



ISSN 2071-2898 (Print)  
ISSN 2071-2901 (Online)

Щерица О.В., Гусев А.О.,  
Мажорова О.С.

Численное исследование  
процесса кристаллизации  
трехкомпонентного раствора  
в цилиндрической ампуле

**Рекомендуемая форма библиографической ссылки:** Щерица О.В., Гусев А.О., Мажорова О.С. Численное исследование процесса кристаллизации трехкомпонентного раствора в цилиндрической ампуле // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2016. № 125. 31 с. doi:[10.20948/prepr-2016-125](https://doi.org/10.20948/prepr-2016-125)  
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2016-125>

Ордена Ленина  
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ  
им. М.В. Келдыша  
Российской академии наук

О.В. Щерица, А.О. Гусев, О.С. Мажорова

Численное исследование процесса кристаллизации  
трехкомпонентного раствора в цилиндрической ампуле

Москва — 2016

**Щерица О.В., Гусев А.О., Мажорова О.С.**

Численное исследование процесса кристаллизации трехкомпонентного раствора в цилиндрической ампуле

Рассмотрена самосогласованная модель квазиравновесного процесса кристаллизации трехкомпонентного раствора в тонкой цилиндрической ампуле. Математическая модель учитывает диффузионный тепломассоперенос в твердой и жидкой фазах, движение фронта кристаллизации и теплообмен с окружающей средой. Проведено численное исследование процессов роста и растворения трехкомпонентного соединения  $A_xB_{1-x}C$ .

**Ключевые слова:** Задача Стефана; фазовый переход; математическое моделирование.

**Olga Vladimirovna Shcheritsa, Andrey Olegovich Gusev,  
Olga Semenovna Mazhorova**

Numerical study of ternary alloy crystallization in the cylindrical ampule

The self-consistent model of multicomponent alloy crystallization in the cylindrical ampule was considered. The mathematical model accounts for the diffusion heat and matter transport in both solid and liquid phases, the movement of the crystallization front and heat exchange with the environment. The proposed model was used for numerical simulation of the crystallization process of ternary compound  $A_xB_{1-x}C$ .

**Key words:** Stefan problem; phase transition; mathematical modeling.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 15-01-03741 и Программы фундаментальных исследований Президиума РАН П-5.

## 1. Введение

Математическое моделирование и численный эксперимент в настоящее время являются неотъемлемой частью исследования процессов кристаллизации многокомпонентных соединений и получения материалов с заданными свойствами. В работе представлена самосогласованная модель квазиравновесного процесса кристаллизации тройного соединения в длинной цилиндрической ампуле. Основу модели составляют уравнения теплопроводности и диффузии. На границе раздела фаз температура и концентрация всех компонентов удовлетворяют балансным соотношениям, вытекающим из законов сохранения энергии и массы, и фазовой диаграмме системы: достаточно сложным, как правило, нелинейным соотношением, связывающим равновесные концентрации всех компонентов и температуру. Рассматриваемый класс задач отличается от классической задачи Стефана о фазовом переходе тем, что температура фазового перехода зависит от состава твердой и жидкой фазы (термодиффузионная задача Стефана). Кроме того, опыт решения подобных задач [1–5] свидетельствует о том, что использование алгоритмов, в основе которых лежит расщепление по физическим процессам, может приводить к результатам, искажающим физическое явление: например, по результатам расчетов в системе должно происходить растворение твердой фазы, а в физическом процессе происходит рост кристалла и наоборот [6]. Поэтому для решения термодиффузионной задачи Стефана надежными являются алгоритмы, в которых система уравнений, описывающая тепломассоперенос и движение фронта кристаллизации, решается совместно [2, 3, 5].

Численные методы решения задач типа Стефана развиваются преимущественно в двух направлениях. Первое составляют алгоритмы сквозного счета, в которых граница фазового перехода явно не выделяется [7, 8], второе — методы, в явном виде отслеживающие положение фронта кристаллизации [2–4, 8–10]. Алгоритмы последней группы более эффективны для решения задач о фазовом переходе в многокомпонентном растворе. Контроль за положением границы раздела фаз осуществляется либо за счет использования подвижных сеток, согласованных в исходных переменных с формой фронта кристаллизации [2, 3, 9–12], либо с помощью динамической замены переменных [2–4, 7, 13, 14], которая выбирается так, чтобы в новых координатах расчетная область была регулярной, с фиксированными границами, совпадающими с координатными линиями — метод выпрямления фронта [15]. В данной работе учет движения фронта кристаллизации осуществляется с помощью замены переменных типа Ландау, в результате которой граница раздела фаз остается неподвижной в ходе всего процесса. В расчетах использовалась неявная консервативная разностная схема, построенная в новой системе координат [3]. Соответствующая система сеточных уравнений решается методом Ньютона относительно вектора неизвестных, компонентами которого являются все искомые функции: концентрации в жидкой и твердой фазах, поле температуры и скорость движения фронта кристаллизации.

В работе построена математическая модель процесса кристаллизации трехкомпонентного раствора в ампуле, учитывающая теплообмен ампулы с окружающей средой. Состояние рассматриваемой системы можно описать средней в сечении температурой и концентрациями. В результате осесимметричная задача сводится к одномерной, в которой распределение температуры описывается уравнением теплопроводности с источником, возникающим из-за учета контактного теплообмена с окружающей средой, а распределение массы — уравнениями диффузии. Построенная модель использовалась для численного исследования температурных режимов роста и растворения соединения  $A_xB_{1-x}C$ .

## 2. Постановка задачи

Рассмотрим задачу о кристаллизации тройного соединения  $A_xB_{1-x}C$ . Раствор компонентов  $A$  и  $B$  в расплаве  $C$  приводится в контакт с затравкой, расположенной на дне тонкой цилиндрической ампулы (рис. 1). Затем температура системы понижается, жидкая фаза становится пересыщенной, и начинается процесс кристаллизации. Математическое моделирование проводится в рамках следующих предположений. На фронте кристаллизации состав жидкой и твердой фазы находится в квазиравновесии. Кинетические процессы на поверхности протекают достаточно быстро и не нарушают квазиравновесия. Фронт кристаллизации является плоским. Конвекция в жидкой фазе незначительна, теплоперенос в системе осуществляется механизмом диффузии.

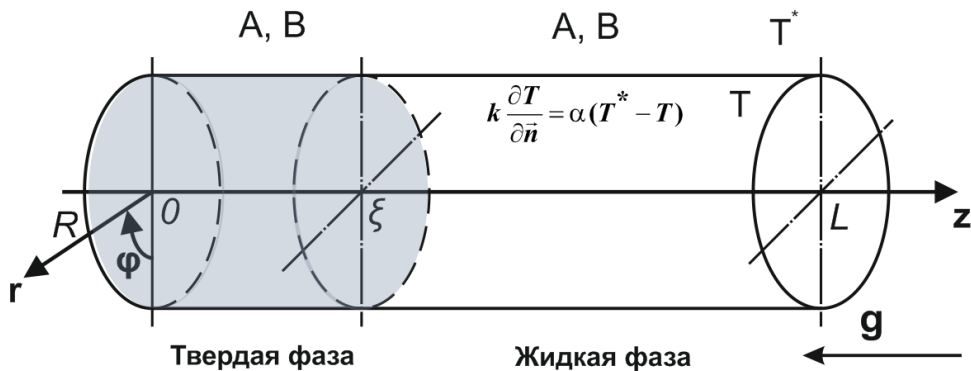


Рис. 1. Цилиндрическая ампула. Раствор компонентов  $A$  и  $B$  в  $C$ , приведен в контакт с затравкой  $A_xB_{1-x}C$ .

Подобласть  $\Omega_l = (\xi, L] \times (0, R]$ , где  $L$  — длина ампулы,  $\xi = \xi(t)$  — положение фронта кристаллизации,  $R$  — радиус ампулы (рис. 1), занимает жидкая фаза, которая представляет собой раствор компонентов  $A$  и  $B$  в расплаве  $C$ . Состав жидкой фазы определяется концентрациями элементов  $A$  и  $B$ , а

концентрация  $\mathbf{C}$  вычисляется из условия

$$x^{l(A)} + x^{l(B)} + x^{l(C)} = 1,$$

где  $x^{l(j)}$ , ( $j = \mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}$ ) — мольная доля соответствующего элемента в жидкой фазе. Твердая фаза занимает область  $\Omega_s = [0, \xi] \times (0, R]$  и является твердым раствором  $\mathbf{A}_x\mathbf{B}_{1-x}\mathbf{C}$ . Состав твердой фазы определяется одной переменной  $x$ , при этом мольные доли каждого ее компонента  $x^{s(j)}$ , ( $j = \mathbf{AC}, \mathbf{BC}$ ) удовлетворяют соотношениям

$$x^{s(AC)} = x, \quad x^{s(BC)} = 1 - x. \quad (1)$$

Распределение температуры и состава в системе описывается уравнениями

$$\frac{\partial C^{s(A)}}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r D^{s(A)} \frac{\partial C^{s(A)}}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( D^{s(A)} \frac{\partial C^{s(A)}}{\partial z} \right), \quad (z, r) \in \Omega_s, \quad (2)$$

$$\frac{\partial C^{l(j)}}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r D^{l(j)} \frac{\partial C^{l(j)}}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( D^{l(j)} \frac{\partial C^{l(j)}}{\partial z} \right), \quad (z, r) \in \Omega_l, \quad (3)$$

$$c_p^s \rho^s \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r k^s \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k^s \frac{\partial T}{\partial z} \right), \quad (z, r) \in \Omega_s, \quad (4)$$

$$c_p^l \rho^l \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r k^l \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k^l \frac{\partial T}{\partial z} \right), \quad (z, r) \in \Omega_l, \quad (5)$$

здесь  $r, z$  — радиальная и вертикальная координаты цилиндрической системы координат,  $t$  — время,  $C^{\gamma(j)}$  — объемная концентрация  $j$ -го компонента в твердой и жидкой фазе,  $D^{\gamma(j)}$  — коэффициент диффузии  $j$ -го компонента в твердой и жидкой фазе  $j = \mathbf{A}, \mathbf{B}$ ,  $T$  — температура,  $c_p^\gamma$  — удельная теплоемкость,  $k^\gamma$  — коэффициент теплопроводности,  $\rho^\gamma$  — плотность,  $\gamma$  принимает значения  $s$  при  $z < \xi$  (твердая фаза) и  $l$  при  $z > \xi$  (жидкая фаза). Содержание компонента  $\mathbf{B}$  в твердой фазе определяется условием (1), записанным в объемных единицах

$$(a_A + a_C)C^{s(A)} + (a_B + a_C)C^{s(B)} = \rho^s, \quad (6)$$

где  $a_A, a_B, a_C$  — атомные веса соответствующих элементов.

На границе раздела фаз ( $z = \xi(t)$ ) выполнены следующие условия

1. Условие фазового равновесия: уравнения описывающие связь концентраций компонентов  $\mathbf{A}$  и  $\mathbf{B}$  в твердой и жидкой фазах;

$$F_m(C^{s(A)}, C^{s(B)}, C^{l(A)}, C^{l(B)}, T) = 0, \quad m = 1, 2, 3. \quad (7)$$

Конкретный вид уравнений фазовой диаграммы определяется свойствами соединения  $\mathbf{A}_x\mathbf{B}_{1-x}\mathbf{C}$ .

2. Закон сохранения энергии (условие Стефана):

$$k^s \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=\xi(t)-} - k^l \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=\xi(t)+} = \lambda \rho^s \xi_t. \quad (8)$$

Здесь  $\lambda$  — скрытая теплота плавления,  $\xi_t$  — скорость движения фронта кристаллизации.

3. Закон сохранения массы:

$$D^{s(j)} \frac{\partial C^{s(j)}}{\partial z} \Big|_{z=\xi(t)-} - D^{l(j)} \frac{\partial C^{l(j)}}{\partial z} \Big|_{z=\xi(t)+} = -(C^{s(j)} - C^{l(j)}) \xi_t, \quad j = \mathbf{A}, \mathbf{B}. \quad (9)$$

Стенки цилиндра непроницаемы, поэтому граничные условия для поля концентрации имеют вид

$$D^{\gamma(j)} \frac{\partial C^{\gamma(j)}}{\partial n} \Big|_{\partial\Omega} = 0, \quad j = \mathbf{A}, \mathbf{B}, \quad \gamma = s, l, \quad (10)$$

где  $\partial\Omega$  — граница области  $\Omega = \Omega_s \cup \Omega_l$ .

На боковой поверхности цилиндра происходит теплообмен по закону Ньютона

$$k^\gamma \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R} = \tilde{\alpha}(T^* - T|_{r=R}). \quad (11)$$

Здесь  $\tilde{\alpha}$  — коэффициент контактного теплообмена,  $T^*$  — температура окружающей среды. На торцах ампулы, в зависимости от исследуемого режима роста, происходит теплообмен

$$k^\gamma \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=0} = -\tilde{\alpha}(T^* - T|_{x=0}), \quad k^\gamma \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=L} = \tilde{\alpha}(T^* - T|_{x=L}), \quad \gamma = s, l, \quad (12)$$

или задана температура, изменяющаяся с течением времени

$$T|_{x=0} = T_{bot}(t), \quad T|_{x=L} = T_{top}(t). \quad (13)$$

Состояние системы можно описать функциями  $\tilde{T}(z, t)$  и  $\tilde{C}^{\gamma(j)}(z, t)$ ,  $j = \mathbf{A}, \mathbf{B}$ ,  $\gamma = s, l$  где:

1)  $\tilde{T}(z, t)$  — средняя температура в сечении  $z$  в момент времени  $t$

$$\tilde{T}(z, t) = \frac{2}{R^2} \int_0^R T(r, z, t) r dr. \quad (14)$$

2)  $\tilde{C}^{\gamma(j)}(z, t)$  — средняя концентрация компонента  $j$  ( $j = \mathbf{A}, \mathbf{B}$ ,  $\gamma = s, l$ ) в сечении  $z$  в момент времени  $t$

$$\tilde{C}^{\gamma(j)}(z, t) = \frac{2}{R^2} \int_0^R C^{\gamma(j)}(r, z, t) r dr.$$

Чтобы получить уравнение для  $\tilde{T}(z, t)$ , проинтегрируем (4), (5) по радиусу  $r$ :

$$\frac{2}{R^2} \int_0^R c_p^\gamma \rho^\gamma \frac{\partial T}{\partial t} r dr = \frac{2}{R^2} \int_0^R \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( k^\gamma r \frac{\partial T}{\partial r} \right) r dr + \frac{2}{R^2} \int_0^R \frac{\partial}{\partial z} \left( k^\gamma \frac{\partial T}{\partial z} \right) r dr, \quad \gamma = s, l,$$

с учетом (14), получим

$$c_p^\gamma \rho^\gamma \frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} = \frac{2}{R^2} \left( k^\gamma r \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R} - k^\gamma r \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=0} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k^\gamma \frac{\partial \tilde{T}}{\partial z} \right), \quad \gamma = s, l. \quad (15)$$

Поскольку значение температуры на боковой поверхности цилиндра не зависит от его радиуса, верно соотношение

$$\frac{2}{R^2} \int_0^R T(R, z, t) r dr = T(R, z, t) = \tilde{T}(z, t),$$

что позволяет переписать (15) с учетом граничных условий на боковой поверхности (11) в виде:

$$c_p^\gamma \rho^\gamma \frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left( k^\gamma \frac{\partial \tilde{T}}{\partial z} \right) + \frac{2\tilde{\alpha}}{R} (T^* - \tilde{T}), \quad \gamma = s, l. \quad (16)$$

Граничные условия (12) и (13) на торцах ампулы

$$k^\gamma \frac{\partial \tilde{T}}{\partial z} \Big|_{z=0} = -\tilde{\alpha} (T^* - \tilde{T}), \quad k^\gamma \frac{\partial \tilde{T}}{\partial z} \Big|_{z=L} = \tilde{\alpha} (T^* - \tilde{T}), \quad \gamma = s, l. \quad (17)$$

$$\tilde{T} \Big|_{z=0} = T_{bot}(t), \quad \tilde{T} \Big|_{z=L} = T_{top}(t) \quad (18)$$

Аналогично получим уравнение для средней концентрации  $\tilde{C}^{\gamma(j)}(z, t)$ , проинтегрировав (2), (3) по  $r$ . С учетом граничных условий получим

$$\frac{\partial \tilde{C}^{\gamma(j)}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left( D^\gamma \frac{\partial \tilde{C}^{\gamma(j)}}{\partial z} \right), \quad \gamma = s, l, \quad j = \mathbf{A}, \mathbf{B}. \quad (19)$$

Граничные условия (10) примут вид:

$$D^\gamma \frac{\partial \tilde{C}^{\gamma(j)}}{\partial z} \Big|_{z=0, L} = 0, \quad \gamma = s, l, \quad j = \mathbf{A}, \mathbf{B}. \quad (20)$$



На границе раздела фаз  $z = \xi(t)$  выполнены условия Стефана:

$$k^s \frac{\partial \tilde{T}}{\partial z} \Big|_{z=\xi(t)-} - k^l \frac{\partial \tilde{T}}{\partial z} \Big|_{z=\xi(t)+} = \lambda \rho^s \xi_t, \quad (21)$$

$$D^{s(j)} \frac{\partial \tilde{C}^{s(j)}}{\partial z} \Big|_{z=\xi(t)-} - D^{l(j)} \frac{\partial \tilde{C}^{l(j)}}{\partial z} \Big|_{z=\xi(t)+} = -(\tilde{C}^{s(j)} - \tilde{C}^{l(j)}) \xi_t, \quad j = \mathbf{A}, \mathbf{B}. \quad (22)$$

В результате осесимметричная задача (2)—(11) сведена к одномерной задаче (16)—(22). Контактный теплообмен на боковой поверхности ампулы теперь учитывается в уравнении температуропроводности в виде источника тепла, зависящего от температуры.

### 3. Алгоритм решения

#### 3.1. Замена переменных

Для решения задачи (16)—(22) с внутренней подвижной границей, положение которой необходимо определять в ходе решения задачи, применим метод выпрямления фронта. Для этого выполним замену независимых переменных  $(t, z)$  таким образом, чтобы в новой системе координат  $(t, y)$  положение границы раздела фаз было фиксировано и совпадало с точкой  $y = 1$ , а границы области, точки  $z = 0$  и  $z = L$ , перешли соответственно в точки  $y = 0$  и  $y = 2$  [15]. Связь между системами координат задается равенствами:

$$t = t, \quad z = \varphi(y, t) = \begin{cases} y \xi(t), & y \in [0, 1], \\ \xi(t) + (L - \xi(t))(y - 1), & y \in [1, 2]. \end{cases} \quad (23)$$

Якобиан этого преобразования равен  $J = \frac{\partial(y, t)}{\partial(z, t)} = \frac{1}{l}$ , где  $l = l(t)$  — длина соответствующей фазы в исходной системе координат: в твердой фазе  $l = l^s = \xi(t)$ , в жидкой фазе  $l = l^l = L - \xi(t)$ . В новых переменных области  $\Omega_y^s = \{0 \leq y < 1\}$  и  $\Omega_y^l = \{1 < y \leq 2\}$  заняты соответственно твердой и жидкой фазами,  $\Omega_y = \Omega_y^s \cup \Omega_y^l$ .

В новой системе координат задача (16)—(22) записывается в виде [3]:

$$c_p^\gamma \left[ \frac{\partial}{\partial t} (l^\gamma \tilde{T}) - \frac{\partial}{\partial y} (\varphi_t \tilde{T}) \right] = \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\varkappa^\gamma}{l^\gamma} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial y} \right) + l(\alpha^\gamma \tilde{T} + \beta^\gamma), \quad y \in (0, 1) \cup (1, 2). \quad (24)$$

Здесь  $\gamma = s, l$ ,  $\varkappa^\gamma = k^\gamma / \rho^\gamma$ , — кусочно-постоянные функции, принимающие значения  $\varkappa^s$  при  $y \in [0, 1)$  и  $\varkappa^l$  при  $y \in (1, 2]$ .  $\alpha^\gamma = 2\tilde{\alpha} / (\rho^\gamma R)$ ,  $\beta^\gamma = 2\tilde{\beta} / (\rho^\gamma R)$ .

На границе раздела фаз ( $y = 1$ ) условие Стефана примет вид

$$\frac{\varkappa^s}{l^s} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial y} \Big|_{y=1-} - \frac{\varkappa^l}{l^l} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial y} \Big|_{y=1+} = \lambda \frac{d\xi}{dt}. \quad (25)$$

Уравнения для концентраций в переменных  $(t, y)$ :

$$\frac{\partial}{\partial t} (l^\gamma \tilde{C}^{\gamma(A)}) - \frac{\partial}{\partial y} (\varphi_t \tilde{C}^{\gamma(A)}) = \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{D^{\gamma(A)}}{l^\gamma} \frac{\partial \tilde{C}^{\gamma(A)}}{\partial y} \right), \quad y \in (0, 1) \cup (1, 2), \quad (26)$$

$$(a_A + a_C) \tilde{C}^{s(A)} + (a_B + a_C) \tilde{C}^{s(B)} = \rho^s, \quad y \in (0, 1), \quad (27)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (l^l \tilde{C}^{l(B)}) - \frac{\partial}{\partial y} (\varphi_t \tilde{C}^{l(B)}) = \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{D^{l(B)}}{l^l} \frac{\partial \tilde{C}^{l(B)}}{\partial y} \right), \quad y \in (1, 2), \quad (28)$$

На границе раздела фаз

$$\frac{D^{s(j)}}{l^s} \frac{\partial \tilde{C}^{s(j)}}{\partial y} \Big|_{y=1-} - \frac{D^{l(j)}}{l^l} \frac{\partial \tilde{C}^{l(j)}}{\partial y} \Big|_{y=1+} = -(\tilde{C}^{s(j)} - \tilde{C}^{l(j)}) \frac{d\xi}{dt}, \quad j = \mathbf{A}, \mathbf{B}. \quad (29)$$

$$F_m(\tilde{C}^{s(A)}, \tilde{C}^{s(B)}, \tilde{C}^{l(A)}, \tilde{C}^{l(B)}, \tilde{T}) \Big|_{y=1} = 0, \quad m = 1, 2, 3. \quad (30)$$

Граничные условия (17), (18), (20) в переменных  $(y, t)$ :

$$\frac{k^s}{l^s} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial y} \Big|_{y=0} = -\tilde{\alpha} \left( T^* - \tilde{T} \Big|_{y=0} \right), \quad \frac{k^l}{l^l} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial y} \Big|_{y=2} = \tilde{\alpha} \left( T^* - \tilde{T} \Big|_{y=2} \right), \quad (31)$$

$$\tilde{T} \Big|_{y=0} = T_{bot}(t), \quad \tilde{T} \Big|_{y=2} = T_{top}(t), \quad (32)$$

$$\frac{D^{s(A)}}{l^s} \frac{\partial \tilde{C}^{s(A)}}{\partial y} \Big|_{y=0} = 0, \quad \frac{D^{l(j)}}{l^l} \frac{\partial \tilde{C}^{l(j)}}{\partial y} \Big|_{y=2} = 0, \quad j = \mathbf{A}, \mathbf{B}. \quad (33)$$

Решить систему уравнений (24) — (33) — значит определить положение фронта кристаллизации и распределение тепла и концентраций каждого из компонентов в твердой и жидкой фазах. Данная система нелинейна: от искомой скорости движения фронта зависят длины фаз  $l^s$  и  $l^l$ , а также функция замены переменных  $\varphi(y, t)$ . Для аппроксимации уравнений (24) — (33) использовалась разностная неявная консервативная схема, предложенная в работе [3], но модифицированная для рассматриваемой задачи.

### 3.2. Разностная схема

В области  $\Omega_y$  введем разностную сетку  $\omega^y = \{y_i, 0 \leq i \leq N, y_0 = 0, y_{i^*} = 1, y_N = 2\}$ ,  $h_{i+1/2} = y_{i+1} - y_i$  — шаг сетки. Пусть граница раздела фаз, точка

$y = 1$ , совпадает с одним из узлов этой сетки; обозначим его  $y_{i^*}$ . Наряду с узлами  $y_i$ , введем потоковые точки  $y_{i+1/2} = (y_i + y_{i+1})/2$ ,  $i = 0, 1, \dots, N - 1$  и шаги сетки  $h_i^y = y_{i+1/2} - y_{i-1/2}$ . Разностную сетку по времени обозначим  $\omega^t = \{t_0 = 0, t_{k+1} = t_k + \tau, k = 0, 1, \dots\}$ ,  $\tau$  — шаг сетки по времени.

Сеточные функции температуры и концентрации будем относить к узлам сетки. Пусть  $f = \tilde{T}, \tilde{C}^{\gamma(j)}$ , ( $\gamma = s, l, j = \mathbf{A}, \mathbf{B}$ ) тогда  $f(y_i, t_j) = f_i$ . Определим эти функции в интервалах между узлами:  $f(y, t_j) = f(y_i, t_j)$  при  $y \in (y_{i-1/2}, y_{i+1/2})$ ,  $i \neq i^*$ . В силу непрерывности температуры на границе раздела фаз,  $\tilde{T}_{i^*-0} = \tilde{T}_{i^*+0}$ . Концентрация на фазовой границе терпит разрыв, поэтому в точке  $i^*$  задаются два ее значения  $\tilde{C}_{i^*-0}^{(j)} = \tilde{C}^{s(j)}$  и  $\tilde{C}_{i^*+0}^{(j)} = \tilde{C}^{l(j)}$ ,  $\tilde{C}^{s(j)}$  и  $\tilde{C}^{l(j)}$  — это равновесные концентрации, удовлетворяющие фазовой диаграмме системы;  $\tilde{C}^{(j)}(y, t_k) = \tilde{C}_{i^*-0}^{(j)}$ , если  $y \in (y_{i^*-1/2}, y_{i^*})$  и  $\tilde{C}^{(j)}(y, t_k) = \tilde{C}_{i^*+0}^{(j)}$ , если  $y \in (y_{i^*}, y_{i^*+1/2})$ . Для единообразия в регулярных точках ( $i \neq i^*$ ) также будем использовать обозначения  $\tilde{C}_{i-0}^{(j)}$  и  $\tilde{C}_{i+0}^{(j)}$ ,  $\tilde{C}_{i-0}^{(j)} = \tilde{C}_{i+0}^{(j)} = \tilde{C}_i^{(j)}$ . В дальнейшем тильду над  $\tilde{T}, \tilde{C}^{\gamma(j)}$  будем опускать. Длина зоны, удельная теплоемкость, коэффициенты температуропроводности, коэффициенты диффузии относятся к полуцелым узлам сетки. Слева и справа от точки  $i^*$  эти функции постоянны и принимают значения, соответствующие твердой и жидкой фазам.

Разностную производную по времени обозначим  $f_{t,i} = f_t = (\hat{f}_i - f_i)/\tau$ , где  $\hat{f}_i = f(y_i, t_k + \tau)$  [16]. Определим операторы разностного дифференцирования по пространству  $f_y(i) = [f(y_{i+1}, t_k) - f(y_i, t_k)]/h_{i+1/2}$ ,  $f_{\bar{y}}(i) = f_y(i - 1)$ .

Приведем этапы построения разностной схемы для уравнения теплопроводности (24). Проинтегрируем уравнение (24) по разностной ячейке  $[y_{i-1/2}, y_{i+1/2}] \times [t_k, t_k + \tau]$ .

$$\begin{aligned} & \int_{t_k}^{t_k + \tau} \int_{y_{i-1/2}}^{y_{i+1/2}} \left[ c_p^\gamma \frac{\partial}{\partial t} (l^\gamma T) - c_p^\gamma \frac{\partial}{\partial y} (\varphi_t T) \right] dy dt = \\ & = \int_{t_k}^{t_k + \tau} \int_{y_{i-1/2}}^{y_{i+1/2}} \left[ \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\varkappa^\gamma}{l^\gamma} \frac{\partial T}{\partial y} \right) + l^\gamma (\alpha^\gamma T + \beta^\gamma) \right] dy dt, \quad \gamma = s, l. \end{aligned} \quad (34)$$

Подставим в это равенство сеточные функции и вычислим последовательно интегралы, стоящие в левой и правой части равенства.

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_1^T &= \int_{t_k}^{t_k + \tau} dt \left[ \int_{y_{i-1/2}}^{y_i} c_{i-1/2} \frac{\partial}{\partial t} (l^\gamma T) dy + \int_{y_i}^{y_{i+1/2}} c_{i+1/2} \frac{\partial}{\partial t} (l^\gamma T) dy \right] = \\ &= \frac{h_{i-1/2}^y}{2} c_{i-1/2} \left[ \widehat{(l_{i-1/2} T_i)} - (l_{i-1/2} T_i) \right] + \frac{h_{i+1/2}^y}{2} c_{i+1/2} \left[ \widehat{(l_{i+1/2} T_i)} - (l_{i+1/2} T_i) \right], \quad \gamma = s, l. \end{aligned} \quad (35)$$

Если отрезок интегрирования  $[y_{i-1/2}, y_{i+1/2}]$  не содержит границу раздела фаз ( $i \neq i^*$ ), то  $c_{i-1/2} = c_{i+1/2}$ ,  $l_{i-1/2} = l_{i+1/2}$ , и при вычислении интеграла нет необходимости разбивать область интегрирования на отрезки, расположенные слева и справа от точки  $y_i$ . Представление (35) обеспечивает однородную, не зависящую от номера узла, форму записи разностной аппроксимации производной по времени.

Интеграл от второго слагаемого в левой части (34) также разобьем на две части и при его вычислении учтем, что  $(\varphi_t T)(y_i - 0) = (\varphi_t T)(y_i + 0)$  и  $\varphi_t(y_{i^*}) = \xi_t$

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_2^T &= \int_{t_k}^{t_k+\tau} dt \left[ \int_{y_{i-1/2}}^{y_i} c_{i-1/2} \frac{\partial}{\partial y} (\varphi_t T) dy + \int_{y_i}^{y_{i+1/2}} c_{i+1/2} \frac{\partial}{\partial y} (\varphi_t T) dy \right] = \\ &= \int_{t_k}^{t_k+\tau} \left[ c_{i-1/2} [(\varphi_t T)(y_i) - (\varphi_t T)(y_{i-1/2})] + c_{i+1/2} [(\varphi_t T)(y_{i+1/2}) - (\varphi_t T)(y_i)] \right] dt \approx \\ &\approx \tau \left[ (c_{i-1/2} - c_{i+1/2}) \xi_t \widehat{T}_{i^*} + c_{i+1/2} (\varphi_t \widehat{T})(y_{i+1/2}) - c_{i-1/2} (\varphi_t \widehat{T})(y_{i-1/2}) \right]. \quad (36) \end{aligned}$$

Произведение  $(\varphi_t T)$  в полужелтых точках вычисляется по формуле

$$(\varphi_t T)(y_{i\pm 1/2}) = \varphi_t(y_{i\pm 1/2})(T_i + T_{i\pm 1})/2.$$

Перейдем к вычислению интеграла, стоящего в правой части равенства. Тепловой поток непрерывен в регулярной точке, а на границе раздела фаз испытывает скачок, величина которого определяется из условия Стефана (25), поэтому приближенное выражение для интеграла  $\mathcal{I}_3$  можно записать в виде:

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_3^T &= \int_{t_k}^{t_k+\tau} dt \left[ \int_{y_{i-1/2}}^{y_i} \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\kappa^\gamma}{l^\gamma} \frac{\partial T}{\partial y} \right) dy + \int_{y_i}^{y_{i+1/2}} \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\kappa^\gamma}{l^\gamma} \frac{\partial T}{\partial y} \right) dy \right] = \\ &\approx \tau \frac{d\xi}{dt} \lambda \delta_{ii^*} + \tau \left[ \kappa_{i+1/2} \left( \frac{\widehat{T}_y}{\widehat{l}_{i+1/2}} \right) - \kappa_{i-1/2} \left( \frac{\widehat{T}_y}{\widehat{l}_{i-1/2}} \right) \right], \quad (37) \end{aligned}$$

где  $\delta_{ii^*}$  — символ Кронекера.

Для интеграла источника тепла получим следующую аппроксимацию:

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_4^T &= \int_{t_k}^{t_k+\tau} dt \left[ \int_{y_{i-1/2}}^{y_i} l^\gamma (\alpha^\gamma T + \beta^\gamma) dy + \int_{y_i}^{y_{i+1/2}} l^\gamma (\alpha^\gamma T + \beta^\gamma) dy \right] = \\ &= \tau \left[ \frac{h_{i-1/2}}{2} \widehat{l}_{i-1/2} (\alpha_{i-1/2} \widehat{T}_i + \beta_{i-1/2}) + \frac{h_{i+1/2}}{2} \widehat{l}_{i+1/2} (\alpha_{i+1/2} \widehat{T}_i + \beta_{i+1/2}) \right]. \quad (38) \end{aligned}$$

Заменяя в (34) интегралы приближенными формулами (35), (36), (36), (38), получим умноженную на площадь ячейки дивергентную разностную схему для уравнений (24).

$$\begin{aligned}
& \frac{h_{i-1/2}^y}{2} c_{i-1/2} (l_{i-1/2} T_i)_t + \frac{h_{i+1/2}^y}{2} c_{i+1/2} (l_{i+1/2} T_i)_t - \\
& - \left[ c_{i+1/2} (\varphi_t \widehat{T}) (y_{i+1/2}) - c_{i-1/2} (\varphi_t \widehat{T}) (y_{i-1/2}) \right] = \\
& = \left[ \varkappa_{i+1/2} \left( \frac{\widehat{T}_y}{\widehat{l}_{i+1/2}} \right) - \varkappa_{i-1/2} \left( \frac{\widehat{T}_y}{\widehat{l}_{i-1/2}} \right) \right] + \xi_t \left[ \lambda \delta_{ii^*} + (c_{i-1/2} - c_{i+1/2}) \widehat{T}_{i^*} \right] + \\
& + \left[ \frac{h_{i-1/2}}{2} \widehat{l}_{i-1/2} (\alpha_{i-1/2} \widehat{T}_i + \beta_{i-1/2}) + \frac{h_{i+1/2}}{2} \widehat{l}_{i+1/2} (\alpha_{i+1/2} \widehat{T}_i + \beta_{i+1/2}) \right]. \quad (39)
\end{aligned}$$

В регулярной точке (39) представляет собой схему с центральными разностями для уравнения типа конвекция-диффузия. При  $i = i^*$  к ней добавляется член, обусловленный скачком термодинамических параметров на границе раздела фаз и выделением (поглощением) тепла при фазовом переходе.

Для аппроксимации граничных условий в точках  $y_0$  и  $y_N$  уравнение (24) нужно проинтегрировать с учетом (31) по отрезкам  $[y_0, y_{1/2}]$  и  $[y_{N-1/2}, y_N]$  соответственно. В результате:

$$\begin{aligned}
& \sigma_1^T \left[ \widehat{T}_0 - T_{bot}(t) \right] + (1 - \sigma_1^T) \left[ \frac{h_{1/2}}{2} c_{1/2} (l_{1/2} T_0)_t - c_{1/2} (\varphi_t \widehat{T})(y_{1/2}) - \varkappa_{1/2} \left( \frac{\widehat{T}_y}{\widehat{l}_{1/2}} \right) \right] + \\
& + (1 - \sigma_1^T) \left[ -\frac{h_{1/2}}{2} \widehat{l}_{1/2} (\alpha_{1/2} \widehat{T}_0 + \beta_{1/2}) - \frac{\tilde{\alpha}}{\rho^s} (T_s^* - \widehat{T}_0) \right] = 0, \\
& \sigma_2^T \left[ \widehat{T}_N - T_{top}(t) \right] + (1 - \sigma_2^T) \left[ \frac{h_{N-1/2}}{2} c_{N-1/2} (l_{N-1/2} T_0)_t + c_{N-1/2} (\varphi_t \widehat{T})(y_{N-1/2}) \right] + \\
& + (1 - \sigma_2^T) \left[ \varkappa_{N-1/2} \left( \frac{\widehat{T}_y}{\widehat{l}_{N-1/2}} \right) - \frac{h_{N-1/2}}{2} \widehat{l}_{N-1/2} (\alpha_{N-1/2} \widehat{T}_N + \beta_{N-1/2}) \right] + \\
& + (1 - \sigma_2^T) \left[ -\frac{\tilde{\alpha}}{\rho^l} (T_l^* - \widehat{T}_N) \right] = 0, \quad \sigma_1^T, \sigma_2^T \in (0, 1). \quad (40)
\end{aligned}$$

Для получения разностной аппроксимации уравнений диффузии, проинтегрируем уравнения (26), (28) по ячейке  $[y_{i-1/2}, y_{i+1/2}] \times [t_j, t_j + \tau]$ :

$$\begin{aligned}
& \int_{t_j}^{t_j+\tau} dt \int_{y_{i-1/2}}^{y_{i+1/2}} \left[ \frac{\partial}{\partial t} (l^\gamma C^\gamma(j)) - \frac{\partial}{\partial y} (\varphi_t C^\gamma(j)) \right] dy = \\
& = \int_{t_j}^{t_j+\tau} \int_{y_{i-1/2}}^{y_{i+1/2}} \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{D^\gamma}{l^\gamma} \frac{\partial C^\gamma(j)}{\partial y} \right) dy dt, \quad \gamma = s, l, \quad j = A, B. \quad (41)
\end{aligned}$$

Для первого слагаемого в левой части получим следующую приближенную формулу:

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_1^C &= \int_{t_j}^{t_j+\tau} dt \left[ \int_{y_{i-1/2}}^{y_i} \frac{\partial}{\partial t} (l^\gamma C^\gamma(j)) dy + \int_{y_i}^{y_{i+1/2}} \frac{\partial}{\partial t} (l^\gamma C^\gamma(j)) dy \right] \approx \\ &\approx \frac{h_{i-1/2}}{2} \left[ \widehat{(l_{i-1/2} C_i^\gamma(j))} - (l_{i-1/2} C_i^\gamma(j)) \right] + \frac{h_{i+1/2}}{2} \left[ \widehat{(l_{i+1/2} C_i^\gamma(j))} - (l_{i+1/2} C_i^\gamma(j)) \right], \\ &\quad \gamma = s, l, \quad j = A, B. \end{aligned}$$

Проинтегрируем второе слагаемое в левой части выражения (41):

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_2^C &= \int_{t_j}^{t_j+\tau} dt \left[ \int_{y_{i-1/2}}^{y_i} \frac{\partial}{\partial y} (\varphi_t C^\gamma(j)) dy + \int_{y_i}^{y_{i+1/2}} \frac{\partial}{\partial y} (\varphi_t C^\gamma(j)) dy \right] = \\ &= \int_{t_j}^{t_j+\tau} \left[ (\varphi_t C^\gamma(j)) \Big|_{y_{i+1/2}}^{y_{i-0}} + (\varphi_t C^\gamma(j)) \Big|_{y_{i+0}}^{y_{i+1/2}} \right] dt \approx \\ &\approx \tau \left[ (\varphi_t C^\gamma(j)) \Big|_{y_{i-1/2}}^{y_{i+1/2}} + (\widehat{C}^s(j) - \widehat{C}^l(j)) \xi_t \delta_{ii^*} \right], \quad \gamma = s, l, \quad j = A, B. \end{aligned}$$

Вычислим интеграл аппроксимирующий правую часть выражения (41):

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_3^C &= \int_{t_j}^{t_j+\tau} dt \left[ \int_{y_{i-1/2}}^{y_i} \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{D^\gamma}{l^\gamma} \frac{\partial C^\gamma(j)}{\partial y} \right) dy + \int_{y_i}^{y_{i+1/2}} \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{D^\gamma}{l^\gamma} \frac{\partial C^\gamma(j)}{\partial y} \right) dy \right] = \\ &= \int_{t_j}^{t_j+\tau} \left[ \frac{D}{l} \frac{\partial C^\gamma(j)}{\partial y} \Big|_{y_{i-1/2}}^{y_{i-0}} + \frac{D}{l} \frac{\partial C^\gamma(j)}{\partial y} \Big|_{y_{i+0}}^{y_{i+1/2}} \right] dt \approx \\ &\approx \tau \left[ \frac{D_{i+1/2}}{\widehat{l}_{i+1/2}} \widehat{C}_y^\gamma(j) - \frac{D_{i-1/2}}{\widehat{l}_{i-1/2}} \widehat{C}_y^\gamma(j) + (\widehat{C}^s(j) - \widehat{C}^l(j)) \xi_t \delta_{ii^*} \right], \quad \gamma = s, l, \quad j = A, B. \end{aligned}$$

Разностная аппроксимация уравнений диффузии (26) и (28):

$$\begin{aligned} &\frac{h_{i-1/2}^y}{2} \left( l_{i-1/2} C_{i-0}^\gamma(j) \right)_t + \frac{h_{i+1/2}^y}{2} \left( l_{i+1/2} C_{i+0}^\gamma(j) \right)_t - \\ &- \left[ (\varphi_t \widehat{C}^\gamma(j)) (y_{i+1/2}) - (\varphi_t \widehat{C}^\gamma(j)) (y_{i-1/2}) \right] = \\ &= D_{i+1/2} \left( \frac{\widehat{C}_y^\gamma(j)}{\widehat{l}_{i+1/2}} \right) - D_{i-1/2} \left( \frac{\widehat{C}_y^\gamma(j)}{\widehat{l}_{i-1/2}} \right), \quad \gamma = s, l, \quad j = A, B. \end{aligned} \quad (42)$$

Аппроксимация граничных условий (33) получается, если в (42) при  $i = 0$  и  $i = N$  формально положить равными нулю члены с индексами  $0 - 1/2$  и  $N + 1/2$  соответственно. В этом нетрудно убедиться, проинтегрировав уравнение (26) и (28) по приграничным ячейкам с учетом условий (33)

$$\begin{aligned} \frac{h_{1/2}}{2} \left( l_{1/2} C_0^{\gamma(j)} \right)_t - (\varphi_t \widehat{C}^{\gamma(j)})(y_{1/2}) - D_{1/2} (\widehat{C}_y^{\gamma(j)} / \widehat{l}_{1/2}) &= 0, \\ \frac{h_{N-1/2}}{2} \left( l_{N-1/2} C_i^{\gamma(j)} \right)_t + (\varphi_t \widehat{C}^{\gamma(j)})(y_{N-1/2}) + D_{N-1/2} (\widehat{C}_y^{\gamma(j)} / \widehat{l}_{N-1/2}) &= 0, \end{aligned} \quad (43)$$

$$\gamma = s, l, \quad j = A, B.$$

### 3.3. Метод решения сеточных уравнений

Для решения нелинейной системы уравнений (39) – (43) применим метод Ньютона. Введем следующие обозначения  $\zeta_i = (C_i^{(A)}, C_i^{(B)}, T_i)^T$ ,  $i = 0, 1, \dots, i^* - 1, i^* + 1, \dots, N$ ,  $\zeta_{i^*} = (C_{i^*}^{s(A)}, C_{i^*}^{s(B)}, T_{i^*}, \xi_t, C_{i^*}^{l(A)}, C_{i^*}^{l(B)})^T$ . Запишем схему (39) – (43) в операторной форме:

$$\mathcal{F}(\zeta) = 0, \quad (44)$$

где переменные упорядочены следующим образом:

$$\zeta = (\zeta_0, \zeta_1, \dots, \zeta_{i^*-1}, \zeta_{i^*}, \zeta_{i^*+1}, \dots, \zeta_N)^T.$$

Определим итерационный процесс по методу Ньютона для системы (44):

$$\mathcal{F}'(\zeta^n) \delta\zeta = -\mathcal{F}(\zeta^n), \quad (45)$$

где  $\mathcal{F}'(\zeta)$  — матрица Якоби системы (44),  $\delta\zeta = \zeta^{n+1} - \zeta^n$ ,  $n$  — номер итерации.

На каждом шаге итерационного процесса (45) необходимо решать систему линейных уравнений, матрица которой имеет блочную трехдиагональную структуру с одним плотно заполненным столбцом, соответствующим неизвестной скорости движения фронта  $\delta\xi_t$ . Эту систему можно записать в виде:

$$\begin{aligned} A_{-1,i} \delta\zeta_{i-1} + A_{0,i} \delta\zeta_i + A_{+1,i} \delta\zeta_{i+1} + B_i \delta\xi_t &= -\mathcal{F}_i, \quad i = 0, \dots, i^* - 1, i^* + 1, \dots, N, \\ A_{-1,0} &= A_{+1,N} = 0, \\ A_{-1,i^*} \delta\zeta_{i^*-1} + A_{0,i^*} \delta\zeta_{i^*} + A_{+1,i^*} \delta\zeta_{i^*+1} &= -\mathcal{F}_{i^*}. \end{aligned} \quad (46)$$

Здесь  $A_{-1,i}$ ,  $A_{0,i}$ ,  $A_{+1,i}$  — матрицы  $3 \times 3$ ,  $\mathcal{F}_i$  — трехкомпонентный вектор,  $A_{-1,i^*}$ ,  $A_{+1,i^*}$  — матрицы  $3 \times 6$ ,  $A_{0,i^*}$  — матрицы  $6 \times 6$ ,  $\mathcal{F}_{i^*}$  — шестикомпонентный вектор.

$A_{0,0}$	$A_{+1,0}$	0			$B_0$					0		
$A_{-1,1}$	$A_{0,1}$	$A_{+1,1}$	0			$B_1$					0	
0	$A_{-1,2}$	$A_{0,2}$	$A_{+1,2}$	0			$B_2$					0
⋮												
0			$A_{-1,i^*-1}$	$A_{0,i^*-1}$	$A_{+1,i^*-1}$	$B_{i^*-1}$					0	
0			$A_{-1,i^*}$	$A_{0,i^*}$		$A_{+1,i^*}$					0	
0					$B_{i^*+1}$	$A_{-1,i^*+1}$	$A_{0,i^*+1}$	$A_{+1,i^*+1}$				0
⋮												
0					$B_{N-2}$	0	$A_{-1,N-2}$	$A_{0,N-2}$	$A_{+1,N-2}$			0
0					$B_{N-1}$	0	$A_{-1,N-1}$	$A_{0,N-1}$	$A_{+1,N-1}$			0
0					$B_N$			0	$A_{-1,N}$	$A_{0,N}$	$A_{+1,N}$	0

Систему уравнений (46) можно решить с помощью модифицированного метода матричной прогонки [17]. Пусть искомые  $\delta\zeta_i$  связаны следующими соотношениями:

$$\begin{aligned} \delta\zeta_i &= \alpha_{i+1}^s \delta\zeta_{i+1} + \beta_{i+1}^s + \gamma_{i+1}^s \delta\xi_t, & i = 0, 1, \dots, i^* - 1, \\ \delta\zeta_i &= \alpha_{i-1}^l \delta\zeta_{i-1} + \beta_{i-1}^l + \gamma_{i-1}^l \delta\xi_t, & i = N, N-1, \dots, i^* + 1. \end{aligned} \quad (47)$$

Здесь  $\alpha_i^\gamma$  — матрицы  $3 \times 3$ , а  $\beta_i^\gamma, \gamma_i^\gamma$  — трехкомпонентные векторы ( $i = 1, \dots, N$ ). С помощью соотношений (47) задача (46) сводится к системе уравнений на границе раздела фаз. Для этого последовательно вычислялись коэффициенты  $\alpha_i^s, \beta_i^s, \gamma_i^s, i = 0, 1, \dots, i^*$  и  $\alpha_i^l, \beta_i^l, \gamma_i^l, i = N, N-1, \dots, i^*$ . Затем, используя  $\alpha_{i^*}^s, \beta_{i^*}^s, \gamma_{i^*}^s, \alpha_{i^*}^l, \beta_{i^*}^l, \gamma_{i^*}^l$  из уравнений, соответствующих границе раздела фаз ( $i = i^*$ ), исключались неизвестные  $\delta\zeta_{i^*-1}, \delta\zeta_{i^*+1}$ . В результате получим систему из шести уравнений с 6-ю неизвестными:  $\delta\zeta_{i^*}$ . Она решается методом Гаусса. По найденным  $\delta\zeta_{i^*}$  с помощью прогоночных соотношений (47) вычисляются приращения  $\delta\zeta_i, 0 \leq i < i^*$  и  $i^* < i \leq N, l^s, l^l, \varphi_t$  на  $n+1$  итерации по методу Ньютона.

В качестве критерия окончания итерационного процесса использовалось условие:

$$\|\delta\zeta\| < \varepsilon_1 \|\zeta^n\| + \varepsilon_2, \quad (48)$$

где  $\varepsilon_1, \varepsilon_2$  — определяют точность сходимости итераций.

Алгоритм решения задачи (44) на каждом временном слое состоит из следующих этапов:

- 1) Вычисление элементов матрицы Якоби  $\mathcal{F}'(\zeta)$  и правых частей  $\mathcal{F}(\zeta)$ . В качестве начального приближения для искомым величин, используется решение с предыдущего временного слоя.
- 2) Вычисление прогоночных коэффициентов  $\alpha^\gamma, \beta^\gamma, \gamma^\gamma$ . Сведение исходной задачи к системе из шести уравнений на границе раздела фаз.
- 3) Вычисление  $\delta c_0^{s(\mathbf{A})}, \delta c_0^{s(\mathbf{B})}, \delta T_0, \delta \xi_t, \delta c_0^{l(\mathbf{A})}, \delta c_0^{l(\mathbf{B})}$ . Решение шести линейных уравнений на границе раздела фаз.



- 4) Вычисление искоемых функций  $\delta\zeta_i$ , ( $0 \leq i < i^*$  и  $i^* < i \leq N$ ),  $l^s, l^l, \varphi_t$ .
- 5) Проверка условия сходимости итераций по методу Ньютона.
- 6) Переход на следующий шаг по времени.

## 4. Результаты расчетов

В качестве примера использования разработанного алгоритма приведем результаты моделирования процессов роста и растворения для соединения  $\mathbf{A}_x\mathbf{B}_{1-x}\mathbf{C}$ . Совместное определение полей температуры, концентраций и положения фронта кристаллизации позволяет задавать начальные данные естественным образом, без предварительного согласования.

### 4.1. Фазовая диаграмма

Фазовая диаграмма системы для каждого из компонентов твердой фазы имеет вид

$$x^{s(AC)} = 4\gamma_A x^{l(A)} x^{l(C)} \Theta_{AC}(T), \quad x^{s(BC)} = 4\gamma_B x^{l(B)} x^{l(C)} \Theta_{BC}(T), \quad (49)$$

$$\Theta_{AC} = \exp\left(\frac{\Delta H_{AC}^{melt}}{RT_{AC}^{melt}} \frac{T_{AC}^{melt} - T}{T}\right), \quad \Theta_{BC} = \exp\left(\frac{\Delta H_{BC}^{melt}}{RT_{BC}^{melt}} \frac{T_{BC}^{melt} - T}{T}\right).$$

Здесь  $R$  — универсальная газовая постоянная,  $\Delta H_j^{melt}$  — удельная энтальпия плавления,  $T_j^{melt}$  — температура плавления,  $j = AC, BC$ ,  $\gamma_j$  ( $j = A, B$ ) — полиномиальные функции температуры и состава твердой фазы, значения коэффициентов приведены в работе [18]. Состав жидкой фазы удовлетворяет

$$x^{l(A)} + \kappa x^{l(B)} = \frac{\eta}{1 - x^{l(A)} - x^{l(B)}}, \quad (50)$$

где  $\kappa = (\gamma_B \Theta_{BC})/(\gamma_A \Theta_{AC})$ ,  $\eta = 1/(4\gamma_A \Theta_{AC})$ . Известна связь между объемной концентрацией компонента и его мольной долей в твердой фазе

$$x^{s(j)} = \frac{2a_C C^{s(j)}}{\rho^s + (a_C - a_A)C^{s(AC)} + (a_C - a_B)C^{s(BC)}}, \quad j = AC, BC, \quad (51)$$

а также между объемной концентрацией компонента и его мольной долей в жидкой фазе

$$x^{l(j)} = \frac{a_C C^{l(j)}}{\rho^l - a_A C^{l(A)} - a_B C^{l(B)}}, \quad j = A, B. \quad (52)$$

Подставив в (49), (50) выражения (51), (52), получим фазовую диаграмму в форме (7).

## 4.2. Изотермический рост

Для получения кристалла в режиме изотермического роста, насыщенный при температуре  $T_1$  раствор компонентов **A** и **B** в **C** приводится в контакт с затравкой состава  $\mathbf{A}_x\mathbf{B}_{1-x}\mathbf{C}$ , и выдерживается при постоянной температуре  $T_0 = T_1 - \Delta T$ . Величина  $\Delta T > 0$  называется степенью пересыщенности расплава. Поскольку жидкая фаза пересыщена, начинается процесс кристаллизации. Основной особенностью данного режима является рост кристалла постоянного состава.

Рассматривалась затравка состава  $\mathbf{A}_{x_0}\mathbf{B}_{1-x_0}\mathbf{C}$ ,  $x_0 = 0.2$ , толщиной  $l^s = 30$  мкм, длина жидкой фазы  $l^l = 15$  см, радиус ампулы 0.5 см,  $\Delta T = 10$  К,  $T_0 = 783$  К,  $i^* = 500$ ,  $N - i^* = 5 \cdot 10^4$ ,  $\tau = 0.1t_D$ ,  $t_D = 5$  с,  $D^s = 5 \cdot 10^{-12}$  см<sup>2</sup>/с,  $D^l = 5 \cdot 10^{-5}$  см<sup>2</sup>/с,  $c_p^s = 441 \cdot 10^{-3}$  Дж/(г К),  $c_p^l = 393 \cdot 10^{-3}$  Дж/(г К),  $\varkappa^s = 2 \cdot 10^{-2}$  (см<sup>2</sup> Вт)/(г К),  $\varkappa^l = 8 \cdot 10^{-2}$  (см<sup>2</sup> Вт)/(г К). В данном расчете боковая поверхность ампулы считалась теплоизолированной, температура на торцах ампулы постоянна и равна  $T_0$ . На рисунке 2 приведены распределения концентрации **AC** в твердой фазе, **A** и **B** в жидкой фазе. Так как раствор является пересыщенным, в жидкой фазе выстраивается концентрационный градиент, способствующий росту кристалла постоянного состава  $x_e = 0.184$ . Температура на фронте кристаллизации не изменяется, поэтому состав на границе жидкой фазы также остается постоянным.

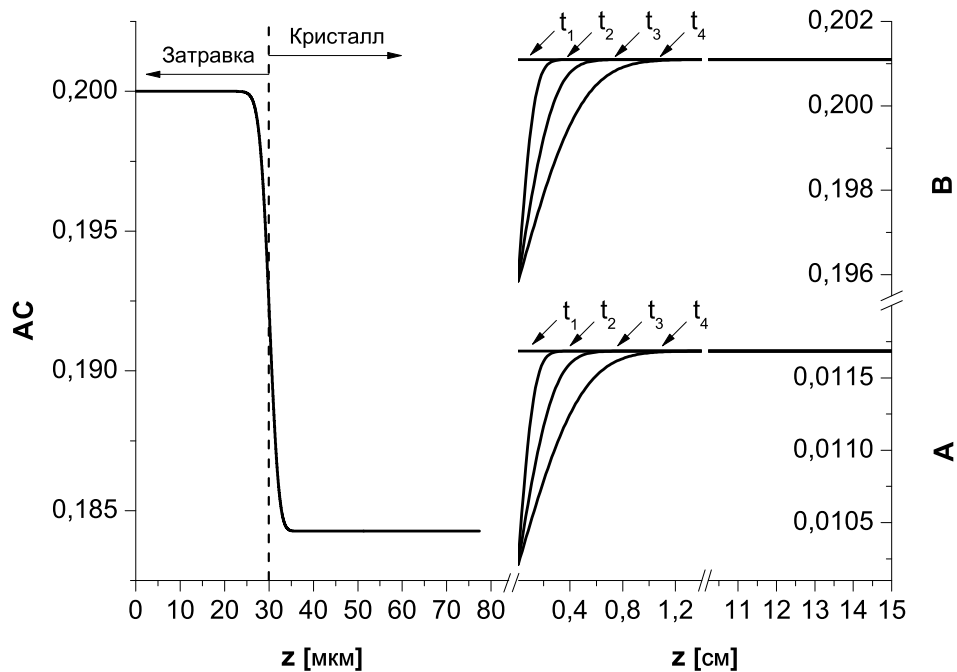


Рис. 2. Содержание **AC** в твердой фазе и состав жидкой фазы при изотермическом росте ( $x_0 = 0.2$ ,  $t_1 = 0t_D$ ,  $t_2 = 30t_D$ ,  $t_3 = 100t_D$ ,  $t_4 = 300t_D$ ).

Аналитическое решение классической задачи Стефана [19] дает зависи-

мость положения фронта кристаллизации от времени следующего вида

$$\xi(t) = \nu\sqrt{t}. \quad (53)$$

Так как в течение процесса температура на фронте кристаллизации остается постоянной, этот результат справедлив и для режима изотермического роста. На рисунке 3 приведена зависимость положения фронта кристаллизации от  $\sqrt{t}$  для различных  $\Delta T$ . Расчеты показывают, что имеет место линейная зависимость. При этом тангенс угла наклона соответствующей прямой на рисунке 3 равен коэффициенту пропорциональности  $\nu$  в (53).

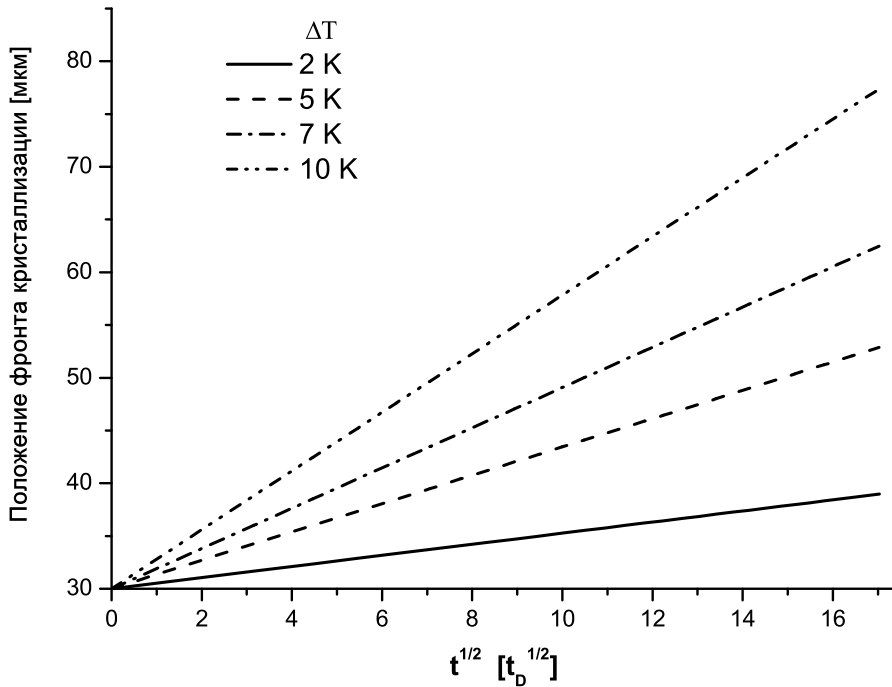


Рис. 3. Зависимость положения фронта кристаллизации от  $\sqrt{t}$  ( $x_0 = 0.2$ ).

Известны экспериментальные данные о составе выросшего кристалла. В работах [20–22] приведена зависимость состава твердой фазы от степени первоначального пересыщения раствора  $\Delta T$ . Расчеты проводились для  $\Delta T = 2, 5, 7, 10 \text{ K}$ . На рисунке 4 приведено падение содержания **АС** на один градус пересыщения —  $\Delta x = \frac{x_0 - x_e}{\Delta T}$ , а также аппроксимация полученных результатов линейной функцией (сплошная линия). Мольная доля **АС** в кристалле убывает с ростом  $\Delta T$ . Зависимость  $x_e$  от  $\Delta T$  с хорошей точностью описывается функцией:  $x_e = 0.2 - 0.0016 \Delta T$ . Что согласуется с данными работ [20–22].

Построенная модель позволяет решать обратные задачи, например, определять коэффициент теплоотдачи  $\tilde{\alpha}$ . Рассматривался процесс изотермического роста из пересыщенного раствора, твердая фаза имела состав  $x_0 = 0.2$ .

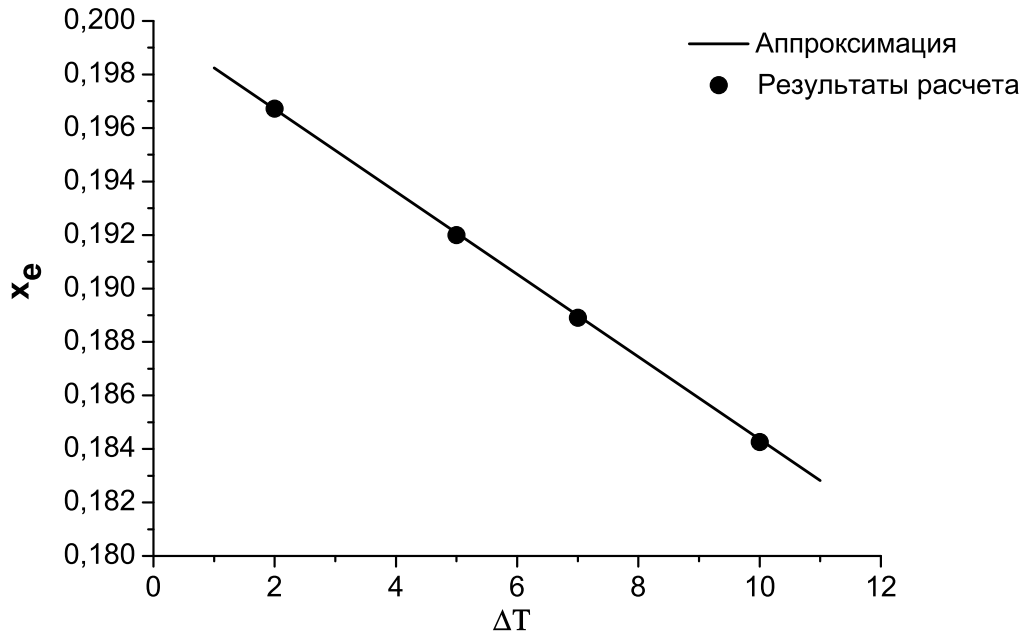


Рис. 4. Зависимость содержания **АС** в выросшем кристалле от степени пересыщения раствора  $\Delta T$  ( $x_0 = 0.2$ ).

Концы ампулы считались теплоизолированными, температура окружающей среды  $T^* = 780$  К, степень пересыщения раствора  $\Delta T = 2$  К. Остальные параметры совпадали с параметрами предыдущего расчета. На рисунке 5 приведены распределения состава при значениях коэффициента теплоотдачи  $\tilde{\alpha} = 0, 10^{-5}, 10^{-6}$  Вт/(К см<sup>2</sup>)<sup>1</sup>. При  $\tilde{\alpha} = 10^{-6}$  Вт/(К см<sup>2</sup>) был получен кристалл постоянного состава, что соответствует экспериментальным данным. Однако при  $\tilde{\alpha} = 10^{-5}$  Вт/(К см<sup>2</sup>) содержание компонента **АС** в твердой фазе падает. Такое распределение состава характерно для выращивания кристалла в условиях принудительного охлаждения. Получено, что теплообмен с окружающей средой настолько силен, что рост происходит уже не в изотермическом режиме; несмотря на то, что при кристаллизации вещества выделяется теплота, ее оказывается недостаточно для того чтобы на границе раздела фаз поддерживалась постоянная температура. В случае большей степени пересыщения раствора ( $\Delta T = 10$  К, рис. 6) скорость движения фронта кристаллизации выше, что соответствует большему количеству теплоты, выделяющемуся при кристаллизации. Этого количества достаточно, чтобы при  $\tilde{\alpha} = 10^{-5}$  Вт/(К см<sup>2</sup>) рос слой практически постоянного состава. На момент времени  $t = 25$  мин падение концентрации компонента **АС** составило 3% от состава твердой фазы равновесной начальному составу раствора при температуре  $T_0$ . Данная величина не превосходит точности измерительных

<sup>1</sup>При  $\tilde{\alpha} = 0$  Вт/(К см<sup>2</sup>) в расчетах на концах ампулы поддерживалась постоянная температура  $T = T_0$ .

приборов, доступных в настоящее время. Проведенные расчеты дают оценку коэффициента теплоотдачи  $\tilde{\alpha} < 10^{-6}$  Вт/(К см<sup>2</sup>).

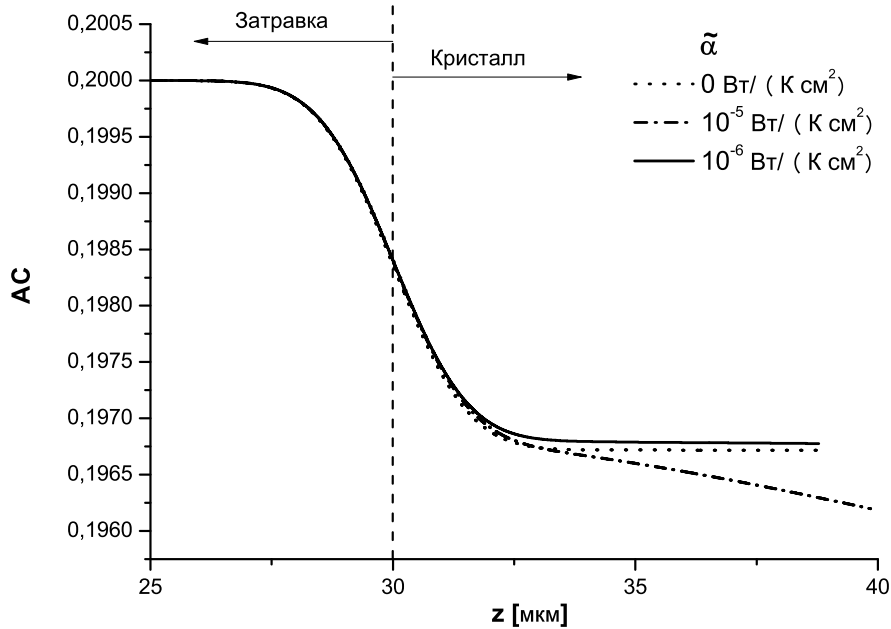


Рис. 5. Содержание АС в составе твердой фазы при различных значениях коэффициента теплоотдачи ( $x_0 = 0.2$ ,  $\Delta T = 2$  К,  $t = 300 t_D$ ).

Отметим следующие достоинства используемого вычислительного алгоритма. Во-первых, это возможность задавать начальные данные для расчетов естественным образом. При изотермическом режиме выращивания в начальный момент состав расплава не равновесен затравке, то есть концентрации веществ в твердой и жидкой фазах не удовлетворяют уравнениям фазовой диаграммы. Однако для предложенного алгоритма, в рассмотренном диапазоне параметров, не требуется специального согласования начальных данных, о котором, например, упоминается в работах [4, 23, 24]. Во-вторых, численный метод является консервативным. Выполнение закона сохранения массы контролировалось на каждом шаге по времени. Масса каждого из компонентов оставалась постоянной с точностью, определяемой точностью решения системы уравнений.

#### 4.3. Рост в условиях принудительного охлаждения

В начальный момент времени затравка  $A_x B_{1-x} C$  приводится в контакт с равновесным ей раствором  $A-B-C$ . Температура на торцах ампулы изменяется по закону:  $T(t) = T_0 - \mu t$ , где  $T_0$  — начальная температура соединения,  $\mu$  — скорость охлаждения,  $t$  — время, боковая поверхность ампулы

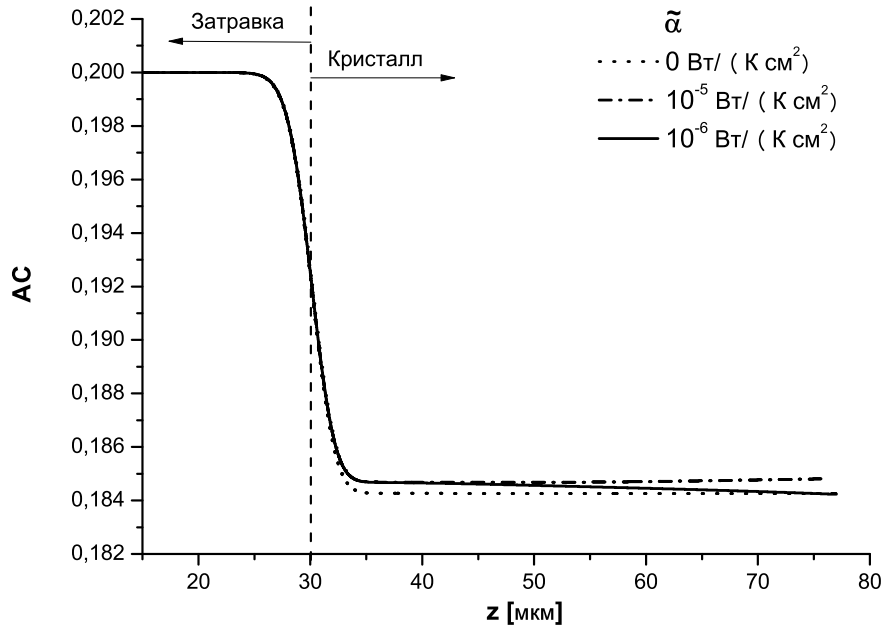


Рис. 6. Содержание **АС** в составе твердой фазы при различных значениях коэффициента теплоотдачи ( $x_0 = 0.2$ ,  $\Delta T = 10$  К,  $t = 300 t_D$ ).

теплоизолированная. Из-за понижения температуры раствор становится пересыщенным, начинается процесс кристаллизации. На рисунке 7 приведены результаты расчета для  $\mu = 0.1$  К/мин. В расчете  $x_0 = 0.207$ , толщина затравки  $l^s = 1$  см, число узлов в твердой фазе  $i^* = 5 \cdot 10^4$ , остальные параметры такие же как и в предыдущих расчетах. Из-за охлаждения жидкая фаза в каждый момент времени является пересыщенной. В растворе выстраивается концентрационный градиент, который способствует движению фронта кристаллизации вправо, происходит рост кристалла переменного состава. Содержание компонента **АС** в твердой фазе убывает в соответствии с фазовой диаграммой системы.

На рисунке 8 для различных значений скорости охлаждения  $\mu$  приведено распределение состава твердой фазы на момент времени  $t = 10$  мин. С увеличением  $\mu$  рост кристалла происходит быстрее. Так при  $\mu = 0.1$  К/мин за 10 минут толщина твердой фазы увеличивается на 1 мкм, а при  $\mu = 0.5$  К/мин — 4.9 мкм. Помимо этого содержание компонента **АС** в твердой фазе падает, поскольку кристаллизация происходит при более низкой температуре [20, 21].

Проводилось исследование влияния теплообмена между боковой поверхностью ампулы и окружающей средой на ход процесса кристаллизации. На торцах ампулы задавали условия охлаждения, а на боковой поверхности условия контактного теплообмена (11). Результаты расчетов показали, что если температура окружающей среды ниже, чем температура внутри ампулы, то

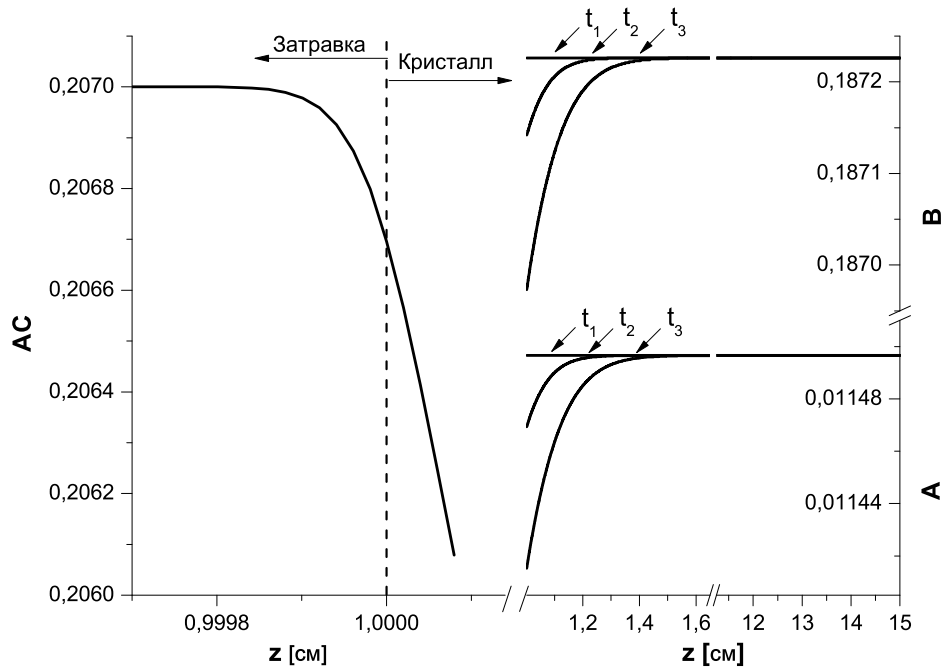


Рис. 7. Состав твердой и жидкой фазы соединения ( $x_0 = 0.207$ ,  $\mu = 0.1$  К/мин,  $t_1 = 0$  с,  $t_2 = 5$  мин,  $t_3 = 10$  мин).

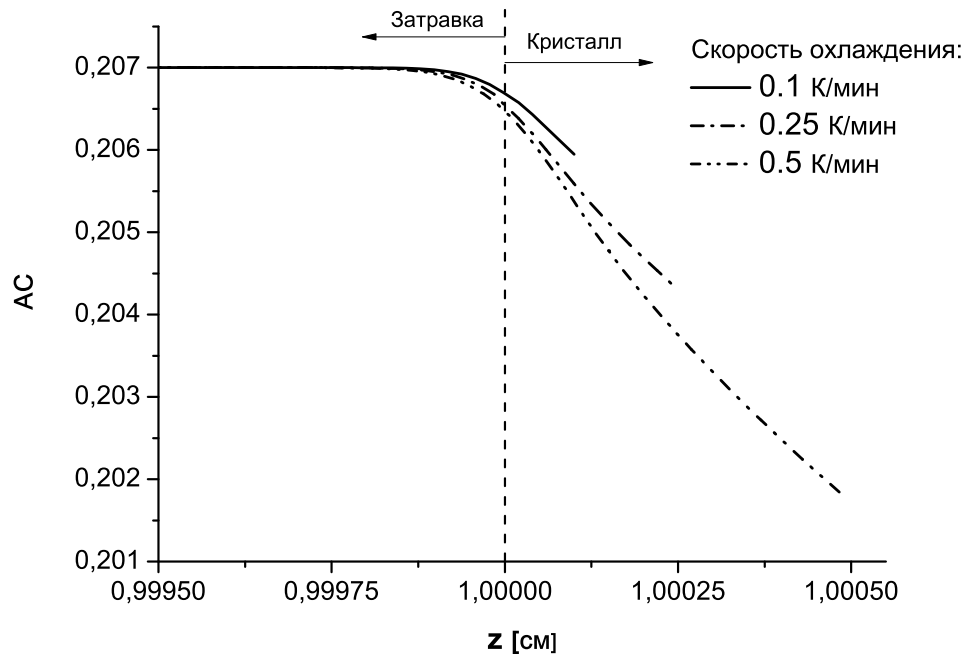


Рис. 8. Зависимость состава выросшего кристалла от скорости охлаждения  $\mu$  ( $x_0 = 0.207$ ,  $t = 10$  мин,  $T_0 = 783\text{K}$ ).

теплообмен выступает в качестве дополнительного механизма охлаждения, поэтому рост кристалла происходит быстрее (см. рис. 9). Таким образом температуру окружающей среды можно использовать как дополнительный регулятор скорости роста кристалла.

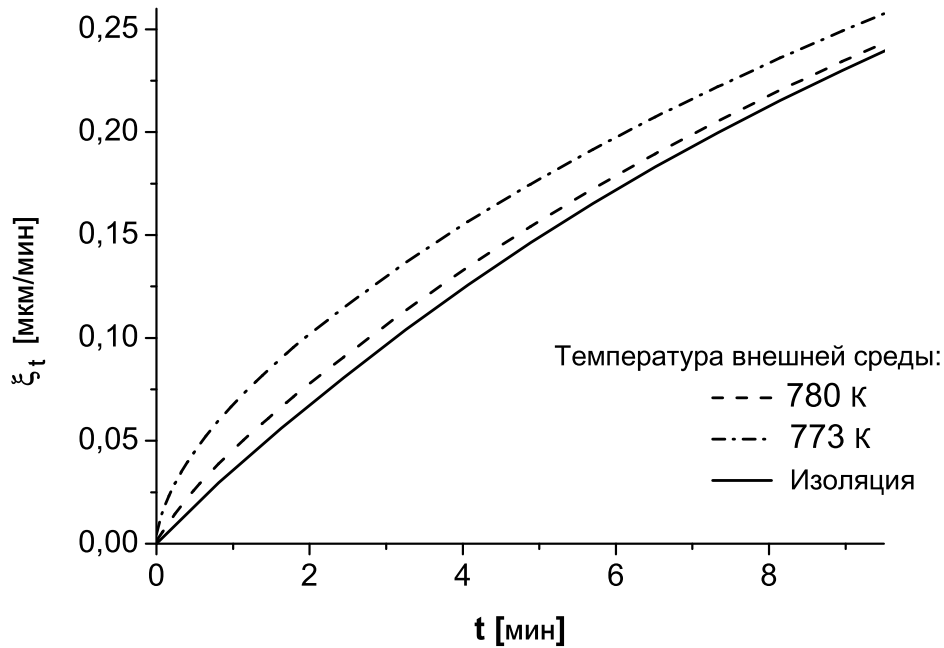


Рис. 9. Скорость движения границы раздела фаз в зависимости от температуры окружающей среды  $T^*$ . ( $\tilde{\alpha} = 10^{-5}$  Вт/(К·см<sup>2</sup>),  $\mu = 0.1$ К/мин,  $T_0 = 783$ К).

#### 4.4. Рост кристалла из недосыщенного раствора

При температуре  $T_0$  недосыщенный раствор компонентов **A** и **B** в **C**, равновесный твердой фазе  $x_0$  при температуре  $T_1 = T_0 - \Delta T$ , помещается в ампулу, на дне которой расположена затравка состава  $A_{x_0}B_{1-x_0}C$ . Торцы ампулы охлаждаются по закону  $T(t) = T_0 - \mu t$  до температуры  $T_2$ , затем система выдерживается при постоянной температуре. Здесь  $\Delta T > 0$  характеризует степень недосыщения жидкой фазы. Боковая поверхность ампулы теплоизолирована<sup>2</sup>. При таком режиме выращивания насыщение раствора происходит как за счет понижения температуры, так и за счет растворения затравки, в результате которого в жидкую фазу поступает дополнительный материал (см. рис. 10). С течением времени раствор в окрестности границы раздела фаз становится насыщенным, и продолжающееся понижение температуры приводит к смене растворения ростом ( $t = 10.5$  мин). Вблизи фронта кристаллизации выстраивается концентрационный градиент, способствующий росту кристалла ( $t = 14.5$  мин).

<sup>2</sup>В расчетах использовались те же параметры, что и для изотермических режимов



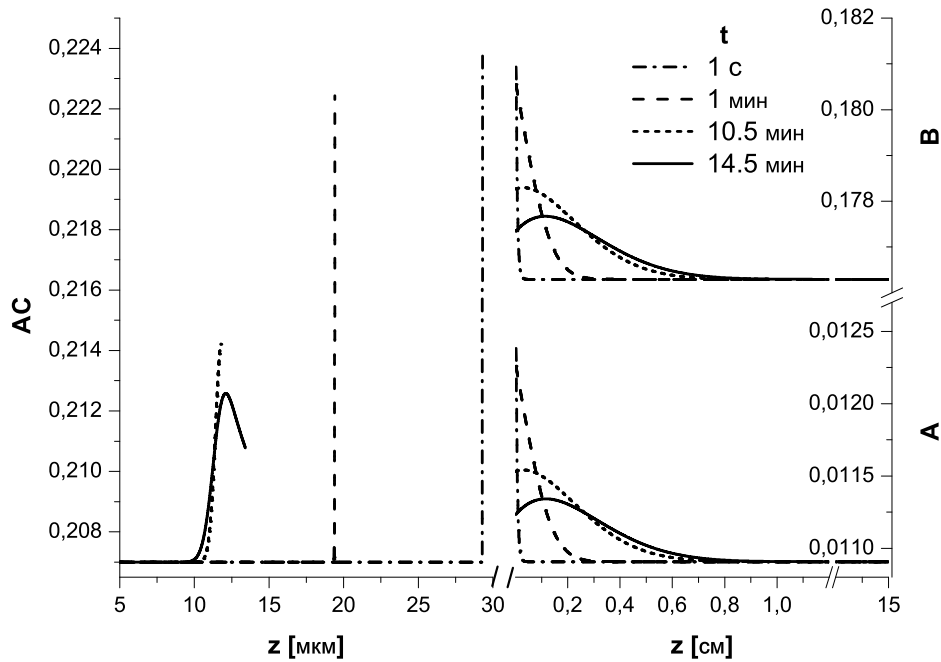


Рис. 10. Содержание  $AC$  в твердой фазе и состав жидкой фазы соединения ( $\Delta T = 10$  К,  $\mu = 0.5$  К/мин,  $x_0 = 0.207$ ).

На рисунке 11 показана эволюция состава в системе на этапе, когда охлаждение ампулы прекращено. Расчеты показывают, что происходит рост кристалла постоянного состава. При этом предварительное подрастворение затравки приводит к тому, что в твердой фазе присутствует зона, в которой концентрация  $AC$  заметно отличается от начального состава затравки. Высота и ширина концентрационного “всплеска” уменьшается с течением времени за счет диффузии в твердой фазе. Из-за большой длины ампулы и достаточно малого коэффициента диффузии в жидкой фазе в окрестности фронта кристаллизации наблюдается зона локального пересыщения раствора.

Для оценки влияния теплообмена на глубину растворения затравки, а также высоту и ширину концентрационного “всплеска” были проведены расчеты при различных коэффициентах теплообмена  $\tilde{\alpha} = 10^{-5}; 10^{-4}; 10^{-3}$  Вт/(К·см<sup>2</sup>) и температурах окружающей среды  $T^* = 780; 773$  К. При этом параметры соединения и сетки совпадали с соответствующими параметрами в предыдущем расчете. Численные эксперименты показали, что из-за малой толщины затравки и достаточно высокой теплопроводности твердой фазы, контактный теплообмен на поверхности ампулы не оказывает существенного влияния на температуру фронта кристаллизации, которая в данном случае совпадает с температурой на нижнем торце цилиндра. Таким образом, для затравок малой толщины глубина растворения и параметры концентрационного пика определяются только степенью недосыщения раствора и скоростью охлаждения концов ампулы.

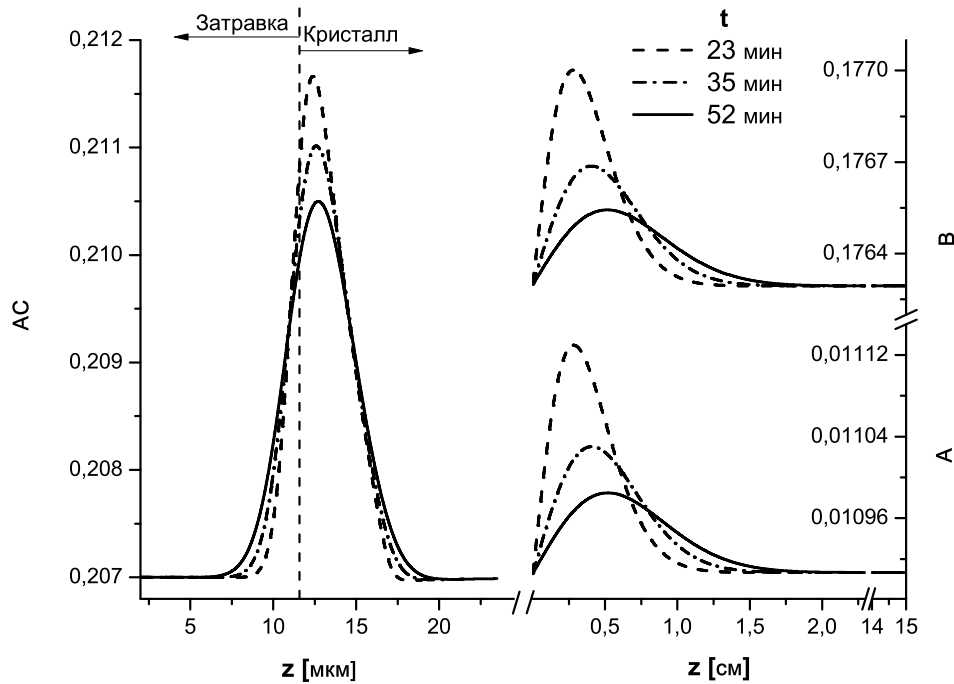


Рис. 11. Содержание **АС** в твердой фазе и состав жидкой фазы соединения на этапе роста эпитаксиального слоя постоянного состава ( $\Delta T = 10$  К,  $\mu = 0.5$  К/мин,  $x_0 = 0.207$ ).

Исследовалась зависимость времени и глубины растворения затравки от  $\Delta T$  при скорости охлаждения  $\mu = 0.5$  К/мин,  $T_0 = 783$  К,  $T_2 = 773$  К. Результаты приведены в таблице 1. Из расчетов видно, что с увеличением  $\Delta T$  скорость движения фронта кристаллизации и глубина растворения затравки также увеличиваются. На рисунке 12 изображены распределения **АС** в твердой фазе на начальном этапе развития режима изотермического роста при различных степенях недосыщения раствора. Численный эксперимент показывает, что происходит рост кристалла постоянного состава  $x_e = 0.207 - 0.0016 \cdot (T_1 - T_2)$ . Падение содержания компонента **АС** в кристалле увеличивается при уменьшении  $\Delta T$ . Ширина и высота концентрационного “всплеска” увеличиваются с увеличением начального недосыщения раствора.

Таблица 1. Результаты расчетов для  $\mu = 0.5$  К/мин

$\Delta T$ [К]	Глубина растворения [μм]	Время растворения [мин]
2	1.7	2
5	7.6	5
7	10.8	7
10	18.4	10

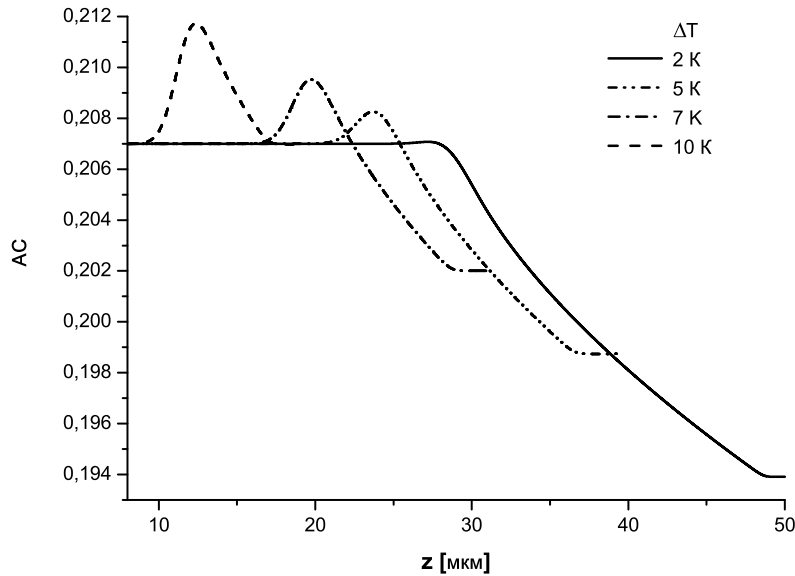


Рис. 12. Содержание **АС** в составе твердой фазы на раннем этапе развития режима изотермического роста для различных  $\Delta T$  ( $\mu = 0.5$  К/мин,  $x_0 = 0.207$ ).

На рисунке 13 приведены зависимости положения фронта кристаллизации от времени при различных скоростях охлаждения и  $\Delta T = 10$  К. Расчеты показывают, что при увеличении  $\mu$ , насыщение раствора на границе раздела фаз происходит быстрее, глубина растворения уменьшается с увеличением скорости охлаждения концов ампулы. С увеличением скорости охлаждения, уменьшается ширина и высота концентрационного “всплеска” (см. рис. 14).

## 5. Заключение

Рассмотрена самосогласованная модель кристаллизации трехкомпонентного раствора в цилиндрической ампуле. Модель учитывает движение фронта кристаллизации и диффузионный тепломассоперенос в твердой и жидкой фазах. Предложен метод решения термодиффузионной задачи Стефана, основанный на совместном решении системы уравнений, описывающей процессы тепломассопереноса и движение фронта кристаллизации. Благодаря использованию неявной разностной схемы и совместному решению уравнений с помощью метода Ньютона, построенный метод обладает значительным запасом устойчивости и гарантирует получение надежных результатов для широкого класса фазовых диаграмм. Консервативные свойства алгоритма позволяют проводить численное моделирование режимов смены растворения ростом. Предложенный метод применялся для решения задачи о кристаллизации трехкомпонентного раствора, однако он очевидным образом обобщает-

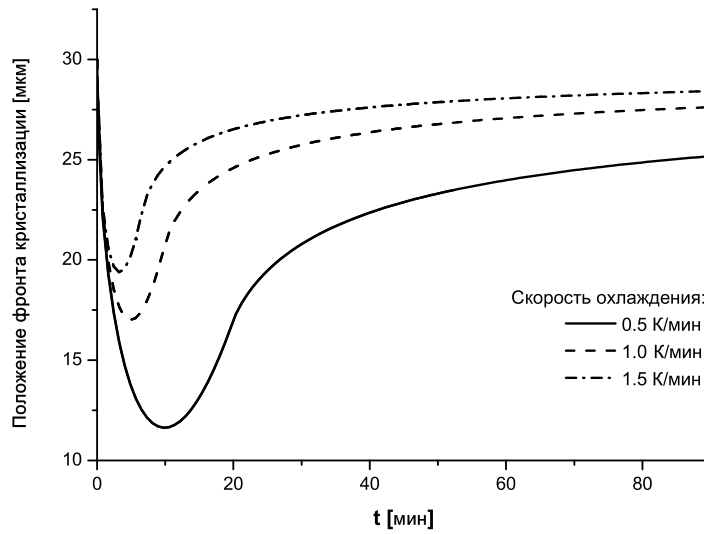


Рис. 13. Изменение положения фронта кристаллизации для различных скоростей охлаждения ( $\Delta T = 10$  К,  $x_0 = 0.207$ ).

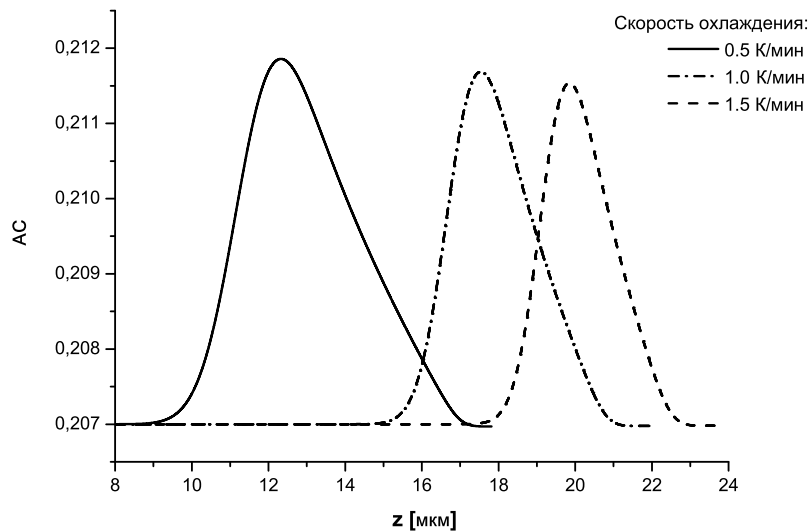


Рис. 14. Содержание **АС** в составе твердой фазы на раннем этапе развития режима изотермического роста для различных скоростей охлаждения ( $\Delta T = 10$  К,  $x_0 = 0.207$ ).

ся на случай кристаллизации раствора с произвольным числом растворенных компонентов. Рассмотрено несколько температурных режимов выращивания кристаллов. Указаны способы влияния на размеры и состав выросшего кристалла. В расчетах использовалась реальная фазовая диаграмма соединения.

## Список литературы

1. Chtcheritsa O.V., Mazhorova O.S., Popov Yu.P. Implicit Numerical Algorithm for the Solution of Phase Transition Problems in Multi-Component Alloys // Journal of Mathematical Modelling and Analysis. 2004. Vol. 9, no. 4. Pp. 253–266.
2. Мажорова О.С., Попов Ю.П., Щерица О.В. Алгоритм расчета задачи о фазовом переходе в многокомпонентной системе // Дифференциальные уравнения. 2004. Т. 40, № 7. С. 1051–1060.
3. 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.
4. Illingworth T.C., Golosnoy I.O. Numerical solutions of diffusion-controlled moving boundary problems which conserve solute // Journal of computation physics. 2005. Vol. 209. Pp. 207 – 225.
5. Мажорова О.С., Попов Ю.П., Похилко В.И. Матричный алгоритм численного решения нестационарных задач концентрационной конвекции для многокомпонентных сред. Получение монокристаллов и полупроводниковых структур. Под ред. Самарского А.А., Попова Ю.П., Мажоровой О.С. Москва: Наука, 1986. С. 142–158.
6. Ghez R., Small M.B. Growth and dissolution kinetics of ternary alloys of ternary III-V heterostructures formed by liquid phase epitaxy. III. Effect of temperature programming // Journal of Applied physics. 1982. Vol. 53, no. 7. Pp. 4907– 4918.
7. Самарский А.А., Вабищевич П.Н. Вычислительная теплопередача. Москва: УРСС, 2003. 784 с.
8. Samarskii A.A., Vabishchevich P.N., Iliev O.P., Churbanov A.G. Numerical simulation of convection/diffusion phase change problems – a review. // Journal of Heat Mass Transfer. 1993. Vol. 36, no. 17. Pp. 4095 – 4106.
9. Muray W.D., Landis F. Numerical and mashine solutions of the transient heat conduction problems involving melting or freezing // Journal heat transfer. 1959. Vol. 81. Pp. 106 – 112.
10. Vermolen F.J., Vuik C. A mathematical model for the dissolution of particles in multi-component alloys. // J. of computational and applied mathematics. 2000. Vol. 126. Pp. 233 – 254.
11. Бакирова О.И. Численное моделирование процесса зонной плавки на основе решения задачи о фазовом переходе в бинарной системе. // Математическое моделирование. Получение металлов и полупроводниковых структур. Москва: Наука, 1986. С. 142–158.

12. Дегтярев Л.М., Дроздов В.В., Иванова Т.С. Метод адаптивных к решению сеток в сингулярно – возмущённых одномерных краевых задачах // Дифференциальные уравнения. 1987. Т. 23, № 7. С. 1160 – 1168.
13. Friazinov I.V., Marchenko M.P., Mazhorova O.S. Transient simulation of crystal growth by Bridgman technique uder normal and low gravity // Proceedings of microgravity science and low gravity / Aerospace congress, Mosckow. 1991. — august. Pp. 179 – 187.
14. Pandelaers L., Verhaeghe F., Wollants P., Blanpain B. An implicit conservative scheme for coupled heat and mass transfer problems with multiple moving interfaces // International journal of heat and mass transfer. 2011. Vol. 54, no. 5-6. Pp. 1039 – 1045.
15. Н.Г. Landau. Heat conduction in a melting solid // Journal of applied mathematics. 1950. Vol. 8. Pp. 81 – 94.
16. Самарский А.А. Введение в теорию разностных схем. Москва: Наука, 1971. 552 с.
17. Самарский А.А., Николаев Е.С. Методы решения сеточных уравнений. Москва: Наука, 1978. 592 с.
18. Денисов И.А., Лакеенков В.М., Мажорова О.С., Попов Ю.П. Математическое моделирование эпитаксиального выращивания твёрдых растворов  $Cd_{\gamma}Hg_{1-\gamma}Te$  из жидкой фазы. Препринт института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, Москва. 1992. № 65. 42 стр.
19. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. Москва: Наука, 2004. 7-е издание, 799 стр.
20. Denisov I.A., Lakeenkov V.M., Mazhorova O.S., Popov Yu.P. Numerical modelling for liquid phase epitaxy of  $Cd_xHg_{1-x}Te$  solid solution // Journal of Crystal Growth. 2002. Vol. 245. Pp. 21– 30.
21. Denisov I.A., Mazhorova O.S., Popov Yu.P., Smirnova N.A. Numerical modelling for convection in growth/dissolution of solid solution  $Cd_xHg_{1-x}Te$  by liquid phase epitaxy // Journal of Crystal Growth. 2004. Vol. 269. Pp. 284–291.
22. Sanz - Maudes J., Sangador J., Rodriguez T. et al. Numerical simulation of the growth of  $HgCdTe$  layers by liquid phase epitaxy from  $Te$ -rich solutions: the effect of liquid dimensions and mercury loss // Journal of Crystal Growth. 1990. Vol. 106. Pp. 303–317.
23. Dost S., Qin Z., Kimura M. A model for convective mass transport in liquid phase epitaxial growth of semiconductors // Journal of heat mass transport. 1997. Vol. 40, no. 13. Pp. 3039 – 3047.

24. Kimura M., Qin Z., Dost S. A solid – liquid diffusion model for growth and dissolution of ternary alloys by liquid phase epitaxy // Journal of Crystal Growth. 1996. Vol. 158. Pp. 231–240.

## Содержание

<b>1. Введение</b>	<b>3</b>
<b>2. Постановка задачи</b>	<b>4</b>
<b>3. Алгоритм решения</b>	<b>8</b>
3.1. Замена переменных . . . . .	8
3.2. Разностная схема . . . . .	9
3.3. Метод решения сеточных уравнений . . . . .	14
<b>4. Результаты расчетов</b>	<b>16</b>
4.1. Фазовая диаграмма . . . . .	16
4.2. Изотермический рост . . . . .	17
4.3. Рост в условиях принудительного охлаждения . . . . .	20
4.4. Рост кристалла из недосыщенного раствора . . . . .	23
<b>5. Заключение</b>	<b>26</b>
<b>Список литературы</b>	<b>28</b>