

ПРИБЛИЖЕННЫЙ РАСЧЕТ ЗАТВЕРДЕВАНИЯ БИНАРНОЙ СМЕСИ В ОСЕСИММЕТРИЧНЫХ ЕМКОСТЯХ

М. М. Дубина

(Якутск)

Рассмотрим динамику перераспределения напряженно-деформированного состояния и поля температуры при затвердевании бинарной смеси в емкостях, имеющих осевую симметрию. Емкости представлены цилиндрической полостью в массиве бесконечного радиуса, цилиндрическим каналом, ограниченным упругой оболочкой, и кольцевым каналом, образованным между двумя упругими оболочками разного радиуса. Во внешней по отношению к емкости среде заданы охлаждающие температурные условия. Фронт затвердевания движется от внешнего радиуса емкости к оси симметрии, вытесняя примесь в жидкую фазу с некоторым коэффициентом дистрибутивности. На фронте затвердевания скачком уменьшается плотность жидкой фазы, что приводит к росту давлений в ней и перераспределению напряжений в среде. Полагаем, что температура фазового перехода на фронте затвердевания есть функция текущих значений давления и концентрации примеси. Подобные задачи возникают в современной технологии при расчете динамики затвердевания материалов, в которых сдвиговые напряжения сравнительно быстро релаксируют и слабо сказываются на величине развиваемых в жидкой фазе давлений, достигающих значений, равновесных по фазовой диаграмме затвердевания. Частный случай такого затвердевания — замерзание рассола, когда фронт замерзания отесняет примесную растворенную соль в жидкую фазу, увеличивая в ней концентрацию, при уровне развиваемых давлений, достигающем нескольких сотен мегапаскалей. Исследуем упругопластическую модель механического поведения массива и упругую для оболочек. Задачу решаем в плоской осесимметричной постановке, при которой поля напряжений, температуры, концентраций и перемещений не зависят от координаты, параллельной оси емкости.

В соответствии с геометрией и физическим содержанием задачи выделяем три различные по своим тепломассообменным и механическим характеристикам зоны с соответствующей индексацией параметров по $i = 1, 2, 3$. Первую зону занимает жидкая фаза смеси ($a \leq r \leq s(\tau)$), вторая ($s(\tau) \leq r \leq b$) представлена твердой фазой смеси, третья ($b \leq r$) имеет место для затвердевания в полости некоторого массива, ведущего себя упругопластически при нагружении. В случае емкостей в виде оболочек третья зона отсутствует; контур $r = b$ рассматривается как радиус внешней оболочки, а контур $r = a$ может быть радиусом внутренней оболочки, причем для затвердевания внутри одиночной цилиндрической оболочки решение получаем, полагая $a = 0$. Запишем соответствующую систему уравнений теплообмена, диффузии примеси и напряженно-деформированного состояния, полагая заданной во все время процесса охлаждающую постоянную температуру T_m либо на контуре внешней оболочки, либо в окрестности бесконечно удаленной точки для полости в массиве.

Система уравнений теплообмена имеет вид

$$r \frac{\partial T_i}{\partial \tau} = a_i \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T_i}{\partial r} \right), \quad i = 1, 2, \quad \lambda_2 \frac{\partial T_2}{\partial r} \Big|_{r=s} = \lambda_1 \frac{\partial T_1}{\partial r} \Big|_{r=s} = l \rho_2 \frac{ds}{d\tau},$$

$$T_2(s, \tau) = T_1(s, \tau) = T_{\Phi}(\tau), \quad T_{\Phi}(\tau_H) = T_{\Phi H}, \quad T_2(b, \tau) = T_3(b, \tau),$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} T_3(r, \tau) = T_m \quad \text{или} \quad T_2(b, \tau) = T_m,$$

$$s(\tau_H) = b, \quad T_i(\tau_H) = T_{iH}(r).$$

Здесь T_i — температура; a_i, λ_i — коэффициенты температуропроводности и теплопроводности; l — скрытая теплота; ρ_i — плотность; τ, τ_H — текущее время, начальный момент времени; T_{iH} — начальное распределение температуры; s — координата фронта затвердевания; $T_{\Phi}, T_{\Phi H}$ — текущее, начальное значение температуры фазового перехода.

Считаем перераспределение примеси протекающим только внутри жидкой и твердой фаз смеси в емкости, поэтому соответствующие уравнения диффузии записываем только в первой и второй зонах:

$$r \frac{\partial c_i}{\partial \tau} = D_i \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial c_i}{\partial r} \right), \quad i = 1, 2,$$

$$D_2 \frac{\partial c_2}{\partial r} \Big|_{r=s} - D_1 \frac{\partial c_1}{\partial r} \Big|_{r=s} = \dot{\varepsilon} (c_2 - c_1)_{r=s},$$

$$c_2(s, \tau) = k c_1(s, \tau), \quad c_1(r, \tau_H) = c_0,$$

$$\frac{\partial c_1}{\partial r} \Big|_{r=a} = \frac{\partial c_2}{\partial r} \Big|_{r=b} = 0,$$

где c_i , D_i — концентрация, коэффициент диффузии; c_0 — начальная концентрация примеси в жидкой фазе, рассчитываемая через массовую концентрацию x ; k — коэффициент распределения примеси [1].

Уравнения напряженно-деформированного состояния задачи затвердевания без учета диффузии примеси рассмотрены в [2], где T_Φ — функция давления в жидкой фазе p в отличие от данной работы, где T_Φ — еще и функция концентрации примеси c_i . Воспользуемся приведенным в [2] решением указанных уравнений, полученным в предположении гидростатического распределения напряжений в затвердевающей смеси и имеющим вид уравнения связи давлений p и положения фронта затвердевания s .

В случае затвердевания в пространстве между двумя тонкостенными цилиндрическими оболочками указанную смесь запишем в явном виде

$$(1) \quad p = p_B + \left[\alpha_V \left(1 - \frac{s^2}{b^2} \right) + \frac{2\lambda_B \sigma_B}{b} \left(1 + \frac{a\lambda_a \sigma_a}{b\lambda_B \sigma_B} \right) \right] / \left\{ \frac{2\lambda_B}{b} \left(1 + \frac{a\lambda_a}{b\lambda_B} \right) + \frac{1}{k_2} \left[\frac{k_2}{k_1} \left(1 - \frac{a^2}{s^2} \right) \frac{s^2}{b^2} + 1 - \frac{s^2}{b^2} \right] \right\},$$

где $\lambda_a = 3a^2/(4E_a \delta_a)$; $\lambda_B = 3b^2/(4E_B \delta_B)$; E_a , E_B и δ_a , δ_B — модули упругости и толщины внутренней и внешней оболочек; k_1 , k_2 — модули объемной упругости жидкой и твердой фаз смеси; $\alpha_V = 1 - \rho_2/\rho_1$ — коэффициент объемной деформации при затвердевании ($\alpha_V > 0$); σ_a , σ_B — известные внутреннее давление на внутреннюю оболочку и внешнее на внешнюю; p_B — известное внутреннее начальное давление в пространстве между оболочками.

При затвердевании в цилиндрической полости в упругопластическом массиве вышеупомянутую связь записываем в соответствии с [2]. Считаем, что смесь затвердевает в объеме, образованном радиусом полости и поверхностью находящейся внутри нее упругой оболочки меньшего радиуса $r = a$.

На упругой стадии деформирования массива связь p и s имеет явный вид

$$(2) \quad p = p_B + \left[2(1 - \nu_3) \frac{\sigma_\infty}{G_3} + \alpha_V \left(1 - \frac{s^2}{b^2} \right) + 2a\lambda_a \frac{\sigma_a}{b^2} \right] / \left\{ \frac{1}{G_3} + \frac{2a\lambda_a}{b^2} + \frac{1}{k_2} \left[\frac{k_2}{k_1} \left(1 - \frac{a^2}{s^2} \right) \frac{s^2}{b^2} + 1 - \frac{s^2}{b^2} \right] \right\}.$$

Здесь σ_∞ — радиальное напряжение на бесконечности; $G_3 = E_3/[2(1 - \nu_3)]$; E_3 , ν_3 — модуль упругости и коэффициент Пуассона массива.

На стадии упругопластического деформирования массива, протекающей после достижения давлением величины p_g , связь давлений и фронта затвердевания можно записать как трансцендентное уравнение

$$(3) \quad p = 2(1 - \nu_3) \sigma_\infty + \tau_3 \left(1 + \ln \left(\frac{G_3}{\tau_3} \left(\alpha_V \left(1 - \frac{s^2}{b^2} \right) + \frac{2a\lambda_a \sigma_a}{b^2} + p \left\{ \frac{2a\lambda_a}{b^2} + \frac{1}{k_2} \left[\frac{k_2}{k_1} \left(1 - \frac{a^2}{s^2} \right) \frac{s^2}{b^2} + 1 - \frac{s^2}{b^2} \right] \right\} \right) \right) \right) + p_B,$$

где $p_g = 2(1 - \nu_3) + \tau_3$; τ_3 — параметр текучести массива для условия пластичности Мизеса.

Для замыкания приведенной системы уравнений относительно неизвестных $T_i(\tau)$, $c_i(\tau)$, $T_\phi(\tau)$, $s(\tau)$ и $p(\tau)$ необходимо добавить связь температуры фазового перехода с давлением и концентрацией. Это уравнение можно получить из условия равенства химических потенциалов на границе раздела фаз:

$$M \left(\frac{1}{\rho_1} - \frac{1}{\rho_2} \right) dp - Ml \frac{dT_\phi}{T_\phi} + RdT_\phi \ln \frac{1-c_1}{1-c_2} - RT_\phi \left(\frac{dc_1}{1-c_1} - \frac{dc_2}{1-c_2} \right) = 0,$$

где M — масса киломоля растворителя; R — газовая постоянная.

Представленная полная система уравнений может быть решена численно при разработке соответствующего алгоритма, а это — довольно трудоемкий путь для получения количественных результатов. Оценки взаимовлияния полей температуры, концентрации примеси и напряженно-деформированного состояния при учете зависимости T_ϕ от давления и концентрации могут быть получены при упрощении исходной системы. Полагая безградиентной по температуре жидкую фазу и квазистационарным распределение температуры в затвердевшей зоне, значительно упрощаем теплообменную часть системы. Диффузионную часть системы упрощаем, считая безградиентными обе фазы по концентрации, а все перераспределение примеси происходящим на фронте затвердевания согласно уравнению баланса концентрации в жидкой фазе $c = c_1(\tau)$.

$$(4) \quad c = c_0 \left(\frac{b^2 - a^2}{s^2 - a^2} \right)^{1-k}.$$

Если предположить также несжимаемость смеси в обеих фазах $k_1 = k_2 = \infty$ и жесткость внутренней оболочки для случая затвердевания в полости $\lambda_a = 0$, то вместо трансцендентного уравнения (3) будем иметь аналогично (1) и (2) явную связь $p(s)$ на стадии пластического деформирования массива.

При сделанных допущениях исходная система уравнений в частных производных сводится к системе двух обыкновенных дифференциальных уравнений в безразмерном виде

$$(5) \quad \frac{dy}{dt} = - \frac{\lambda (\Theta_M - \Theta_\phi)}{y \ln y};$$

$$(6) \quad \left(\beta \ln \frac{1-c}{1-kc} - \Theta_\phi \right) d\Theta_\phi = \psi_0 \alpha_V df + \beta \Theta_\phi \frac{(1-k)}{(1-c)(1-kc)} dc,$$

где $y = \frac{s}{b}$; $\Theta_\phi = \frac{T_\phi}{T_0}$; $\Theta_M = \frac{T_M}{T_0}$; $t = \frac{\tau}{\tau_0}$; $f = \frac{p}{p_0}$; $\lambda = \frac{\lambda_2 T_0 \tau_0}{l \rho_2 b^2}$; $\beta = \frac{RT_0}{Ml}$; $\psi_0 = \frac{p_0}{\rho_2 l}$;

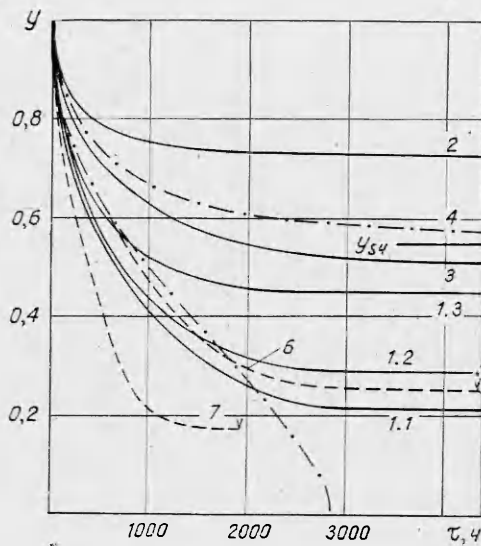
τ_0 , T_0 , p_0 — масштабы времени, температуры и давления.

Отметим, что при указанных выше упрощающих допущениях для входящих в систему (5), (6) параметров c и f получаем явные выражения (1)–(4), а выражения для давлений (1), (2) будут количественно давать одинаковый результат, если $\sigma_\infty \neq 0$ и выполняется связь механических параметров

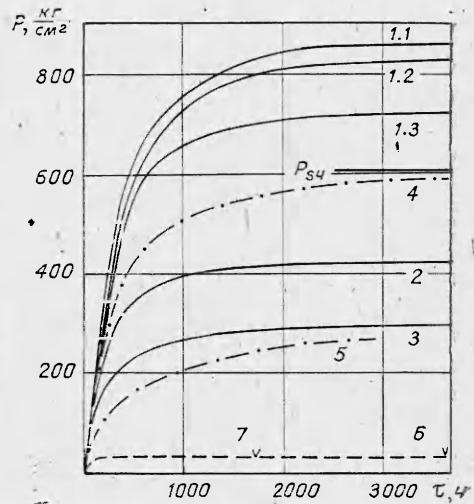
$$(7) \quad G_3 = b/(2\lambda_b), 2\sigma_\infty(1 - \nu_3) = \sigma_b.$$

Это соотношение позволяет примеры расчета для затвердевания между оболочками пересчитывать на случай затвердевания в заполненной смеси полости в упругой в течение всего процесса среде.

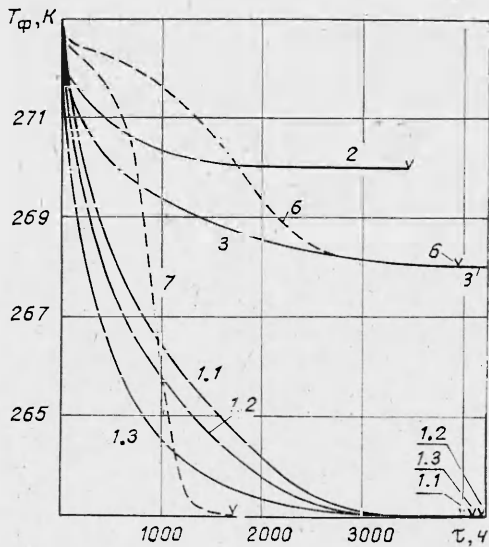
Оценочные расчеты по предлагаемой модели приводятся для замерзания водного раствора соли NaCl. В расчетах положены постоянными значения параметров: $\tau_0 = 1$ ч, $T_0 = 273$ К, $p_0 = 1$ кгс/см², $k = 0,01$, $R = 8,32 \cdot 10^3$ Дж/(К·моль), $M = 0,018$ кг/моль, $l = 334 \cdot 10^3$ Дж/кг, $\lambda_2 = 2,21$ Вт/(м·К), $\rho_1 = 1000$ кг/м³, $\rho_2 = 910$ кг/м³, $\delta_a = \delta_b = 0,01$ м,



Р и с. 1



Р и с. 2



Р и с. 3

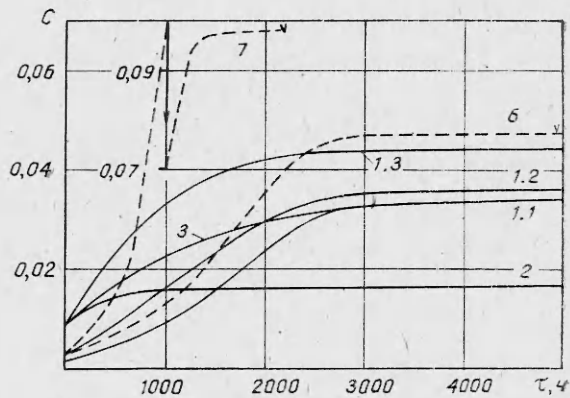
$E_a = E_b = 2 \cdot 10^6$ кгс/см², $a = 0$,
 $b = 1$ м, $k_1 = k_2 = \infty$, $\sigma_a =$
 $= \sigma_b = p_b = \sigma_\infty = 0$.

На рис. 1–4 представлены результаты расчета замерзания раствора соли в полости для упругой (сплошные линии) и упругопластической (штриховые) моделей вмещающего полость массива. Штрихпунктиром нанесены графики расчета при нулевой концентрации примеси. Для сравнительного анализа приведены семь вариантов условий задачи (кривые 1.1–1.3 для варианта 1, 2–7 — для остальных). Кривые 1.1–1.3 соответствуют начальной концентрации $x = 2,5; 5; 15$ кг/м³ при $T_M = 263$ К, 2 и 3 — $G_3 = 1 \cdot 10^4$ и $0,3 \cdot 10^4$ кгс/см² при $T_M = 268$ К, $x = 15$ кг/м³, 4 и 5 — тем же значениям T_M и G_3 , но при $x = 0$.

Графики 6 и 7 построены для упругопластической модели вмещающего полость массива при одинаковых $\tau_3 = 5$ кгс/см², $G_3 = 5 \cdot 10^4$ кгс/см², $x = 5$ кг/м³ для $T_M = 268$ и 263 К. Заметим, что, согласно (7), приведенные линии 1–5 соответствуют также случаю замерзания в одиночной оболочке, для которой при $b = 0,27$ м и $E_b = 2 \cdot 10^6$ кгс/см² значению $G_3 = 1 \cdot 10^4$ кгс/см² отвечают $\delta_b = 2 \cdot 10^{-3}$ м, а значению $G_3 = 0,3 \cdot 10^4$ кгс/см² — $\delta_b = 6,7 \cdot 10^{-4}$ м.

Анализ результатов расчетов показывает существенное влияние учета примеси на динамику фронта s (рис. 1), давлений p (рис. 2), температуры фазового перехода T_f (рис. 3) и концентрации c (рис. 4). При отсутствии примеси ($x = 0$, кривые 4 и 5) процесс протекает либо до полного затвердевания (кривая 5 на рис. 1), либо фронт стремится к стационарному значению y_{s4} за бесконечный промежуток времени, а давления выходят на значения равновесных p_{s4} (кривая 4 на рис. 1, 2). Расчеты при тех же значениях охлаждающей температуры T_M и параметра G_3 , но с учетом примеси дают меньшие величины давлений (кривые 2 и 3 на рис. 2), причем упрочнение массива (или оболочек) повышает уровень давлений,

В случае наличия примеси, во-первых, полного затвердевания не наблюдается, и все параметры процесса выходят на стабилизированные значения за конечный промежуток времени в некоторый момент, который отмечен знаком V на графиках; во-вторых, давления при $x \neq 0$ меньше, чем при $x = 0$ (кривые 2—4). Увеличение начальной концентрации примеси снижает развиваемые давления и объем затвердевшей фазы, что иллюстрируют линии 1.1 — 1.3.



Р и с. 4

Учет пластических деформаций массива вокруг полости значительно снижает развиваемые давления, которые для двух значений T_M имеют очень близкие графики во времени (6, 7 на рис. 2), но разные моменты достижения стабилизированных значений. Для упругопластической модели понижение T_M ускоряет выход параметров на стабилизированные значения, увеличивает объем затвердевшей фазы (см. рис. 1) и значительно увеличивает стабилизированную концентрацию (кривые 6, 7 на рис. 4). Такое сильное увеличение стабилизированного значения концентрации обусловлено ускорением затвердевания при понижении T_M , что в реальных условиях уменьшает время на выравнивание поля концентраций примеси в фазах смеси. Менее ярко выраженный количественно этот эффект наблюдается и для упругой модели полости (или случая одиночной оболочки) — это видно из сравнения кривых 2 и 1.3 на рис. 4.

В заключение отметим следующее. Во-первых, результаты расчетов затвердевания в пространстве между соосными оболочками качественно мало отличаются от приведенных здесь примеров. Во-вторых, согласно расчетам, проведенным для значения k , изменявшегося в пределах от $1 \cdot 10^{-2}$ до $1 \cdot 10^{-6}$, уменьшение его интенсифицирует выталкивание примеси в жидкую фазу, что приводит к снижению величины стабилизированного давления. В-третьих, проведенные расчеты показали возможность прогноза во времени нагружения и оценки надежности вмещающих затвердевающую массу емкостей. В-четвертых, расчеты не выявили режимов затвердевания с существованием переходной фазы.

Приведенная модель затвердевания не включает возможности возникновения переходной фазы, рассматриваемой в [3, 4]. Описание процесса затвердевания с переходной фазой в исследуемой здесь задаче требует дополнения математической модели. Переходная фаза в рассматриваемой задаче не возникнет, когда температура твердой фазы меньше температуры фазового перехода.

ЛИТЕРАТУРА

1. Воеводин А. Ф., Леонтьев Н. А., Петрова А. Г. Термодиффузионная задача о кристаллизации шара. — В кн.: Упругопластические модели и задачи. Новосибирск: ИГ СО АН СССР, 1982, вып. 55.
2. Дубина М. М., Красовицкий Б. А. Теплообмен и механика взаимодействия трубопроводов и скважин с грунтами. — Новосибирск: Наука, 1983.
3. Fasano A., Pimpinio M. A parabolic-hyperbolic problem: mushy regions with variable temperature in melting processes. Preprint N 4. Istituto Matematico «Ulisse Dini». Firenze, 1982/1983.
4. Мейрманов А. М. Пример несуществования классического решения задачи Стефана. — ДАН СССР, 1981, т. 258, № 3.

Поступила 30/IV 1985 г.