VI Minsk International Heat and Mass Transfer Forum
MIF 2008, Minsk, May 19-23, 2008

УДК 519.6

ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ СТЕФАНА

В. А. Сычевский

Институт тепло- и массообмена им. А. В. Лыкова НАН Беларуси, Беларусь

Введение. Известно, что такие процессы как сушка, кристаллизация, сублимация являются основными процессами химической технологии и широко используются в разнообразных промышленных аппаратах [1]. Процессы тепло- и массопереноса с фазовыми переходами играют важную роль в геокриологии [2], испарительном охлаждении [3], при разработке технологических процессов сушки влажных материалов, в том числе и сублимационной сушки [4]. Замораживание органических объектов актуально в сельском хозяйстве, где остра проблема воздействия низких температур в зимний период и во время заморозков на посевы, многолетние растения и готовый урожай. Все перечисленные здесь проблемы с математической точки зрения относятся к задачам Стефана.

Наиболее общие и широко используемые численные методы решения задачи Стефана можно разделить на два класса: численные схемы с выделением границы раздела фаз, где граница раздела отслеживается на каждом шаге по времени; методы сквозного счета, в которых используется обобщенная формулировка задачи Стефана. В работах [5, 6] развивается неявная схема с ловлей фронта в узел разностной сетки. В исследуемой области вводится пространственная сетка с постоянным шагом и временная с переменным. При этом шаг по времени выбирается так, чтобы граница фазового перехода переместилась из данного узла в ближайший следующий узел пространственной сетки. Для нахождения искомой величины (например, температуры) и временного шага применяются итерационные процедуры решения нелинейных алгебраических уравнений. В публикации [7] разрабатывается метод выпрямления фронта, суть которого состоит в том, что производится такая замена независимых переменных, что рассматриваемая область пространства переходит в фиксированную прямоугольную область, а граница фазового перехода совпадает с фиксированной координатной линией. Построенную краевую задачу для фиксированной расчетной области в новых независимых переменных решают, используя стандартные разностные методы.

В работах [8, 9] предлагаются схемы сквозного счета задачи Стефана. Применяя δ-функцию, уравнения теплопроводности с условиями Стефана преобразуются к одному нелинейному уравнению. Следует учитывать, что коэффициенты теплопроводности и теплоемкости при таком описании терпят разрыв. Выделение тепла при фазовом переходе аналогично добавлению некоторой теплоемкости на границе фазового перехода. Для решения применяется метод сглаживания. С этой целью δ-функцию заменяют функцией, которая отлична от нуля лишь внутри некоторого интервала. Сглаживая на интервале коэффициенты теплоемкости и теплопроводности, получают уравнение со сглаженными коэффициентами. Для решения таких уравнений применяют стандартные разностные схемы, приведенные в работах [9, 10]. При этом граница фазового перехода явно не выделяется и не используется в разработке численного метода.

Методика расчета задачи Стефана. Методику расчета изложим на примере промерзания влагонасыщенной среды. Воспользуемся методом контрольного объема, суть которого применительно к тепловой задаче заключается в строгом выполнении закона сохранения тепловой энергии в каждом из объемов, которыми разбивается вся исследуемая область. На основе метода контрольного объема разностный аналог уравнения теплопроводности можно записать в следующем виде:

$$(c\rho)_i \frac{T_i^{k+1} - T_i^k}{\Delta t} = \frac{1}{x_{i+1/2} - x_{i-1/2}} \left(\lambda_{i+1/2} \frac{T_{i+1} - T_i}{x_{i+1} - x_i} - \lambda_{i-1/2} \frac{T_i - T_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} \right), \qquad (1)$$

где $x_{i+1/2} = \frac{x_i + x_{i+1}}{2}$, $x_{i-1/2} = \frac{x_{i-1} + x_i}{2}$, а $\lambda_{i+1/2} = \lambda\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right)$ и $\lambda_{i-1/2} = \lambda\left(\frac{x_{i-1} + x_i}{2}\right)$ — теплопроводность материала соответственно в точках $x_{i+1/2}$ и $x_{i-1/2}$.

Основная идея предлагаемого способа заключается в том, что вместо математической поверхности, на которой осуществляется фазовый переход, мы принимаем, что фазовый переход происходит в контрольном объеме при достижении его узлом температуры фазового перехода $T_{\text{ф}}$. Запишем разностный аналог условия Стефана, переходя от математической поверхности к малому, но конечному объему

$$\lambda_1 \frac{T_{\text{ф}} - T_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} - \lambda_2 \frac{T_{i+1} - T_{\text{ф}}}{x_{i+1} - x_i} = \frac{1}{S} \frac{|\Delta m|}{\Delta t} Q_{\text{ф}}. \qquad (2)$$

Здесь S – площадь поперечного сечения, 1 – мерзлая зона, 2 – талая зона. В формуле (2) количество тепла, отводимое от контрольного объема, компенсируется подводимым теплом и теплом фазового перехода воды в лед. Расчет массы жидкости, перешедшей в лед на временном шаге Δt, осуществляем по формуле

$$\Delta m = \left(\lambda_1 \frac{T_{\text{ф}} - T_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} - \lambda_2 \frac{T_{i+1} - T_{\text{ф}}}{x_{i+1} - x_i} \right) \frac{S \Delta t}{Q_{\text{ф}}}. \qquad (3)$$

При этом температура контрольного объема сохраняется постоянной и равной температуре фазового перехода $T_{\text{ф}}$. Полученное количество замерзшей массы жидкости Δm вычитается из массы воды в объеме и добавляется к массе льда. Так продолжается до тех пор пока вся жидкость в контрольном объеме не перейдет в лед. После этого осуществляем смену агрегатного состояния рассматриваемого объема и зону фазового перехода смещаем к следующему объему. Это дает нам информацию о местоположении и скорости фронта кристаллизации. Ясно, что при уменьшении размеров контрольных объемов и шага по времени точность вычислений будет увеличиваться.

В результате дискретности численной схемы имеются некоторые дополнительные особенности ее реализации. Так, температура T в узлах контрольных объемов от шага к шагу по времени меняется скачками и следовательно может стать ниже температуры фазового перехода $T_{\text{ф}}$ даже раньше, чем начнется сам процесс перехода воды в лед. Чтобы этого не происходило, корректировка расчетной схемы производится следующим образом. Температуру элемента задаем равной $T_{\text{ф}}$, а разность температур $(T_{\text{ф}} - T)$ компенсируем теплотой фазового перехода воды в лед. При этом количество замороженной жидкости рассчитываем по формуле

$$\Delta m = \frac{c_{\text{в}} m_{\text{э}} (T_{\text{ф}} - T)}{Q_{\text{ф}}}. \qquad (4)$$

Здесь $c_{\text{в}}$ – удельная теплоемкость воды Дж/(кг·К); $m_{\text{э}}$ – масса воды в контрольном объеме, кг. В конце процесса вымораживания жидкости в элементе может оказаться, что масса вымерзшей воды Δm, рассчитанная по формуле (3), будет больше, чем реально ее осталось. Это означает, что количество тепла, представляющее собой разность подводимой и отводимой теплоты от контрольного объема, превосходит количество тепла фазового перехода в оставшейся жидкости. Чтобы избежать такую ситуацию излишек отведенного тепла покрывается за счет охлаждения образовавшегося в объеме льда ниже температуры фазового перехода $T_ф$

$$T_i = T_ф - \left(\lambda_в \frac{T_ф - T_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} - \lambda_л \frac{T_{i+1} - T_ф}{x_{i+1} - x_i}\right)\frac{S\Delta t}{c_л m_л} + \frac{\Delta m_в Q_ф}{c_л m_л}. \qquad (5)$$

Здесь $c_л$ – удельная теплоемкость льда Дж/(кг·К); $m_л$ – масса льда в контрольном объеме, кг, $\Delta m_в$ – масса оставшейся жидкости, кг.

Разработанный метод протестирован на серии задач, решение которых можно получить развитыми ранее методами. В частности, для проверки использовались аналитические методы, описанные в работе [11], а также численные методы, представленные в работах [12, 13]. Сравнение тестовых расчетов температурного поля с эталонными методами показало высокую точность представленного метода. Достоверность результатов получаемых предлагаемым способом рассмотрена в работе [14], где сравнивались расчетные и натурные данные, полученные на трех опытных площадках. Как указывается в работе [14] расчетные и экспериментальные данные находятся в удовлетворительном соответствии.

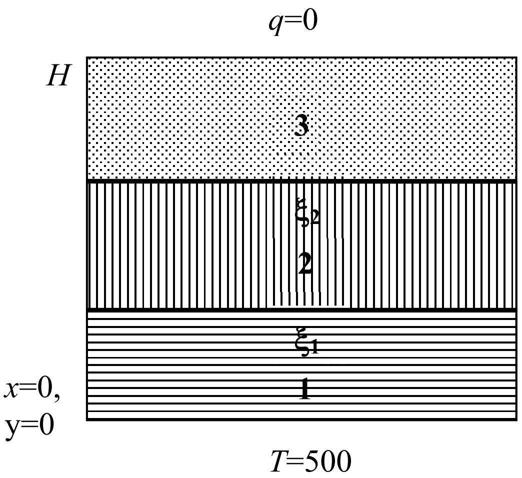

Рис. 1. Геометрическая схема задачи термического разложения

Термолиз измельченной резины. Изучим процесс термического разложения измельченных резиновых отходов в среде перегретого водяного пара, продуваемого с постоянной скоростью $\vec{v}$ [15]. На рис. 1 представлена геометрическая схема задачи. Зона 1 представляет собой засыпку из твердых продуктов разложения, 2 – зона частиц из резины с температурой выше 100 ^oC, 3 – частицы вместе с конденсирующейся на них водой, ξ_1 – граница фазового перехода резина – газообразные продукты разложения, ξ_2 – граница фазового перехода вода – пар.

В начальный период, когда засыпка прогревается до температуры 100 ^oC, используется уравнение

$$\left[(1-\varepsilon)(c\rho)_ш + \varepsilon(c\rho)_п\right]\frac{\partial T}{\partial t} = \mathrm{div}(\lambda_{ш\,эф}\mathrm{grad}T) - \frac{c_п\rho_н\vec{v}}{\varepsilon}\mathrm{grad}T - \frac{Q_в\vec{v}}{\varepsilon}\mathrm{grad}\rho_н \qquad (6)$$

со следующими граничными условиями:

$$T\big|_{x=0} = 500\ ^oC, \quad T\big|_{x=H} = 0. \qquad (7)$$

Предполагается, что тепловые потоки через боковые поверхности отсутствуют. Эти граничные условия сохраняются для всего процесса термолиза. Когда с поверхностей частиц на границе фазового перехода в засыпке идет испарение воды, уравнение теплопроводности имеет вид

$$\left[(1-\varepsilon)(c\rho)_ш + \varepsilon(c\rho)_п\right]\frac{\partial T_2}{\partial t} = \mathrm{div}(\lambda_{ш\,эф}\mathrm{grad}T_2) - \frac{c_п\rho_н\vec{v}}{\varepsilon}\mathrm{grad}T_2, \qquad (8)$$

а условие Стефана на границе фазового перехода запишем

$$\lambda_{\text{ш эф}} \frac{\partial T_3}{\partial x} - \lambda_{\text{ш эф}} \frac{\partial T_2}{\partial x} - (\rho v c)_{\text{п}} (T_3(M + \Delta h) - T_2(M - \Delta h)) = \nu_{\text{в}} \varepsilon \rho_{\text{в}} Q_{\text{в}} \frac{\partial \xi_2}{\partial t}, \quad T_2\big|_{\xi_2} = T_3\big|_{\xi_2} = T_{\text{в}} . \tag{9}$$

При прогреве засыпки выше температуры деструкции $T_{\text{д}}$ необходимо решать следующую систему:

$$\left[(1-\varepsilon)(c\rho)_{\text{у}} + \varepsilon(c\rho)_{\text{п}}\right]\frac{\partial T_1}{\partial t} = \operatorname{div}(\lambda_{\text{у эф}} \operatorname{grad} T_1) - \frac{c_{\text{п}}\rho_{\text{н}}\vec{\text{v}}}{\varepsilon} \operatorname{grad} T_1, \ 0 < x < \xi_1(t); \tag{10}$$

$$\left[(1-\varepsilon)(c\rho)_{\text{ш}} + \varepsilon(c\rho)_{\text{п}}\right]\frac{\partial T_2}{\partial t} = \operatorname{div}(\lambda_{\text{ш эф}} \operatorname{grad} T_2) - \frac{c_{\text{п}}\rho_{\text{н}}\vec{\text{v}}}{\varepsilon} \operatorname{grad} T_2, \ \xi_1(\tau) < x < \xi_2(t); \tag{11}$$

$$\left[(1-\varepsilon)(c\rho)_{\text{ш}} + \varepsilon(c\rho)_{\text{п}}\right]\frac{\partial T_3}{\partial t} = \operatorname{div}(\lambda_{\text{ш эф}} \operatorname{grad} T_3) - \frac{c_{\text{п}}\rho_{\text{н}}\vec{\text{v}}}{\varepsilon} \operatorname{grad} T_3 - \frac{Q_{\text{в}}\vec{\text{v}}}{\varepsilon} \operatorname{grad} \rho_{н}, \ \xi_2(t) < x < L . \tag{12}$$

На границе фазового перехода резина – газообразные продукты разложения имеем

$$\lambda_{\text{ш эф}} \frac{\partial T_2}{\partial x} - \lambda_{\text{у эф}} \frac{\partial T_1}{\partial x} - (\rho \text{v} c)_{\text{п}} (T_2(M + \Delta h) - T_1(M - \Delta h)) = \nu_{\text{ш}} (1-\varepsilon) \rho_{\text{ш}} Q_{\text{ф}} \frac{\partial \xi_1}{\partial t}, T_1\big|_{\xi_1} = T_2\big|_{\xi_1} = T_{\text{д}}, \tag{13}$$

а на границе вода – пар – (9).

Рассматриваемая задача решается численным методом, представленным выше, используя локально-одномерную схему, при этом осуществляется расщепление задачи по пространственным переменным. Методика позволяет одновременно учитывать фазовые переходы резина – газообразные продукты разложения и вода – пар. Некоторые результаты расчетов представлены на рис. 2.

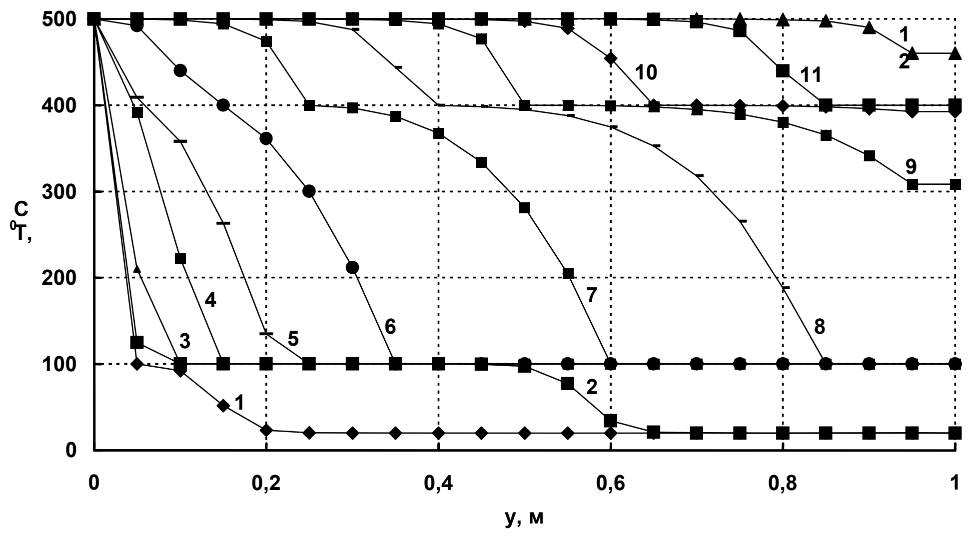

Рис. 2. Распределение температуры в засыпке резиновых отходов в зависимости от времени: при термическом разложении и фазовых переходах вода-пар: 1 – t = 1 мин; 2 – 5; 3 – 10; 4 – 30; 5 – 60; 6 – 120; 7 – 240; 8 – 360; 9 – 480; 10 – 600; 11 – 780; 12 – 931

На рис. 2 отражено характерное распределение температуры в засыпке для разных моментов времени при наличии фазовых переходов резина – газ и вода – пар. Распределение температуры имеет сложный характер. На кривых видны две точки излома, соответствующие фазовым переходам. Из анализа полученных результатов следует, что основной причиной прогрева засыпки до 100 °С является конденсация пара. Совершенно по иному происходит нагревание засыпки до 100 °С в отсутствие фазовых переходов. Основными механизмами нагревания в этом случае являются теплопроводность и конвекция, они приводят к более медленному прогреванию.

Таблица. Расчетные и экспериментальные данные по термолизу резины

Параметры процесса	Расчетные данные	Экспериментальные значения
Время термолиза, с	55860	48480
Время увлажнения отходов, с	660	627
Количество конденсирующегося пара, кг/кг	0,102	0,096
Расход пара, кг/с·м^2	0,036	0,031

Для оценки правомерности принятой модели расчета, обоснованности предположений и допущений в работе [16] приведены результаты сравнения расчетных и экспериментальных данных по термолизу резиновой крошки. В ходе экспериментов регистрировались такие параметры процесса термолиза дисперсных резиновых отходов в паровой среде как температура, расход пара, скорость движения фронта фазового перехода (конденсация пара, термическое разложение), количество выпадающего конденсата, время завершения процесса термолиза. В таблице приведено сравнение расчетных и экспериментальных данных термолиза резиновой крошки в среде перегретого водяного пара. Как следует из таблицы согласование результатов хорошее, что подтверждает правомерность принятых при расчетах допущений и предположений.

Сублимация льда из пористого элемента в вакуум. Рассмотрим материал, представляющий собой пористый цилиндр из никеля (рис. 3). В сублимационный зазор ($0<r<L$) под давлением подается жидкость, которая через внутреннюю границу $r=L$ пористого элемента под действием фильтрационного и капиллярного давлений перемещается к внешней поверхности цилиндра, соприкасающейся с вакуумом [17]. В результате испарения жидкости и радиационного отвода тепла пористый элемент охлаждается и жидкость замерзает, образуя прослойку льда в порах. Предполагая, что по длине цилиндра граничные условия одинаковы, будем считать процесс тепло- и массопереноса в пористом цилиндре одномерным. На внутреннюю поверхность $r=L$ подается тепловой поток, который, проходя через пористую стенку, заполненную жидкостью и льдом, частично расходуется на плавление и сублимацию (испарение), а частично отводится излучением с поверхности материала в вакуум. Таким образом, в соответствии с общей картиной процесса тепло- и массопереноса считаем, что в

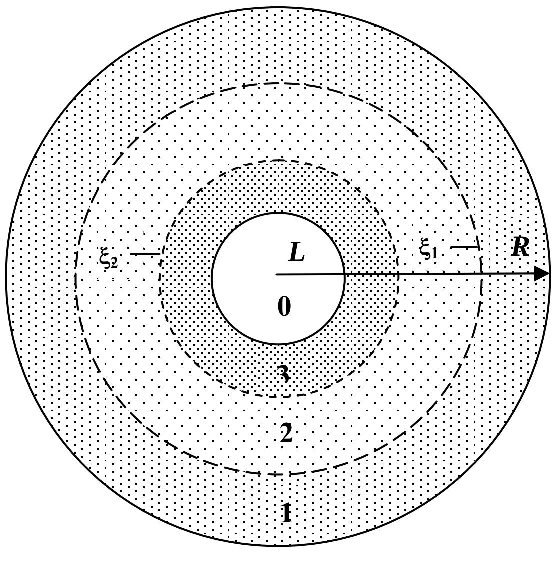

Рис. 3. Геометрическая схема задачи: 1, 2, 3 – зоны пара, льда и воды в пористом элементе соответственно

пористом элементе сосуществуют три фазы и происходят фазовые превращения лед–пар и лед–жидкость, границы которых $r=\xi_1(t)$ и $r=\xi_2(t)$ находятся в движении.

Рассмотрим систему дифференциальных уравнений, описывающих задачу типа Стефана с двумя фронтами фазовых переходов

$$(1-\varepsilon)(\rho c)_{\text{с}}\frac{\partial T_1}{\partial t}=\lambda_{\text{эф}1}\left(\frac{\partial^2 T_1}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial T_1}{\partial r}\right);\ \xi_1(t)<r<R; \tag{14}$$

$$\left[\varepsilon(\rho c)_{\text{л}}+(1-\varepsilon)(\rho c)_{\text{с}}\right]\frac{\partial T_2}{\partial t}=\lambda_{\text{эф}2}\left(\frac{\partial^2 T_2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial T_2}{\partial r}\right);\ \xi_2(t)<r<\xi_1(t); \tag{15}$$

$$\left[\varepsilon(\rho c)_{\text{в}}+(1-\varepsilon)(\rho c)_{\text{с}}\right]\frac{\partial T_3}{\partial t}=\lambda_{\text{эф}2}\left(\frac{\partial^2 T_3}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial T_3}{\partial r}\right);\ L<r<\xi_2(t). \tag{16}$$

Граничные условия:

$$-\lambda_{\text{эф}2}\frac{\partial T_2}{\partial r}\Big|_{\xi_1}+\lambda_{\text{эф}1}\frac{\partial T_1}{\partial r}\Big|_{\xi_1}=-\varepsilon\rho_{л}Q_1\frac{d\xi_1}{dt};\ \left(\frac{d\xi_1}{dt}\langle 0\right); \tag{17}$$

$$T_1\big|_{r=\xi_1}=T_2\big|_{r=\xi_2}=T_*(t), \tag{18}$$

$$\rho_{л}\frac{d\xi_1}{dt}=\frac{\rho_{\text{п}}(T_*)\sqrt{kT_*/2\pi m}}{1+\xi_1/d}\equiv j_{\text{п}}, \tag{19}$$

$$-\lambda_{\text{эф}3}\frac{\partial T_3}{\partial r}\Big|_{\xi_2}+\lambda_{\text{эф}2}\frac{\partial T_2}{\partial r}\Big|_{\xi_2}=\varepsilon\rho_{\text{в}}Q_{\text{ф}}\frac{d\xi_2}{dt}, \tag{20}$$

$$T_2\big|_{r=\xi_2}=T_3\big|_{r=\xi_2}=T_{\text{ф}}, \tag{21}$$

$$-\lambda_{\text{эф}3}\frac{\partial T_3}{\partial r}\Big|_L=q. \tag{22}$$

Соотношения (17), (18) есть условия Стефана для фазового перехода лед–пар (сублимация льда), при этом температура на фазовой поверхности неизвестна и должна определяться в процессе решения задачи. Выражения (20), (21) являются условиями Стефана для фазового перехода вода–лед (кристаллизация, плавление), однако здесь температура на границе фазового перехода известна и равна $T_{\text{ф}}$. Уравнение (19), взятое из [18], заменяет уравнение массопереноса пара в зоне 1, связывает неизвестную температуру T_* со скоростью сублимации и отражает наличие сопротивления движению пара при заглублении фронта сублимации. При заглубленном фронте сублимации $r=\xi_1(t)$ с внешней поверхности пористого материала происходит отток тепла с помощью излучения, что позволяет записать граничное условие при $r=R$ как

$$-\lambda_{\text{эф}1}\frac{\partial T_1}{\partial r}\Big|_R=(1-\varepsilon)\varepsilon^*\sigma T^4\big|_R. \tag{23}$$

Когда пористый элемент заполнен жидкостью и происходит ее испарение с поверхности, граничное условие имеет следующий вид:

$$-\lambda_{\text{эф}3}\frac{\partial T_3}{\partial r}\Big|_R=(1-\varepsilon)\varepsilon^*\sigma T^4\big|_R+\varepsilon\rho_{\text{п}}(T_R)Q_{\text{в}}\sqrt{\frac{kT|_R}{2\pi m}}. \tag{24}$$

При замерзании воды, будет происходить сублимация льда с поверхности и можно написать следующее граничное условие:

$$-\lambda_{\text{эф}2}\frac{\partial T_2}{\partial r}\Big|_R=(1-\varepsilon)\varepsilon^*\sigma T^4\Big|_R+\varepsilon\rho_{\text{п}}(T_R)Q_1\sqrt{\frac{kT\big|_R}{2\pi m}}\,. \qquad (25)$$

Начальные условия

$$\tau=0,\ \xi_1(0)=\xi_2(0)=0,\ T=274\,\text{K}. \qquad (26)$$

Данная задача решается численным методом, описанным выше. Используется явная схема расчета. Разработанная методика позволяет одновременно учитывать фазовые переходы жидкость–лед, лед–пар и вода – пар и получать решения при неизвестной температуре на границе лед–пар.

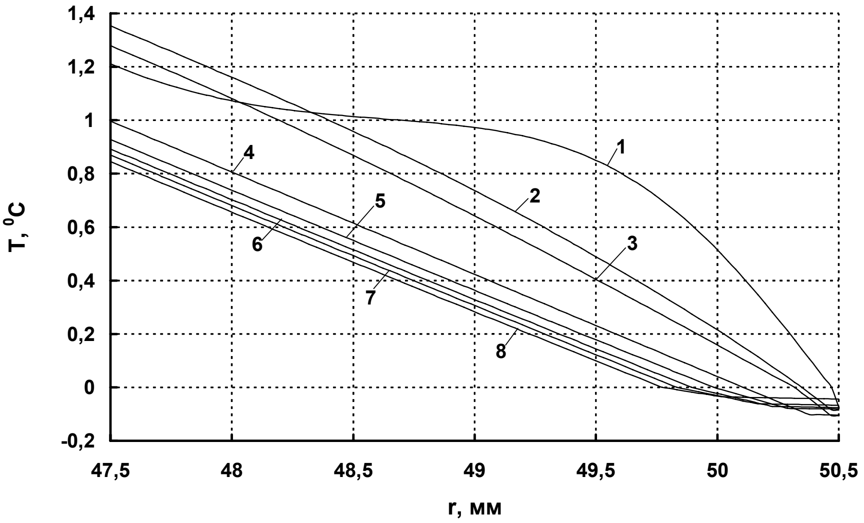

Рис. 4. Распределение температуры по толщине пористого элемента для различных времен, включая кристаллизацию на фронте вода–лед, при $Q_{\text{т.н}}$ =250 Вт: 1 – t=0.1 с; 2 – 0.5; 3 – 1; 4 – 5; 5 – 10; 6 – 15; 7 – 20; 8 – 38.

На рис. 4 представлено типичное распределение температуры по толщине пористого элемента в различные моменты времени. Видны три зоны, отделяемые двумя точками излома. Эти точки являются поверхностями фазовых переходов лед–пар и вода–лед. Первая (см. рис. 3) зона представляет собой пористую структуру, заполненную паром, вторая зона заполнена льдом, а третья – водой.

На основе проведенных численных экспериментов была установлена следующая типичная картина процесса охлаждения. В начальный момент предполагаем, что пористая пластина полностью заполнена водой и с ее поверхности происходит испарение жидкости в вакуум. Принимаем, что по мере испарения влага успевает подойти из внутренних слоев элемента к поверхности за счет капиллярных сил и перепада давления, поддерживаемого в системе. В результате поверхность охлаждается очень интенсивно и в некоторый момент, достигнув 0 °C, верхний слой замерзает. Вода оказывается отделенной от вакуума слоем льда. С этого момента начинается сублимация льда и фронт лед-пар постепенно заглубляется внутрь пористого элемента. Одновременно с этим движется фронт кристаллизации жидкость-лед. Этот фронт, как показывают численные расчеты, движется быстрее поверхности сублимации. Прослойка льда увеличивается. Так продолжается до тех пор, пока поток поступающего тепла меньше потока тепла, удаляемого в вакуум. Однако в результате заглубления фронта сублимации увеличивается сопротивление пористого материала отводу пара, что приводит к снижению интенсивности сублимации. В определенный момент устанавливается равенство потоков тепла, подводимого к элементу и отводимого в вакуум. В этот момент фронт кристаллизации останавливается, прослойка льда перестает расти и устанавливается временное равновесие. Однако фронт сублимации продолжает заглубляться, что приводит к дальнейшему снижению интенсивности отвода тепла и началу обратного процесса плавления прослойки льда. Фронт плавления начинает подниматься к внешней поверхности пористой структуры. В результате прослойка льда уменьшается за счет двух факторов: плавления льда снизу и его сублимации сверху. Так продолжается до тех пор, пока ледяная прослойка совсем не исчезнет. В действительности, однако, она может не исчезнуть полностью, но, достигнув некоторого критического размера, продавливается фильтрационным давлением. После этого жидкость начинает быстро подниматься к поверхности пористого элемента. С момента достижения верхней границы весь описанный цикл сублимационного охлаждения начинается заново.

Напряжения и деформации в сферической области при ее промерзании. Для изучения напряжений, деформаций и трещин во влажном материале при его замораживании рассмотрим процесс промерзания жидкости, заключенной в сферическую оболочку, которая представляет собой конгломерат льда и структурирующей основы (материала) [19]. Опишем напряженно-деформированное состояние системы вода–лед. Предположим, что механические процессы проходят намного быстрее тепловых и система всегда успевает отреагировать на изменения температуры в ней. Поэтому принимаем, что система находится в статическом равновесии, а следовательно, механическая задача с учетом сферической симметрии примет вид [20]

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial r^2 u}{\partial r}\right) = 0\,. \qquad (27)$$

Граничные условия для ледяной прослойки в случае, когда на внутренней поверхности внешней оболочки приложено давление $P_{\text{вн}}$, будут

$$r = r_{вн} : \sigma_{rr} = P_{вн}; \quad r = r_{л0} : \sigma_{rr} = P_{в}. \qquad (28)$$

Компоненты тензора напряжений определяются выражениями

$$\sigma_{rr} = -\frac{P_{\text{в}} r_{\text{л}0}^3 - P_{\text{вн}} r_{\text{вн}}^3}{r_{\text{вн}}^3 - r_{\text{л}0}^3} + \frac{\left(P_{\text{в}} - P_{\text{вн}}\right) r_{\text{л}0}^3 r_{\text{вн}}^3}{r_{\text{вн}}^3 - r_{\text{л}0}^3}\frac{1}{r^3}\,, \qquad (29)$$

$$\sigma_{\theta\theta} = \sigma_{\varphi\varphi} = -\frac{P_{\text{в}} r_{\text{л}0}^3 - P_{\text{вн}} r_{\text{вн}}^3}{r_{\text{вн}}^3 - r_{\text{л}0}^3} - \frac{\left(P_{\text{в}} - P_{\text{вн}}\right)}{2}\frac{r_{\text{л}0}^3 r_{\text{вн}}^3}{r_{\text{вн}}^3 - r_{\text{л}0}^3}\frac{1}{r^3}\,. \qquad (30)$$

Зная $P_{\text{в}}$, $r_{\text{в}0}$ и $r_{\text{л}0}$, находятся величины тензоров деформаций и напряжений в любой точке r как ледяной прослойки, так и водяного шара. Давление $P_{\text{в}}$ рассчитывается по формуле

$$P_{\text{в}} = -\frac{\left(r_{\text{в}0} - r_{\text{л}0}\right) - \frac{3}{2}\left(1-\nu\right)\frac{P_{\text{вн}} r_{\text{вн}}^3 r_{\text{л}0}}{E_{\text{л}}\left(r_{\text{вн}}^3 - r_{\text{л}0}^3\right)}}{\frac{1-2\nu}{E_{\text{л}}}\frac{r_{\text{л}0}^4}{r_{\text{вн}}^3 - r_{\text{л}0}^3} + \frac{1+\nu}{2E_{\text{л}}}\frac{r_{\text{л}0} r_{\text{вн}}^3}{r_{\text{вн}}^3 - r_{\text{л}0}^3} + \frac{1}{3}\frac{r_{\text{в}0}}{K_{\text{в}}}}\,. \qquad (31)$$

Величина $r_{\text{в}0}$ соответствует зоне фазового перехода вода–лед ($r_{\text{ф}}$) при решении задачи Стефана и находится по формуле

$$r_{\text{в}0} = r_{\text{ф}} = \sqrt[3]{\frac{\frac{4}{3}\pi r_{\text{вн}}^3 \rho_{\text{в}} - M_{\text{л}}}{\frac{4}{3}\pi\rho_{\text{в}}}} \,. \tag{32}$$

Значение $r_{\text{л}0}$ определяем из выражения

$$r_{\text{л}0} = \sqrt[3]{\left(1 - \frac{\rho_{\text{в}}}{\rho_{\text{л}}}\right) r_{\text{вн}}^3 + \frac{\rho_{\text{в}}}{\rho_{\text{л}}} r_{\text{в}0}^3} \,. \tag{33}$$

Уравнение теплопроводности для сферически симметричного случая имеет вид

$$c\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r}\left(\lambda r^2 \frac{\partial T}{\partial r}\right). \tag{34}$$

Условие Стефана на границе фазового перехода вода–лед запишем как

$$\lambda_{\text{в}} \left.\frac{\partial T_{\text{в}}}{\partial r}\right|_{r=r_{\text{ф}}} - \lambda_{\text{л}} \left.\frac{\partial T_{\text{л}}}{\partial r}\right|_{r=r_{\text{ф}}} = -\rho_{\text{в}} \frac{\mathrm{d}r_{\text{ф}}}{\mathrm{d}t} Q_{\text{ф}} \,, \quad \left(\frac{\mathrm{d}r_{\text{ф}}}{\mathrm{d}t} < 0\right). \tag{35}$$

Основным уравнением, которое описывает фазовый переход вода – лед, является уравнение Клапейрона–Клаузиуса [21, 22]. Однако выразить зависимость температуры фазового перехода от давления в широком диапазоне температуры точной аналитической функцией сложно вследствие зависимости теплоты фазового перехода от температуры. Поэтому для дальнейших расчетов используется эмпирическая формула, приведенная в работе [23]. В нашем случае температура фазового перехода $T_{\text{ф}}$ зависит от давления в жидкости

$$T_{\text{в}}\big|_{r=r_{\text{ф}}} = T_{\text{л}}\big|_{r=r_{\text{ф}}} = T_{\text{ф}}(P) = 273.16 \sqrt[9]{1 - \frac{P}{395.2}} \,. \tag{36}$$

На внешней поверхности оболочки задаем теплообмен по «закону» Ньютона

$$\lambda \left.\frac{\partial T}{\partial r}\right|_{r=R_{\text{вн}}} = -\alpha\left(T_{\text{пов}} - T_{\text{ср}}\right). \tag{37}$$

Для центра сферы напишем условие симметрии, имеющее вид

$$\left.\frac{\partial T}{\partial r}\right|_{r=0} = 0 \,. \tag{38}$$

Приведенная задача решается описанным выше методом, используя явную схему. Ее особенностью является зависимость температуры фазового перехода от давления $T_{\text{ф}}=T_{\text{ф}}(P)$. Наиболее простой способ учета этой зависимости заключается в том, чтобы оставить $T_{\text{ф}}$ неизменной до полного промерзания контрольного объема и изменить ее в зависимости от величины давления $P_{\text{в}}$ в жидкой фазе для определения условия промерзания следующего контрольного объема. Точность такого расчета увеличивается с уменьшением шага расчетной сетки.

Когда давление в жидкой фазе превышает прочность составной оболочки (состоящей из внешней и ледяной оболочек), происходит разрыв сплошности и расширение всей системы. Для учета этого разработана и реализована процедура перестройки сетки во время разрушения и расширения системы. Принимается, что после расширения вода должна занимать объем, соответствующий ненапряженному состоянию с плотностью $\rho_{\text{в}}$=1000 кг/м^3, а каждый контрольный объем, заполненный льдом, увеличивается на величину, соответствующую плотности льда, равной $\rho_л$=917 кг/м^3 (напомним, что масса контрольного объема остается постоянной).

С подвижной внешней оболочкой лед имеет возможность расширяться, а, следовательно, течь и разрушаться. Поведение компонент тензора напряжений описывается формулами (29) и (30). В ледяной прослойке в результате симметрии задачи имеют место только нормальные компоненты напряжений σ_{rr}, $\sigma_{\theta\theta}=\sigma_{\varphi\varphi}$. Компонента σ_{rr} принимает максимальное значение $P_в$ по абсолютной величине на внутренней поверхности ледяной оболочки, граничащей с водой, и монотонно падает до $P_{вн}$ на внешней поверхности. Она имеет все время отрицательную величину, что означает сжатие льда в радиальном направлении. Поведение компонент $\sigma_{\theta\theta}=\sigma_{\varphi\varphi}$ является более сложным. Так, при малой толщине ледяной прослойки они отрицательны и уменьшаются по абсолютной величине в направлении к внутренней граничной поверхности. По мере роста толщины оболочки $\sigma_{\theta\theta}$ и $\sigma_{\varphi\varphi}$ принимают положительные значения около внутренней ее поверхности. Таким образом, на внешней поверхности льда и вблизи нее оболочка в тангенциальном направлении сжата ($\sigma_{\theta\theta}=\sigma_{\varphi\varphi}<0$). У центра $\sigma_{\theta\theta}$ и $\sigma_{\varphi\varphi}$ имеют нулевые значения, а следовательно, и деформации в этих направлениях отсутствуют. Около внутренней поверхности льда напряжения увеличиваются и на самой поверхности принимают максимальные положительные значения. Это означает, что оболочка льда в данной области растянута.

При промораживании в системе увеличиваются напряжения и слой, состоящий из льда и внешней оболочки, достигнув критических значений напряжений, разрушается, что приводит к падению напряжений в системе. После этого весь описанный процесс повторяется снова. Так продолжается до полного вымерзания воды. Распределение температуры в теле носит монотонный характер, а в плоскости фазового перехода находится излом. При разрушении оболочки давление в материале падает, увеличивается температура фазового перехода и вода оказывается переохлажденной, что приводит к интенсивному фазовому переходу воды в лед. Поскольку выделение тепла идет интенсивно, температура в области кристаллизации повышается скачком. Расчеты показывают, что величина скачка температуры зависит от прочности оболочки. Чем она выше, тем больших напряжений достигает система вода–лед, а следовательно, меньшие значения принимает температура фазового перехода, что и приводит к бóльшему скачку при разрушении оболочки.

Вывод. Представлен достаточно простой численный метод решения задач Стефана. Он позволяет моделировать многофронтовые фазовые переходы, в том числе и многофронтовые фазовые переходы различной природы (жидкость–газ, жидкость–твердое тело и твердое тело–газ), а также производить расчет задачи Стефана с неизвестной температурой фазового перехода. Используя его, можно описывать процессы, в которых существует зависимость температуры фазового перехода от давления. Данный метод относится к методам с выделением границы раздела фаз, однако, его программная реализация достаточно проста, что является безусловным преимуществом в сравнении с другими методами данного типа.

Приведен ряд задач, решенных данным способом. Вскрыты основные закономерности поведения изучаемых систем.

Обозначения. c – удельная теплоемкость, Дж/кг; ρ – плотность кг/м^3; T – температура, K, t – время, с; x – координата, м; r – радиальная координата, м; λ – теплопроводность, Вт/(м·K); S – площадь поперечного сечения, м^2; $Q_ф$ – теплота кристаллизации или теплота фазового перехода, тогда $Q_ф=Q_д+Q_{исп}$, Дж/кг; Δm – масса жидкости, перешедшей в лед, кг; $m_э$ – масса воды в контрольном объеме, кг; $\Delta m_в$ – масса

оставшейся жидкости, кг; ε – пористость; $Q_{в}$ – теплота испарения (конденсации) воды (пара), Дж/кг; $\vec{v}$ – скорость, м/с; Δh – малая величина длины в направлении, перпендикулярном к поверхности фазового перехода, м; M=2Δh; $\nu_{ш}$ – доля воды в порах; $\nu_{в}$ – доля разложившейся резины; $Q_{д}$ – теплота деструкции резины, Дж/кг; $Q_{исп}$ – теплота испарения жидких продуктов разложения, Дж/кг; Q_1 – теплота сублимации, Дж/кг; q – плотность теплового потока, Вт/м^2; ε^* – степень черноты; σ – постоянная Стефана-Больцмана, Вт/(м^2·К^4); d – эффективный диаметр пор, м; $j_{п}$ – поток пара, кг/(м^2·с); T – температура границы фазового перехода лед-пар, К; m – масса молекулы воды, кг; k – постоянная Больцмана, Дж/К; u – смещения вдоль координаты r, м; σ_{rr} $\sigma_{\theta\theta}$ $\sigma_{\varphi\varphi}$ – компоненты тензора напряжения, Па; ν – коэффициент Пуассона; E – модуль упругости, Па; K – модуль объемного сжатия, Па; $M_{л}$ – масса ледяной оболочки, кг; P – давление, Па; α – коэффициент теплообмена, Вт/(м^2·К).
Индексы: ф – фазовый переход; в – вода; э – элемент; i – номер контрольного объема; ш – шина; п – пар; пов – поверхность; эф – эффективный; н – насыщенный; у – углеродный остаток; д – деструкция; с – скелет; вн – внешний; 0 – начальный; ср – среда; т.н – тепловая нагрузка.

Ссылки

[1] Новый справочник химика и технолога. Процессы и аппараты химической технологии. СПб.: НПО «Профессионал». Ч. I. 2004, Ч. II. 2006.
[2] Основы геокриологии. Ч. 4. Динамическая геокриология. Под. Ред. Э.Д. Ершова. М.: Из-во МГУ. 2001.
[3] Полежаев Ю.В., Юревич Ф.Б. Тепловая защита. М. 1976.
[4] Лыков А.В. Теория сушки. М.: Энергия, 1968.
[5] Васильев Ф. П., Успенский А. Б. Разностный метод решения двухфазной задачи Стефана // ЖВМ и МФ. 1963. Т. 3. № 5. с. 874 – 886.
[6] Будак Б. М., Васильев Ф. П., Успенский А. Б. Разностные методы решения некоторых краевых задач типа Стефана. В сб. «Численные методы в газовой динамике», Изд-во МГУ, 1965. Вып. IV. с. 139 – 182.
[7] Будак Б. М., Гольдман Н. Л., Егорова А. Т., Успенский А. Б. Метод выпрямления фронтов для решения задач типа Стефана в многомерном случае. В сб. «Вычислительные методы и программирование», Изд-во МГУ, 1967. Вып. VIII. с. 103 – 120.
[8] Самарский А. А., Моисеенко Б. Д. Экономичная схема сквозного счета для многомерной задачи Стефана // ЖВМ и МФ. 1965. Т. 5. № 5. с. 816 – 827.
[9] Самарский А. А. Теория разностных схем. М.: Наука. 1989. 616 с.
[10] Самарский А. А., Вабищевич П. Н. Вычислительная теплопередача. М.: Едиториал УРСС. 2003. 784 с.
[11] Лыков А.В. Теория теплопроводности. М.: Высшая школа, 1967.
[12] Самарский А.А. Теория разностных схем. М.: Наука. 1989.
[13] Давидовский П.Н., Бровка Г.П. Тепло- и массоперенос в промерзающих торфяных системах. Мн.: Наука и техника. 1985.
[14] Бровка Г.П., Дедюля И.В., Сычевский В.А. Моделирование теплового и влажностного режимов верхнего слоя торфяных почв. // ИФЖ. 2000. Т.73, №5. С. 999–1005.
[15] Журавский Г.И., Сычевский В.А. Численный расчет парового термолиза органических отходов // ИФЖ. 2003. Т. 76, № 6. С. 104 – 109.
[16] Аристархов Д. В., Сычевский В. А. Паровой термолиз резиновых отходов // Весці НАНБ. Сер. фіз.-тэхн. навук. 2002. № 1. С. 102 – 108.

[17] Сычевский В.А., Павлюкевич Н. В., Васильев Л. Л. (мл.), Розин С. Математическое моделирование тепло- и массопереноса при испарении вещества из пористого тела в вакуум // ИФЖ. 2003. Т. 76, № 1. С. 17 – 24.
[18] Pavlyukevich N.V., Gorelik G.E., Levdansky V.V., Leitsina V.G.and Rudin G.I. Physical Kinetics and Transfer Processes in Phase Transitions. New York, 1995.
[19] Сычевский В.А. Расчет напряжений и деформаций в сферической области, заполненной водой, при ее замерзании. // ИФЖ. 2007. Т. 80, № 4. С. 173 – 1180.
[20] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теория упругости. М.: Наука. 1987. 248 с.
[21] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. М.: Наука. 1976. 584 с
[22] Базаров И. П. Термодинамика. М.: Высшая школа. 1976. 447 с.
[23] Чижов В. Е. О термодинамических свойствах и термических уравнениях состояния фаз льда высокого давления // ПМТФ. 1993. № 2. С. 113 – 123.