

**ВСЕСОЮЗНЫЙ ЦЕНТР МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ
Российской академии наук**

**А.А. Самарский, П.Н. Вабишевич,
О.П. Илиев, А.Г. Чурбанов**

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
КОНВЕКТИВНО - ДИФФУЗИОННЫХ ПРОЦЕССОВ
ПРИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДАХ**

Препринт № 7 за 1992г.

Москва

АННОТАЦИЯ

Дается обзор численных методов решения задач тепло- и массопереноса при фазовых превращениях твердое тело-жидкость. Математическая модель базируется на описании тепловых полей на основе стандартного приближения Стефана для описания фазового перехода и уравнений Навье-Стокса в приближении Буссинеска для конвективных течений расплава. Рассматриваются два основных подхода к решению таких задач со свободной границей. Первый из них связан с использованием методов с выделением свободной границы, второй - методов сквозного счета. Методы сквозного счета для описания гидродинамических процессов в переменной расчетной области строятся на основе различных вариантов метода штрафа.

ABSTRACT

A review of numerical methods for the solution of heat and mass transfer problems with solid/liquid phase change is presented. The mathematical model for the description of a thermal field includes Stefan's approximation for the evaluation of phase change and the Navier-Stokes equations in the Boussinesq approximation for the convective flows of a melt. Two basic approaches for the solution of these problems with a free boundary (phase change interface) are considered. The first is connected with free boundary-fitting algorithms, the second - with free boundary-smearing methods. The free boundary-smearing methods for the investigation of hydrodynamical phenomena in a varying calculation domain are based on various modifications of a penalty method.

Обозначения

- C - удельная теплоемкость;
 h - энтальпия;
 k - теплопроводность;
 K - проницаемость пористой среды;
 L - энтальпия фазового перехода;
 P - давление;
 S - источниковый член в уравнениях переноса;
 t - время;
 T - температура;
 T^* - температура фазового перехода;
 $v = (u, v, w)$ - скорость;
 (x, y, z) - декартовы координаты;
- σ - тензор скоростей деформаций;
 Δ - оператор Лапласа;
 ε - параметр продолжения в методе фиктивных областей;
 μ, μ', ν - коэффициенты динамической, объемной и кинематической вязкости;
- ρ - плотность;
 Ψ - доля твердой фазы;
 ψ - функция тока;
 ω - вихрь скорости;

индексы:

- ef - индекс для эффективной величины;
 s, l - индексы твердой и жидкой фаз;
 n - индекс нормальной составляющей.

Содержание

1. Введение	5
2. Основные уравнения	7
2.1. Уравнение энергии	7
2.2. Уравнения импульса и неразрывности	9
3. Методы решения задач теплопроводности с фазовыми переходами	11
3.1. Методы с выделением границы раздела фаз	12
3.2. Методы без выделения границы раздела фаз	12
4. Расчет фазового перехода с учетом конвекции. Методы с выделением границы фазового перехода	13
4.1. Преобразование расчетной области	14
4.2. Нерегулярные деформируемые сетки	17
4.3. Методы локальной адаптации	18
5. Расчет фазового перехода с учетом конвекции. Методы без выделения границы фазового перехода	18
5.1. Естественные переменные	19
5.2. Переменные функция тока - вихрь скорости	23
5.3. Моделирование течений в двухфазной зоне	24
6. Выводы	25
Список литературы	26

1. ВВЕДЕНИЕ

Современный уровень развития вычислительной техники и численных методов позволяет более детально исследовать многие физические и технологические процессы и явления. В последние годы непрерывно возрастает число работ, посвященных разработке численных методов для сопряженных задач тепло- и массопереноса при фазовом переходе жидкость-твердое тело с учетом конвекции в жидкой фазе и свободной границей между фазами. Соответственно возрастает и число работ, посвященных численному моделированию физических и технологических процессов, при которых встречаются указанные выше явления.

Раньше всего к проблемам численного моделирования фазовых переходов с учетом конвекции обратились при изучении металлургических процессов. При затвердевании или плавлении относительно больших объемов металлов и сплавов роль конвекции в жидкой фазе становится существенной [1,2]. В настоящее время такие задачи приходится решать при анализе литья и плавления металлов, выращивания кристаллов, аккумуляции энергии, лазерной обработки металлов, замораживания пищевых продуктов, получения пластмасс, в геологии и т. д.

Естественно, огромное количество опубликованных работ в данной области требует осмысления, анализа и классификации. Все чаще появляются обзоры литературы по данной тематике. В работе Vasu и Date [3], преимущественно с физической точки зрения, обсуждаются формулировки и классификации задач затвердевания и плавления с учетом и без учета конвекции. Voller с соавторами проанализировали в [4] англоязычную литературу по методам сквозного счета для численного решения задач фазового перехода без учета конвекции. Периодически обзоры литературы по математическому моделированию и экспериментальному исследованию задач кристаллизации публикует Viskanta (см., например, [5]). В обзорной работе Kannan с соавторами [6] обсуждаются методологические проблемы моделирования процессов кристаллизации, а также качество и возможности существующего программного обеспечения для решения задач такого типа.

Целью настоящей работы является обсуждение основных подходов к численному решению задач фазового перехода с учетом конвекции на основе современного уровня развития методов прикладной

и вычислительной математики. Делается попытка анализа всех основных работ в данном направлении, в том числе и на русском языке, которые практически не цитируются в англоязычной литературе. Большой интерес представляет и обзор примеров использования таких математических моделей при изучении конкретных практических задач.

При исследовании конвективно-диффузионных процессов с учетом фазовых превращений жидкость-твердое тело в качестве основных приняты следующие предположения:

- используется обычное параболическое уравнение теплопроводности, базирующееся на законе Фурье;
- для чистых материалов на границе раздела фаз выполняется условие Стефана, а для сплавов и солей используются простейшие макроскопические модели двухфазной зоны;
- естественная и/или концентрационная конвекция в жидкой фазе рассматривается на основе уравнений Навье-Стокса в приближении Буссинеска для ламинарных течений;
- изменение плотности при фазовом переходе незначительно;
- течение в двухфазной зоне рассматривается в рамках простейших макроскопических уравнений, например, на основе приближения Дарси-Буссинеска для пористой среды.

Отметим, что рассматриваемые сопряженные задачи тепло- и массопереноса с фазовыми переходами являются существенно нелинейными. Во-первых, нелинейность обусловлена конвективными членами в уравнениях движения и энергии. Во-вторых, естественно учитывать зависимость теплофизических характеристик материалов от температуры. Третий тип нелинейности в рассматриваемых задачах обусловлен фазовым переходом, наличием свободной (зависящей от решения) границы между фазами. Трудности, связанные с конвективными членами в уравнениях движения и зависимостью параметров от температуры, являются стандартными для задач конвективного тепло- и массопереноса. Они широко обсуждаются в литературе по вычислительной гидродинамике и тепломассообмену (см., например, [7-11]) и здесь рассматриваться не будут.

Настоящая работа имеет следующую структуру. Во втором разделе приводятся основные уравнения рассматриваемых проблем тепло- и массопереноса при фазовых превращениях. В третьей части работы коротко напоминаются основные подходы к численному решению чисто тепловых задач затвердевания и плавления. В четвертой

разделе обсуждаются численные методы, основанные на явном выделении границы фазового перехода при решении задач фазового перехода с учетом конвекции и отмечаются работы, где эти методы применяются для решения конкретных практических задач. В пятом разделе обсуждаются численные методы сквозного счета для системы твердое тело/расплав и также приводятся примеры их применения.

2. ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Рассматриваемые уравнения тепло- и массопереноса при фазовом переходе liquidus-solidus базируются на законах сохранения энергии, массы и количества движения [12]. Здесь и далее будем говорить о затвердевании, имея в виду, что численные методы для задач затвердевания и плавления не отличаются друг от друга. Естественно, необходимы и соответствующие предпосылки относительно массовой доли примеси при моделировании затвердевания/плавления сплавов. Будем считать, в частности, что чистые материалы затвердевают при фиксированной температуре $T=T^*$ и при этом существует гладкая граница $\Gamma(t)$ раздела твердой и жидкой фаз. Для сплавов и солей характерно затвердевание в интервале температур и существование двухфазной зоны.

2.1. Уравнение энергии

Распределение температуры в твердой фазе описывается обычным уравнением теплопроводности:

$$\rho c_s \frac{\partial T_s}{\partial t} = \text{div}(k_s \text{grad } T_s) + S_s^T \quad (2.1)$$

В достаточно общей форме уравнения распределения температуры в нетвердой (жидкой или твердожидкой двухфазной зонах) с учетом кондуктивного и конвективного теплообмена записывается в виде:

$$\rho c_1 \left[\frac{\partial T_1}{\partial t} + (\mathbf{v}, \text{grad}) T_1 \right] = \text{div}(k_1 \text{grad } T_1) + S_1^T \quad (2.2)$$

В случае затвердевания чистых материалов на границе раздела фаз $\Gamma(t)$ температура постоянна:

$$\Gamma(t) = \{ (x, y, z) \mid T(x, y, z, t) = T^* \} \quad (2.3)$$

На границе фазового перехода $\Gamma(t)$ удовлетворяются обычные условия Стефана (непрерывность температуры и скачок теплового потока, пропорциональный скорости движения границы):

$$[T] = 0, \quad (x, y, z) \in \Gamma(t), \quad (2.4)$$

$$\left[k \frac{\partial T}{\partial n} \right] = -\rho L V_n, \quad (x, y, z) \in \Gamma(t) \quad (2.5)$$

Здесь через $[\varphi]$ обозначен скачок величины φ при переходе $\Gamma(t)$ со стороны твердой в жидкую фазу. Отметим, что условия (2.4) и (2.5) могут быть учтены в источниковом члене и тогда вместо уравнений (2.1)-(2.5) можно во всей расчетной области рассматривать одно уравнение:

$$\rho C \left[\frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{v}, \text{grad})T \right] = \text{div}(k \text{ grad } T) + S^* \quad (2.6)$$

При этом естественно положить $\mathbf{v} \equiv 0$ в твердой фазе. Уравнение (2.6) используется для изучения затвердевания как чистых материалов, так и сплавов и солей - при этом следует определить подходящим образом S^* . Остановимся на этом более подробно и заодно продемонстрируем возможность записать уравнение энергии с использованием эффективной теплоемкости.

В работах [13-15] показано, что в случае затвердевания чистых материалов (т.е. решения задачи Стефана) условия (2.4)-(2.5) эквивалентны выбору источникового члена S^* в виде $S^* = S^T - \rho L \delta(T - T^*) \frac{\partial T}{\partial t}$, где через S^T обозначены источники, не связанные с выделением скрытой теплоты кристаллизации. В случае затвердевания сплавов источниковый член S^* может быть представлен в виде $S^* = S^T - \rho L \frac{\partial \Psi}{\partial t}$ (см., например, [1]). После этого уравнение (2.6) переписывается как:

$$\rho C_{ef} \left[\frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{v}, \text{grad})T \right] = \text{div}(k \text{ grad } T) + S^T \quad (2.7)$$

где:

$$C_{ef} = \begin{cases} C + L\delta(T-T^*) & \text{для чистых металлов,} \\ C + L \frac{d\Psi}{dT} & \text{для сплавов.} \end{cases} \quad (2.8)$$

Численное решение уравнения с дельта-функцией требует разработки специальных подходов, поэтому во многих случаях уравнение (2.7) преобразуется введением энтальпии h к виду:

$$\rho \left[\frac{\partial h}{\partial t} + (v, \text{grad})h \right] = \text{div}(k \text{ grad } T) + S^T \quad (2.9)$$

где:

$$h = \int_0^T C_0 dT, \quad T \leq T^*, \quad (2.10)$$

$$h = h(T^*) + L + \int_{T^*}^T C_1 dT + L, \quad T > T^*. \quad (2.11)$$

Обсуждению преимуществ и недостатков вышеуказанных формулировок уравнения энергии (в основном для чисто тепловых задач), а также примерам их использования посвящено большое число работ. Влияние различных способов "размазывания" разрыва энтальпии в уравнениях (2.9)-(2.11) на точность получаемого решения исследовано, в частности, в работе [16]. В данной статье мы не будем касаться этой тематики, отсылая читателя за подробностями к обстоятельному обзору [4].

2.2. Уравнения импульса и неразрывности

Рассмотрим теперь используемые модели конвективного движения расплава. Уравнения Навье-Стокса, описывающие ламинарные течения, имеют вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho v}{\partial t} + \text{div}(\rho v v) = \\ = 2\text{div}(\mu \sigma) - \text{grad } P - \text{grad} \left[\left(\frac{2}{3} \mu - \mu' \right) \text{div} v \right] + S^V \end{aligned} \quad (2.12)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho v) = 0 \quad (2.13)$$

В большинстве работ по численному моделированию фазового перехода с учетом конвекции движение расплава рассматривается в приближении Буссинеска для вязкой несжимаемой жидкости. В этом случае имеем:

$$\begin{aligned} \frac{\partial v}{\partial t} + (v, \operatorname{grad})v &= \\ &= - \frac{1}{\rho} \operatorname{grad} P + \operatorname{div}(v \operatorname{grad} v) + S^v \end{aligned} \quad (2.14)$$

$$\operatorname{div} v = 0 \quad (2.15)$$

В вычислительной гидродинамике [7-11] для решения двумерных задач вместо формулировки уравнений Навье-Стокса (2.14)-(2.15) в естественных переменных чаще используются уравнения в терминах функции тока - завихренность (ψ, ω) :

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + (v, \operatorname{grad})\omega = \operatorname{div}(v \operatorname{grad} \omega) + S^\omega \quad (2.16)$$

$$\Delta \psi = -\omega \quad (2.17)$$

где $\Omega = \operatorname{rot} v$, $\Omega = (0, 0, \omega)$, $v = \operatorname{rot} \Psi$, $\Psi = (0, 0, \psi)$. В отдельных случаях используется одно уравнение четвертого порядка для функции тока ψ :

$$\frac{\partial \Delta \psi}{\partial t} + (v, \operatorname{grad})\Delta \psi = \operatorname{div}(v \operatorname{grad} \Delta \psi) + S^\psi \quad (2.18)$$

Вычислительные аспекты использования различных формулировок уравнений Навье-Стокса подробно обсуждаются в литературе (см., например, [7-11, 17, 18]).

Подробного обсуждения заслуживают модели движения в двухфазной зоне. Простейшая модель, которая широко используется во многих работах, основана на том, что возникающая при затвердевании сплавов двухфазная зона трактуется как пористая среда. В простейшем случае для описания движения может использоваться обычное приближение Дарси-Буссинеска. В таких моделях основное внимание должно уделяться установлению зависимости коэффициента

фильтрации такой пористой среды от доли примеси.

Для удобства изложения будем обсуждать в последующих частях работы численные методы применительно к модельной задаче о затвердевании металла (или сплава) в охлаждаемой сбоку прямоугольной полости с теплоизолированными верхним и нижним основаниями. Эта ситуация схематично отображена на рис. 1.

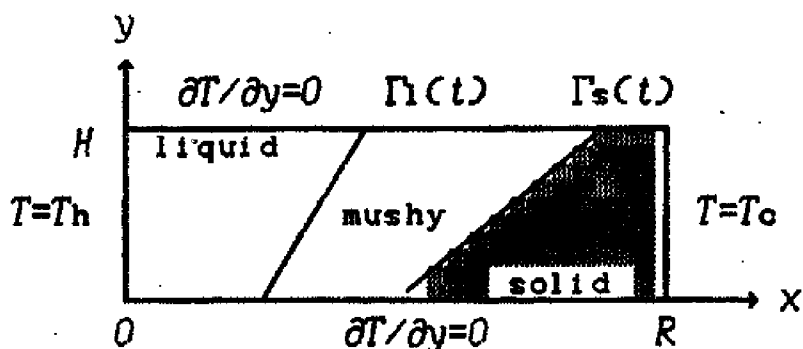


Рис. 1

Естественно, что в случае классической задачи Стефана (чисто тепловая задача) существует только одна плоская граница $\Gamma(t) \equiv \Gamma_s(t)$ между фазами. Отклонение от этой границы является мерой влияния конвекции в расплаве на процессы теплопереноса.

3. МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ С ФАЗОВЫМИ ПЕРЕХОДАМИ

Задача Стефана является предметом многих исследований [15, 20-22]. Она допускает аналитическое решение только в отдельных сильно упрощенных случаях (см., например, [13, 23]), поэтому в подавляющем числе случаев задачи типа Стефана решаются численно. Наиболее общее деление численных методов для решения подобных задач со свободной (неизвестной) границей [24] связано с использованием двух классов методов. Прежде всего различают методы с выделением границы раздела фаз (иногда их называют *variable domain methods*). Второй класс образуют методы без выделения этой границы (или методы сквозного счета, называемые еще *fixed domain methods*, по терминологии работ [3, 4]).

3.1. Методы с выделением границы раздела фаз

К данной группе относятся методы, в которых положение свободной границы отслеживается на каждом временном слое. С этой целью используются сеточные методы, в которых свободная граница определяется положением соответствующих узлов (используются согласованные сетки, динамические сетки). Поэтому в этой группе используются методы с переменным шагом сетки по пространству.

В одномерных задачах адаптация к границе раздела фаз может осуществляться и за счет использования переменного шага по времени. Такой подход к использованию переменных шагов по времени (ловля фронта в узле пространственной сетки) предложен в работе [25,26]. Следует отметить, что хотя этот подход использовался многократно при решении одномерных задач, к многомерным задачам он неприменим.

Широкое распространение получили так называемые методы выпрямления фронта, когда используется динамическая сетка постоянной структуры с закреплением узлов на границе раздела фаз. Для задач типа Стефана такой подход предложен в работах [27,28]. Из более поздних работ отметим работу [29], где такой подход применяется для численного решения двумерных задач. Кроме того в этой работе для повышения точности расчетов используется современная методика адаптации сетки.

Особенностью задач типа Стефана являются неоднородные условия сопряжения (2.3)–(2.5). Для их более точного выполнения при приближенном решении квазистационарной задачи Стефана разработан численный метод, базирующийся на использовании теории потенциала простого слоя [30,31]. Более подробный обзор литературы, посвященный методам этой группы, помимо отмеченных выше работ, можно найти в [32].

3.2. Методы без выделения границы раздела фаз

Поскольку для многомерных задач с фазовым переходом использование численных методов с явным выделением границы раздела фаз во многих случаях связано с алгоритмическими сложностями и большими вычислительными затратами, то широкое распространение при решении таких задач получили методы сквозного счета. Начиная с работ Самарского и Мойсеенко [33] и Будака с соавторами [34] для

температурной формулировки и с работы [35] для энтальпийной формулировки, было разработано и использовано множество вариантов метода сквозного счёта чисто тепловых задач с фазовым переходом. Суть предложенного в работе [33] метода сквозного счёта для решения задачи Стефана состоит в следующем. Вместо уравнения

$$\rho(C + L\delta(T-T^*)) \frac{\partial T}{\partial t} = \operatorname{div}(k \operatorname{grad} T) \quad (3.1)$$

решается уравнение

$$\rho \tilde{C} \frac{\partial T}{\partial t} = \operatorname{div}(k \operatorname{grad} T) \quad (3.2)$$

Сглаженная теплоемкость \tilde{C} выбирается из условия сохранения тепла на некотором интервале:

$$\int_{T^*-\eta}^{T^*+\eta} (C + L\delta(T-T^*)) dT = \int_{T^*-\eta}^{T^*+\eta} \tilde{C}(T) dT \quad (3.3)$$

Например, можно положить

$$\tilde{C} = C + \frac{L}{2\eta} \quad (3.4)$$

Более детальное обсуждение этого метода, в частности, обоснование выбора величины η в (3.4), другие аппроксимационные зависимости для \tilde{C}_1 можно посмотреть в [33]. Заметим также, что некоторые варианты энтальпийной формулировки задачи Стефана практически эквивалентны методу из [33] - см., например, обзорную работу [3], стр.182. Более подробное обсуждение англоязычной литературы по методам сквозного счёта имеется в упомянутом выше обзоре [4].

4. РАСЧЕТ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА С УЧЕТОМ КОНВЕКЦИИ. МЕТОДЫ С ВЫДЕЛЕНИЕМ ГРАНИЦЫ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА

Для удобства методы этой группы условно разобьем на несколько подгрупп. К первой из них отнесем методы преобразования

исследуемой нерегулярной области с использованием новых независимых переменных в регулярную с последующей дискретизацией преобразованных уравнений в трансформированной области. Ко второй группе отнесем методы, использующие нерегулярные и деформирующиеся сетки в исходной области. К последней группе отнесем методы локальной адаптации. Понятно, что между этими подходами есть много общего и конкретный вычислительный алгоритм может интерпретироваться по-разному.

4.1. Преобразование расчетной области

В настоящее время большая часть вычислительных алгоритмов для решения двумерных задач фазового перехода в присутствии конвекции с движущейся границей раздела фаз основывается на преобразовании исходной области, занятой жидкой фазой. С этой целью используются новые независимые переменные. Примером такого преобразования может служить использование конформного преобразования исходной нерегулярной расчетной области. Необходимо только специально отметить, что речь должна идти о динамическом преобразовании расчетной области (такое преобразование должно осуществляться в каждый расчетный момент времени), так как занятая расплавом область не постоянна, а изменяется со временем. Для численного решения преобразованных уравнений используются различные методы дискретизации: конечноразностные, конечноэлементные и т. д.

Для простоты и определенности продемонстрируем этот подход на примере ранее обсуждаемой модельной задачи, принимая, что уравнения Навье-Стокса записаны в переменных завихренность-функция тока (2.16)-(2.17) в декартовой системе координат. В этом случае занятая в момент времени t жидкой фазой область $G^*(t)$ введением новых переменных $\xi = \xi(x, y, t)$ и $\eta = \eta(x, y, t)$ может быть преобразована в регулярную область Ω . При принятых выше предположениях преобразованное безразмерное уравнение для вихря записывается в виде:

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \frac{1}{J} \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial t} - \frac{\partial y}{\partial \eta} \frac{\partial x}{\partial t} \right) \frac{\partial \omega}{\partial \xi} + \frac{1}{J} \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial t} - \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial t} \right) \frac{\partial \omega}{\partial \eta} +$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{J} \frac{\partial(U\omega)}{\partial\xi} + \frac{1}{J} \frac{\partial(V\omega)}{\partial\eta} = \\
& = \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial\xi} \left[\frac{Pr}{J} \left(\alpha \frac{\partial\omega}{\partial\xi} - \beta \frac{\partial\omega}{\partial\eta} \right) \right] + \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial\eta} \left[\frac{Pr}{J} \left(\gamma \frac{\partial\omega}{\partial\eta} - \beta \frac{\partial\omega}{\partial\xi} \right) \right] + \\
& + Ra \cdot Pr \cdot S^\omega(\xi, \eta) \tag{4.1}
\end{aligned}$$

Геометрические коэффициенты α, β, γ , компоненты скорости u, v и якобиан определены следующим образом:

$$\alpha = \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right)^2, \tag{4.2}$$

$$\beta = \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} + \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta}, \tag{4.3}$$

$$\gamma = \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \right)^2, \tag{4.4}$$

$$u = \frac{\partial \psi}{\partial \eta}, \quad v = - \frac{\partial \psi}{\partial \xi}, \tag{4.5}$$

$$J = \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi}. \tag{4.6}$$

Аналогичным образом выписываются и остальные преобразованные уравнения.

Следует обратить особое внимание на то, что в общем случае построение отображения $\xi = \xi(x, y, t)$ и $\eta = \eta(x, y, t)$ является самостоятельной и важнейшей проблемой. Только в некоторых простейших случаях можно явным образом указать необходимое преобразование. Например, это может быть простое растяжение по одной пространственной переменной (метод выпрямления фронта). С позиций проблематики построения сеток (см., например, [8, 9, 36, 37]) это соответствует использованию алгебраических методов генерирования сеток. Для построения сеток более общего вида требуется решения на каждом шаге связанной системы уравнений в частных производных [36-38], что может потребовать даже больших вычислительных затрат, чем решение самих уравнений переноса. Поэтому, как будет отмечено ниже, во многих работах принимаются дополнительные упрощающие предположения, которые позволяют более простым способом определять отображения $\xi = \xi(x, y, t)$ и $\eta = \eta(x, y, t)$.

Применительно к задачам тепло- и массопереноса с фазовыми превращениями полное преобразование $\xi = \xi(x, y, t)$ и $\eta = \eta(x, y, t)$ осуществляется в работах [39, 40]. Этот подход использован в [41] для численного изучения замерзания заполненной водой пористой среды.

Если же вернуться к рассматриваемой модельной задаче (см. рис. 1), то в этом частном случае можно воспользоваться тем, что область, занимаемая жидкой фазой, имеет форму криволинейного четырехугольника с тремя неподвижными и одной свободной границами. Поэтому можно использовать простейшее преобразование, сводящееся к растяжению области $G^*(t)$ неравномерно по переменной x до прямоугольной области Ω , $\Omega = \{(\xi, \eta): 0 \leq \xi \leq 1, 0 \leq \eta \leq H\}$. Учитывая, что $\frac{\partial v}{\partial \xi} = 0$ и имеется явная зависимость для $\xi = \xi(x, y, t)$ и $\eta = \eta(x, y, t)$, существенно упрощается уравнение (4.1) и другие рассматриваемые уравнения.

Среди первых работ, где этот упрощенный подход был использован для решения рассматриваемой тестовой задачи, отметим [42, 43]. В вышеуказанных работах использовался так называемый квазистационарный подход, когда принимается, что фронт фазового перехода "заморожен" между двумя дискретными моментами t и $t + \Delta t$ и определяется из условия Стефана только в дискретных моментах времени. Для дискретизации использовался метод конечных разностей. Разностная схема базируется на использовании метода переменных направлений для параболических уравнений и решении сеточного эллиптического уравнения для функции тока методом последовательной верхней релаксации. Реализация метода с преобразованием исходной расчетной области может базироваться и на других разностных методах решения задач математической физики (см., например, [44-47]). Этот подход был использован Viskanta с соавторами для расчета затвердевания или плавления многих конкретных материалов и показал хорошую точность при сравнении с экспериментальными данными [48, 49].

Аналогичный подход используется и в работе [50] для решения уравнений тепло- и массопереноса в однофазной (жидкой) и двухфазной (жидкость+пар) зонах для одной тестовой задачи, включающей кипение и естественную конвекцию в пористой среде. Отметим и некоторые другие работы, посвященные использованию отмеченного подхода к решению ряда прикладных проблем. В работе [51] численно изучено плавление льда в каверне, заполненной пористой средой

при подогреве снизу. Работа [52] посвящена численному анализу процесса горизонтального затвердевания бинарных растворов с взаимной диффузией компонентов в ограниченной прямоугольной полости (при этом учитываются как температурная, так и концентрационная конвекция). В работе [53] проведен анализ плавления чистого металла около вертикальной горячей стенки. В работе [54] изучается влияние естественной конвекции и конвекции Марангони на плавление чистого металла, работа [55] посвящена многопараметрическому исследованию тепловых и гидродинамических полей NaNO_3 при зонной плавке. Численное исследование плавления чистого материала с учетом естественной конвекции проведена в [56], а в [57] проведено исследование влияния тепловой конвекции и конвекции Марангони на плавление чистого металла.

Как уже отмечалось, в перечисленных работах использовался квазистационарный подход - т.е. граница раздела фаз "замораживалась" за время между t и $t+\Delta t$ и после расчета всех величин новое положение границы в момент $t+\Delta t$ определялось явно из условия Стефана по новому полю температур. Такой подход с "замораживанием" границы раздела фаз накладывает естественные ограничения на шаг по времени. Большие возможности предоставляет подход, предложенный в работе [58], где положение границы раздела фаз рассчитывается неявно вместе с остальными уравнениями, что позволяет рассчитывать на существенное увеличение допустимого шага по времени.

4.2. Нерегулярные деформируемые сетки

В отличие от предыдущей группы методов с явным выделением границы раздела фаз, рассматриваемые здесь численные методы не предусматривают решения преобразованных уравнений в новых переменных в регулярной области, а базируются на решении исходных уравнений на нерегулярных деформирующихся сетках. Отличия одного подхода от другого зачастую фактически обусловлены способом построения дискретной задачи и могут приводить к одним и тем же сеточным задачам.

В работе [59] для задач тепло- и массопереноса с фазовыми превращениями предлагается в каждый момент времени по известной границе раздела фаз строить нерегулярную сетку в жидкой и твердой фазе. Неявная разностная схема строится методом баланса,

причем ближайšie к границе раздела фаз ячейки сетки в жидкой фазе являются треугольниками, а все остальные клетки - четырехугольниками. При переходе на новый временной слой определяется новое положение границы, строится новая сетка, производится переинтерполяция и т. д. Развитию вышеуказанного подхода посвящена работа [60]. Для получения сеточных уравнений могут использоваться и деформируемые конечные элементы. Такой подход применяется, например, в работе [61].

4.3. Методы локальной адаптации

Здесь отдельно отметим работы, в которых граница раздела фаз выделяется явно и на фиксированной сетке строится аккуратная аппроксимация в приграничных узлах. В работе [62] исследуется влияние на термокапиллярную конвекцию скорости движения внешнего источника при лазерной плавке. При этом основное внимание уделяется аппроксимации на фиксированной сетке в приграничных узлах. Лазерная плавка исследуется и в работах [63,64], в которых используется более простой, но и менее точный алгоритм на основе метода SIMPLE. Предполагается, что около границы фазового перехода скорости малы и поэтому конвекция рассчитывается только в жидких ячейках, а в жидко-твердых ее пренебрегают. Аналогичный алгоритм использован и в работах [65-67]. Фактически речь идет о простейшей аппроксимации границы фазового перехода ломаной, состоящей из узлов фиксированной сетки.

К выделенному классу методов необходимо отнести и вычислительные алгоритмы, базирующиеся на использовании составных сеток [68]. В этом случае строится подвижная ортогональная сетка вблизи границы фазового перехода. Особенности вычислительной реализации такого подхода обсуждаются в работе [69].

5. РАСЧЕТ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА С УЧЕТОМ КОНВЕКЦИИ. МЕТОДЫ БЕЗ ВЫДЕЛЕНИЯ ГРАНИЦЫ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА

Как уже отмечалось в начале, в большинстве работ по численным методам для решения сопряженных задач тепло- и массопереноса при затвердевании/плавлении с учетом конвекции в жидкой фазе принимается, что можно рассматривать расплав как вязкую несжимаемую жидкость, а течения - как ламинарные. Кроме того считает-

ся, что плотность не меняется при фазовом переходе и поэтому на границе фазового перехода можно ставить простейшие однородные условия для скорости [70]. Рассматриваемые в этом разделе численные методы разобьем на две большие группы в зависимости от используемых математических моделей для описания гидродинамических процессов в жидкой фазе. В первой группе вычислительных алгоритмов используются естественные переменные "скорость, давление", во второй - переменные "функция тока, вихрь скорости".

В рассматриваемой области прикладного математического моделирования различные специалисты (прежде всего прикладники и математики) подходят с разных сторон к решению одних и тех же задач, используя свою интерпретацию результатов и терминологию. Методы сквозного счета в данной работе рассматриваются с математических позиций, хотя и для описания твердой фазы можно привлекать и чисто физические соображения. Как нам представляется, удобная формализация различных численных методов в данной области может быть достигнута на основе общего подхода к решению задач математической физики в нерегулярных областях, известного как метод фиктивных областей (МФО). МФО предложен для приближенного решения краевых задач для эллиптических уравнений Саульевым еще в 1960г. [71]. Изложение сути метода можно найти в книге [72], общий обзор результатов имеется в работе [73]. Наиболее полное изложение метода фиктивных областей с приложением результатов для численного решения различных классов задач гидродинамики имеется в монографии [74].

5.1. Естественные переменные

Начнем с рассмотрения методов сквозного счета задач динамики расплава при использовании естественных переменных (u, v, P) . В этом случае можно рассматривать в качестве основных два варианта МФО - с продолжением по младшим производным и с продолжением по старшим производным [74]. Отметим, что в литературе по моделированию конвективных течений с фазовыми переходами встречается пока только первый вариант.

Продолжение по младшим производным сводится к следующему. Вместо уравнений (2.14)-(2.15) в нерегулярной и изменяющейся во времени области $G^*(t)$ рассмотрим во всей расчетной области G следующие уравнения:

$$\begin{aligned} \frac{\partial v_\varepsilon}{\partial t} + (v_\varepsilon, \text{grad}) v_\varepsilon = \\ = \frac{1}{\rho} \text{grad } P_\varepsilon + \text{div}(v \text{ grad } v_\varepsilon) - C_\varepsilon v_\varepsilon + S_\varepsilon^V \end{aligned} \quad (5.1)$$

$$\text{div } v_\varepsilon = 0 \quad (x, y) \in G \quad (5.2)$$

Здесь коэффициент продолжения C_ε и правая часть S_ε^V выбираются следующим образом:

$$C_\varepsilon = \begin{cases} 0, & (x, y) \in G^*(l), \\ \varepsilon^{-2}, & (x, y) \in \partial G^*(l). \end{cases} \quad (5.3)$$

$$S_\varepsilon^V = \begin{cases} S^V, & (x, y) \in G^*(l), \\ 0, & (x, y) \in \partial G^*(l). \end{cases} \quad (5.4)$$

где ε достаточно мало. Естественно, что функции C_ε и S_ε^V в конкретных задачах могут выбираться и в несколько другом виде.

Подчеркнем, что вариант метода фиктивных областей (5.1)–(5.4) известен давно, а в работе [75] дано обоснование данного подхода. А именно, для стационарных и нестационарных задач гидродинамики вязкой несжимаемой жидкости получена оценка близости приближенного v_ε и точного v решений вида

$$\| v_\varepsilon - v \| \leq \text{const } \varepsilon^{1/2} \quad (5.5)$$

в соответствующий нормах.

В ряде более поздних работ такой подход получил название "модель пористой среды". Член $C_\varepsilon v_\varepsilon$ в уравнении (5.1) может интерпретироваться как сила сопротивления движению жидкости в пористой среде. Как известно, при пренебрежении инерционными членами уравнение Дарси-Буссинеска для пористой среды имеет вид

$$v = -\frac{K}{\mu} \text{grad } P \quad (5.6)$$

Объединяя уравнения (5.6) и (2.14) и продолжая коэффициент K нулем в жидкой фазе и очень большим числом в твердой фазе, можно получить одно уравнения типа (5.1), описывающее рассматриваемые процессы во всей области – жидкой и твердой фазах. Аналогичное описание может использоваться и для двухфазной зоны.

Подход "пористой среды" изложен детально в работах [76-78], где он сочетается с энтальпийной формулировкой для уравнения энергии и используется для изучения затвердевания чистого материала в каверне. Этот же подход в работе [79] положен в основу исследования затвердевания сплавов - т.е. при наличии двухфазной зоны. В дальнейшем указанный подход использован этими авторами и их коллегами для изучения ряда конкретных процессов. В работе [80] численно изучались ламинарные нестационарные течения чистого материала и образование корки в охлаждаемых трубах. В работе [81] рассчитывается плавление чистого галлия в подогреваемой сбоку каверне и приводится сравнение с экспериментальными данными. В работе [82] численно исследуется затвердевание чистого олова (pure tin solidification). В работе [83] наряду с естественной конвекцией в жидкой фазе рассмотрена и концентрационная.

Наряду с изучением конкретных процессов авторы вышеперечисленных работ работали и над усовершенствованием численного алгоритма. Особое внимание уделялось определению эффективного коэффициента проницаемости K (уравнение (5.6)) в пористой среде и его продолжению в твердую фазу. В работе [84] демонстрируется существенное влияние способа определения K на результаты расчетов и предлагается более удачный, по мнению авторов, подход к его определению по сравнению с предыдущими работами авторов. Дальнейшему изучению возможностей определения этого коэффициента посвящена работа [85]. В этой работе определение коэффициента проницаемости K базируется на имеющейся информации о природе двухфазной зоны. Из последних работ в этом направлении отметим [86,87]. Заметим также, что развитие численного алгоритма в вышеуказанной работе [84] опирается на предыдущие работы Vennon и Inghora.

Повышению точности численных расчет в посвящены модификации в методике расчета конвективно-диффузионных задач с фазовым переходом, сделанные Shyu и Chen. В работе [88] при рассмотрении стационарного тепломассообмена в подогреваемой сбоку каверне с учетом фазового перехода используются неортогональные координаты и адаптивные сетки. При этом, как и в отмеченных выше работах в ней используется модель пористой среды. Интересным является одновременное использование декартовых и криволинейных компонент скорости. В общем виде используемые безразмерные уравнения

записываются в следующем виде:

$$\frac{\partial U}{\partial \xi} + \frac{\partial V}{\partial \eta} = 0, \quad (5.7)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{J} \frac{\partial(Uw)}{\partial \xi} + \frac{1}{J} \frac{\partial(Vw)}{\partial \eta} &= \frac{Pr}{J} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{J} \left(q_1 \frac{\partial u}{\partial \xi} - q_2 \frac{\partial u}{\partial \eta} \right) \right) + \right. \\ &+ \left. \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{1}{J} \left(-q_2 \frac{\partial u}{\partial \xi} + q_3 \frac{\partial u}{\partial \eta} \right) \right) \right] - \frac{1}{J} \left[y_\eta \frac{\partial p}{\partial \xi} - y_\xi \frac{\partial p}{\partial \eta} \right] + Au, \end{aligned} \quad (5.8)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{J} \frac{\partial(Uv)}{\partial \xi} + \frac{1}{J} \frac{\partial(Vv)}{\partial \eta} &= \frac{Pr}{J} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{J} \left(q_1 \frac{\partial v}{\partial \xi} - q_2 \frac{\partial v}{\partial \eta} \right) \right) + \right. \\ &+ \left. \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{1}{J} \left(-q_2 \frac{\partial v}{\partial \xi} + q_3 \frac{\partial v}{\partial \eta} \right) \right) \right] - \frac{1}{J} \left[x_\xi \frac{\partial p}{\partial \eta} - x_\eta \frac{\partial p}{\partial \xi} \right] + Av + \\ &+ Ra \cdot Pr \cdot \varphi, \end{aligned} \quad (5.9)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{J} \frac{\partial(U\varphi)}{\partial \xi} + \frac{1}{J} \frac{\partial(V\varphi)}{\partial \eta} &= \frac{1}{J} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{J} \left(q_1 \frac{\partial \varphi}{\partial \xi} - q_2 \frac{\partial \varphi}{\partial \eta} \right) \right) + \right. \\ &+ \left. \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{1}{J} \left(-q_2 \frac{\partial \varphi}{\partial \xi} + q_3 \frac{\partial \varphi}{\partial \eta} \right) \right) \right] - \\ &- \frac{1}{J \cdot St} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} (U \cdot \Delta H) + \frac{\partial}{\partial \eta} (V \cdot \Delta H) \right] \end{aligned} \quad (5.10)$$

где:

$$U = uy_\eta - vx_\eta, \quad (5.11)$$

$$V = vx_\xi - uy_\xi, \quad (5.12)$$

$$q_1 = x_\eta^2 + y_\eta^2, \quad (5.13)$$

$$q_2 = x_\xi x_\eta + y_\xi y_\eta, \quad (5.14)$$

$$q_3 = x_\xi^2 + y_\xi^2, \quad (5.15)$$

$$J = x_\xi y_\eta - x_\eta y_\xi. \quad (5.16)$$

Отметим, что усовершенствования численной методики в этой работе относятся к расчету гидродинамики, в то время как используется простейшая линейная зависимость объемной доли жидкой фазы

от температуры для двухфазной зоны. Использование неортогональных координат и адаптивных сеток позволяет более аккуратно рассчитывать тепло- и массообмен при больших числах Грасгофа. В этой и в последующих работах этих авторов [89,90] проведено многопараметрическое исследование безразмерной системы (5.7)-(5.16) при нормальной и микрогравитации с учетом естественной и термокапиллярной конвекции.

Рассмотренные в этом пункте работы показывают, что предложенные в разное время разными авторами подходы к решению конвективно-диффузионных задач плавления/затвердевания, основанные на использовании модели пористой среды, с точки зрения вычислительной и прикладной математики могут быть рассмотрены как вариант МФО с продолжением по младшим производным.

5.2. Переменные функция тока - вихрь скорости

При интерпретации имеющихся вариантов метода фиктивных областей для уравнения для функции тока (уравнение четвертого порядка) можно в качестве основных выделить (см. [74]) три варианта МФО. Таковыми являются вариант с продолжением по младшим производным, с продолжением коэффициентов при вторых производных и с продолжением коэффициентов при старших (четвертых) производных. В обсуждаемой литературе по моделированию процессов тепло и массопереноса с фазовыми превращениями пока известны только работы с продолжением по младшим и по вторым производным.

В варианте с продолжением по младшим коэффициентам вместо уравнения (2.18) в нерегулярной области $G^*(l)$ решается следующее уравнение во всей области G :

$$\frac{\partial \Delta \psi_\varepsilon}{\partial t} + (V_\varepsilon, \text{grad}) \Delta \psi_\varepsilon = \text{div}(v \text{ grad } \Delta \psi_\varepsilon) - C_\varepsilon \psi_\varepsilon + S_\varepsilon^\psi \quad (5.17)$$

где функции C_ε и S_ε^ψ определяются как и в (5.3), (5.4). Этот подход предложен в работах [91] и [92] на примере тестовой задачи о затвердевании в каверне с горячей и холодной вертикальными стенками. В работе [93] вышеуказанный метод использован для расчета затвердевания металла в изложнице.

В качестве варианта метода фиктивных областей с продолжением

ем по вторым производным можно рассматривать метод, предложенный в работе [94]. Эти варианты тесно связаны с вариантами МФО при продолжении по младшим коэффициентам (модель "пористой среды"). В этом случае вместо уравнения (5.16) рассматривается уравнение вида

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Delta \psi_{\varepsilon}}{\partial t} + (V_{\varepsilon}, \text{grad}) \Delta \psi_{\varepsilon} = \\ = \text{div}(v \text{ grad } \Delta \psi_{\varepsilon} + C_{\varepsilon} \text{ grad } \psi_{\varepsilon}) + S_{\varepsilon}^{\psi} \end{aligned} \quad (5.18)$$

Аналогичный вариант метода фиктивных областей можно применять и при моделировании гидродинамических течений в многосвязных областях.

5.3. Моделирование течений в двухфазной зоне

Математические модели процессов тепло- и массопереноса в двухфазной зоне могут основываться на различных предположениях [95]. Здесь основные усилия направлены на описание процессов в двухфазной зоне и на учет взаимодействия между различными зонами. Начиная с общих уравнений для каждой из фаз в двухфазной зоне авторы усредняют их по пространству и получают единые непрерывные уравнения для бинарной смеси. В общем плане следует выделить модель с переменной вязкостью, когда двухфазная зона рассматривается как жидкость с твердыми включениями. Вторая модель базируется на предположении дендритной структуры двухфазной зоны и использовании модели пористой среды.

При рассмотрении двухфазной зоны как пористой среды [96] можно записать уравнения движения в виде (5.1)-(5.2), при этом вместо (5.3)-(5.4) коэффициент продолжения C_{ε} и правая часть определяются из физических соображений, зависящих от свойств рассматриваемой среды. Разработанная модель была протестирована различными авторами в сравнении с экспериментальными данными и использована для расчета ряда конкретных процессов.

В работе [97] рассматривается затвердевание бинарного сплава в прямоугольной каверне и проводится сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными. В работе [98] подробно обсуждается методология численного решения системы дифференци-

альных уравнений в частных производных, на которой основывается вышеуказанная модель. Работа [99] посвящена описанию модели и численного алгоритма и его использованию для изучения плавления бинарной смеси $\text{NH}_4\text{Cl}-\text{H}_2\text{O}$ с учетом не только естественной конвекции, но также и конвекции Марангони, вызванной силами поверхностного натяжения. Широкомасштабное сравнение результатов расчета по этой модели с экспериментальными данными приводится в работе [100]. В работе [101] численно исследуется затвердевание бинарного раствора Na_2CO_3 в горизонтальном цилиндрическом кольцевом канале и численные результаты сравниваются с экспериментальными. Из этой серии работ отметим и интересное приложение вышеизложенного алгоритма для моделирования фазовых переходов в геологии [102]. Аналогичная модель пористой среды для решения конвективно-диффузионных задач плавления использована и в работе Леончука с соавторами [103]. Для повышения точности расчетов на фиксированной прямоугольной сетке авторами проводится корректировка коэффициентов в уравнении теплопроводности вблизи фронта плавления, использующая приближенные аналитические значения для толщины теплового пограничного слоя и коэффициента теплоотдачи.

Дальнейшему совершенствованию математической модели тепло-массообмена при затвердевании сплавов и солей посвящена работа [104]. В отличие от предыдущих работ, указанных в этой главе, здесь рассматривается и пространственное изменение доли жидкой фазы в двухфазной зоне. При этом снова базовое предположение - это модель пористой среды и единая форма уравнений, похожая на (5.1)-(5.2) для всех трех фаз - жидкой, двухфазной и твердой. Расчеты авторов показывают, что это существенно меняет вычисляемые поля скоростей и температуры.

6. ВЫВОДЫ

В приближенном решении задач тепло- и массопереноса при фазовых превращениях твердое тело/жидкость накоплен значительный расчетно-теоретический опыт. Можно сказать, что расчеты затвердевания/плавления в двумерной постановке с учетом конвективных движений жидкости в расплаве являются в настоящее время рядовыми и ведутся в нескольких научных группах.

Математические модели базируются на использовании обычного приближения Буссинеска для слабонесжимаемой жидкости. Уточнение

математических моделей должно проводиться в рамках использования более адекватных гидродинамических моделей. На повестке дня стоит разработка моделей с точным учетом процессов на границе фазового перехода. В этой связи отметим прежде всего необходимость исследования изменения плотности при фазовом переходе, когда используемое приближение о неподвижности расплава вблизи границы фазового перехода неверно. Следует ожидать новых результатов по разработке моделей двухфазной зоны.

В настоящее время при разработке алгоритмов приближенного описания динамики расплава сложилось два направления. Как и при моделировании чисто тепловых проблем, используются вычислительные алгоритмы с выделением границы фазового перехода и без ее выделения. Методы сквозного счета привлекают своей алгоритмической простотой, но, вообще говоря, уступают методам с выделением и отслеживанием свободной границы. Различные предложенные варианты методов сквозного счета интерпретируются с единых позиций вычислительной математики как варианты метода фиктивных областей. Нарботанные математические результаты в этом направлении используются незначительно.

Представляется недостаточной и теоретическая проработка вычислительных алгоритмов. Практически отсутствуют работы по обоснованию используемых вычислительных алгоритмов (сходимость, устойчивость). Работы по моделированию тепло- и массопереноса с фазовыми превращениями не отражают достигнутый уровень развития вычислительной математики, теории численных методов решения задач математической физики. Основное внимание уделяется рассмотрению достаточно узкого класса прикладных проблем, проведению методических расчетов, эмпирическому улучшению качеств вычислительных алгоритмов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Флемингс М. Процессы затвердевания. М.: Мир, 1977.
2. Ефимов В.А. Разливка и кристаллизация стали. М.: Metallургия, 1976.
3. Basu B., Date A.W. Numerical modelling of melting and solidification problems - A review. - Sadhana, 1988, v.13, Pt 3, pp.169-213.
4. Voller V.R., Swaminathan C.R., Thomas B.G. Fixed grid techni-

- ques for phase change problems: A review. - *Int. J. Numer. Methods Engng.*, 1990, v.30, N 4, pp.875-898.
5. Viskanta R. Mathematical modeling of transport processes during solidification of binary systems. - *JSME Int. J., Series II*, 1990, v.33, N 3, pp.409-423.
 6. Kannan K.S., Madhusudana K., Venkataramani R., Ganesh N., Prabhakar O. Modelling of solidification processes. - *Indian J. Technology*, 1990, v.28, N 6/7/8, pp.460-474.
 7. Роуч П. Вычислительная гидродинамика. М.: Мир, 1980.
 8. Андерсон Д., Таннехилл Дж., Плетчер Р. Вычислительная гидродинамика и теплообмен. М.: Мир, 1990.
 9. Флетчер К. Вычислительные методы в динамике жидкостей. М.: Мир, 1991.
 10. Ши Д. Численные методы в задачах теплообмена. М.: Мир, 1988.
 11. Патанкар С. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости. М.: Энергоатомиздат, 1984.
 12. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Гидродинамика. М.: Наука, 1986.
 13. Тихонов А. Н., Самарский А. А. Уравнения математической физики. М.: Наука, 1972.
 14. Олейник О. А. Об одном методе решения общей задачи Стефана. - Докл. АН СССР, 1960, т.135, N 5, с.1054-1057.
 15. Рубинштейн Л. И. Проблема Стефана. Рига: Зинатне, 1967.
 16. Мажукин В. И., Повещенко Ю. А., Попов С. Б., Попов Ю. П. Об однородных алгоритмах численного решения задачи Стефана. /Препринт ИПМ им. М. В. Келдыша АН СССР N 122. М., 1985.
 17. Пейре Р., Тейлор Т. Д. Вычислительные методы в задачах механики жидкости. Л.: Гидрометеиздат, 1986.
 18. Пасконов В. М., Полежаев В. И., Чудов Л. А. Численное моделирование процессов тепло- и массообмена. М.: Наука, 1984.
 19. Полубаринова-Кочина П. Я. Теория движения грунтовых вод. М.: Наука, 1977.
 20. Crank J. Free and moving boundary problems. Clarendon Press: Oxford, 1987.
 21. Мейрманов А. М. Задача Стефана. Новосибирск: Наука, 1986.
 22. Фридман А. Вариационные принципы и задачи со свободными границами. М.: Мир, 1990.
 23. Карлслоу Г., Егер Д. Теплопроводность твердых тел. М.: Наука, 1964.
 24. Вабищевич П. Н. Численные методы решения задач со свободной

- границей. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1987.
25. Douglas J., Gallie G.M. On the numerical integration of a parabolic differential equations subject to a moving boundary condition. - Duke Math. J., 1955, v.22, N 4, pp. 557-572.
 26. Васильев Ф.П., Успенский А.Б. Разностный метод решения двухфазной задачи Стефана. - ЖВМ и МФ, 1963, т.3, N 5, с. 874-886.
 27. Будаков Б.М., Гольдман Н.Л., Успенский А.Б. Разностные схемы с выпрямлением фронтов для решения многофронтовых задач типа Стефана. - Докл. АН СССР, 1966, т.167, N 4, с. 735-738.
 28. Будаков Б.М., Успенский А.Б. Разностный метод с выпрямлением фронтов для решения задач типа Стефана. - ЖВМ и МФ, 1969, т.9, N 6, с. 1299-1315.
 29. Дарьин Н.А., Мажукин В.И. Математическое моделирование нестационарных двумерных краевых задач на сетках с динамической адаптацией. - Математическое моделирование, 1989, т.1, N 3, с. 29-43.
 30. Вабищевич П.Н., Вабищевич Т.Н. Об одном методе численного решения задачи Стефана. - Вестн. Моск. ун-та. Вычисл. матем. и киберн., 1983, N 4, с. 17-22.
 31. Вабищевич П.Н., Вабищевич Т.Н. Численное решение квазистационарной осесимметричной задачи Стефана. - ИФЖ, 1984, т.46, N 3, с. 506-512.
 32. Никитенко Н.И. Исследование процессов тепло- и массообмена методом сеток. Киев: Наукова думка, 1978.
 33. Самарский А.А., Моисеенко Б.Д. Экономичная схема сквозного счета для многомерной задачи Стефана. - ЖВМ и МФ, 1965, т.5, N 5, с. 816-827.
 34. Будаков Б.М., Соловьева Е.Н., Успенский А.Б. Разностный метод со сглаживанием коэффициентов для решения задачи Стефана. - ЖВМ и МФ, 1965, т.5, N 5, с. 828-840.
 35. Shamsundar N., Sparrow E.M. Analysis of multidimensional conduction phase change via the enthalpy model. - ASME J. Heat Transfer, 1975, v.97, pp. 333-340.
 36. Thompson J.F., Warsi Z.U.A., Mastin C.W. Numerical grid generation: foundations and applications. Elsevier: New York, 1985.
 37. Thompson J.F., Warsi Z.U.A., Mastin C.W. Boundary-fitted

- coordinate systems for numerical solution of partial differential equations. A review. - J. Comput. Phys., 1982, v.47, N 1, pp.1-108.
38. Годунов С.К., Забродин А.В., Иванов М.Я. и др. Численное решение многомерных задач газовой динамики. М.: Наука, 1976.
 39. Saitoh T., Hirose K. High Rayleigh number solutions to problems of latent heat thermal energy storage in a horizontal cylinder capsule. - ASME J. Heat Transfer, 1982, v.104, N 3, pp.545-553.
 40. Riger H. et al. Heat transfer during melting inside a horizontal tube. - ASME J. Heat Transfer, 1983, v.105, N 2, pp.226-234.
 41. Sasaki A., Aiba S., Fukusako S. Numerical study on freezing heat transfer in water-saturated porous media. - Numer. Heat Transfer, Pt A, 1990, v.18, N 1, pp.17-32.
 42. Ramachandran N., Gupta J.P., Jaluria Y. Thermal and fluid flow effects during solidification in a rectangular enclosure. - Int. J. Heat Mass Transfer, 1982, v.25, N 2, pp.187-194.
 43. Жеребятъев И.В., Шепеленко Т.Ф. Численный расчет конвективного движения вязкой несжимаемой жидкости в области с подвижными границами. - В кн.: Математическое моделирование нестационарных процессов. Алма-Ата, 1982, с.11-17.
 44. Самарский А.А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1983.
 45. Самарский А.А., Николаев Е.С. Методы решения сеточных уравнений. М.: Наука, 1978.
 46. Mitchel A.R., Griffiths D.F. The difference method in partial differential equations. Wiley: New York, 1980.
 47. Хейгеман Л., Янг Д. Прикладные итерационные методы. М.: Мир, 1986.
 48. Gau C., Viskanta R. Melting and solidification of a pure metal on a vertical wall. - ASME J. Heat Transfer, 1986; v.108, pp.174-181.
 49. Wolff F., Viskanta R. Solidification of a pure metal at a vertical wall in the presence of liquid superheat. - Int. J. Heat Mass Transfer, 1988, v.31, N 8, pp.1735-1744.
 50. Ramesh P.S., Torrance K.E. Numerical algorithm for problems involving boiling and natural convection in porous materials. - Numer. Heat Transfer, Pt B, 1990, v.17, N 1,

pp. 1-24.

51. Zhang X., Nguyen T.H., Kahawita R. Melting of ice in a porous medium heated from below. - Int. J. Heat Mass Transfer, 1991, v. 34, N 2, pp. 389-405.
52. Thompson M.E., Szekely J. Density stratification due to counterbuoyant flow along a vertical crystallization front. - Int. J. Heat Mass Transfer, 1989, v. 32, N 6, pp. 1021-1036.
53. Webb B.W., Viskanta R. Analysis of heat transfer during melting of a pure metal from an isothermal vertical wall. - Numer. Heat Transfer, 1986, v. 9, pp. 539-558.
54. Bergman T.L., Webb B.W. Simulation of pure metal melting with buoyancy and surface tension forces in the liquid phase. - Int. J. Heat Mass Transfer, 1990, v. 33, N 1, pp. 139-149.
55. Lan C.W., Kou S. Thermocapillary flow and natural convection in a melt column with an unknown melt/solid interface. - Int. J. Numer. Methods Fluids, 1991, v. 12, N 1, pp. 59-80.
56. Lacroix M. Computation of heat transfer during melting of a pure substance from an isothermal wall. - Numer. Heat Transfer, Pt B, 1989, v. 15, pp. 191-210.
57. Lacroix M. Analysis of mixed convection melting of a pure metal. - Numer. Heat Transfer, Pt A, 1990, v. 17, pp. 401-416.
58. Lacroix M. Effects of buoyancy and surface tension forces on the melting of a metal. - Numer. Heat Transfer, Pt A, 1991, v. 19, pp. 101-115.
59. Бакирова О.И., Фрязинов И.В. Метод совместного решения задачи Стефана и уравнений Навье-Стокса. /Препринт ИТМ им. М.В. Келдыша АН СССР N 103, М., 1981.
60. Бакирова О.И. О некоторых методах решения задачи Стефана. - Дифференц. уравнения, 1983, т. 19, N 3, с. 491-500.
61. Albert M.R., O'Neill K. Transient two-dimensional phase change with convection using deforming finite elements. - In: Computer techniques in heat transfer. (Eds R.W. Lewis, K. Morgan, J.A. Johnson, W.R. Smith). Pineridge Press: Swansea, 1985, v. 1.
62. Chen J.C., Huang Y.C. Thermocapillary flows of surface melting due to a moving heat flux. - Int. J. Heat Mass Transfer, 1991, v. 34, N 3, pp. 663-671.
63. Basu B., Date A.W. Numerical study of steady state and tran-

- sient laser melting problems-I. Characteristics of flow field and heat transfer. - Int. J. Heat Mass Transfer, 1990, v.33, N 6, pp.1149-1163.
64. Basu B., Date A.W. Numerical study of steady state and transient laser melting problems-II. Effect of the process parameters. - Int. J. Heat Mass Transfer, 1990, v. 33, N 6, pp.1165-1175.
65. Ishiguro H., Ohyama K., Nariai H., Teramoto T., Akai M. Numerical analysis of buoyancy and Marangoni convection in melted zone of metals under high power laser irradiation. - J. Nuclear Sci. Technol., 1990, v.27, N 12; pp.1115-1125.
66. Schneider G.E. Computation of heat transfer with solid/liquid phase change including free convection. - AIAA J. Thermophys. Heat Transfer, 1987, v.1, N 2, pp.136-145.
67. Schneider G.E. Computation of solid/liquid phase change including free convection - comparison with data. - AIAA J. Thermophys. Heat Transfer, 1990, v.4, N 3, pp.366-374.
68. Вабищевич П. Н. Адаптивные сетки составного типа в задачах математической физики. - ЖВМ и МФ, 1989, т.29, N 6, с. 902-914.
69. Вабищевич П. Н. Численное решение эллиптических краевых задач на составных сетках. - Математическое моделирование, 1991, т.3, N 8, с.112-122.
70. Франк-Каменецкий Д. А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. М.: Наука, 1967.
71. Саульев В. К. Об одном методе автоматизации решения краевых задач на быстродействующих вычислительных машинах. - Докл. АН СССР, 1962, т.144, N 3, с.497-500.
72. Марчук Г. И. Методы вычислительной математики. М.: Наука, 1980.
73. Konovalov A.N. The fictitious regions method in problems of mathematical physics. - In: Computing methods in applied sciences and engineering. (Eds R. Glowinski, J. I. Lions). North-Holland, 1980, pp.29-40.
74. Вабищевич П. Н. Метод фиктивных областей в задачах математической физики. М.: Изд-во Моск. Ун-та, 1991.
75. Бугров А. Н., Смагулов Ш. Метод фиктивных областей в краевых задачах для уравнений Навье-Стокса. - В кн.: Математические модели течений жидкости. Новосибирск, 1978, с.79-90.

76. Voller V.R., Cross M., Markatos N.C. An enthalpy method for convection/diffusion phase change. - *Int. J. Numer. Methods Engng.*, 1987, v.24, pp.271-284.
77. Voller V.R., Markatos N., Cross M. Techniques for accounting for the moving interface in convection/diffusion phase change. - In: *Numerical methods in thermal problems.* (Eds R.W.Lewis, K.Morgan). Pineridge Press: Swansea, 1985, v.4, pp.595-609.
78. Voller V.R., Markatos N.C., Cross M. Solidification in convection and diffusion. - In: *Numerical simulations of fluid flow and heat/mass transfer processes.* (Eds N.Markatos, D.Tatchell, M.Cross and N.Rhodes). Springer: Berlin, 1986, pp.425-432.
79. Voller V.R., Prakash C. A fixed grid numerical modelling methodology for convection-diffusion mushy region phase-change problems. - *Int. J. Heat Mass Transfer*, 1987, v.30, N 8, pp.1709-1719.
80. Hibbert S.E., Markatos N.C., Voller V.R. Computer simulation of moving-interface, convective, phase-change processes. - *Int. J. Heat Mass Transfer*, 1988, v.31, N 9, pp.1785-1795.
81. Brent A.D., Voller V.R., Reid K.J. Enthalpy-porosity technique for modeling convection-diffusion phase change: application to the melting of a pure metal. - *Numer. Heat Transfer*, 1988, v.13, N 3, pp.297-318.
82. Brent A.D. Numerical simulation of tin solidification under the influence of natural convection in a thick walled annular crucible. - *Int. Comm. Heat Mass Transfer*, 1989, v.16, N 5, pp.693-701.
83. Voller V.R., Brent A.D., Prakash C. The modelling of heat, mass and solute transport in solidification systems. - *Int. J. Heat Mass Transfer*, 1989, v.32, pp.1719-1731.
84. Prakash C., Voller V.R. On the numerical solution of continuum mixture model equations describing binary solid-liquid phase change. - *Numer. Heat Transfer, Pt B*, 1989, v.15, pp.171-189.
85. Voller V.R., Brent A.D., Prakash C. Modelling the mushy region in a binary alloy. - *Appl. Math. Modelling*, 1990, v.14, pp.320-326.
86. Swaminathan C.R., Voller V.R. A general enthalpy method for

- modelling solidification processes. - Research Report of the Supercomputer Institute at the University of Minnesota, UMSI 91/167.
87. Voller V.R., Swaminathan C.R. A general source-based method for solidification phase change. - Numer. Heat Transfer, Pt B, 1991, v.19, pp.175-190.
 88. Shyy W., Chen M.-H. Steady-state natural convection with phase change. - Int. J. Heat Mass Transfer, 1990, v.33, N 11, pp.2545-2563.
 89. Shyy W., Chen M.-H. Effect of Prandtl number on buoyancy-induced transport processes with and without solidification. - Int. J. Heat Mass Transfer, 1990, v.33, N 11, pp.2565-2578.
 90. Shyy W., Chen M.-H. Interaction of thermocapillary and natural convection flows during solidification: normal and reduced gravity conditions. - J. Crystal Growth, 1991, v.108, N 1/2, pp.247-261.
 91. Вабищевич П.Н., Илиев О.П. Численное решение сопряженных задач тепло- и массопереноса с учетом фазового перехода. - Дифференц. уравнения, 1987, т.23, N 7, с.1127-1132.
 92. Изтелеуов М.И., Смагулов Ш. Приближенный метод решения стационарной сопряженной задачи тепло- и массообмена. - Дифференц. уравнения, 1989, т.25, N 7, с.1227-1232.
 93. Vabishchevich P.N., Iliev O.P. Numerical investigation of heat and mass transfer during the crystallization of metal in a mould. - Comm. Appl. Num. Meth., 1989, v.5, N 5, pp.515-526.
 94. Raw W.Y., Lee S.L. Application of weighting function scheme on convection-conduction phase-change problems. - Int. J. Heat Mass transfer, 1991, v.34, N 6, pp.1503-1513.
 95. Ni J., Beckermann C. A volume-averaged two-phase model for transport phenomena during solidification. - Metallurgical Transactions B, 1991, v.22B, pp.349-361.
 96. Bennon W.D., Incropera F.P. A continuum model for momentum, heat and species transport in binary solid-liquid phase change systems-I. Model formulation. - Int. J. Heat Mass Transfer, 1987, v.30, N 10, pp.2161-2170.
 97. Bennon W.D., Incropera F.P. A continuum model for momentum, heat and species transport in binary solid-liquid phase change systems-II. Application to solidification in a

- rectangular cavity. - Int. J. Heat Mass Transfer, 1987, v. 30, N 10, pp. 2171-2187.
98. Bennon W.D., Incropera F.P. Numerical analysis of binary solid-liquid phase change using a continuum model - Numer. Heat Transfer, 1988, v. 13, N 3, pp. 277-296.
99. Incropera F.P., Engel A.H.H., Bennon W.D. Numerical analysis of binary solid-liquid phase change with buoyancy and surface tension driven convection. - Numer. Heat Transfer, Pt A, 1989, v. 16, N 4, pp. 407-427.
100. Christenson M.S., Bennon W.D., Incropera F.P. Solidification of an aqueous ammonium chloride solution in a rectangular cavity-II. Comparison of predicted and measured results. - Int. J. Heat Mass Transfer, 1989, v. 32, N 1, pp. 69-79.
101. Neilson D.G., Incropera F.P., Bennon W.D. Numerical simulation of solidification in a horizontal cylindrical annulus charged with an aqueous salt solution. - Int. J. Heat Mass Transfer, 1990, v. 33, N 2, pp. 367-380.
102. Oldenburg C.M., Spera F.J. Numerical modeling of solidification and convection in a viscous pure binary eutectic system. - Int. J. Heat Mass Transfer, 1991, v. 34, N 8, pp. 2107-2121.
103. Леончук М. П., Швецов Ю. Е., Швецова Л. В. Численное моделирование процессов плавления при наличии конвекции. /Препринт ФЭИ N 1932. Обнинск, 1988.
104. Nandapurkar P.J., Poirier D.R., Heinrich J.C. Momentum equations for dendritic solidification. - Numer. Heat Transfer, Pt A, 1991, v. 19, pp. 297-311.

