

Adam Bokota

DYSKUSJA WARUNKÓW CIĄGŁOŚCI NA POWIERZCHNI KRZEPNIĘCIA

W opisie procesu krzepnięcia ważną rolę odgrywa modelowanie zjawisk zachodzących na powierzchni krzepnięcia i w jej otoczeniu. Zjawiska te są bowiem bardzo złożone i należy ocenić, które z nich można pominąć, aby nie uszczuplić zbytnio opisu zjawiska, otrzymując przy tym stosunkowo prosty model.

W literaturze dotyczącej opisów zjawisk zachodzących w procesie krzepnięcia modele warunków ciągłości na powierzchni krzepnięcia wynikają z rozważań termodynamicznych dla ciała dwufazowego zawierającego pewną powierzchnię nieciągłości (powierzchnię krzepnięcia) [1, 3, 6]. Pomija się w nich niektóre aspekty wnoszone przez warunki geometryczne i kinematyczne oraz człony wynikające z przyspieszeń powierzchni krzepnięcia i jej napięcia powierzchniowego.

W pracy wprowadza się uzupełnienie rozważań dotyczących powierzchni krzepnięcia w nowe elementy, które wydają się istotne w późniejszym modelowaniu warunków ciągłości dla tej powierzchni. Omówmy, dla przypomnienia, podstawowe zjawiska zachodzące podczas przebiegu procesu krzepnięcia. Uwzględnienie lub pominięcie występowania niektórych z tych zjawisk powoduje przyjęcie odpowiednich założeń dla fizycznego modelu procesu krzepnięcia.

Zajmujemy się badaniem ruchu powierzchni przemiany fazowej (umownej, charakteryzującej się gładkością powierzchni rozdziału faz) przy pominięciu zjawisk związanych z powstawaniem i narastaniem kryształów, zachodzących w jej otoczeniu. Nie rozważamy warstwy przejściowej, bę-

dącej granicą rozdziału między kryształem (ciałem stałym) a roztworem.

Zjawiska termodynamiczne, w szczególności zmiany pola temperatury i koncentracji są istotne przy przechodzeniu materiału z fazy ciekłej w fazę stałą (lub na odwrót) i nie można ich pominąć w analizie. Interesują nas również naprężenia wynikłe z obciążenia powierzchni związanego z występowaniem zjawiska transportu masy, co zachodzi wówczas, gdy faza ciekła i stała ośrodka krystalizującego mają różną gęstość masy oraz następuje segregacja składników na powierzchni krzepnięcia w przypadku ośrodków wieloskładnikowych (stopów) [1, 5, 7]. W przypadku krzepnięcia najczęściej temperatura fazy ciekłej jest bliska temperatury krzepnięcia, przy czym wielkość odchylenia od temperatury krzepnięcia jest uwarunkowana wielkością przechłodzenia bądź to termicznego, bądź stężeniowego. Przyjmując, że temperatura na froncie krzepnięcia jest równa równowagowej temperaturze krystalizacji, wykluczamy powstawanie skryształizowanej fazy stałej w stadium chłodzenia fazy ciekłej [1, 8].

W celu pokazania roli i znaczenia geometrycznych i kinematycznych warunków zgodności na powierzchni krzepnięcia przypomnimy te warunki dla powierzchni nieciągłości śledząc rozważania zawarte w pracy [3]. Rozważania te dotyczą propagacji fal słabej i silnej nieciągłości i oparte są na metodzie teorii powierzchni osobliwych. Podobne zagadnienia omawiane są również w pracach [5, 6, 7, 10, 14].

Interesować nas będzie przede wszystkim fala silnej nieciągłości, gdyż traktując powierzchnię krzepnięcia jako powierzchnię osobliwą, spełnia ona warunki fali silnej nieciągłości dla funkcji odgrywających pierwszoplanową rolę w opisie procesu krzepnięcia. Myślimy tu o funkcji temperatur, funkcji stężeń i funkcji przemieszczeń.

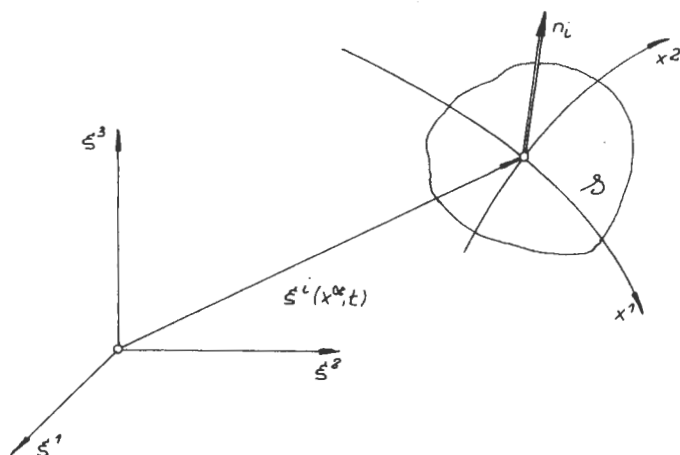
Fala według teorii powierzchni osobliwych uważana jest za zaburzenie dowolnej wielkości, ściśle związane z pewną powierzchnią. Znaczenie tej koncepcji polega na fakcie, że jest ona ścisła pod względem matematycznym i wolna od jakichkolwiek założeń upraszczających. Podstawy tej teorii, ze szczególnym omówieniem aspektów matematycznych zawiera praca [12].

Rozważmy zatem ruchomą powierzchnię określoną przez jedno z równań [2, 3]

$$\xi^i = \xi^i(x^\alpha, t), \quad (1)$$

$$t = \Psi(\xi^i), \quad (2)$$

gdzie x^α ($\alpha = 1, 2$) parametryzują powierzchnię \mathcal{S} , t oznacza czas, a ξ^i ($i = 1, 2, 3$) są współrzędnymi kartezjańskiego układu odniesienia.



Rys. 1. Parametryzacja rozważanej powierzchni

Zakłada się, że ξ^i są funkcjami ciągłymi i różniczkowalnymi parametrów powierzchniowych oraz że powierzchnia jest regularna, tzn. macierz $\xi^i_{,\alpha}$ jest drugiego rzędu i warunek ten oznacza istnienie płaszczyzny stycznej w każdym punkcie powierzchni $\mathcal{S}(t)$ w każdej chwili t .

Tensor metryczny powierzchni \mathcal{S} ma współrzędne

$$a_{\alpha\beta} = \xi^i_{,\alpha} \xi^j_{,\beta} g_{ij}, \quad a_{\alpha\beta} a^{\alpha\beta} = \delta_{\alpha}^{\alpha}, \quad (3)$$

przy czym g_{ij} są współrzędnymi tensora metrycznego układu współrzędnych ξ^i . Wektory $\xi^i_{,\alpha}$, $\xi^j_{,\beta}$ są styczne do powierzchni \mathcal{S} . Jeżeli przez n_i oznaczymy współrzędne wektora jednostkowego normalnego do powierzchni \mathcal{S} , to zachodzą związki [2, 12].

$$n_i = \frac{\Psi_{,i}}{\sqrt{\Psi_{,k} \Psi_{,k}}}, \quad \Psi_{,i} = \frac{\partial \Psi}{\partial \xi^i}, \quad (4)$$

$$n_i \xi^i_{,\alpha} = 0, \quad \xi^i_{,\alpha} = \frac{\partial \xi^i}{\partial x^\alpha}. \quad (5)$$

Współrzędne tensora krzywizny powierzchni \mathcal{S} zdefiniowane są wzorem

$$b_{\alpha\beta} = -n^i_{,\alpha} \xi^j_{,\beta} g_{ij}, \quad (6)$$

a jej krzywizna główna [3, 5]

$$\Omega = \frac{1}{2} a^{\alpha\beta} b_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} b^{\alpha}_{\alpha}. \quad (7)$$

Prędkość dowolnego punktu powierzchni wynosi

$$v^i = \dot{\xi}^i, \quad \dot{\xi}^i = \frac{\partial \xi^i}{\partial t} \quad (8)$$

i jest oczywiście funkcją parametrów powierzchniowych x^α . Rzut tej prędkości na kierunek normalnej n_i ,

$$w = v^i n_i = \dot{\xi}^i n_i, \quad (9)$$

nazywamy prędkością propagacji powierzchni \mathcal{S} .

Wykorzystując związek

$$\xi^i \psi_{,i} = 1 \quad (10)$$

otrzymujemy wzór na prędkość propagacji w postaci

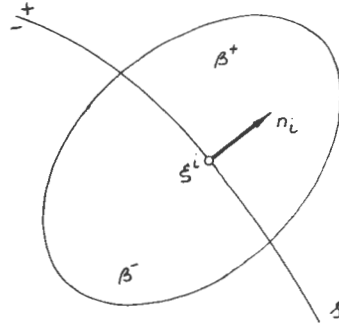
$$w = \frac{1}{\sqrt{\psi_{,i} \psi^i}}, \quad (11)$$

z którego wynika, że nie zależy ona od sposobu parametryzacji powierzchni \mathcal{S} .

Załóżmy, że powierzchnia \mathcal{S} dzieli ciało materialne na dwa podobszary β^+ i β^- i stanowi granicę między nimi. Wektor normalny n_i jest skierowany do podobszaru β^+ . Niech H będzie dowolnym polem (skalaro-

wym, wektorowym, tensorowym), takim że H jest ciągle w każdym punkcie obydwu podobszarów i ma określone granice H^+ i H^- , jeśli ξ^i zbliża się do powierzchni odpowiednio z podobszarów β^+ i β^- . Powierzchnię \mathcal{S} nazywamy powierzchnią osobliwą lub powierzchnią nieciągłości względem pola H , jeżeli skok pola H wzdłuż tej powierzchni jest

$$[[H]] = H^- - H^+ \neq 0. \quad (12)$$



Rys. 2. Obszar podzielony powierzchnią nieciągłości

Oznacza to, że pole H jest na tej powierzchni nieciągłe.

W związku z ruchem ciała β na ruchomej powierzchni nieciągłości muszą być spełnione geometryczne i kinematyczne warunki zgodności. Geometryczne warunki zgodności wiążą skoki pochodnych pola H ze skokami pochodnych normalnych i stycznych oraz z geometrią powierzchni \mathcal{S} . Z kolei kinematyczne warunki zgodności są związkami między pochodnymi skoków pola H po czasie i skokami pochodnych: po normalnej i po czasie oraz prędkością propagacji powierzchni \mathcal{S} . Przez iterację otrzymać można warunki zgodności wyższych rzędów wiążące skoki wyższych pochodnych pola H z jego pochodnymi. Szczegółowe rozważania na ten temat i wyprowadzenia warunków zgodności znaleźć można w monografiach T.Y. Thomasa [11], C. Truesdella i R.A. Toupin [12] oraz Z. Wesołowskiego [13], K. Wilmońskiego [14], W. Kosińskiego [5]. W tym miejscu ograniczymy się tylko do przedstawienia warunków zgodności w postaci gotowych wzorów, które zostaną wykorzystane następnie przy badaniu propagacji powierzchni nieciągłości - powierzchni krępcenia.

Wprowadźmy oznaczenia

$$A = [[H]], \quad B = [[H_{,i}]]n^i, \quad c = [[H_{,ij}]]n^i n^j, \\ A_i = [[H_{,i}]], \quad B_i = [[H_{,ij}]]n^j, \quad A' = [[\dot{H}]], \quad B' = [[\dot{H}_{,i}]]n^i \quad (13)$$

i zapiszmy pochodną przemieszczeniową [3, 5, 12] w postaci

$$\frac{\delta H}{\delta t} = -H_{,\alpha} a^{\alpha\beta} g_{ij} \xi^i \xi^j_{,\beta} + \dot{H}. \quad (14)$$

Przy tych oznaczeniach geometryczny warunek zgodności pierwszego rzędu jest następujący:

$$\llbracket H_{,i} \rrbracket = Bn_i + a^{\alpha\beta} g_{ij} A_{,\alpha} \xi^j_{,\beta} = A_i. \quad (15)$$

Kinematyczny warunek zgodności pierwszego rzędu wyraża się zależnością

$$\llbracket \dot{H} \rrbracket = -Bw + \frac{\delta A}{\delta t}. \quad (16)$$

W szczególnym przypadku, gdy funkcja H jest ciągła na powierzchni $\mathcal{S}(A=0)$, z warunków (15) i (16) otrzymujemy odpowiednio

$$\llbracket H_{,i} \rrbracket = Bn_i, \quad (17)$$

$$\llbracket \dot{H} \rrbracket = -Bw. \quad (18)$$

Powyższe warunki zgodności stanowią wyjściową podstawę analizy własności fal traktowanych jako zaburzenie związane z ruchomą powierzchnią nieciągłości.

Wprowadźmy w tym miejscu za W. Kosińskim [5] następujące definicje: "Powieemy, że powierzchnia \mathcal{S} jest powierzchnią nieciągłości funkcji H albo powierzchnią osobliwą (osobliwości) zerowego rzędu, jeśli funkcja H nie jest ciągła na β , natomiast jest ciągła na każdym ze zbiorów β^- i β^+ razem z ich domknięciem... Powieemy, że powierzchnia \mathcal{S} jest powierzchnią osobliwą (osobliwości) p -tego rzędu ($p \geq 1$) dla funkcji H , jeśli funkcja H jest klasy C_{p-1} na zbiorze β i nie jest klasy C_p , natomiast w każdym z podzbiorów β^- i β^+ (wraz z domknięciem) jest co najmniej p -krotnie różniczkowalna".

Zgodnie z powyższymi definicjami powierzchnia krzepnięcia jest powierzchnią osobliwą zerowego rzędu dla funkcji stężeń (skok stężenia na froncie krzepnięcia) oraz powierzchnią o osobliwości pierwszego rzędu dla funkcji temperatur (skok pochodnych funkcji temperatury na froncie krzepnięcia).

Zalóżmy, że pole H jest polem temperatury T np. w zagadnieniu Stefana. Warunek geometryczny (15) ma zatem postać

$$[[T, i]] = [[T, j]] n_i^j + a^{\alpha\beta} g_{ij} [[T]],_{\alpha} \xi_{i, \beta}^j. \quad (19)$$

Przyjmując, że powierzchnia krzepnięcia jest powierzchnią płaską, mamy

$$[[T, i]] = [[T, n]] n_i + [[T]],_{\beta} \xi_{i, \beta}. \quad (20)$$

Przy założeniu, że na powierzchni krzepnięcia istnieje ciągłość temperatury ($[[T]] = 0$), co poczynione jest w zagadnieniu Stefana, warunek (20) jest spełniony. Warunek kinematyczny (16) przyjmuje tutaj postać

$$[[\dot{T}]] = - [[T, i]] n_i w + \frac{\delta}{\delta t} [[T]], \quad (21)$$

który dla przypadku jednowymiarowego i wykorzystaniu ciągłości temperatury ($[[T]] = 0$) sprowadza się do postaci

$$[[\dot{T}]] + [[T, x]] \frac{d\xi}{dt} = 0. \quad (22)$$

Z rozwiązania zagadnienia Stefana przedstawionego np. w pracy [7] mamy

$$\frac{d\xi}{dt} = \frac{K}{2\sqrt{\tau}} \quad (23)$$

oraz

$$\left. \frac{\partial T_s}{\partial \tau} \right|_{x=\xi} = - B_1 \frac{K}{2\sqrt{\pi a_s} \tau} \exp\left(-\frac{K^2}{4a_s}\right), \quad (24)$$

$$\left. \frac{\partial T_l}{\partial \tau} \right|_{x=\xi} = - B_2 \frac{K}{2\sqrt{\pi a_l} \tau} \exp\left(-\frac{K^2}{4a_l}\right),$$

$$\left. \frac{\partial T_s}{\partial x} \right|_{x=\xi} = B_1 \frac{1}{\sqrt{\pi a_s} \sqrt{\tau}} \exp\left(-\frac{K^2}{4a_s}\right),$$

$$\left. \frac{\partial T_1}{\partial x} \right|_{x=\xi} = B_2 \frac{1}{\sqrt{\pi a_1} \sqrt{\tau}} \exp\left(-\frac{K^2}{4a_1}\right). \quad (25)$$

Rozpisując w (22) skoki oraz podstawiając (23), (24) i (25), jest

$$\begin{aligned} & - B_1 \frac{K}{2\sqrt{\pi a_s} \tau} \exp\left(-\frac{K^2}{4a_s}\right) + B_2 \frac{K}{2\sqrt{\pi a_1} \tau} \exp\left(-\frac{K^2}{4a_1}\right) + \\ & + \left(B_1 \frac{1}{\sqrt{\pi a_s} \sqrt{\tau}} \exp\left(-\frac{K^2}{4a_s}\right) - B_2 \frac{1}{\sqrt{\pi a_1} \sqrt{\tau}} \exp\left(-\frac{K^2}{4a_1}\right) \right) \times \frac{K}{2\sqrt{\tau}} = 0, \quad (26) \end{aligned}$$

co dowodzi tożsamościowego spełnienia warunku kinematycznego (22).

Rozważmy dalej jednowymiarowe zagadnienie segregacji i dyfuzji w procesie krzepnięcia materiału zawierającego domieszkę. Warunkiem ciągłości dla równań różniczkowych dyfuzji wynikającym z warunku zachowania masy na froncie krzepnięcia jest (por. [2, 6])

$$D_s \left. \frac{\partial c_s}{\partial x} \right|_{x=\xi} - D_l \left. \frac{\partial c_l}{\partial x} \right|_{x=\xi} = (c_l(T_0) - c_s(T_0)) \frac{d\xi}{dt}. \quad (27)$$

Ze względu na fakt, że dla funkcji stężeń powierzchnia krzepnięcia jest powierzchnią o osobliwości zerowego rzędu, definiuje się tu współczynnik rozdziału na froncie krzepnięcia jako

$$\alpha(\xi) = \left. \frac{c_s}{c_l} \right|_{x=\xi}. \quad (28)$$

Związek (27) zapiszemy teraz w postaci

$$D_s \left. \frac{\partial c_s}{\partial x} \right|_{x=\xi} - D_l \left. \frac{\partial c_l}{\partial x} \right|_{x=\xi} = c_l \Big|_{x=\xi} (1 - \alpha) \frac{d\xi}{dt}. \quad (29)$$

Warunek kinematyczny (21) przyjmuje tu formę

$$\frac{d}{dt} \llbracket c \rrbracket = \llbracket \dot{c} \rrbracket + \llbracket c, x \rrbracket \frac{d\xi}{dt}, \quad (30)$$

który po rozpisaniu skoków funkcji stężeń zgodnie z (12) i podstawieniu (28) przyjmuje postać

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} (c_1|_{x=\xi} (1 - \alpha)) &= \frac{\partial c_1}{\partial t} \Big|_{x=\xi} - \frac{\partial c_s}{\partial t} \Big|_{x=\xi} + \\ &+ \left(\frac{\partial c_1}{\partial x} \Big|_{x=\xi} - \frac{\partial c_s}{\partial x} \Big|_{x=\xi} \right) \frac{d\xi}{dt}. \end{aligned} \quad (31)$$

Z warunku tego wynika, że w ogólnym przypadku skok funkcji stężeń na powierzchni krzepnięcia nie może być wielkością stałą, lecz

$$\alpha = \alpha(\xi), \quad (32)$$

gdyż w przeciwnym przypadku związek (31) sprowadzałby się do

$$\frac{\partial c_s}{\partial t} \Big|_{x=\xi} - \frac{\partial c_1}{\partial t} \Big|_{x=\xi} = \left(\frac{\partial c_1}{\partial x} \Big|_{x=\xi} - \frac{\partial c_s}{\partial x} \Big|_{x=\xi} \right) \frac{d\xi}{dt} \quad (33)$$

i rozwiązanie zagadnienia segregacji z warunkiem ciągłości (27) nie musi spełniać warunku (33).

Prześledźmy jako przykład rozwiązanie zawarte w pracy [4], w którym zakłada się stałość skoku stężenia ($\alpha = \text{const}$) oraz stałość funkcji w fazie stałej $c_s = c_0$ (rys. 3). Dla takich założeń otrzymano rozwiązanie i funkcja stężeń w cieczy ma postać

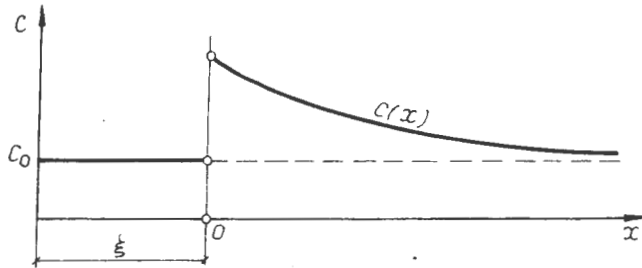
$$c_1(x) = c_0 \left(1 + \frac{1 - \alpha}{\alpha} \exp\left(-\frac{v}{D} x\right) \right). \quad (34)$$

Kinematyczny warunek zgodności (33) dla poczynionych założeń sprowadza się do postaci

$$\frac{\partial c_1}{\partial x} \Big|_{x=\xi} \frac{d\xi}{dt} = - \frac{\partial c_1}{\partial t} \Big|_{x=\xi}. \quad (35)$$

Obliczmy zatem poszczególne pochodne.

$$\frac{\partial c_1}{\partial x} \Big|_{x=\xi} = -c_0 \frac{1 - \alpha}{\alpha} \frac{v}{D} \exp\left(-\frac{v}{D} \xi\right), \quad (36)$$



Rys. 3. Model segregacji na powierzchni krzepnięcia

$$\begin{aligned} \left. \frac{dc}{dt} \right|_{x=\xi} &= -c_0 \frac{1-\alpha}{\alpha} \frac{\xi}{D} \exp\left(-\frac{v}{D}\xi\right) \frac{\partial v}{\partial t} + \\ &+ \frac{1-\alpha}{\alpha} \frac{v}{D} \exp\left(-\frac{v}{D}\xi\right) \frac{d\xi}{dt}. \end{aligned} \quad (36)$$

W przyjętym układzie ruchomym jest

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial c}{\partial x} \right|_{x=0} &= -c_0 \frac{1-\alpha}{\alpha} \frac{v}{D}, \\ \left. \frac{dc}{dt} \right|_{x=0} &= +c_0 \frac{1-\alpha}{\alpha} \frac{v}{D} \frac{d\xi}{dt}, \end{aligned} \quad (37)$$

co dowodzi nie spełnienia związku (35) dla dowolnego skoku funkcji i dowolnej prędkości v .

Jeśli chodzi o równanie ciągłości (27), które przyjmuje tu postać

$$-D \left. \frac{\partial c}{\partial x} \right|_{x=\xi} = c \left. \frac{d\xi}{dt} \right|_{x=\xi}, \quad (38)$$

jest ono również spełnione dla funkcji (34) w przyjętym ruchomym układzie współrzędnych, dla dowolnej prędkości i dowolnej wielkości α , które to wielkości nie są dowolne, gdyż prędkość krzepnięcia determinowana jest przepływem ciepła, wielkość zaś skoku determinowana jest, między innymi, wielkościami współczynników dyfuzji i prędkością narastania.

Dla bardziej złożonych modeli opisujących zjawiska segregacji i dyfuzji rozwiązywanych numerycznie równoległe uwzględnienie warunku ciąg-

łości masy (27) i warunku kinematycznego (30) zapewnia nam zatem zgodność konfiguracji powierzchni rozdziału domieszek i powierzchni determinowanej przepływem ciepła. Dotyczy to zwłaszcza przypadków, gdy zarówno prędkość krzepnięcia, jak i wielkość skoku stężeń na powierzchni krzepnięcia nie są wielkościami ustalonymi.

Literatura

1. B.A. Boley, Time - dependent Solidification of Binary Mixtures, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 21, (1978).
2. A. Bokota, R. Parkitny, Sprzężenia zjawisk cieplnych, dyfuzyjnych i mechanicznych w procesie krzepnięcia, *Krzepnięcie Metali i Stopów*, 6 (1983).
3. R. Dziecielak, Propagacja fal nieciągłości w ośrodku porowatym nasyconym cieczą, *Rozprawy nr 118*, Poznań 1980.
4. E. Fraś, Krystalizacja żeliwa, *Skrypt AGH nr 811*, Kraków 1981.
5. W. Kosiński, Wstęp do teorii osobliwości pola i analizy fal, *Warszawa-Poznań 1981*.
6. S. Jura, B. Mochnacki, J. Suchy, Model matematyczny kinetyki segregacji w odlewie krzepnącym kierunkowo, *Archiwum Hutnictwa* 25, zesz. 2 (1980).
7. W. Longa, *Krzepnięcie odlewów w formach piaskowych*, Wyd. Śląsk, Katowice 1973.
8. J. Marczak, Dynamika przemian fazowych pierwszego rodzaju na przykładzie namarzania, *Praca doktorska*, IPPT PAN, Warszawa 1982.
9. K. Ostrowski, J. Rutkowski, O warunkach brzegowych na powierzchni swobodnej i jej deformacji, *Arch. Termod.*, 6, 1-2 (1986).
10. W. Sakwa, R. Parkitny, A. Bokota, Compatibility conditions on the solidification surface, *The Metals Society*, 2 (1981).
11. T.Y. Thomas, *Concepts from tensor analysis and differential geometry*, Academic Press, New York-London 1961.
12. C. Truesdell, R.A. Toupin, *The classical field theories of mechanics*. *Handbuch der Physik* III/3, Springer-Verlag, Berlin 1960.

13. Z. Wesolowski, Fala przyspieszenia i fala silnej nieciągłości w nieliniowym ośrodku sprężystym. Zagadnienia termomechaniki ciał sprężystych, Wrocław 1978.
14. K. Wilmański, Zarys termodynamiki ośrodków ciągłych. Praca IPPT PAN, Warszawa 1975.