УДК 519.6

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И МЕТОД РАСЧЕТА КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ДВУХКОМПОНЕНТНЫХ РАСПЛАВОВ

Гинкин В.П.[1], Ганина С.М.[1], Картавых А.В.[2], Чернов К.Г.[1]

[1]*ГНЦ РФ-Физико-энергетический институт, Обнинск, Россия*
[2]*Институт химических проблем микроэлектроники, Москва, Россия*

Работа поддержана грантами РФФИ 09-08-00844-а, 10-03-00338-а и госконтрактом 02.740.11.0505 Федеральной программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 гг.

АННОТАЦИЯ

Разработана математическая модель процесса кристаллизации, в которой численно решается задача Стефана с двумя границами: твердая фаза – двухфазная переходная зона и двухфазная зона – жидкая фаза. Двухфазная зона представлена пористой средой с переменной пористостью. Впервые для двухфазной зоны вводится квадратичная зависимость пористости от температуры. В двухфазной зоне учитывается дополнительная сила сопротивления течению расплава в пористой среде по аналогии с законом Дарси. Полученная система уравнений решается неявным методом установления с использованием экспоненциального метода аппроксимации, метода Патанкара-Сполдинга и метода неполной факторизации. Тестирование модели на расчете эксперимента по кристаллизации сплава Sn+20%Pb (масс.%) показало хорошее совпадение расчетных и экспериментальных данных.

ВВЕДЕНИЕ

Целью настоящей работы является построение математической модели и разработка численного метода расчета процесса затвердевания двухкомпонентного расплава. Необходимость создания таких моделей диктуется, в частности, прикладной проблемой получения поликристаллических слитков из интерметаллического сплава TiAl(Nb) с однородной микроструктурой, обладающих высокими потребительскими характеристиками и имеющими широкий круг практического использования, например, при изготовлении лопаток турбин.

Одним из ключевых условий создания новых материалов с заданными потребительскими характеристиками является установление критического соответствия между составом, структурой и свойствами материала, а затем оптимальных технологических режимов, гарантирующих воспроизводимость такого соответствия.

Для этого была разработана новая версия гидродинамической модели, описывающей процесс тепломассопереноса при кристаллизации расплава в среде с двухфазной переходной областью (mushy zone). В этой модели численно решается задача Стефана с двумя границами: твердая фаза – промежуточная переходная двухфазная зона и двухфазная зона – жидкая фаза, с учетом конвекции в расплаве и в двухфазной зоне с неоднородным распределением твердой фазы по объему переходной зоны. В жидкой области решаются уравнения Навье-Стокса в приближении Буссинеска, в переходной двухфазной зоне – модифицированные уравнения Навье-Стокса, в которых учитывается дополнительная сила сопротивления течению расплава вследствие тормозящего воздействия зарождающейся и прорастающей в расплав твердой фазы. Двухфазная зона моделируется пористой средой, в которой твердая фаза представляет неподвижный пористый «скелет», через который течет расплав. В качестве замыкающего соотношения в данной модели используется квадратичная зависимость пористости от температуры в двухфазной зоне. Эта зависимость установлена путем численной обработки экспериментально наблюдаемого распределения фаз в двухфазной области.

Предыдущая версия модели, предложенная в работе [1], в которой дано описание численного бенчмарка для расчета переноса примеси при затвердевании двухкомпонентных расплавов, реализованная и верифицированная авторами данной статьи в работе [2], не содержит предположения о квадратичной зависимости пористости от температуры в двухфазной зоне. Вместо этого в предыдущей версии модели использовалось условие квазистационарности, то есть, равенство температур жидкой и твердой фаз в двухфазной зоне в каждый момент времени.

Расчет эксперимента из работы [3] по кристаллизации расплава олова с примесью свинца методом

вертикальной направленной кристаллизации по предложенной в настоящей работе модели дает хорошее совпадение расчетных и экспериментальных результатов, что подтверждает адекватность данной модели. По предыдущей (квазистационарной) версии модели такого соответствия получено не было.

УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА

В области моделирования вещество может находиться в твердом, жидком или промежуточном двухфазном состоянии, являющемся смесью двух фаз: твердой и жидкой, с разными объемными долями фаз. Зону, содержащую смесь двух фаз, будем называть двухфазной зоной. Для модельного состава сплава Sn+20%Pb эта зона, по определению, ограничена снизу температурой образования эвтектики T_e (или температурой солидус для неэвтектических сплавов, таких как TiAl), а сверху температурой ликвидус T_{liq}, зависящей от концентрации примеси в расплаве C_l. Обычно предполагается, что зависимость T_{liq} от C_l линеаризована:

$$T_{liq} = T_m + mC_l ,$$

где m - наклон линии ликвидус на фазовой диаграмме (заданная константа), T_m - температура плавления чистого материала (т.е. при $C_l = 0$).

Возьмем точку внутри области и окружим малой окрестностью объемом V_{cell}. Выделенную окрестность будем называть ячейкой. Все параметры среды внутри ячейки считаем однородными и постоянными. Предположим, что часть объема ячейки V_l заполнена жидкой фазой, а часть $V_s = V_{cell} - V_l$ – твердой фазой. Объемные доли фаз в ячейке обозначим $\varepsilon_l = \dfrac{V_l}{V_{cell}}$ и $\varepsilon_s = \dfrac{V_s}{V_{cell}}$. Здесь и ниже индексы l и s означают принадлежность к жидкой или твердой фазе, соответственно. Объемная доля жидкой фазы называется также пористостью вещества. По определению,

$$\varepsilon_l + \varepsilon_s = 1 .$$

Рассмотрим процесс затвердевания двухкомпонентного расплава, причем один компонент будем считать основным, а второй – примесью.

Так как плотности вещества в жидкой ρ_l и твердой ρ_s фазах различны, то плотность вещества в двухфазной зоне определяется выражением:

$$\rho = \varepsilon_l \rho_l + \varepsilon_s \rho_s .$$

Аналогично определяются коэффициент теплопроводности k, коэффициент диффузии примеси D и теплоемкость c_p в двухфазной зоне:

$$k = \varepsilon_l k_l + \varepsilon_s k_s ,\ D = \varepsilon_l D_l + \varepsilon_s D_s ,$$
$$c_p = \varepsilon_l c_{p_l} + \varepsilon_s c_{p_s} ,$$

Диффузией примеси в твердой фазе традиционно пренебрегаем, то есть полагаем $D_s = 0$, $D = \varepsilon_l D_l$.

Концентрация примеси в твердой фазе в двухфазной зоне определяется через коэффициент распределения примеси k_0 :

$$C_s = k_0 C_l .$$

Введем обозначения:

$$\mathbf{V} = \varepsilon_l \mathbf{v}_l ,\ p = p_l ,\ h_s = c_{p_s}(T - T_e) ,$$
$$h_l = c_{p_l}(T - T_e) + L ,\ \langle h \rangle = c_p (T - T_e) + \varepsilon_l L ,$$
$$\langle C \rangle = \varepsilon_l C_l + \varepsilon_s C_s = (\varepsilon_l + (1 - \varepsilon_l) k_0) C_l ,$$

где $\mathbf{v}_l$ - истинная скорость течения расплава, $\mathbf{V}$ - скорость фильтрации расплава, p - давление, T - температура материала, h_s - удельная энтальпия вещества в твердой фазе, h_l - удельная энтальпия вещества в жидкой фазе, $\langle h \rangle$ - удельная энтальпия вещества в двухфазной зоне, L - скрытая теплота фазового перехода.

Предположим, что для течения расплава применимо приближение Буссинеска, где предполагается, что плотность расплава линейно зависит от температуры и концентрации примеси:

$$\tilde{\rho} = \rho_l (1 - \beta_T (T - T_0) - \beta_C (C_l - C_0)) ,$$

где ρ_l - плотность расплава при $T = T_0$, $C = C_0$ (считаем ее константой), β_T , β_C - коэффициенты температурного и концентрационного расширения.

Тогда уравнения тепломассопереноса имеют следующий вид.

Уравнение движения

$$\rho_l \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + \frac{\rho_l}{\varepsilon_l} (\nabla \mathbf{V}) \cdot \mathbf{V} = \\ = \nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{V}) - \varepsilon_l \nabla p - \frac{\mu \varepsilon_l}{K} \mathbf{V} + \varepsilon_l \tilde{\rho} \vec{g} \qquad (1)$$

Уравнение неразрывности

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = 0 \qquad (2)$$

Уравнение сохранения энергии

$$\frac{\partial \rho \langle h \rangle}{\partial t} + \nabla (\rho c_p T) \cdot \mathbf{V} - \nabla \cdot (k \nabla T) = 0 \qquad (3)$$

Уравнение переноса примеси

$$\frac{\partial \langle C \rangle}{\partial t} + \nabla C_l \cdot \mathbf{V} - \nabla \cdot (D \nabla C_l) = 0 \qquad (4)$$

где μ - вязкость (константа).

Отметим, что в уравнении движения (1) учтено сопротивление течению расплава через пористую среду посредством добавления в него добавочной силы, выражение для которой получено по аналогии с законом Дарси:

$$F = -\frac{\mu \varepsilon_l}{K}\mathbf{V}, \qquad (5)$$

где K - проницаемость пористой среды для жидкостных потоков.

Система четырех уравнений (1)-(4) содержит пять неизвестных $\mathbf{V}$, p, $\langle h \rangle$, C_l, ε_l. Поэтому необходимо еще одно дополнительное уравнение. В качестве такого уравнения выберем зависимость ε_l от энтальпии $\langle h \rangle$

$$\varepsilon_l = \varepsilon_l(\langle h \rangle), \qquad (6)$$

явное выражение для которой будет определено ниже.

МОДЕЛИ ДЛЯ ПРОНИЦАЕМОСТИ

Проницаемость K зависит не только от пористости ε_l, но и от других безразмерных характеристик геометрии пористой среды. Были сделаны многочисленные попытки математического описания K для типичных пористых сред, как путем рассмотрения простейших моделей, так и путем обработки опытных данных. Все полученные результаты носят частный характер и имеют сравнительно узкую область применимости. Наибольшей известностью из формул этого рода пользуется формула Козени - Кармана, полученная на основе аналогии между пористой средой и системой параллельных проводящих капиллярных каналов, выражающая проницаемость через удельную поверхность пор и пористость.

В работе [1] для модели численного бенчмарка по конвективному тепломассопереносу при затвердевании двухкомпонентных расплавов формула Козени - Кармана для проницаемости имеет следующий вид:

$$K = \frac{\lambda_2^2 \varepsilon_l^3}{180\, \varepsilon_s^2}, \qquad (7)$$

где λ_2 - характеристическое расстояние между вторичными ветвями поликристаллических дендритов (эмпирический параметр, разный для разных материалов).

Следует отметить, что в модели Козени-Кармана предполагается, что пористая среда строго структурирована, твердые включения в ней имеют определенные размеры, форму и взаимную ориентацию. Эта модель применяется также при расчетах фильтрационных сопротивлений искусственных пористых сред, применяемых в химических аппаратах.

Из выражения (7) следует, что если пористость ε_l равна нулю, то проницаемость $K = 0$, и сила F в (5) равна бесконечности. При этом скорость фильтрации $\mathbf{V}$ становится равной нулю, что соответствует твердой фазе. Если же пористость $\varepsilon_l = 1$, то $\varepsilon_s = 1$, $K = \infty$, и сила F в (5) равна нулю, что соответствует жидкой фазе. В этом случае уравнения модели (1)-(4) переходят в обычные уравнения Навье-Стокса.

В кластерной гидродинамической модели кристаллизации расплавов, предложенной и развитой нами в предыдущих работах [4]-[6], проницаемость определялась следующим выражением:

$$K = \frac{S\, \varepsilon_l^2}{\alpha \varepsilon_s}, \qquad (8)$$

где S - поверхность сечения ячейки, нормального по отношению к вектору скорости фильтрации $\mathbf{V}$, α - эмпирический параметр. Из (8), так же как из (7), следует, что при $\varepsilon_l = 0$ проницаемость $K = 0$, а при $\varepsilon_l = 1$ проницаемость $K = \infty$. Из сравнения формул (8) и (7) находим выражение для эмпирического параметра α, при котором формулы (8) и (7) совпадают:

$$\alpha = \frac{180\ S}{\lambda_2^2}\frac{\varepsilon_s}{\varepsilon_l}$$

ЗАВИСИМОСТЬ ПОРИСТОСТИ ОТ ЭНТАЛЬПИИ

Сначала найдем зависимость пористости от температуры. Она может быть определена из эксперимента. В частности, для поликристаллического TiAl(Nb) методом закалки процесса направленной кристаллизации получена следующая экспериментальная картина распределения твердой и жидкой фаз в двухфазной зоне в продольном срезе слитка (рис.1). Из рис.1 видно, что двухфазная зона действительно является пористой средой, а не гомогенной смесью твердой и жидкой фаз. В ней твердая фаза образует неподвижный пористый «скелет», в порах которого течет расплав.

Компьютерное разделение фаз при обработке этого изображения позволило получить экспериментальную зависимость $\varepsilon_s(T)$ в двухфазной зоне,

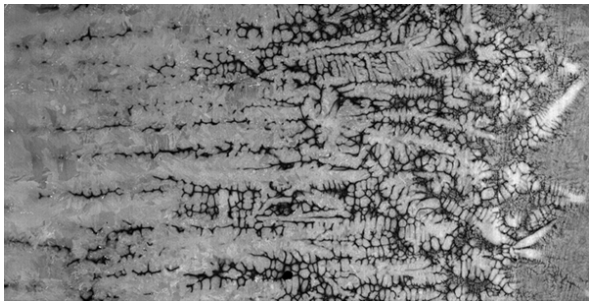

Рис.1. Двухфазная зона (mushy zone), выявленная при структурных исследованиях слитка TiAl после резкого замораживания (закалки) процесса его направленной кристаллизации. Кристаллизация протекала слева направо.

представленную на рис.2.

Эту зависимость можно приближенно аппроксимировать параболой (сплошная линия на рис.2.):

$$\varepsilon_s = 1 - \left[\frac{(T - T_e)}{(T_{liq} - T_e)}\right]^2,$$

где $T_e = 1500°C$, $T_{liq} = 1570°C$.

Соответственно, для пористости $\varepsilon_l = 1 - \varepsilon_s$ получим выражение:

$$\varepsilon_l = \left[\frac{(T - T_e)}{(T_{liq} - T_e)}\right]^2, \; T_e \le T \le T_{liq}$$

Выберем за начало отсчета температуры температуру образования эвтектики T_e. Тогда получим следующие формулы для вычисления пористости в зависимости от температуры:

$$\varepsilon_l = \begin{cases} 0, & T < 0 \\ \left(\dfrac{T}{T_{liq}}\right)^2, & 0 \le T \le T_{liq} \\ 1, & T > T_{liq} \end{cases} \qquad (9)$$

Подставив выражение для пористости (9) в выражение для энтальпии в двухфазной зоне $\langle h \rangle = c_p T + \varepsilon_l L$, получим уравнение, связывающее температуру T с удельной энтальпией $\langle h \rangle$, решив

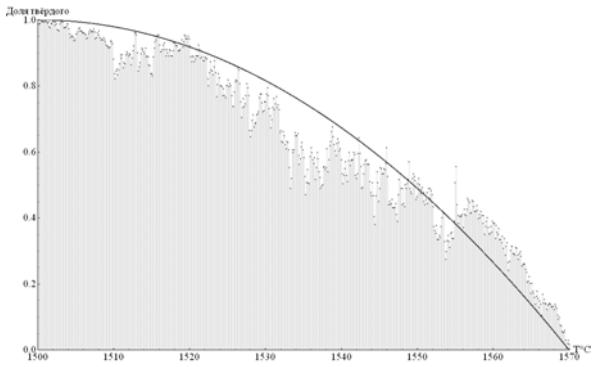

Рис.2. Аппроксимация распределения объемной доли твёрдой фракции в двухфазной зоне параболой как функцией температуры.

которое получим:

$$T = \begin{cases} \dfrac{\langle h \rangle}{c_{p_s}}, & \langle h \rangle \le 0 \\ \dfrac{c_p T_{liq}^2}{2L}\left(\sqrt{1 + \dfrac{4L\langle h \rangle}{c_p^2 T_{liq}^2}} - 1\right), & 0 < \langle h \rangle < c_p T_{liq} + L \\ \dfrac{\langle h \rangle - L}{c_{p_l}}, & \langle h \rangle \ge c_p T_{liq} + L \end{cases}$$

Подставив это выражение в (9), находим искомую зависимость пористости от энтальпии:

$$\varepsilon_l = \begin{cases} 0, & \langle h \rangle \le 0 \\ \dfrac{c_p^2}{4L^2}\left(\sqrt{1 + \dfrac{4L\langle h \rangle}{c_p^2 T_{liq}^2}} - 1\right)^2, & 0 < \langle h \rangle < c_p T_{liq} + L \\ 1, & \langle h \rangle \ge L \end{cases}$$

МЕТОД РЕШЕНИЯ

Для решения системы уравнений Навье-Стокса (1)-(4) используем метод, предложенный в работе [7]. Идея метода заключается в следующем. Запишем уравнения (1)-(4) покомпонентно, используя неявную схему аппроксимации по времени.

$$\left(V_x \frac{\partial W^j}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}\varepsilon_x^j x \frac{\partial W^j}{\partial x}\right) + \left(V_y \frac{\partial W^j}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial y}\varepsilon_y^j \frac{\partial W^j}{\partial y}\right) + \left(V_z \frac{\partial W^j}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z}\varepsilon_z^j \frac{\partial W^j}{\partial z}\right) + \gamma^j W^j = F^j, \; j = 1, ..., 4 \qquad (18)$$

где W^j – субстанциональная переменная, принимающая значения $V_x, V_y, V_z, \langle h \rangle, C_l$, а $\varepsilon_x^j, \varepsilon_y^j, \varepsilon_z^j, \gamma^j, F^j$ – соответствующие им параметры.

Используя экспоненциальное преобразование, приведем это уравнение к диффузионному виду (индекс j здесь, для простоты, опущен)

$$-\frac{1}{\lambda}\frac{\partial}{\partial x}\lambda\varepsilon_x\frac{\partial W}{\partial x}-\frac{1}{\omega}\frac{\partial}{\partial y}\omega\varepsilon_y\frac{\partial W}{\partial y}-$$
$$-\frac{1}{\eta}\frac{\partial}{\partial z}\eta\varepsilon_z\frac{\partial W}{\partial z}+\gamma W=F$$

где

$$\lambda=e^{-\int_{x_0}^{x}\frac{V_x}{\varepsilon_x}dx}\ ;\ \omega=e^{-\int_{y_0}^{y}\frac{V_y}{\varepsilon_y}dy}\ ;\ \eta=e^{-\int_{z_0}^{z}\frac{V_z}{\varepsilon_z}dz}\ .$$

Используя разнесенные сетки для компонент скоростей, и применяя интегральный метод аппроксимации, построим разностный аналог этих уравнений.

Конечно-разностное уравнение для давления получим из уравнения неразрывности (2) по методу Патанкара-Сполдинга [8]. Полученную нелинейную систему конечно-разностных уравнений для W^j и p линеаризуем и решаем, используя неявный метод установления.

Неявный метод установления заключается в следующем. На каждом временном шаге основной временной сетки вводится вспомогательная сетка по времени установления с шагом $\breve{\tau}$, и в каждое из уравнений добавляется член с производной по времени от соответствующей функции. Полученные уравнения аппроксимируются с использованием неявной схемы по времени.

Полученная система конечно-разностных уравнений на каждом шаге по времени решается до установления по следующему алгоритму:

1. По заданным распределениям долей жидкой фазы ε_l, температур T и концентраций C_l, из решения уравнений (1)-(2) рассчитываются распределения компонент скоростей и давления.
2. Из решения уравнения (3) находится новое распределение энтальпии $\langle h \rangle$.
3. Рассчитывается новое распределение температур T и пористости ε_l.
4. Из решения уравнения (4) находится новое распределение концентраций C_l .
5. Вычисляются новые значения T_{liq}.
6. Сравниваются старое и новое распределения энтальпии $\langle h \rangle$ и распределения концентраций примеси C_l. Если точность не достигнута, то возвращаемся на п.2.
7. Вычисляется $div(\mathbf{V})$ и сравнивается с нулем. Если точность по дивергенции не достигнута, то возвращаемся на п.1.
8. Сравниваются старое и новое распределения давления p. Если точность не достигнута, то возвращаемся на п.1.
9. Переходим к следующему временному шагу.

РЕЗУЛЬТАТЫ ТЕСТОВЫХ РАСЧЕТОВ.

Для верификации разработанной модели был рассчитан эксперимент из работы [3] по направленной кристаллизации в вертикально расположенной цилиндрической ампуле расплава олова с примесью свинца 20% массовых.

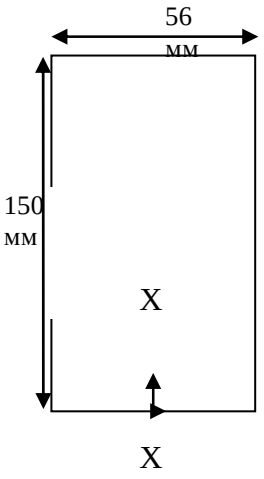

Рис.3. Схема расчетной области

Расчет проводился в двумерной (x,y)-геометрии. Число узлов по осям X и Y задавалось 150 и 56, соответственно. Шаг по времени задавался равным 0.001 с.

Схема расчетной области представлена на рис.3.

Кристаллизация велась вертикально сверху вниз. До начала процесса кристаллизации расплав находился в адиабатических условиях при температуре T_0 =211°C . Сила тяжести направлена вниз. Концентрация примеси вначале постоянна и равна 20% массовых. В начальный момент времени на верхнем торце емкости задавался отвод тепла по закону:

$q_b = h_T(T - T_{ext})$,

где h_T =2100 $t^{-0.001}$, t -время в с, T_{ext} =25°C .

Теплофизические данные, использованные в расчетах, взяты из работ [1], [9] и приведены в таблице 1.

В емкости развивается свободная конвекция из-за появившихся градиентов температур и концентраций. В расчетах оценивались параметры кристаллизации, такие как положение границы ликви-

дус, скорость движения границы ликвидус, температурный градиент в расплаве на границе ликвидус и скорость охлаждения на границе ликвидус.

Температура плавления, °C	232
Температура образования эвтектики, °C	183
Теплоемкость твердой фазы, Дж/(кг*К)	200
Теплоемкость жидкой фазы, Дж/(кг*К)	231
Теплопроводность твердой фазы, Вт/(м*К)	59
Теплопроводность жидкой фазы, Вт/(м*К)	32
Теплота кристаллизации, Дж/кг	52580
Плотность твердой фазы, кг/(м**3)	8250
Плотность жидкой фазы, кг/(м**3)	7860
β_T , 1/°C	$6.0*10^{-5}$
β_C , 1/(% вес)	$-5.3*10^{-3}$
Молекулярная вязкость, кг/(м*с)	10^{-3}
Коэффициент распределения k_0	0.0656
m, °C/(% вес)	-1.5
λ_2	$6.5*10^{-5}$

Табл. 1. Теплофизические данные, использованные в расчетах.

Скорость охлаждения (cooling rate) оценивалась в каждой точке границы ликвидус по значениям температуры в текущий и предыдущий момент времени.

Авторы работы [9] утверждают, что существует корреляция между значением скорости охлаждения и температурным градиентом на границе ликвидус с одной стороны и положением микроструктурного перехода в кристаллизуемом материале, определяющем смену морфологии кристаллизуемых дендритов (так называемого CET – перехода) с другой. Эта известная корреляция позволяет использовать позицию CET-перехода в кристаллизационной системе как реперную модельную точку.

В эксперименте [3] было найдено, что CET – переход происходит при значении скорости охлаждения на границе ликвидус r=0.03 K/s. Это соответствует расстоянию точки CET – перехода от охлаждаемого торца X=76 мм. В расчете по представленной модели было получено, что критическое значение скорости охлаждения r=0.03 K/s достигается при значении X=70 мм.

На рис.4 приведено сравнение расчетной и экспериментальной скоростей охлаждения в зависимости от расстояния от охлаждаемого торца ампулы X. Из этого рисунка видно, что расчетная кривая хорошо согласуется с результатами измерений, что подтверждает адекватность предложенной модели.

На рис.5 для демонстрации характера конвективных течений приведены поля скоростей в различные моменты времени. Сплошной линией на

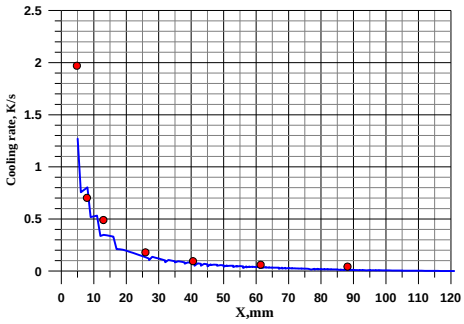

Рис.4. Зависимость скорости охлаждения на границе ликвидус от расстояния от охлаждаемого торца. Сплошная кривая – расчет, точки – экспериментальные данные (снято с графика из работы [9]).

них указано положение границы ликвидус. Черным цветом окрашена зона твердой фазы. Зона, лежащая между твердой фазой и границей ликвидус, является переходной двухфазной зоной, и окрашена оттенками серого цвета, причем более темный оттенок означает большую долю твердой фазы. Из этих рисунков видно, что к 60 секунде после начала эксперимента в жидкой фазе развиваются два симметричных конвективных вихря, направленных друг к другу и к центру емкости. В переходную двухфазную зону течение проникает слабо. Затем проникновение течения в двухфазную зону несколько увеличивается. Характер течения тоже со временем меняется. Постепенно один вихрь уменьшается в размерах, а второй увеличивается, и к 100 секунде течение становится практически одновихревым. Толщина переходной двухфазной зоны со временем возрастает. Линия ликвидус искривляется со временем вследствие развития конвективного течения. На рис.6 приведено распределение концентраций свинца в расплаве в момент времени 300 с. Видно, что оно неоднородно вследствие конвективного переноса примеси. Диффузионный перенос в данном случае пренебрежимо мал.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе представлена новая математическая модель кристаллизации двухкомпонентных расплавов, учитывающая конвективный тепломассоперенос в расплаве и в переходной двухфазной зоне. В отличие от предыдущего варианта модели, в новой модели не делается предположения о квазистационарности процесса затвердевания расплава. Вместо этого предполагается, что в промежуточной двухфазной зоне пористость квадратично зависит от температуры. Эта зависимость получена из компьютерной обработки результатов измерений пространственного распределения фаз в переходной двухфазной зоне. Двухфазная зона ограничена температурой образования эвтектики и температурой ликвидус, причем последняя зависит от концентрации примеси в жидкой фазе. Решается задача Сте-

фана с двумя границами: жидкая фаза – переходная двухфазная зона, двухфазная зона – твердая фаза. Сопротивление течению расплава в двухфазной зоне учитывается дополнительной силой, определяемой по аналогии с законом Дарси для течения в пористых средах. Представленная модель реализована в программе GIGAN, разработанной в ГНЦ РФ-ФЭИ, г. Обнинск. Метод расчета включает неявную аппроксимацию по времени, неявный метод установления, экспоненциальную аппроксимацию конвективных членов, метод Патанкара-Сполдинга и метод неполной факторизации. Численный расчет эксперимента по кристаллизации расплава олова с 20% примесью свинца методом вертикальной направленной кристаллизации показал хорошее совпадение расчетных и экспериментальных результатов. Модель и метод расчета, представленные в работе, могут найти практическое применение при разработке технологий получения из двухкомпонентных расплавов высококачественных материалов с однородной структурой методом направленной кристаллизации.

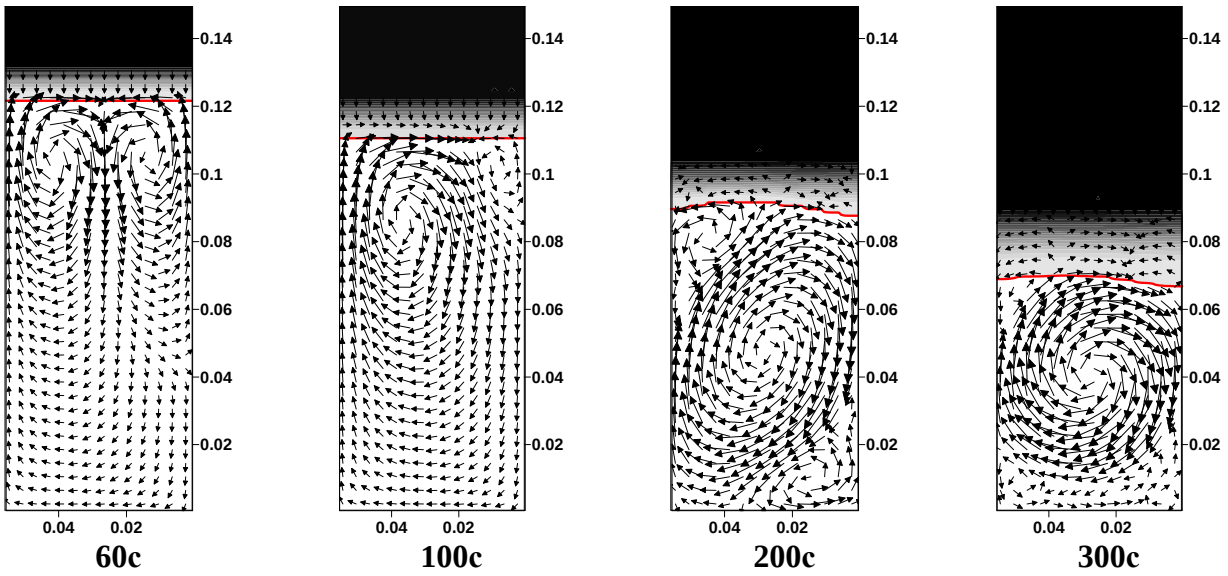

Рис.5. Характер конвективных течений в процессе затвердевания расплава в различные моменты времени

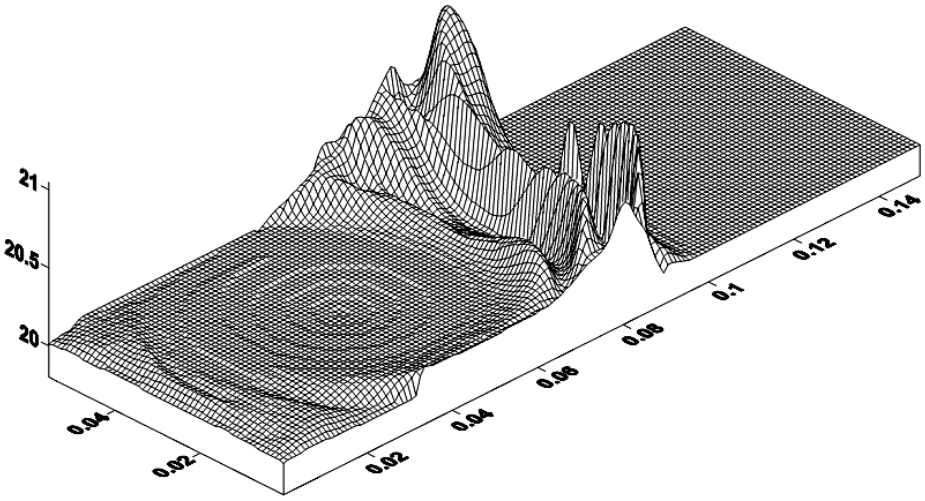

Рис.6. Распределение концентрации свинца на момент времени 300 с.

ЛИТЕРАТУРА

1. M.Bellet, H.Combeau, Y.Fautrelle et al. International Journal of Thermal Sciences, 2009, 48, 2013–2016.
2. Гинкин В.П., Ганина С.М., Гинкина О.М. ВАНТ, Серия Мат. моделирование физических процессов, 2010, вып. 2, 64-74.
3. Spinelli JE, Ferreira IL, Garcia A (2004) J Alloys Compd 384:217.
4. V.Ginkin, A.Kartavykh and M.Zabudko: J.Cryst. Growth. Vol. 270, No.3-4 (2004), p. 329.
5. V.Ginkin, O.Naumenko, A.Kartavykh et al.: Numer. Heat Transfer B: Fundamentals. Vol. 47, No.5 (2005), p. 459.
6. V.P.Ginkin: J.of Porous Media. Vol.8, No.4 (2005), p. 347.
7. V.Ginkin , Proc. 2nd Int. Symp. Advances in Computational Heat Transfer, Palm Cove, Queensland, Australia, Vol. 2 (2001) 1161-1168.
8. S.V.Patankar , D.B.Spalding J. Heat Mass Transfer, 15 (1972), 1787-1806.
9. Arvind Kumar, Pradip Dutta. J Mater Sci (2009) 44:3952–3961.