}$ , (в)  $k_{\text{kin}} = 10^{-3}$ , (г)  $k_{\text{kin}} = 10^{-4}$ . Сплошные контуры приведены для  $14.5 < t < 18$  часов с шагом 50 минут, контуры с маркерами приведены для  $20 < t < 50$  часов с шагом 7.5 часов

ки, смена растворения ростом, кристаллизация полупроводникового материала. В расчетах использовались реальные параметры установки и материалов, а также внешние температурные режимы. Получены результаты, на качественном уровне согласующиеся с имеющимися теоретическими и экспериментальными данными.

Изложение материала в работе велось на примере метода вертикальной направленной кристаллизации двухкомпонентного раствора. Однако предложенный вычислительный алгоритм очевидным образом обобщается на случай кристаллизации жидкой фазы с произвольным числом растворенных компонентов и применим для моделирования выращивания тонких пленок методом жидкофазной эпитаксии, получения монокристаллов методом подвижного на-

гревателя и диффузии в жидкой фазе, процесса легирования элементарных полупроводников.

## Заключение

В работе рассмотрены численные методы решения задачи о фазовом переходе в многокомпонентном растворе. Математическая модель учитывает движение фронта кристаллизации, конвективный и диффузионный тепломассоперенос в растворе, процессы теплопроводности и диффузии в кристалле, зависимость температуры фазового перехода от состава фаз. С помощью методов, основанных на явном выделении границы фазового перехода, построены разностные схемы, наследующие основные свойства исходной дифференциальной задачи и обеспечивающие выполнение дискретных аналогов законов сохранения массы, внутренней и кинетической энергии. Выделен класс схем, для которых метод выпрямления фронта и метод, основанный на использовании подвижных сеток, согласованных с формой границы раздела, алгебраически эквивалентны.

Рассмотрены методы решения сеточных уравнений, описывающих процессы тепломассопереноса в многокомпонентной среде, сопровождающиеся фазовым переходом. Показано, что область применимости методов, основанных на последовательном определении полей температуры, концентрации и скорости фронта, является ограниченной и определяется физическими свойствами рассматриваемых веществ, параметрами технологического режима. Проведен анализ устойчивости алгоритма, в котором соответствующая система нелинейных уравнений решаются совместно с помощью метода Ньютона относительно вектора неизвестных, компонентами которого являются концентрация в твердой и жидкой фазах, температура во всей расчетной области и скорость движения фронта. Показано, что совместный алгоритм является надежным и гибким инструментом исследования процессов кристаллизации.

Предложенная в работе вычислительная стратегия допускает внесение существенных изменений в модель процесса кристаллизации — рассмотрение новых расчетных подобластей, использование реалистичных граничных условий для температуры, учет поверхностных эффектов на межфазной границе и т.д.

Методы, разработанные на основе изложенных принципов, могут быть использованы для численного моделирования промышленных способов получения полупроводниковых материалов из жидкой фазы. В работе возможности вычислительного алгоритма продемонстрированы на примере моделирования процесса выращивания двухкомпонентного соединения методом вертикальной направленной кристаллизации. В расчетах использованы реальные параметры технологического процесса.

## Публикации автора по теме диссертации

1. *Щерица О.В., Гусев А.О., Мажорова О.С.* Численное исследование процесса кристаллизации трехкомпонентного раствора в цилиндрической ампуле // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. — 2016. — № 125. — 31 с.
2. *Гусев А.О., Щерица О.В., Мажорова О.С.* Численное исследование процесса кристаллизации чистого вещества из раствора в присутствии примеси // Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. — 2017. — № 24. — 22 с.
3. *Щерица О.В., Гусев А.О., Мажорова О.С.* Об одном методе решения задачи кристаллизации многокомпонентного раствора в цилиндрической ампуле // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. — 2017. — № 5. — С. 118–138.
4. *Gusev A.O., Shcheritsa O.V., Mazhorova O.S.* Conservative finite-difference algorithm for the thermodiffusion Stefan problem // LNCS. — 2019. — Т. 11386. — С. 256–263.
5. *Гусев А.О., Щерица О.В., Мажорова О.С.* Анализ устойчивости методов решения задачи о фазовом переходе // Дифференциальные уравнения. — 2019. — Т. 55, № 7. — С. 929–939. — Переводная версия:  
Gusev A.O., Shcheritsa O.V., Mazhorova O.S. Stability analysis of solution methods for a phase transition problem // Differential Equations. — 2019. — Т. 55, № 7. — С. 929–939.
6. *Гусев А.О., Щерица О.В., Мажорова О.С.* Параметрическое исследование процесса кристаллизации чистого вещества в присутствии примеси // Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. — 2019. — № 130. — 30 с.
7. *Gusev A.O., Shcheritsa O.V., Mazhorova O.S.* Conservative finite volume strategy for investigation of solution crystal growth techniques // Computers & fluids. — 2020. — Т. 202. — С. 104501.

8. *Гусев А.О., Щерица О.В., Мажорова О.С.* Опыт применения библиотек Intel MKL и PETSc для решения задач тепломассопереноса с фазовым переходом // Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. — 2020. — № 62. — 34 с.
  
9. *Гусев А.О., Щерица О.В., Мажорова О.С.* К вопросу об эквивалентности разностных методов решения задачи Стефана на подвижных и фиксированных сетках // Дифференциальные уравнения. — 2021. — Т. 57, № 7. — С. 907—921. — Переводная версия:  
*Gusev A.O., Shcheritsa O.V., Mazhorova O.S.* Two Equivalent finite volume schemes for Stefan problem on boundary-fitted grids: front-tracking and front-fixing techniques // Differential Equations. — 2021. — Т. 57, № 7. — С. 876—890.
  
10. *Гусев А.О., Щерица О.В., Мажорова О.С.* О свойствах одного разностного метода решения двухфазной задачи Стефана // Дифференциальные уравнения. — 2022. — Т. 58, № 7. — С. 930—946. — Переводная версия:  
*Gusev A.O., Shcheritsa O.V., Mazhorova O.S.* On the properties of conservative finite volume scheme for the two-phase Stefan problem // Differential Equations. — 2022. — Т. 58, № 7. — С. 930—946.
  
11. *Гусев А.О.* Сравнение трех математических моделей процесса направленной кристаллизации многокомпонентного раствора // Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. — 2022. — № 53. — 32 с.
  
12. *Гусев А.О.* Численное моделирование процесса кристаллизации трехкомпонентного раствора на подвижной сетке // Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. — 2022. — № 64. — 30 с.



## Список литературы

13. *Osher S., Sethian J.* Front propagating with curvature-dependent speed: algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations // J. Comput. Phys. — 1988. — Т. 79, № 1. — С. 12—49.
14. *Chen S., Merriman S., Osher S.* A simple level set method for solving Stefan problem // J. Comput. Phys. — 1997. — Т. 135. — С. 8—29.
15. *Chen H., Min C., Gibou F.* A numerical scheme for the Stefan problem on adaptive Cartesian grids with supralinear convergence rate // J. Comput. Phys. — 2009. — Т. 228. — С. 5803—5818.
16. *Kaiser J., Adami S., Akhatov I.* A semi-implicit conservative sharp-interface method for liquid-solid phase transition // Int. J. Heat Mass Transf. — 2020. — Т. 155. — С. 119800.
17. *Shaikh J., Sharma A., Bhardwaj R.* On sharp-interface level-set method for heat and/or mass transfer induced Stefan problem // Int. J. Heat Mass Transf. — 2016. — Т. 96. — С. 458—473.
18. *Boledi L., Terschanski B., Elgeti S.* A level-set based space-time finite element approach to the modelling of solidification and melting processes // J. Comput. Phys. — 2022. — Т. 457. — С. 111047.
19. *Tornberg A., Engquist B.* A finite element based level-set method for multiphase flow applications // Comput. Visual Sci. — 2000. — Т. 3. — С. 93—101.
20. *Enright D., Fedkiw R., Ferziger J.* A hybrid particle level set method for improved interface capturing // J. Comput. Phys. — 2002. — Т. 183. — С. 83—116.
21. *Chen L., Khachaturyan A.* Computer simulation of structural transformations during precipitation of ordered intermetallic phase // Acta Mater. — 1991. — Т. 39. — С. 2533—2551.

22. *Wang Y., Chen L., Khachaturyan A.* Kinetics of strain-induced morphological transformation in cubic alloys with a miscibility gap // *Acta Mater.* — 1993. — T. 41. — C. 279—296.
23. *Kobayashi R.* Modeling and numerical simulations of dendritic crystal growth // *Physics D.* — 1993. — T. 63. — C. 410—423.
24. *Grafe U., Bottger B., Tiaden J.* Coupling of multicomponent thermodynamics to a phase field model: application to solidification and solid-state transformations of superalloys // *Scripta Materialia.* — 2000. — T. 42. — C. 1179—1186.
25. *Provatas N., Elder K.* Phase-field methods in materials science and engineering. — Wiley-VCH, 2010. — 305 c.
26. *Nestler B., Danilow D., Galenko P.* Crystal growth of pure substances: Phase-field simulations in comparison with analytical and experimental results // *J. Comput. Phys.* — 2005. — T. 2007. — C. 221—239.
27. *Li Y., Kim J.* Phase-field simulations of crystal growth with adaptive mesh refinement // *Int. J. Heat Mass Transf.* — 2012. — T. 55. — C. 7926—7932.
28. *Chen G., Lin H., Lan C.* Phase-field modeling of twin-related faceted dendrite growth of silicon // *Acta Mater.* — 2016. — T. 115. — C. 324—332.
29. *Bueno J., Starodumov I., Gomez H.* Three dimensional structures predicted by the modified phase field crystal equation // *Computational Materials Science.* — 2016. — T. 111. — C. 310—312.
30. *Gao J., Han M., Kao A.* Dendritic growth velocities in an undercooled melt of pure nickel under static magnetic fields: A test of theory with convection // *Acta Mater.* — 2016. — T. 103. — C. 184—191.
31. *Ankudinov V., Galenko P.* Growth of different faces in a body centered cubic lattice: A case of the phase-field-crystal modeling // *J. Crystal Growth.* — 2020. — T. 539. — C. 125608.

32. Самарский А.А., Моисеенко Б.Д. Экономичная схема сквозного счёта для многомерной задачи Стефана. // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 1965. — Т. 5, № 5. — С. 816—827.
33. Meyer G.H. The numerical solution of Stefan problems with front-tracking and smoothing methods // Applied mathematics and computation. — 1978. — Т. 4, № 4. — С. 283—306.
34. Esen A., Kutluay S. A numerical solution of the Stefan problem with Neumann-type boundary condition by enthalpy method // Applied mathematics and computation. — 2004. — Т. 148. — С. 321—329.
35. Grossmann C., Noack A. Smoothing and Rothe's method for Stefan problems in enthalpy form // Journal of computational and applied mathematics. — 2002. — Т. 138. — С. 347—366.
36. Забелина М.П., Фрязинов И.В. Сеточный метод решения задачи Стефана для бинарной системы // Дифференциальные уравнения. — 1987. — Т. 23, № 7. — С. 1188—1197.
37. Sekhon M., Dost S. Numerical examination of the effect of steady crucible rotation in the liquid phase diffusion growth of SiGe // J. Crystal Growth. — 2015. — Т. 430. — С. 63—70.
38. Sekhon M., Lent B., Dost S. Numerical study of liquid phase diffusion growth of SiGe subjected to accelerated crucible rotation // J. Crystal Growth. — 2016. — Т. 438. — С. 90—98.
39. Helenbrook B., Hrdina B. High-order adaptive arbitrary-Lagrangian-Eulerian (ALE) simulations of solidification // Computers & fluids. — 2018. — Т. 167. — С. 40—50.
40. Anomalous segregation during electrodynamic gradient freeze growth of cadmium zinc telluride / N. Zhang [и др.] // J. Crystal Growth. — 2011. — Т. 325. — С. 10—19.

41. *Derby J., Zhang N., Yeckel A.* Modeling insights on the melt grow of cadmium zinc telluride // J. Crystal Growth. — 2013. — T. 379, № 15. — C. 28—33.
42. *Peterson J., Fiederle M., Derby J.* Analysis of the traveling heater method for the growth of cadmium telluride // J. Crystal Growth. — 2016. — T. 454. — C. 45—58.
43. *Peterson J., Derby J.* An axial temperature profile curvature criterion for the engineering of convex crystal growth interfaces in Bridgman systems // J. Crystal Growth. — 2017. — T. 468. — C. 899—904.
44. *Divecha M., Derby J.* Towards optimization of ACRT schedules applied to the gradient freeze growth of cadmium zinc telluride // J. Crystal Growth. — 2017. — T. 480. — C. 126—131.
45. *Yin L., Jie W., Wang T.* The transport phenomena during the growth of ZnTe crystal by the temperature gradient solution growth technique // J. Crystal Growth. — 2017. — T. 461. — C. 16—24.
46. *Stelian C., Duffar T.* Modeling effects of solute concentration in Bridgman growth of cadmium zinc telluride // J. Crystal Growth. — 2016. — T. 446. — C. 42—49.
47. *Stelian C., Calestani D., Velazquez M.* Numerical and experimental investigation of CdZnTe growth by the boron oxide encapsulated vertical Bridgman method // Int. J. Heat Mass Transf. — 2021. — T. 176. — C. 121490.
48. *Jamai H., Patreyon B., El Ganaoui M.* Numerical simulation of vertical Bridgman solidification of CdZnTe // Int. J. Simul. Multisci. Des. Optim. — 2014. — T. 5.
49. *Demirdzic I., Peric M.* Space conservation law in finite volume calculations of fluid flow // Int. J. Numer. Methods Fluids. — 1988. — T. 8, № 9. — C. 1037—1050.

50. *Ferziger J., Peric M.* Computational Methods for Fluid Dynamics. — Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2002.
51. *Apanovich Y., Ljumkis E.* The numerical simulation of heat and mass transfer during growth of a binary system by the travelling heater method // J. Crystal Growth. — 1991. — Т. 110. — С. 839—854.
52. *Stelian C., Duffar T.* Numerical modeling of CdTe crystallization from Te solution under terrestrial and microgravity conditions // J. Crystal Growth. — 2014. — Т. 400. — С. 67—75.
53. *Lyubimova T., Parshakova Y.* Numerical investigation of heat and mass transfer during vertical Bridgman crystal growth under rotational vibrations // J. Crystal Growth. — 2014. — Т. 385. — С. 82—87.
54. Influence of submerged heating on vertical Bridgman crystal growth of silicon under travelling magnetic field / T. Lyubimova [и др.] // J. Crystal Growth. — 2020. — Т. 531. — С. 125340.
55. *Бреславский П.В., Мажукин В.И.* Алгоритм численного решения гидродинамического варианта задачи Стефана при помощи динамически адаптирующихся сеток // Матем. моделирование. — 1991. — Т. 3, № 10. — С. 104—115.
56. *Мажукин В.И., Самарский А.А., Кастелъянос О.* Метод динамической адаптации для нестационарных задач с большими градиентами // Матем. моделирование. — 1993. — Т. 5, № 4. — С. 32—56.
57. *Mazhukin V.I., Chuiko M.M.* Solution of two-dimensional multi-interface Stefan problem by the method of dynamic adaptation // Mathematical Modelling and analysis. — 2001. — Т. 6, № 1. — С. 129—137.
58. *Мажукин А.В., Мажукин В.И.* Динамическая адаптация в параболических уравнениях // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. — 2007. — Т. 47, № 11. — С. 1913—1936.

59. *Landau H.* Heat conduction in a melting solid // Journal of applied mathematics. — 1950. — Т. 8. — С. 81—94.
60. *Crank J.* Two methods for the numerical solution of moving boundary problems in diffusion and heat flow // Q. J. Mech. appl. Math. — 1957. — Т. 10. — С. 220—231.
61. *Будак Б.М., Гольдман Н.Л., Егорова А.Т.* Вычислительные методы и программирование. // Метод выпрямления фронтов для решения задач типа Стефана в многомерном случае. — Москва: изд-во МГУ, 1967. — С. 103—120.
62. *Spaid F., Charwat A., Redekopp L.* Shape evolution of a subliming surface subjected to unsteady spatially nonuniform heat flux // Int. J. Heat Mass Transf. — 2012. — Т. 14, вып. 5. — С. 673—687.
63. *Ettouney H., Brown R.* Finite – element methods for steady solidification problems // J. Comput. Phys. — 1983. — Т. 49. — С. 118—150.
64. *Friazinov I.V., Marchenko M.P., Mazhorova O.S.* Transient simulation of crystal growth by Bridgman technique under normal and low gravity // Proceedings of microgravity science and low gravity. — Aerospace congress, Moscow. 08.1991. — С. 179—187.
65. *Lan C. W.* Newton's method for solving heat transfer, fluid flow and interface shapes in a floating molten zone // Int. J. Numer. Methods Fluids. — 1994. — Т. 19. — С. 41—65.
66. *Lan C. W., Chen F. C.* A finite volume method for solute segregation in directional solidification and comparison with a finite element method // Comput. Methods Appl. Mech. Eng. — 1996. — Т. 131. — С. 191—207.
67. *Марченко М.П., Фрязинов И.В.* Комплекс программ КАРМА1 решения нестационарных задач выращивания монокристаллов в ампулах // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. — 1997. — Т. 37, № 8. — С. 988—998.

68. *Lan C. W., Lang M. C.* Modeling of dopant segregation in vertical zone-melting crystal growth // J. Crystal Growth. — 1998. — Т. 186, № 1. — С. 203—213.
69. *Lan C. W., Chian J. H.* Effects of ampoule rotation on vertical zone-melting crystal growth: steady rotation versus accelerated crucible rotation technique (ACRT) // J. Crystal Growth. — 1999. — Т. 201. — С. 286—296.
70. *Марченко М.П., Фрязинов И.В.* Математическое моделирование процессов конвективной диффузии в многокомпонентной несжимаемой среде при химических превращениях и фазовых переходах // Дифференциальные уравнения. — 1999. — Т. 35, № 3. — С. 396—402.
71. *Shcheritsa O. V., Mazhorova O. S., Popov Y. P.* Numerical study for diffusion processes in dissolution and growth of  $\text{Cd}_{1-x}\text{Hg}_x\text{Te}/\text{CdTe}$  heterostructures formed by LPE. Part I. Isothermal conditions // J. Crystal Growth. — 2006. — Т. 290. — С. 350—356.
72. *Shcheritsa O. V., Mazhorova O. S., Popov Y. P.* Numerical study for diffusion processes in dissolution and growth of  $\text{Cd}_{1-x}\text{Hg}_x\text{Te}/\text{CdTe}$  heterostructures formed by LPE. Part II. Effect of programmed temperature changes // J. Crystal Growth. — 2006. — Т. 290. — С. 357—362.
73. *Lan C. W.* Flow and segregation control by accelerated rotation for vertical Bridgman growth of cadmium zinc telluride: ACRT versus vibration // J. Crystal Growth. — 2005. — Т. 274. — С. 379—386.
74. Effects of solutal convection on the dissolution of GaSb into InSb melt and solute transport mechanism in InGaSb solution: Numerical simulations and in-situ observation experiments / G. Rajesh [и др.] // J. Crystal Growth. — 2011. — Т. 324, № 1. — С. 357—362.

75. Numerical simulation of InGaSb crystal growth by temperature gradient method under normal- and micro-gravity fields / M. Nobeoka [и др.] // J. Crystal Growth. — 2014. — Т. 385. — С. 66—71.
76. *Patankar S.* Numerical heat transfer and fluid flow. — Hemisphere publishing corporation, 1981. — 197 с.
77. *Мажорова О.С., Попов Ю.П., Похилко В.И.* Исследование алгоритмов численного решения систем параболических уравнений с нелинейными граничными условиями // Дифференциальные уравнения. — 1987. — Т. 23, № 7. — С. 1240—1250.
78. *Мажорова О.С., Попов Ю.П., Сахарчук А.С.* Устойчивость разностной задачи для системы параболических уравнений с нетрадиционными граничными условиями // Дифференциальные уравнения. — 1997. — Т. 33, № 7. — С. 946—954.
79. *Kimura M., Qin Z., Dost S.* A solid-liquid diffusion model for growth and dissolution of ternary alloys by liquid phase epitaxy // J. Crystal Growth. — 1996. — Т. 158. — С. 231—240.
80. *Illingworth T. C., Golosnoy I. O.* Numerical solution of diffusion-controlled moving boundary problems which conserve solute // J. Comput. Phys. — 2005. — Т. 209. — С. 207—225.
81. *Vermolen F.J., Vuk C.* Solution of vector Stefan problems with cross-diffusion // Journal of computational and applied mathematics. — 2005. — Т. 176. — С. 179—301.
82. *Ghez R., Small M.* Growth and dissolution of ternary alloys of III-V compounds by liquid phase epitaxy and formation of heterostructures // J. Crystal Growth. — 1981. — Т. 52. — С. 699—709.
83. *Гершуни Г.З., Жуховицкий Е.М.* Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости. — Москва: Наука, 1972. — 392 стр.



84. *Dost S., Lent B.* Single crystal growth of semiconductors from metallic solutions. — Elsevier, 2007. — 505 с.
85. *Флетчер К.* Вычислительные методы в динамике жидкости. Т. 2. — М.: Мир, 1991. — 552 с.
86. *Steger J.* Implicit finite-difference simulation of flow about arbitrary two-dimensional geometries // AIAA. — 1978. — Т. 16, № 7. — С. 679—686.
87. *Alexiades V., Solomon A.* Mathematical modeling of melting and freezing processes. — Hemisphere publishing corporation., 1993. — 323 с.
88. *Самарский А. А.* Теория разностных схем. — М.: Наука, 1989. — 616 с.
89. *Arakawa A.* Computational design for long-term numerical integration of the equation of fluid motion: Two dimensional incompressible flow // J. Comput. Phys. — 1966. — Т. 1. — С. 119—143.
90. *Phillips N.* An example of non-linear computational instability // The Atmosphere and the sea in motion. — 1959. — С. 501—504.
91. *Thom A.* The flow past circular cylinders at low speeds // Proc. Roy. Soc. London Ser. A. — 1933. — Т. 141. — С. 651—669.
92. *Мажорова О.С., Попов Ю.П., Похилко В.И.* О численном решении уравнений параболического типа с нелинейными граничными условиями // Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. — 1985. — № 46. — С. 28.
93. *Самарский А.А., Николаев Е.С.* Методы решения сеточных уравнений. — Москва: Наука, 1978.
94. *Бахвалов Н.С.* Численные методы (анализ, алгебра, обыкновенные дифференциальные уравнения). — Москва: Наука, 1975.
95. *Kim D., Brown R. A.* Modelling of the dynamics of HgCdTe growth by the vertical Bridgman method // J. Crystal Growth. — 1991. — Т. 114, № 3. — С. 411—434.

96. *Ермаков С. В., Мажорова О. С., Попов Ю. П.* Математическое моделирование задач электрического разделения биосмесей. Ч.1 // Дифференциальные уравнения. — 1992. — Т. 28, № 10. — С. 1810—1821.
97. *Камышин В. Э., Мажорова О. С.* Алгоритм решения уравнений Навье-Стокса для моделирования «ползущих» течений // Дифференциальные уравнения. — 2017. — Т. 53, № 7. — С. 976—990.
98. *Моисеенко Б. Д., Фрязинов И. В.* Консервативные разностные схемы для уравнений несжимаемой вязкой жидкости в переменных Эйлера // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. — 1981. — Т. 21, № 5. — С. 1180—1191.
99. *Флетчер К.* Вычислительные методы в динамике жидкости. Т. 1. — М.: Мир, 1991. — 505 с.
100. *Saad Y.* Iterative Methods for Sparse Linear Systems. — Second. — Society for Industrial, Applied Mathematics, 2003.
101. *Demmel J. W.* Applied Numerical Linear Algebra. — Society for Industrial, Applied Mathematics, 1997.
102. PETSc Web page / S. Balay [и др.]. — 2019. — <https://www.mcs.anl.gov/petsc>.
103. PETSc Users Manual : тех. отч. / S. Balay [и др.] ; Argonne National Laboratory. — 2020. — ANL-95/11 —Revision 3.13. — URL: <https://www.mcs.anl.gov/petsc/petsc-current/docs/manual.pdf>.
104. Efficient Management of Parallelism in Object Oriented Numerical Software Libraries / S. Balay [и др.] // Modern Software Tools in Scientific Computing / под ред. Е. Arge, А. М. Bruaset, Н. Р. Langtangen. — Birkhäuser Press, 1997. — С. 163—202.
105. *Schenk O., Gärtner K.* Solving Unsymmetric Sparse Systems of Linear Equations with PARDISO // Journal of Future Generation Computer Systems. — 2004. — Т. 20, № 3. — С. 475—487.

106. *Schenk O., Gärtner K.* On fast factorization pivoting methods for symmetric indefinite systems // Elec. Trans. Numer. Anal. — 2006. — Т. 23. — С. 158—179.
107. *Karypis G., Kumar V.* A fast and high quality multilevel scheme for partitioning irregular graphs // SIAM Journal on Scientific Computing. — 1999. — Т. 20, № 1. — С. 359—392.
108. *Kimura M., Qin Z., Dost S.* A solid – liquid diffusion model for growth and dissolution of ternary alloys by liquid phase epitaxy // J. Crystal Growth. — 1996. — Т. 158. — С. 231—240.
109. A numerical analysis for the conversion phenomenon of *GaAs* to *GaAsP* on a *GaP* substrate in an LPE system / Kimura M. [и др.] // J. Crystal Growth. — 1996. — Т. 169. — С. 697—703.
110. *Small M., Ghez R.* Growth and dissolution kinetics of ternary alloys of ternary III-V heterostructures formed by liquid phase epitaxy // Journal of Applied physics. — 1979. — Т. 50, № 8. — С. 5322—5330.
111. *Smith V.G., Tiller W.A., Rutter J.W.* A mathematical analysis of solute redistribution during solidification // Canadian journal of physics. — 1955. — Т. 33. — С. 723—745.
112. *Scheil V.* Bemerkungen zur Schichtkristallbildung // Z. Metallkd. — 1942. — Т. 34. — С. 70—72.
113. *Pfann W.G.* Principles of zone melting // Journal of metals. — 1952. — Т. 4. — С. 747—753.
114. *Мажорова О.С., Попов Ю.П., Щерица О.В.* Консервативные разностные схемы для термо-диффузионной задачи Стефана // Дифференциальные уравнения. — 2013. — Т. 49, № 7. — С. 897—905.

115. Берлинер Л.Б., Гвелесиани Л.А. Численный расчет радиационного теплообмена для направленной кристаллизации CdZnTe // Вестник МИТХТ. — 2010. — Т. 5. — С. 13—18.
116. Numerical study for liquid phase epitaxy of  $\text{Cd}_{1-x}\text{Hg}_x\text{Te}$  solid solution / I. A. Denisov [и др.] // J. Crystal Growth. — 2002. — Т. 245. — С. 21—30.
117. Numerical modeling for convection in growth/dissolution of solid solution  $\text{Cd}_{1-x}\text{Hg}_x\text{Te}$  by liquid-phase epitaxy / I. A. Denisov [и др.] // J. Crystal Growth. — 2004. — Т. 269. — С. 284—291.
118. Выращивание монокристаллов  $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$  ( $x \sim 0,04$ ) методом вертикальной направленной кристаллизации по Бриджмену на затравку / Гришечкин М.Б. [и др.] // Цветные металлы. — 2016. — Т. 12. — С. 50—55.
119. Чернов А.А. Слоисто-спиральный рост кристаллов // Успехи физических наук. — 1961. — Т. 73. — С. 277—331.
120. Ghez R, Lew J.S. Interface kinetics and crystal growth under conditions of constant cooling rate // J. Crystal Growth. — 1973. — Т. 20. — С. 273.

# Приложение А

## Математическая модель. Обозначения и безразмерные параметры

Таблица А.1. Обозначения

| Величина                                 | $\Omega^{\text{cr}}$       | $\Omega^{\text{lq}}$       | $\Omega^{\text{amp}}$      |
|------------------------------------------|----------------------------|----------------------------|----------------------------|
| Кинематическая вязкость                  | -                          | $\nu$                      | -                          |
| Коэффициент температурного расширения    | -                          | $\beta_{\text{T}}$         | -                          |
| Коэффициент концентрационного расширения | -                          | $\beta_{\text{C}}$         | -                          |
| Скрытая теплота плавления                | $\lambda$                  | -                          | -                          |
| Плотность                                | $\rho^{\text{cr}}$         | $\rho^{\text{lq}}$         | $\rho^{\text{amp}}$        |
| Удельная теплоемкость                    | $c_{\text{p}}^{\text{cr}}$ | $c_{\text{p}}^{\text{lq}}$ | $c_{\text{p}}^{\text{cr}}$ |
| Коэффициент теплопроводности             | $k^{\text{cr}}$            | $k^{\text{lq}}$            | $k^{\text{cr}}$            |
| Коэффициент диффузии                     | $D^{\text{cr}}$            | $D^{\text{lq}}$            | -                          |

Таблица А.2. Безразмерные теплофизические характеристики

| Величина                         | Обозначение    | $\Omega^{\text{cr}}$                                | $\Omega^{\text{lq}}$ | $\Omega^{\text{amp}}$                                |
|----------------------------------|----------------|-----------------------------------------------------|----------------------|------------------------------------------------------|
| Отношение плотностей             | $\rho$         | $\rho^{\text{cr}}/\rho^{\text{lq}}$                 | 1                    | $\rho^{\text{amp}}/\rho^{\text{lq}}$                 |
| Отношение удельных теплоемкостей | $c_{\text{p}}$ | $c_{\text{p}}^{\text{cr}}/c_{\text{p}}^{\text{lq}}$ | 1                    | $c_{\text{p}}^{\text{amp}}/c_{\text{p}}^{\text{lq}}$ |
| Отношение коэф. теплопроводности | $k$            | $k^{\text{cr}}/k^{\text{lq}}$                       | 1                    | $k^{\text{amp}}/k^{\text{lq}}$                       |
| Отношение коэф. диффузии         | $D$            | $D^{\text{cr}}/D^{\text{lq}}$                       | 1                    | -                                                    |

Таблица А.3. Безразмерные параметры

| Величина                        | Определение                                                                                              |
|---------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Число Прандтля                  | $\text{Pr} = \nu c_{\text{p}}^{\text{lq}} \rho^{\text{lq}} / k^{\text{lq}}$                              |
| Число Шмидта                    | $\text{Sc} = \nu / D^{\text{lq}}$                                                                        |
| Число Стефана                   | $\text{St} = \lambda \rho^{\text{cr}} / (\rho^{\text{lq}} c_{\text{p}}^{\text{lq}} \Delta T^{\text{d}})$ |
| Тепловое число Грасгофа         | $\text{Gr}_{\text{T}} = g \beta_{\text{T}} R_{\text{in}}^3 \Delta T^{\text{d}} / \nu^2$                  |
| Концентрационное число Грасгофа | $\text{Gr}_{\text{C}} = g \beta_{\text{C}} R_{\text{in}}^3 C_{\text{init}}^{\text{d}} / \nu^2$           |

# Приложение Б

## Глава 2. Геометрические и физический параметры задачи

Таблица Б.1. Параметры установки

| Ампула           |                   |                   |                 | Фазы                |                     |                     | Нагреватель           |                       |
|------------------|-------------------|-------------------|-----------------|---------------------|---------------------|---------------------|-----------------------|-----------------------|
| Внутр.<br>радиус | Внешний<br>радиус | Толщина<br>торцов | Общая<br>высота | Толщина<br>затравки | Толщина<br>раствора | Положение<br>фронта | $z_g^{\text{bot}}(0)$ | $z_g^{\text{top}}(0)$ |
| 0.25 см          | 0.5 см            | 0.2 см            | 5.4 см          | 2.5 см              | 2.5 см              | 2.7 см              | 1.9 см                | 2.9 см                |

Таблица Б.2. Значения безразмерных физических параметров ( $\Delta T^d = 400$  K)

| $\rho^{\text{cr}}$ | $\rho^{\text{amp}}$ | $c_p^{\text{cr}}$ | $c_p^{\text{amp}}$ | $k^{\text{cr}}$ | $k^{\text{amp}}$ | D                 | $\alpha$ | $k_{\text{seg}}$ |
|--------------------|---------------------|-------------------|--------------------|-----------------|------------------|-------------------|----------|------------------|
| 1                  | 0.29                | 0.64              | 4                  | 0.145           | 1.25             | $1 \cdot 10^{-4}$ | 1.25     | 2.6              |

Таблица Б.3. Значения безразмерных параметров ( $\Delta T^d = 400$  K)

| Pr   | Sc | St   | $\text{Gr}_T$    | $\text{Gr}_C$   |
|------|----|------|------------------|-----------------|
| 0.11 | 20 | 1.16 | $7.6 \cdot 10^5$ | $-7 \cdot 10^5$ |

# Приложение В

## Глава 4. Геометрические и физический параметры задачи

Таблица В.1. Геометрические параметры установки

|        |                         |        |
|--------|-------------------------|--------|
| Печь   | Высота                  | 66 см  |
|        | Радиус                  | 4.9 см |
|        | Длина штока при $t = 0$ | 41 см  |
| Ампула | Внутренний радиус       | 2.6 см |
|        | Внешний радиус          | 2.9 см |
|        | Толщина торца           | 0.3 см |
|        | Высота                  | 9.3 см |
| Тигель | Внутренний радиус       | 2.3 см |
|        | Внешний радиус          | 2.6 см |
|        | Толщина торца           | 0.3 см |
|        | Высота                  | 9.0 см |
| Фазы   | Толщина заправки        | 1.2 см |
|        | Толщина загрузки        | 7.5 см |

Таблица В.2. Значения безразмерных физических параметров ( $\Delta T^d = 50$  K)

| $\rho^{cr}$ | $\rho^{cruc}$ | $\rho^{amp}$ | $c_p^{cr}$ | $c_p^{cruc}$ | $c_p^{amp}$ | $k^{cr}$ | $k^{cruc}$ | $k^{amp}$ | D                 | $\alpha$ | $k_{seg}$ |
|-------------|---------------|--------------|------------|--------------|-------------|----------|------------|-----------|-------------------|----------|-----------|
| 1.02        | 0.25          | 0.39         | 1          | 7.84         | 3.02        | 0.5      | 3.7        | 0.9       | $1 \cdot 10^{-4}$ | 4.2      | 1.4       |

Таблица В.3. Значения безразмерных параметров ( $\Delta T^d = 50$  K)

| Pr  | Sc | St   | Gr <sub>T</sub>  | Gr <sub>C</sub>   |
|-----|----|------|------------------|-------------------|
| 0.2 | 80 | 16.7 | $6.2 \cdot 10^6$ | $-1.2 \cdot 10^7$ |

## Глава 4. Температурный режим на стадии растворения загрузки

На стадии растворения ампула является неподвижной. Процесс нагрева ампулы и ее содержимого состоит из четырех этапов.

Таблица В.4. Растворение. Внешний температурный режим

| Этап | Температура<br>дна ампулы | Температура свободной<br>поверхности раствора | Время                                                |
|------|---------------------------|-----------------------------------------------|------------------------------------------------------|
| 1    | 1365.16 К                 | 1371.41 К                                     | Нагрев до второго этапа: 2 ч                         |
| 2    | 1368.16 К                 | 1374.16 К                                     | Выдержка: 1 ч<br>Нагрев до третьего этапа: 3 ч       |
| 3    | 1368.16 К                 | 1381.16 К                                     | Выдержка: 2.5 ч<br>Нагрев до четвертого этапа: 2.5 ч |
| 4    | 1368.16 К                 | 1386.16 К                                     | Выдержка: 4.5 ч                                      |