

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ТЕПЛООБМЕНА И КРИСТАЛЛИЗАЦИИ СЛИТКОВ

Р. ЛАЗАРОВ, СТ. ДИМОВА, Н. ДРЕНСКА, Т. ЧЕРНОГОРОВА

Институт Математики и Механики с ВЦ, Болгарская Академия Наук, София

Разработка новых технологий ставит перед конструкторами и технологами сложные задачи. Для их успешного решения необходима предварительная информация об основных закономерностях протекающих процессов и о величинах, которые их характеризуют. Экспериментальное исследование не всегда возможно, поскольку приводит к опытам с большим числом параметров, и как следствие, к большим материальным затратам. Другой метод получения такой информации — это вычислительный эксперимент [1] — сочетание математического моделирования и численных методов с использованием вычислительной техники. При изучении реальных процессов методом вычислительного эксперимента возникает необходимость в разработке адекватных математических моделей, в исследовании их функциональных характеристик, в построении численных методов заданного качества, в их программной реализации и в проведении расчетов многих технологических вариантов.

В настоящей работе приведены некоторые результаты реализации всех этих этапов при изучении процессов теплообмена и кристаллизации слитков. Эта работа является результатом сотрудничества Института металловедения и технологии металлов БАН и Института математики БАН.

Отметим, что имеется довольно большое количество работ на эту тему. Мы не будем останавливаться на них, отсылаем интересующихся к довольно полному обзору [2].

1. Физическая и математическая постановка задачи

1. Рассматривается процесс теплообмена и кристаллизации металла в кокиле [2]–[6], который представляет собой цилиндр или трехмерный параллелепипед. В последнем случае будем считать, что

температура изменяется только в двух направлениях, так что всегда будем рассматривать только осевое сечение трехмерного тела (рис. 1). Схема формирования отливки приведена на рис. 1.

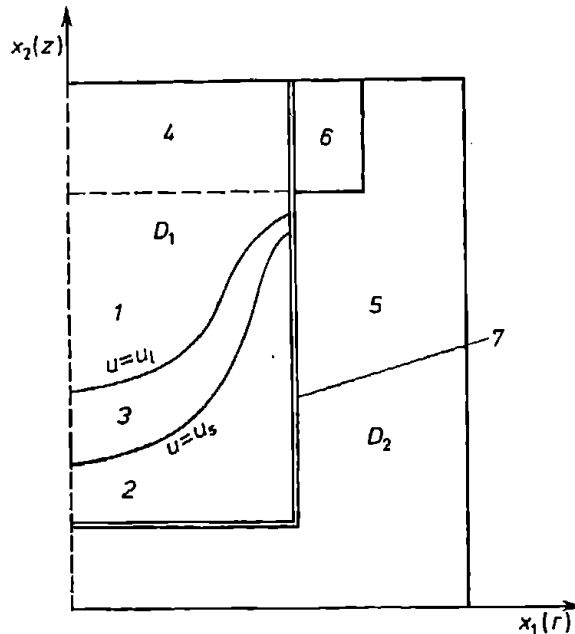


Рис. 1. Половина осевого сечения слитка и кокиля: 1 — жидкий металл; 2 — твердый металл; 3 — двухфазная зона; 4 — прибыль; 5 — кокиль; 6 — вкладыш; 7 — тонкое термическое сопротивление (краска, газовый зазор)

2. Пусть D_1 обозначает область, в которой находится металл, составленную из зон 1, 2, 3 и 4 (рис. 1). Через D_2 обозначим объединение зон 5 и 6 и положим $D = D_1 \cup D_2$. Характеристики металла будем обозначать индексом 1, характеристики кокиля — индексом 2. Пусть u обозначает температуру, ρ — плотность, c — удельную теплоемкость, λ — коэффициент теплопроводности. Тогда в этих обозначениях имеем:

$$u = \begin{cases} u_1(x, t), & x \in D_1, \\ u_2(x, t), & x \in D_2; \end{cases} \quad c(x, t, u) = \begin{cases} c_1(x, t, u), & x \in D_1, \\ c_2(x, t, u), & x \in D_2, \end{cases}$$

и т.д. Будем считать, что все функции c , λ , ρ зависят от пространственных и временной координат и от температуры.

Выделение тепла при кристаллизации металла учитывается путем задания эффективной теплоемкости $c_1(x, t, u)$ по формуле [3], [5], [7]

$$(1) \quad c_1(x, t, u_1) = \begin{cases} c_{\text{тв}}, & u_1 < u_s, \\ c_{\text{ж}}, & u_1 > u_e, \\ c_{\text{тв}} - L\psi'(u_1), & u_s < u_1 < u_l. \end{cases}$$

Здесь $\psi(u_1)$ — объемная доля твердой фазы в двухфазной (твердо-жидкой) зоне между затвердевшим металлом с коэффициентом теплоемкости c_m и жидким металлом с коэффициентом теплоемкости $c_{ж}$; L — удельная теплота кристаллизации; u_l, u_s — равновесные температуры ликвидуса и солидуса, отвечающие исходному составу жидкого металла. Функция $\psi(u_1)$ определяется по равновесной диаграмме состояния конкретного сплава [3].

Температурное поле всей конфигурации описывается уравнением теплопроводности

$$(2) \quad \rho(x, t, u) c(x, t, u) \frac{\partial u}{\partial t} = \\ = \frac{1}{x_1^n} \frac{\partial}{\partial x_1} \left(x_1^n \lambda(x, t, u) \frac{\partial u}{\partial x_1} \right) + \frac{\partial}{\partial x_2} \left(\lambda(x, t, u) \frac{\partial u}{\partial x_2} \right),$$

где $n = 0$ в декартовых координатах, $n = 1$ в цилиндрических.

Отметим, что рассматриваются не очень большие по объему слитки. В этом случае можно пренебречь конвективный теплообмен в жидком металле [4].

3. Пусть между металлом и кокшем имеется тонкое термическое сопротивление (краска, газовый зазор [4]). Наличие этой прослойки учитывается условиями сопряжения [8]

$$(3) \quad -\lambda_1 \frac{\partial u_1}{\partial n} = -\lambda_2 \frac{\partial u_2}{\partial n} = \alpha(u_1, u_2)(u_1 - u_2).$$

4. Теплообмен с внешней средой осуществляется теплопроводностью по закону Ньютона с коэффициентом теплообмена α_1 и излучением по закону Стефана-Больцмана с постоянной σ_0 . Прибыль (рис. 1) подогревается экзотермическими смесями. При их сгорании выделяется теплота, которая учитывается через эквивалентный тепловой поток q (заданный на верхней основе прибыли), действующий определенное время t_q . Пусть температура внешней среды постоянна и равна u_{cp} . Тогда краевое условие на границе ∂D имеет вид

$$(4) \quad -\lambda \frac{\partial u}{\partial n} = \alpha_1(u - u_{cp}) + \sigma_0(u^4 - u_{cp}^4) + q.$$

5. На оси симметрии ставится условие

$$(5) \quad \frac{\partial u}{\partial x_1} = 0.$$

6. Чтобы завершить постановку задачи, осталось сформулировать начальное условие:

$$(6) \quad u(x, 0) = u_0(x) = \begin{cases} \tilde{u}_0, & x \in D_1, \\ u_{op}, & x \in D_2, \end{cases}$$

где $\tilde{u}_0 = \text{const}$ — температура заливки металла. Уравнение (2), краевые и начальные условия (3)–(6) дают полную математическую постановку рассматриваемой задачи.

7. Сделаем более полный анализ условий сопряжения (3), см. [4]. Если на внутренней боковой поверхности кокиля нет теплоизолирующего покрытия (краска), то на всей границе слиток–кокиль сначала принят теплообмен по закону „неидеального” контакта:

$$(7) \quad -\lambda_1 \frac{\partial u_1}{\partial n} = -\lambda_2 \frac{\partial u_2}{\partial n} = \alpha_{\text{копт}}(u_1 - u_2),$$

где $\alpha_{\text{копт}}$ — коэффициент контактного теплообмена. После возникновения газового зазора шириной δ_r и теплопроводностью λ_r принято, что теплообмен через зазор осуществляется путем молекулярной теплопроводности и излучения:

$$(8) \quad -\lambda_1 \frac{\partial u_1}{\partial n} = -\lambda_2 \frac{\partial u_2}{\partial n} = \frac{\lambda_r}{l_r}(u_1 - u_2) + \sigma_0(u_1^4 - u_2^4).$$

В случае наличия краски толщиной $l_{\text{кр}}$ и теплопроводностью $\lambda_{\text{кр}}$, до возникновения газового зазора ставится условие

$$(9) \quad -\lambda_1 \frac{\partial u_1}{\partial n} = -\lambda_2 \frac{\partial u_2}{\partial n} = \frac{\lambda_{\text{кр}}}{l_{\text{кр}}}(u_1 - u_2)$$

(принято, что контакт между металлом, краской и кокилем идеален и распределение температуры в краске линейно (рис. 2.а) [4]).

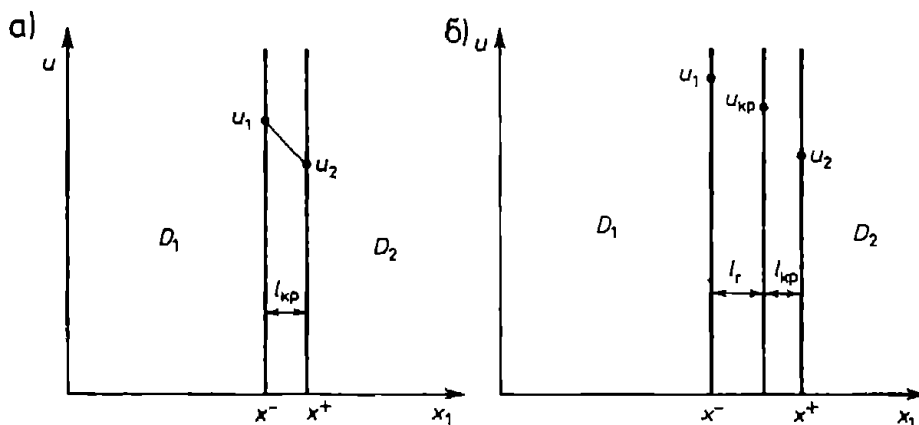


Рис. 2

После возникновения газового зазора между слитком и кокилем имеется двухслойная контактная поверхность. Принято, что теплоперенос через зазор осуществляется посредством теплопроводности и излучения, а через обмазку — посредством теплопроводности (рис. 2.б). Введя в рассмотрение температуру краски $u_{кр}$, получается следующее условие сопряжения [4]:

$$(10) \quad -\lambda_1 \frac{\partial u_1}{\partial n} = -\lambda_2 \frac{\partial u_2}{\partial n} = \frac{\left(\frac{\lambda_r}{l_r} + \alpha_1\right) \frac{\lambda_{кр}}{l_{кр}}}{\frac{\lambda_r}{l_r} + \alpha_1 + \frac{\lambda_{кр}}{l_{кр}}} (u_1 - u_2),$$

где

$$(11) \quad \alpha_1 = (u_1 + u_{кр})(u_1^2 + u_{кр}^2),$$

$$(12) \quad u_{кр} = \frac{\left(\frac{\lambda_r}{l_r} + \alpha_1\right) u_1 + \frac{\lambda_{кр}}{l_{кр}} u_2}{\frac{\lambda_r}{l_r} + \alpha_1 + \frac{\lambda_{кр}}{l_{кр}}}.$$

Отметим, что (10), (11) дают нелинейное уравнение относительно температуры $u_{кр}$.

8. Трудности аналитического исследования и численного решения этой задачи обусловлены следующими ее особенностями:

- нелинейность в главной части уравнения (2);
- подвижные разрывы коэффициентов уравнения;
- нелинейное условие сопряжения (3);
- разрывное начальное условие (6);
- нелинейность типа излучения в граничных условиях (4).

Для разделения этих трудностей, как и для изучения разных сторон рассматриваемого процесса и их взаимного влияния, создана и исследована одномерная модель задачи.

2. Одномерная модель

1. В случае достаточно длинного кокиля, когда можно пренебречь влиянием теплообмена на верхнем и нижнем основании кокиля, из уравнений (2) можно получить следующую систему пространственно одномерных уравнений в частных производных:

$$(13) \quad \rho_1(x, t) f(|u_1|) \frac{\partial u_1}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_1(x, t) \frac{\partial u_1}{\partial x} \right), \quad (x, t) \in Q_1,$$

$$(14) \quad \rho_2(x, t) c_2(x, t) \frac{\partial u_2}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_2(x, t) \frac{\partial u_2}{\partial x} \right), \quad (x, t) \in Q_2,$$

в областях $Q_1 = \{x \in (0, 1), t \in (0, T)\}$, $Q_2 = \{x \in (1, 2), t \in (0, T)\}$ (Q_i — одномерный аналог области D_i из рис. 1). Тогда условия (3)–(6) можно сформулировать следующим образом:

$$(15) \quad u_1(x, 0) = \tilde{u}_1(x), \quad x \in (0, 1); \quad u_2(x, 0) = \tilde{u}_2(x), \quad x \in (1, 2),$$

$$(16) \quad \lambda_1(0, t) \frac{\partial u_1(0, t)}{\partial x} = \beta_1(t) u_1(0, t) - \mu_1(t), \quad t \in (0, T),$$

$$(17) \quad -\lambda_2(2, t) \frac{\partial u_2}{\partial x} = \beta_2(t) u_2(2, t) + \gamma(t) |u_2(2, t)|^3 u_2(2, t) - \mu_2(t),$$

$$t \in (0, T).$$

На прямой $x = 1$ будем рассматривать условия сопряжения

$$(18) \quad \lambda_1(1, t) \frac{\partial u_1(1, t)}{\partial x} = \lambda_2(1, t) \frac{\partial u_2(1, t)}{\partial x} = -a(t) [u_1(1, t) - u_2(1, t)].$$

Отметим следующие особенности краевой задачи (13)–(18):

(а) В условиях сопряжения (18) функция $a(t)$ зависит только от времени и не зависит от $u_1(1, t)$, $u_2(1, t)$, т.е., здесь будем рассматривать линейные условия сопряжения.

(б) Разрывная функция $c_1(u_1)$ из формулы (1) сглаживается в окрестностях точек $u = u_s$, $u = u_i$. Введенная в уравнении (13) гладкая функция $f(|u_1|)$ моделирует особенность теплоемкости $c_1(u_1)$.

(в) В краевом условии (17) учитывается излучение тепла по закону Стефана–Больцмана, аналогично рассмотренной модели (2)–(6).

2. В работе [9] изучены основные функциональные характеристики решения задачи (13)–(18), а также и некоторых более общих задач. Приведем некоторые из основных результатов. Задачу (13)–(18) будем рассматривать при естественных ограничениях на гладкость и знак коэффициентов. Совокупность краевых задач вида (13)–(18), коэффициенты которых удовлетворяют этим ограничениям, назовем *исходным семейством*.

ТЕОРЕМА 1. Пусть задача (13)–(18) принадлежит исходному семейству и функции $u_1(x, t) \in W_2^{2,1}(Q_1)$, $u_2(x, t) \in W_2^{2,1}(Q_2)$ удовлетворяют уравнениям (13)–(18). Тогда справедлива априорная оценка:

$$(19) \quad \|u_1\|_{W_2^{2,1}(Q_1)}^2 + \|u_2\|_{W_2^{2,1}(Q_2)}^2 \leqslant O \cdot \{ \|\tilde{u}_1\|_{W_2^1(0,1)}^2 + \|\tilde{u}_2\|_{W_2^1(1,2)}^2 + \|\tilde{u}_2\|_{W_2^1(1,2)}^5 + \|\mu_1\|_{W_2^1(0,T)}^2 + \|\mu_2\|_{W_2^1(0,T)}^2 \},$$

где $L_2(Q)$ — пространство суммируемых с квадратом функций, а $W_2^{2,1}(Q)$, $W_2^1(0, 1)$ — пространства Соболева [10].

При некоторых дополнительных предположениях проведено исследование знака решения.

ТЕОРЕМА 2. Пусть задача (13)–(18) принадлежит исходному семейству. Предположим кроме того, что:

$$(a) \quad \frac{\partial \varrho_1(x, t)}{\partial t} \leq 0, \quad (x, t) \in Q_1, \quad \frac{\partial}{\partial t} (\varrho_2 c_2) \leq 0, \quad (x, t) \in Q_2,$$

$$(b) \quad \mu_1(t) \geq 0, \quad \mu_2(t) \geq 0, \quad t \in (0, T), \\ \tilde{u}_1(x) \geq 0, \quad x \in (0, 1), \quad \tilde{u}_2(x) \geq 0, \quad x \in (1, 2).$$

Тогда решение задачи неотрицательно, т.е.,

$$u_1(x, t) \geq 0, \quad (x, t) \in Q_1, \quad u_2(x, t) \geq 0, \quad (x, t) \in Q_2.$$

При более сильных естественных ограничениях установлена строгая положительность решения ([9], Теорема 3). В приложении к исходной задаче (13)–(18) положительность решения означает, что температуры металла и кокиля в любой точке и в любой момент времени не меньше, чем температура внешней среды.

Далее можно доказать разрешимость задачи.

ТЕОРЕМА 3. Пусть выполнены условия теоремы 3 из [9] и существует положительная постоянная M такая, что $|f'(k)| \leq M$, $k \geq 0$. Пусть $\mu_1(t) \in W_2^1(0, T)$, $\mu_2(t) \in W_2^1(0, T)$, $\gamma(t) \in W_2^1(0, T)$, $\tilde{u}_1(x) \in W_2^1(0, 1)$, $\tilde{u}_2(x) \in W_2^1(1, 2)$.

Тогда существуют непрерывные положительные функции $u_1(x, t) \in W_2^{2,1}(Q_1)$, $u_2(x, t) \in W_2^{2,1}(Q_2)$, которые являются решением задачи (13)–(18).

3. При аппроксимации уравнений (13)–(18) существенное значение имеет форма записи этих уравнений. Приведем некоторые из возможных форм. Введем функцию

$$H(u_1) = \int_0^{u_1} f(\lambda) d\lambda,$$

которая называется энтальпией фазового перехода. Тогда уравнение (13) принимает следующий вид (энтальпийная постановка задачи):

$$(20) \quad \frac{\partial H(u_1)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_1 \frac{\partial u_1}{\partial x} \right).$$

Положим

$$\Phi(u_1) = \frac{1}{2} \int_0^{(u_1)^2} f(\sqrt{\lambda}) d\lambda.$$

Тогда уравнение (13) принимает следующий вид:

$$(21) \quad \frac{\varrho_1(x, t)}{u_1(x, t)} \frac{\partial}{\partial t} \Phi(u_1) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_1 \frac{\partial u_1}{\partial x} \right).$$

Таким образом существуют по крайней мере три формы записи уравнения (13), т.е. (13), (20), и (21). Для построения разностных схем использованы все эти три формы. Полное исследование свойств разностной схемы проведено для аппроксимации, основанной на форме (21). Разностные схемы основанные на формах записи (13) и (20) исследовались численно.

Перейдем к построению разностных схем. Будем использовать стандартные обозначения из [11]. Пусть $\bar{\omega}_h^{(1)}$, $\bar{\omega}_h^{(2)}$ — равномерные сетки с шагами h_1 , h_2 на отрезках $[0, 1]$, $[1, 2]$ соответственно, а $\bar{\omega}_\tau$ — сетка с шагом τ на $[0, T]$.

Линейные члены в уравнениях (13), (14) аппроксимируем известными выражениями вида $(k_i y_{\bar{x}})_{x,i} + \tilde{\varphi}_i$, $i = 1, 2$ в $\bar{\omega}_h^i \times \bar{\omega}_\tau$. Функции ϱ_i , k_i , $\tilde{\varphi}_i$ выражаются через a_i , λ_i с помощью введенных в [11] шаблонных функционалов. Условия сопряжения (18) при $x = 1$ аппроксимируем по аналогии с работой [8]. Временные члены в (13), (14) заменим выражениями

$$\varrho_k \frac{\Phi_k(y_i^j) - \Phi_k(y_i^{j-1})}{\tau y_i^j}, \quad \text{где} \quad \Phi_k(y) = \frac{1}{2} \int_0^{y^2} f_k(\sqrt{\lambda}) d\lambda, \quad k = 1, 2.$$

В этой формуле $f_1(\lambda) = f(\lambda)$, $f_2(\lambda) \equiv 1$. Запишем разностные схемы в операторном виде. Пусть H — пространство сеточных функций $y = (y^{(1)}, y^{(2)})$ в области $\bar{\omega} = (\bar{\omega}_h^{(1)} \times \bar{\omega}_\tau) \cup (\bar{\omega}_h^{(2)} \times \bar{\omega}_\tau)$ с естественным скалярным произведением. Определим линейный оператор A по формуле:

$$(22) \quad Ay = \begin{cases} \frac{-k_1 y_{x,0}^{(1)} + \beta_1 y_0^{(1)}}{0.5 h_1}, & i = 0 \quad (x = 0), \\ -(k_1 y_{\bar{x}}^{(1)})_{x,i}, & i = 1, 2, \dots, n-1 \quad (0 < x < 1), \\ \frac{\bar{a}(y_n^{(1)} - y_{n+1}^{(2)}) + k_1 y_{\bar{x},n}^{(1)}}{0.5 h_1}, & i = n \quad (x = 1), \\ \frac{-\bar{a}(y_n^{(1)} - y_{n+1}^{(2)}) + k_2 y_{x,n+1}^{(2)}}{0.5 h_2}, & i = n+1 \quad (x = 1), \\ -(k_2 y_{\bar{x}}^{(2)})_{x,i}, & i = n+2, \dots, N-1 \quad (1 < x < 2), \\ \frac{k_2 y_{\bar{x},N}^{(2)} + \beta_2 y_N^{(2)}}{0.5 h_2}, & i = N \quad (x = 2). \end{cases}$$

Сеточную функцию φ определим равенством

$$(23) \quad \varphi_i = \begin{cases} \frac{\mu_1}{0.5h_1}, & i = 0, \\ 0, & i = 1, 2, \dots, N-1, \\ \frac{\mu_2}{0.5h_2}, & i = N. \end{cases}$$

Особое внимание следует уделить аппроксимации нелинейного члена в краевом условии (17). Рассмотрим следующий оператор B :

$$By_i^j = \begin{cases} 0, & i = 0, 1, \dots, N-1, \\ \frac{\gamma}{0.5h_2} [(y_N^j)^4 + (y_N^j)^3 y_N^{j-1} + (y_N^j)^2 (y_N^{j-1})^2 + \\ + y_N^j \cdot (y_N^{j-1})^3 + (y_N^{j-1})^4], & i = N. \end{cases}$$

Пусть σ — параметр, изменяющийся в пределах $(0.5, 1]$, а $y^{(\sigma)} = \sigma y + (1-\sigma)\tilde{y}$. Задаче (13)–(18) поставим в соответствии разностную схему [12]:

$$(24) \quad \rho \frac{\Phi(y) - \Phi(\tilde{y})}{\tau y} + Ay^{(\sigma)} + By = \varphi$$

с начальным условием

$$(25) \quad y(x, 0) = y_0(x) = (\tilde{u}_1(x), \tilde{u}_2(x)).$$

Задача (24), (25) представляет собой нелинейную разностную схему для решения уравнений (13)–(18). Отметим некоторые простейшие свойства задачи (24), (25):

(а) разностная схема принадлежит к классу консервативных разностных схем [11].

(б) Оператор A схемы является самосопряженным и положительно определенным [11].

В дальнейших исследованиях будем предполагать, что решение $y(x_i, t_j)$ схемы (24), (25) существует, единственное и положительно определенное в следующем смысле: существует число $v_1 > 0$ такое, что $y(x_i, t_j) \geq v_1$, $i = 0, 1, \dots, N$, $j = 0, 1, \dots, M$. Кроме того предположим, что краевая задача (13)–(18) имеет единственное обобщенное решение в классе $H_1 = (W_2^{1,0}(Q_1) \cap C(Q_1)) \cup (W_2^{1,0}(Q_2) \cap C(Q_2))$. В [12] получены априорные оценки для решения разностной задачи (24)–(25), аналогичные оценке (19). Как показано в работе [13], имеет место следующий интересный результат:

ТЕОРЕМА 4. Пусть решение $u(x, t)$ уравнений (13)–(18) удовлетворяет условию

$$\left| \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} \right| \leq M, \quad (x, t) \in Q.$$

Тогда справедлива оценка:

$$\|y - u\|_{H_2^{2,1}(Q)} \leq C(h^2 + \tau)^{1/5}.$$

Если $u(x, t)$ удовлетворяет условию

$$\left| \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} \right| \leq M_1, \quad (x, t) \in Q,$$

то имеет место оценка

$$\|y - u\|_{H_2^{1,0}(Q)} \leq C(h^2 + \tau).$$

Заметим, что в первом случае нет поточечной аппроксимации дифференциального уравнения, а сходимость с указанным выше порядком все же имеется.

4. В настоящее время к разностным схемам предъявляется большое количество требований [11], причем некоторые из них конкурируют между собой. Актуальными являются задачи о построении как можно более широкого семейства разностных схем, удовлетворяющие каждому требованию в отдельности. Здесь мы приведем два семейства разностных схем и исследуем численно их качества.

При построении первого семейства будем пользоваться основной записью краевой задачи (13), т.е., будем использовать запись нелинейного временного члена в уравнении (13) в виде $\varrho_1(x, t)f(u_1)\partial u_1/\partial t$. Пусть σ — параметр, изменяющийся в пределах $[0, 1]$. Положим $y^{(\sigma)} = \sigma y + (1 - \sigma)\tilde{y}$. Рассмотрим разностные схемы

$$(26) \quad \varrho f(y^{(\sigma)})y_i^- + Ay^{(\sigma)} + B_1 y = \varphi, \quad y(x, 0) = y_0(x).$$

Оператор A в уравнении (26) совпадает с использованным в пункте 3 и определяется равенством (22). Правая часть φ определяется тождеством (23). Определим нелинейный оператор $B_1 y$ по формуле:

$$B_1 y_i^j = \begin{cases} 0, & i = 0, 1, \dots, N-1, \\ y_N^{(\sigma)} \cdot (y_N^j)^2 \frac{\gamma}{0.5 h_2}, & i = N. \end{cases}$$

Оператор $B_1 y$ аппроксимирует нелинейный член в краевом условии (17).

Задача (26) представляет собой нелинейную разностную схему для решения уравнений (13)–(18). Если известно решение $y(x_i, t_{j-1})$ в момент времени t_{j-1} , то для вычисления $y(x_i, t_j)$ возникает нелинейное алгебраическое уравнение, которое решается простейшим итерационным процессом

$$(27) \quad \varphi f(\sigma y^{(s)} + (1-\sigma)\check{y}) \frac{y^{(s+1)} - \check{y}}{\tau} + \sigma A y^{(s+1)} + \\ + \delta_N \frac{\gamma}{0.5 h_2} (y_N^{(s)})^3 (\sigma y_N^{(s+1)} + (1-\sigma)\check{y}) = \varphi - (1-\sigma) A \check{y},$$

$$y_i^{(0)} = \check{y}_i, \quad i = 0, 1, \dots, N, \quad \delta_N = \begin{cases} 0, & i \neq N, \\ 1, & i = N. \end{cases}$$

Итерационный процесс проводится до тех пор, пока относительная погрешность между двумя соседними итерациями не окажется меньше некоторой наперед заданной величины ε . Итерации прекращаются, если выполнено условие $\left\| \frac{y^{(s+1)} - y^{(s)}}{y^{(s+1)}} \right\|_C \leq \varepsilon$. В реальных вычислениях параметр ε принимал значения из интервала $[10^{-7}, 10^{-2}]$.

Надежным критерием качества алгоритмов является скорость сходимости итерационного процесса. Если скорость сходимости в каком-либо смысле недостаточно быстрая, то необходимо уменьшение шага по времени τ .

Рассмотрим второе семейство разностных схем для задачи (13)–(18). Обозначим, как выше, через $H(u)$ энтальпию. Будем аппроксимировать уравнение (13) в форме (20). Получаем:

$$(28) \quad \frac{H(y) - H(\check{y})}{\tau} + A y^{(\sigma)} + \frac{\gamma}{0.5 h_2} (y_N^{(\sigma)})^4 \delta_N = \varphi_1, \quad y(x, 0) = y_0(x).$$

Оператор A определяется по формуле (22), правая часть φ_1 определяется равенством (23).

Для решения нелинейной разностной схемы (28) применим итерационный метод Ньютона. Проведя линеаризацию, получим уравнение

$$(29) \quad H(y^{(s)}) + (y^{(s+1)} - y^{(s)}) \frac{dH(y^{(s)})}{dy} + \sigma \tau A y^{(s+1)} + \\ + \frac{\tau}{0.5 h_2} \gamma \delta_N (\sigma y_N^{(s)} + (1-\sigma)\check{y}_N)^4 + \frac{4\tau\gamma}{0.5 h_2} \delta_N (y_N^{(s+1)} - y_N^{(s)}) \times \\ \times (\sigma y_N^{(s)} + (1-\sigma)\check{y}_N)^3 = \varphi_2, \quad y_i^{(0)} = \check{y}_i, \quad i = 0, 1, \dots, N.$$

Итерационный процесс проводится до тех пор, пока не выполнено условие

$$\left\| \frac{y^{(s+1)} - y^{(s)}}{y^{(s+1)}} \right\|_C \leq \varepsilon.$$

Два из изложенных вычислительных алгоритмов были реализованы на машинах БЭС М-6 и ЕС-1040 в виде стандартных программ на языке Фортран. Были проведены эксперименты для двух краевых задач. Одна из этих задач является тестовой, другая — конкретная задача из металлургии. Так как точное решение второй задачи не известно, то некоторые результаты счета сравнивались с результатами физического эксперимента [6], [7].

При счете сетка по пространственной переменной выбиралась неравномерной. Более густой она выбиралась около особой точки $x = 1$. Сетка по времени была неравномерной в начале счета. Так как решения типичных задач из металлургии очень быстро меняются в начале процесса, то начальные временные шаги брались малыми и постепенно увеличивались до достижения некоторой величины, постоянной до конца счета.

На основе численных экспериментов можно сделать следующие выводы:

Итерационный процесс (27) сходится не очень быстро (20 итераций), особенно в случаях больших чисел α . Сходимость итерационного процесса налагает дополнительное условие на шаг τ .

Итерационный процесс (29) сходится значительно быстрее (3–5 итераций), чем (27). Это позволяет считать с более крупным шагом τ .

При помощи построенных разностных схем для одномерной модели изучено влияние одного из технологических приемов управления кристаллизации и уменьшения термического удара на кокиль — нанесение тонкой краски (обмазки) на внутренней боковой поверхности кокиля. В этом случае имеют место условия сопряжения (9)–(12).

Были проведены расчеты с разными коэффициентами $\lambda_{кр}$ и толщинами $\delta_{кр}$. Они дали возможность получить количественные характеристики влияния этих величин на процесс кристаллизации (на движении изотерм $u = u_s$) и на снижении термического удара на кокиль.

На рисунке 3 показано распределение температур в разных моментах времени в слитке и в кокиле при отсутствии краски, а на рисунке 4 при наличии теплопроводящей тонкой краски.

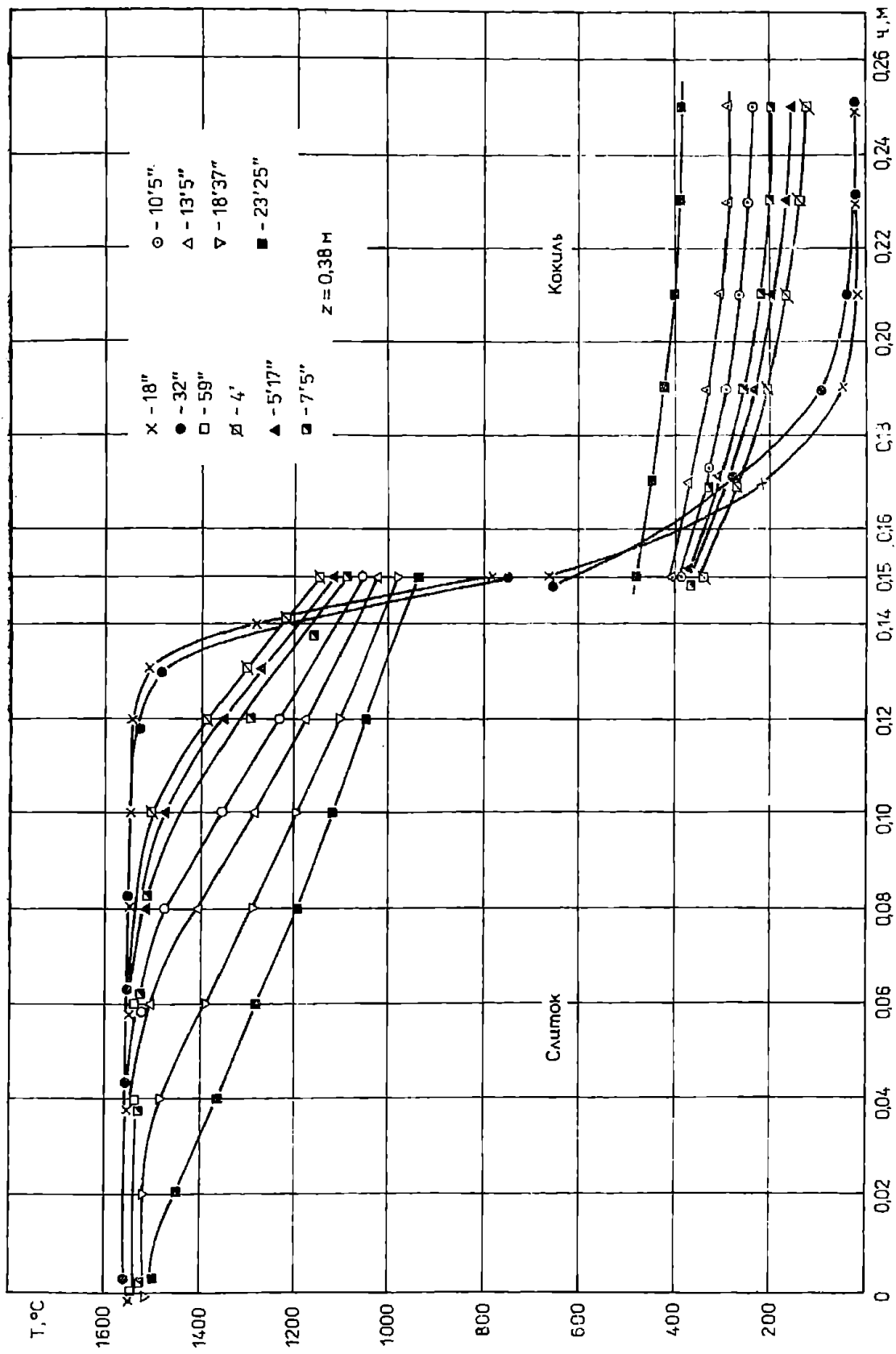


Рис. 3

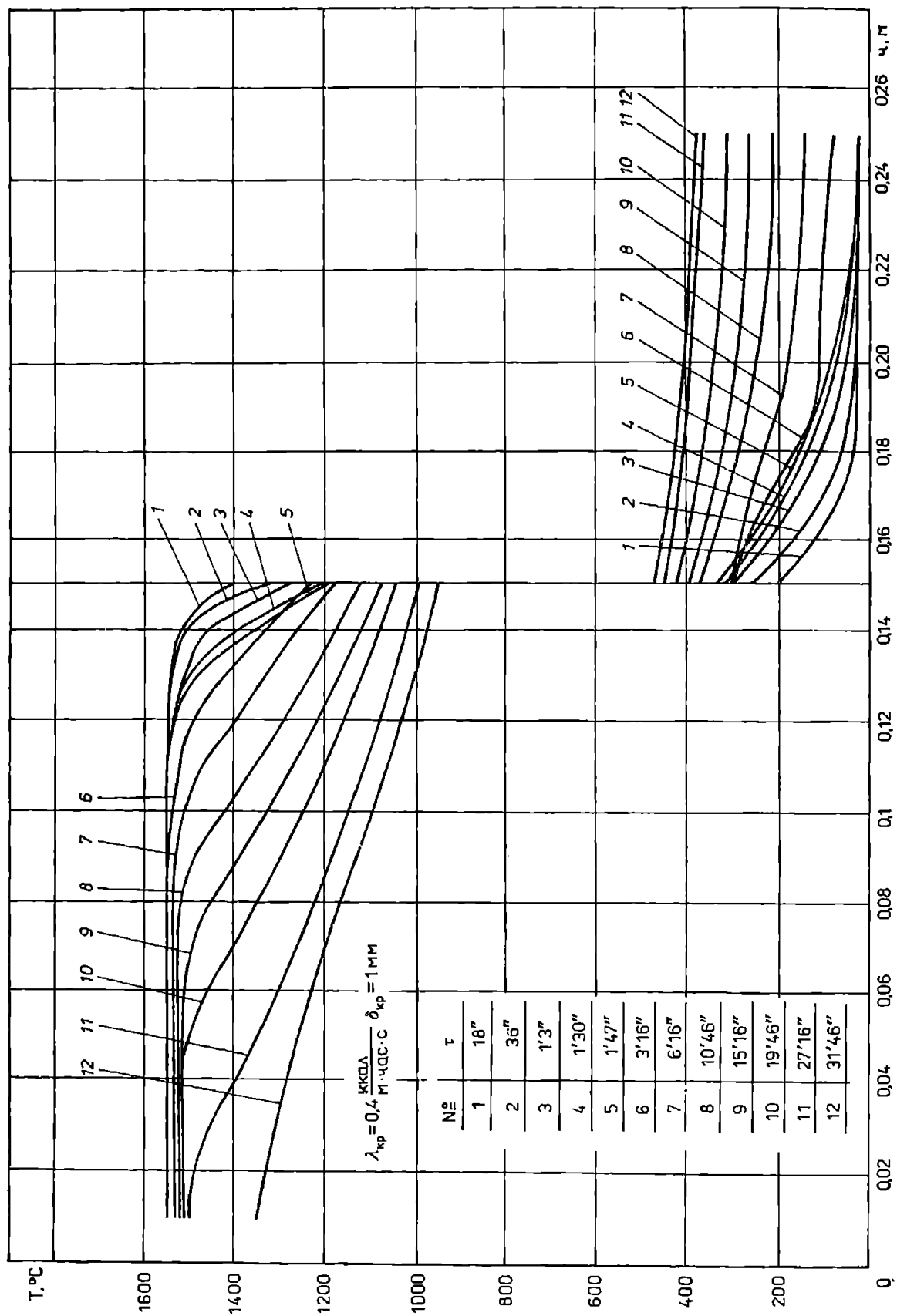


Рис. 4

3. Численное решение двумерных задач

Для численного решения двумерной задачи (2)–(6) применены явные двумерные и неявные локально одномерные разностные схемы.

1. Для конструирования явной схемы в области $Q = D \times [0, T]$ введена неравномерная сетка по пространственным и временной переменным. При этом линии раздела подобластей (рис. 1) являются линиями сетки, а точки на границе между слитком и кокилем являются двойными (рис. 2).

Для построения разностной схемы использован интегро-интерполяционный метод (метод баланса) [8], [11]. Таким образом получена следующая консервативная схема:

$$(30) \quad \tilde{C} \frac{\hat{y} - y}{\tau} = Ay + \varphi, \quad y(x, 0) = y_0(x),$$

где

$$(31) \quad \tilde{C}_{ij} = \frac{1}{\tilde{h}_{1,i} \tilde{h}_{2,i}} \int_{x_{2,j-1/2}}^{x_{2,j+1/2}} \int_{x_{1,i-1/2}}^{x_{1,i+1/2}} \varrho(u) c(u) dx_1 dx_2.$$

Нелинейный оператор A аппроксимирует правую часть уравнения (2), условия сопряжения (3) и граничные условия (4), (5) стандартным образом [8], [11]. В случае гладких решений порядок аппроксимации схемы является $O(\tau + h^2)$.

Принципом максимума получено условие устойчивости схемы (30), (31)

$$\tau \leq \min \left(\frac{\bar{c} \bar{\varrho}}{\bar{\lambda}} \cdot \frac{\tilde{h}^2}{4}, \frac{\bar{c} \bar{\varrho}}{2\bar{\lambda} + \bar{\alpha}h} \cdot \frac{\tilde{h}^2}{2} \right),$$

где

$$\begin{aligned} \bar{\varrho} &= \min_u \varrho(u), & \bar{c} &= \min_u c(u), \\ \bar{\lambda} &= \max_u \lambda(u), & \bar{\alpha} &= \max_u \alpha(u), \\ \tilde{h} &= \min_{i,j} \{h_{1,i}, h_{2,j}\}. \end{aligned}$$

2. Локально одномерные схемы получены на основе аппроксимации двух одномерных уравнений [11]:

$$(32) \quad \frac{1}{2} \varrho(x, t, u^{(1)}) c(x, t, u^{(1)}) \frac{\partial u^{(1)}}{\partial t} = \frac{1}{x_1^n} \frac{\partial}{\partial x_1} \left(x_1^n \lambda(x, t, u^{(1)}) \frac{\partial u^{(1)}}{\partial x_1} \right),$$

$$(33) \quad \frac{1}{2} \varrho(x, t, u^{(2)}) c(x, t, u^{(2)}) \frac{\partial u^{(2)}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_2} \left(\lambda(x, t, u^{(2)}) \frac{\partial u^{(2)}}{\partial x_2} \right),$$

полагая при этом

$$u_1^{(1)}(x, 0) = u_0(x), \quad u^{(2)}(x, t_{j+1/2}) = u^{(1)}(x, t_{j+1/2}).$$

Аппроксимируя каждое из уравнений методом баланса, получаем

$$(34) \quad \tilde{C}_1 \frac{\bar{y} - y}{\tau} = A_1 \bar{y} + \varphi_1,$$

$$(35) \quad \tilde{C}_2 \frac{\hat{y} - \bar{y}}{\tau} = A_2 \hat{y} + \varphi_2, \quad y(x, 0) = y_0(x),$$

где

$$\begin{aligned} \tilde{C}_1 &= \frac{1}{h_{1,i}} \int_{x_{1,i-1/2}}^{x_{1,i+1/2}} \varrho(u^{(1)}) c(u^{(1)}) dx_1, \\ \tilde{C}_2 &= \frac{1}{h_{2,i}} \int_{x_{2,i-1/2}}^{x_{2,i+1/2}} \varrho(u^{(2)}) c(u^{(2)}) dx_2. \end{aligned}$$

Нелинейные операторы A_1 и A_2 аппроксимируют правые части уравнений (2), условия сопряжения и граничные условия аналогично одномерному случаю. В случае гладких решений каждое из уравнений (34), (35) аппроксимирует соответствующее уравнение (32), (33) с погрешностью $O(\tau + h_a^2)$, $a = 1, 2$. Суммарная аппроксимация в случае гладких решений на целых слоях есть $O(\tau + |h|^2)$ [11]. Для решения нелинейной системы (34), (35) можно применить разные итерационные процессы. Нами использован метод последовательных приближений, в котором коэффициенты берутся на предыдущей итерации.

3. На двумерной модели в случае цилиндрического слитка исследовано влияние других технологических факторов, как подогревание металла экзотермическими смесями, высота прибыли и вкладыша, режим охлаждения дна кокиля, размеры слитка и кокиля [14]. Проведенное исследование дает возможность получить количественные характеристики этих влияний.

На рисунке 5 показаны изотермы $u = u_s$ в разных моментах времени без подогрева металла, а на рисунке 6 — в случае подогрева металла и при других размерах слитка. Видно заметное изменение характера этих изотерм.

В заключении отметим следующие интересные задачи.

В области исследования дифференциальной задачи остаются открытыми вопросы об исследовании свойств решения в случаях нелинейных условий сопряжения и разрывной теплоемкости. Необходимо также провести полное исследование многомерной дифференциальной задачи.

Для разностных схем необходимо решить вопросы об существовании, единственности и положительности их решений. Надо исследовать сходимость и других использованных схем.

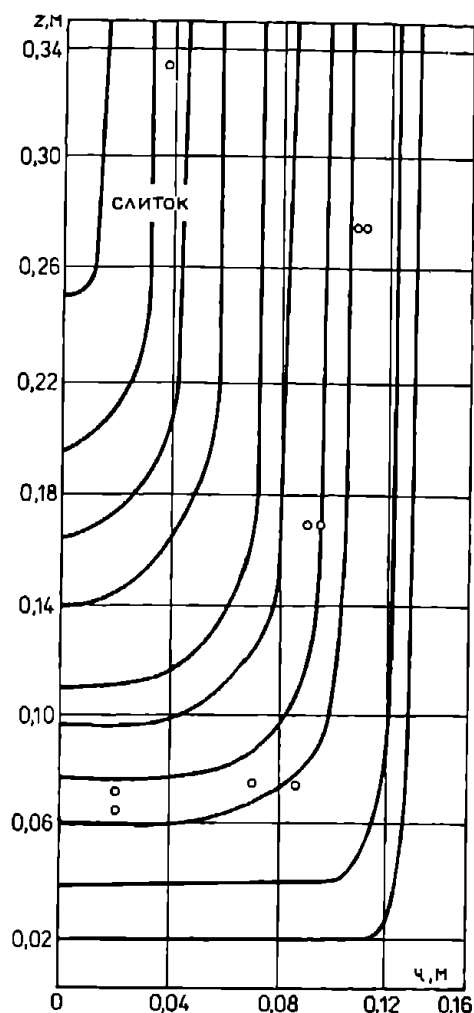


Рис. 5

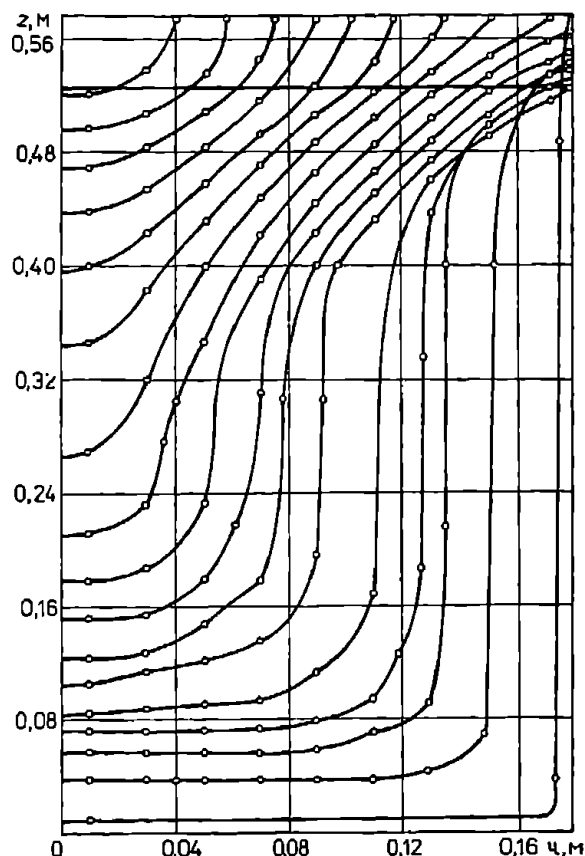


Рис. 6

Очень важной задачей является сравнение на основе численного экспериментирования всех известных многомерных схем, а также сравнение итерационных методов для решения получающихся нелинейных разностных уравнений.

Литература

- [1] А. А. Самарский, *Математическое моделирование и вычислительный эксперимент*, Вестник АН СССР 5 (1979), 38-49.
- [2] Б. Е. Патон, Б. И. Медовар, Ю. А. Стеренбоген, В. Ф. Демченко, *Математические модели затвердевания электрошлаковых слитков*; Сб.: *Математические методы в исследовании процессов специальной электрометаллургии*, Киев 1976, стр. 4-20.

- [3] *Математические методы исследования процессов спецэлектрометаллургии*, изд. об-ва Знание, Киев 1974.
- [4] Р. И. Есьман, Н. П. Жмакин, Л. И. Шуб, *Расчеты процессов литья*, Высшейшая школа, Минск 1977.
- [5] Ю. А. Самойлович, Е. М. Котляревский, *Математическое моделирование затвердевания слитка в изложнице с учетом утепляющих вкладышей*; Сб.: *Проблемы стального слитка*, т.5, *Металлургия*, Москва 1974.
- [6] И. Димов, Ц. Рашев, В. Манолов, Н. Андреев, Р. Лазаров, Ст. Димова, П. Шопов, *Математическая модель затвердевания цилиндрического слитка из безникеловой азотной стали*, *Материаловедение и технология*, София, 9 (1980).
- [7] И. Димов, Ц. Рашев, В. Манолов, Н. Андреев, Бл. Сендов, Ст. Димова, Р. Лазаров, Т. Черногорова, *Математическо моделиране на топлофизични процеси при получаване на блок от неръждаема стомана по методите за обработка на металите с газово противоплавяне*, *Металлургия*, 34.4 (1981), 3–5.
- [8] А. А. Самарский, В. Б. Андреев, *Разностные методы для эллиптических уравнений*, „Наука”, Москва 1976.
- [9] Н. Т. Дренска, *Об одной задаче сопряжения двух параболических уравнений*, *Диффер. уравнения* 15.12 (1979).
- [10] С. М. Никольский, *Приближение функций многих переменных и теоремы вложения*, „Наука”, Москва 1974.
- [11] А. А. Самарский, *Теория разностных схем*, „Наука”, Москва 1977.
- [12] Н. Т. Дренска, *Свойства разностных схем для задачи об остывании металла в форме*, *Диффер. уравнения*, 16.9 (1980).
- [13] —, *Точность численных алгоритмов для одномерной задачи об остывании металла в формах*, *Вестник МГУ, сер. Вычисл. мат. и киберн.* 4 (1981).
- [14] Н. Андреев, В. Манолов, Ц. Рашев, Р. Лазаров, Ст. Димова, Т. Черногорова, *Математическая модель кристаллизации стали в прибыльной части слитка*, II научно-техн. конф. по проблемам сталеплавильного производства, Варна, 4–6.X.1979 г.

*Presented to the Semester
Computational Mathematics
February 20 — May 30, 1980*
