

На правах рукописи

**Самылова Юлия Андреевна**

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАМЕРЗАНИЯ ВОДЫ  
С РАСТВОРЕННЫМ ГАЗОМ В ЗАМКНУТЫХ ОБЪЕМАХ**

05.13.18 – Математическое моделирование,  
численные методы и комплексы программ

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Тюмень – 2010

Работа выполнена на кафедре высшей математики и информатики ГОУ ВПО ХМАО-Югры «Сургутский государственный педагогический университет»

Научный руководитель: кандидат физико-математических наук, доцент  
**Сигунов Юрий Александрович**

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, профессор  
**Аксенов Борис Гаврилович**

кандидат физико-математических наук, доцент  
**Гореликов Андрей Вячеславович**

Ведущая организация: **Тюменское отделение СургутНИПИнефть**

Защита состоится «21» декабря 2010 г. в 16:00 часов на заседании диссертационного совета Д 212.274.14 при Тюменском государственном университете по адресу 625003, г. Тюмень, ул. Перекопская 15А, ауд. 410.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Тюменского государственного университета.

Автореферат разослан «\_\_\_» ноября 2010 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета



Бутакова Н.Н.

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность темы.** В условиях холодного климата замерзание водосодержащих сред часто приводит к негативным последствиям, таким как закупорка, деформация и разрывы труб скважин или систем водоснабжения. Причиной является интенсивный рост давления в замерзающем объеме из-за разности плотностей воды и льда. На практике имеет место задержка стадии резкого роста давления на некоторый период. На длительность этого периода может повлиять растворенный в воде воздух (или любой газ некоторого состава). Отторжение растворенного газа из образовавшегося льда в незамерзшую область повлечет его диффузию и выделение в свободную фазу при превышении равновесного значения. Появление в системе пузырьков газа увеличит сжимаемость среды, что повлияет и на динамику замерзания, и на темпы роста давления в объеме. При математическом моделировании замерзания замкнутых объемов обычно учитывают только зависимость температуры замерзания от давления. Анализ влияния растворенного газа на условия замерзания замкнутых масс в известных математических моделях не встречается.

Включение фактора растворенного газа в модель замерзания замкнутого объема приводит к термодиффузионной задаче с фазовым переходом. Нетривиальность её постановки в данном исследовании состоит в учете возможного выделения газа из перенасыщенного раствора. При этом возникает сложная нелинейная зависимость между скоростью замерзания и интенсивностью выделения газа, связываемая через уравнение для роста давления, определяющегося обоими указанными факторами. Решение возникающей системы нелинейных уравнений теплообмена и диффузии с подвижной границей аналитически невозможно, а численное интегрирование требует дополнительных усилий для разработки эффективного и надежного вычислительного алгоритма.

Поэтому актуальность представленной работы обусловлена как необходимостью построения и исследования адекватных математических моделей для имеющих важное практическое значение процессов замерзания водных сред в замкнутых объемах, так и требованиями развития алгоритмов численного решения задач совместного тепломассопереноса с фазовыми превращениями.

**Целью работы** является численное моделирование процесса замерзания газонасыщенной жидкости в замкнутом объеме для количественной оценки степени влияния растворенного газа на процесс замерзания и динамику роста давления в замерзающем объеме.

Основными **задачами** работы являлись:

- 1) разработка математической модели замерзания замкнутых объемов воды, учитывающей влияние выделения растворенного газа на динамику роста давления;

- 2) разработка и программная реализация численного алгоритма для исследования предложенной модели;
- 3) апробация математической модели и разработанного алгоритма на модельных задачах и экспериментальных данных;
- 4) численное исследование влияния исходных и внешних условий на динамику роста давления в замерзающем объеме.

**Научная новизна работы** заключается в следующем:

- 1) предложена математическая модель замерзания воды с растворенным газом в замкнутом объеме, которая учитывает изменение сжимаемости среды вследствие выделения газа;
- 2) разработаны и апробированы алгоритм и программа численного решения поставленной новой термодиффузионной задачи с фазовым переходом вода-лед;
- 3) выявлен ряд закономерностей динамики замерзания и роста давления в замкнутых объемах, которые не воспроизводятся моделями, не учитывающими фактор растворенного газа.

**Обоснованность и достоверность положений, выводов и результатов**, защищаемых в диссертации, обеспечиваются использованием основных законов сохранения, принципов математического описания процессов теплообмена и диффузии, подтвержденных экспериментально физических законов. Алгоритм численного решения и программное обеспечение проверены на тестовых задачах, а полученные решения сопоставлены с результатами экспериментов.

**Теоретическая и практическая ценность.** Результаты численного исследования замерзания газонасыщенной жидкости в замкнутом объеме позволяют более точно прогнозировать динамику протекания данного процесса, в частности интенсивность роста давления в объеме. Их анализ приводит к формулировке ряда новых практически значимых выводов.

Для решения задачи разработан, реализован в виде программного обеспечения и апробирован на тестах численный метод с подвижными расчетными сетками, привязанными к значениям рассчитываемых полей температуры и концентрации. Разработанные алгоритмы и программное обеспечение могут быть использованы для научно-технических расчетов при исследовании аналогичных процессов.

**Апробация работы.** Основные положения и результаты исследований по теме диссертации докладывались и обсуждались на Международной конференции XIII International Conference on the Methods of Aerophysical Research (Новосибирск, 2007); на VIII Всероссийской конференции молодых ученых по математическому моделированию и информационным технологиям (Новосибирск, 2007); на IV, V, VII конференциях «Наука и инновации XXI века: Открытая окружная конференция молодых ученых» (Сургут, 2003, 2004, 2006); на Региональном конкурсе научных студенческих работ (Тюмень, 2004); на VIII и IX научных конференциях преподавателей, аспирантов и соискателей СурГПУ (Сургут, 2004, 2005); на научно-

исследовательском семинаре под руководством профессора В.Н. Кутрунова при ТюмГУ (Тюмень, 2010); на научных семинарах аспирантов и соискателей СурГПУ «Численное моделирование процессов тепломассопереноса» (Сургут); на научно-методических семинарах кафедры высшей математики информатики СурГПУ (Сургут).

**Публикации.** По теме диссертации опубликовано 10 работ.

**Структура и объем работы.** Диссертация состоит из введения, трёх глав, заключения, списка литературы, содержащего 109 наименований, и приложения. Работа содержит 37 рисунков и 12 таблиц. Полный объем диссертации составляет 115 страниц.

## ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

**Основания к построению модели.** Рост давления внутри замерзающего объема является хорошо известным явлением. Исследованию роста давлений и возникающих напряжений посвящены как теоретические, так и экспериментальные работы. Многочисленные натурные наблюдения показывают образование и рост пузырьков воздуха при замерзании воды. Влияние содержания газа в воде отмечалось в экспериментальных работах по замораживанию капель воды, в том числе фиксировалась задержка роста давления, обусловленная выделением растворенного газа.

Фазовые превращения чистых веществ описываются известной задачей Стефана, для которой имеются многочисленные работы по её теоретическому исследованию и методам приближенного и численного решения. Описание затвердевания растворов приводит к совместным задачам теплообмена и диффузии с фазовым переходом. Термодиффузионные задачи возникают при моделировании затвердевания растворов соли и кристаллизации бинарных расплавов. Аналогичной задачей можно описать процесс замерзания воды, содержащий растворенный газ.

**Математическая модель.** Постановка задачи замерзания воды с растворенным газом в замкнутом объеме является ключевым элементом в разработке и исследовании предлагаемой новой математической модели процесса.

Предлагаемая математическая модель включает:

- кондуктивный теплоперенос с фазовым переходом с учетом зависимости температуры замерзания от давления в объеме;
- отторжение растворенного газа из замерзшего объема, изменение его концентрации вследствие диффузии и выделение в свободную фазу при превышении равновесной концентрации;
- изменение давления в замерзающем объеме в процессе роста объема льда.

В постановке задачи не учитываются возможные конвективные течения, что представляется допустимым при небольших размерах среды (например, для труб с малым отношением диаметра к длине).

Рассматривается ограниченный объем воды  $V_0$  в форме пластины толщиной  $R$  с теплоизолированной поверхностью  $r = 0$ , либо цилиндрической

или сферической области радиуса  $R$  с внутренним вырезом радиуса  $r_0$ . Вода имеет однородную начальную температуру  $T_0$  и содержит растворенный газ объемной концентрации  $C_0$ . Начальные температура и концентрация соответствуют равновесным значениям температуры замерзания и растворимости газа для начального давления в водном объеме  $P_0$ . С поверхности  $r = R$  происходит охлаждение посредством заданной температуры или по закону конвективного теплообмена с внешней средой температуры  $T_b < T_0$ , приводящее к замерзанию водного объема с начального момента времени.

*Тепловая часть задачи.* Перенос тепла и замерзание воды описывается краевой задачей с подвижной границей  $r = r_m(t)$ :

$$\frac{\partial T_w}{\partial t} = a_w \Delta T_w, \quad 0 < r < r_m(t); \quad (1)$$

$$\frac{\partial T_i}{\partial t} = a_i \Delta T_i, \quad r_m(t) < r < R, \quad \Delta T = \frac{1}{r^s} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^s \frac{\partial T}{\partial r} \right); \quad (2)$$

$$T_w = T_i = T_m(P), \quad \lambda_i \frac{\partial T_i}{\partial r} - \lambda_w \frac{\partial T_w}{\partial r} = -L \frac{dr_m}{dt} \quad \text{при } r = r_m(t); \quad (3)$$

$$\lambda_i \frac{\partial T_i}{\partial r} = h(T_b - T_i) \quad \text{или } T_i = T_b \quad \text{при } r = R; \quad (4)$$

$$r^s \frac{\partial T_w}{\partial r} = 0 \quad \text{при } r = r_0; \quad (5)$$

$$T_w = T_0, \quad r_m = R \quad \text{при } t = 0, \quad (6)$$

где  $a$  и  $\lambda$  – коэффициенты температуропроводности и теплопроводности;  $s = 0, 1, 2$  соответственно для плоской, цилиндрической и сферической геометрий;  $L$  – объемная теплота фазового перехода вода-лед,  $h$  – коэффициент теплоотдачи. Индексы  $w$  и  $i$  соответствуют воде и льду. В системе уравнений предусмотрено задание двух вариантов граничных условий: первого рода и третьего.

Температура замерзания  $T_m(P)$  определяется давлением в незамерзшем объеме из уравнения Клаузиуса-Клапейрона:

$$\frac{dT_m}{dP} = \left( \frac{\rho_i}{\rho_w} - 1 \right) \frac{T_m + 273.2}{L}.$$

*Диффузионная часть задачи.* В ходе замерзания воды растворенный в ней газ отторгается в незамерзшую область, вызывая перераспределение концентрации в последней вследствие диффузии. При перенасыщении раствора часть газа выделяется в свободную фазу в виде растущих пузырьков. Этот процесс описывается уравнениями диффузии с условием на поверхности раздела фаз и стоковым членом, задающим скорость выделения газа:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \Delta C - f(C), \quad 0 < r < r_m(t); \quad (7)$$

$$D \frac{\partial C}{\partial r} = -C \frac{dr_m}{dt} \quad \text{при } r = r_m(t); \quad (8)$$

$$r^s \frac{\partial C}{\partial r} = 0 \quad \text{при } r = r_0; \quad C = C_0 \quad \text{при } t = 0, \quad (9)$$

где  $D$  – коэффициент диффузии газа в воде, функция  $f(C)$  задает интенсивность выделения газа в свободную фазу в зоне перенасыщенного раствора.

Процесс формирования и роста пузырьков газа в перенасыщенном растворе имеет довольно сложный характер. В литературе отмечается, что удовлетворительного математического описания не имеет даже задача о газовыделении из однородной среды при резком уменьшении давления. С учетом этого в нашей модели для функции интенсивности газовыделения в качестве первого приближения принималась линейная зависимость

$$f(C) = k_c H(C - C_{eq})(C - C_{eq}),$$

где  $H(C)$  – функция Хевисайда;  $k_c$  – коэффициент, имитирующий задержку, обусловленную консолидацией молекул в пузырьки, повышающие сжимаемость среды.

Следует отметить, что в теории растворимости аналогичные линейные приближения часто используются. При растворении твердых частиц в жидкости линейная зависимость скорости растворения вещества от разности его концентрации в растворе и равновесной концентрации экспериментально установлены опытами Щукарева и Нернста. Такая линейная зависимость принимается в уравнениях, описывающих процесс сорбции газа. Кроме того, при больших значениях коэффициента пропорциональности  $k_c$  функция источника будет соответствовать равновесным условиям, при которых молекулы газа мгновенно выделяются в свободную фазу. Такое допущение принимается во многих работах при описании газовыделения из перенасыщенного раствора.

Для равновесной концентрации принимается линейная зависимость от давления, выражаемая законом Генри

$$C_{eq} = \Gamma P,$$

где  $\Gamma$  – постоянная растворимости, зависящая от состава газа.

*Безразмерные переменные и параметры.* Для предварительного анализа модели, а так же для проведения расчетов и их сопоставительной обработки система уравнений теплообмена и диффузии приводилась к безразмерному виду. Пространственная координата нормировалась к размеру замерзающего объема, концентрация и давление – к их начальным значениям, температура – к диапазону её изменения:

$$\xi = \frac{r}{R}, \quad \eta = \frac{r_m}{R}, \quad \tau = \frac{a_i t}{R^2},$$

$$\theta_i = \frac{T_0 - T_i}{T_0 - T_b}, \quad \theta_w = \frac{T_0 - T_w}{T_0 - T_b}, \quad \sigma = \frac{C}{C_0}, \quad \varphi = \frac{P}{P_0}.$$

Структура уравнений при этом не меняется и поэтому в автореферате не приводится. Переход к безразмерному виду приводит лишь к изменениям коэффициентов уравнений при уменьшении их количества. Входящие в постановку безразмерные параметры будут определяться соотношениями:

$$\alpha = \frac{a_i}{a_w}; \quad \varepsilon_m = \frac{\lambda_w}{\lambda_i}; \quad \delta = \frac{a_i}{D}; \quad St = \frac{c_i(T_0 - T_b)}{L}; \quad Bi = \frac{h\lambda_i}{R}.$$

Первые три параметра определяются известными физическими свойствами воды, льда и газа, а значения двух последних (число Стефана  $St$  и число Био  $Bi$ ) варьируются в зависимости от интенсивности охлаждения.

Функция газовой выделенности в безразмерных величинах в рамках линейной зависимости примет вид

$$f(\sigma) = k_{\sigma} H(\sigma - \sigma_{eq})(\sigma - \sigma_{eq}),$$

где  $k_{\sigma} = k_c R^2 / D$  – безразмерный параметр, определяющий скорость газовой выделенности.

*Уравнение роста давления в замерзающем объеме.* Отдельным элементом, замыкающим полную постановку задачи, является вывод уравнения для роста давления в замерзающем объеме с учетом накопленного количества свободного газа. Рост давления происходит из-за меньшей плотности льда по сравнению с водой, так что при замерзании некоторой массы воды такая же масса льда уже будет занимать больший объем.

Образовавшийся избыточный объем льда должен компенсироваться соответствующим уменьшением объемов газа, воды и льда за счет их сжимаемости. При образовании дополнительного объема льда  $dV_i$  должно выполняться равенство

$$(1 - \rho_i / \rho_w) dV_i = -(\delta V_i + \delta V_w + \delta V_a),$$

где через  $\rho$  обозначены плотности, а через  $\delta V$  – изменение объемов соответствующих сред, обусловленное их сжимаемостью. Индекс  $a$  здесь и далее отнесен к газу в свободном состоянии.

Считая лед и воду слабосжимаемыми, а газ идеальным, из последнего уравнения баланса объемов в работе выведено дифференциальное уравнение

$$\frac{d\varphi}{d\psi} = \frac{\chi\varphi^2}{(b_1 - b_2\psi)\varphi^2 + (1 - b_1\varphi)v}, \quad (10)$$

связывающее приведенное давление с относительными объемами образовавшегося льда ( $\psi = V_i / V_0$ ) и накопленного свободного газа ( $v = V_a / V_0$ ). Здесь  $\chi = 1 - \rho_i / \rho_w$  считается постоянной и независимой от давления величиной, равной при атмосферных условиях 0.083, коэффициенты  $b_1$  и  $b_2$  определены равенствами  $b_1 = \beta_w P_0$ ,  $b_2 = (\beta_w - \beta_i) P_0$ . Начальным условием для дифференциального уравнения является  $\varphi(0) = 1$ .

Приведенная выше система дифференциальных уравнений представляет математическую модель замерзания замкнутого водного объема, в которой учитывается изменение сжимаемости системы вследствие увеличения доли свободного газа.

**Предварительный анализ влияния растворенного газа.** Для предварительной оценки можно рассмотреть два предельных случая. Первый из них не учитывает дополнительного выделения газа, второй соответствует мгновенному выделению всего газа из замерзшей воды. Для таких идеализированных условий достаточно лишь одного уравнения роста давления, в котором  $v(\tau) = v_0 + C_0\psi$  и для первого случая  $C_0 = 0$ .

Сопоставление показывает, что выделение растворенного газа существенно повышает сжимаемость среды и приводит к задержке роста давления (рис. 1). Исключение составляет случай, когда в объеме в начальный момент полностью отсутствует газ в свободном состоянии. В этом случае происхо-



дит резкое возрастание давления и дополнительное выделение газа (при заданных начальных концентрациях) не успевает оказать существенного влияния на повышение сжимаемости системы. В реальности мгновенного роста давления не происходит в силу слабой прочности тонкого слоя льда, а так же некоторого количества газа, захватываемого потоком воды при заполнении объема. С увеличением начальной сжимаемости системы (увеличение значения  $\nu_0$ ) влияние растворенного газа на темпы роста давления проявляется сильнее. В действительности следует ожидать некоторой промежуточной динамики роста давления, т.к. в свободную фазу выделяется лишь некоторая доля растворенного газа. Здесь требуется учет всех включенных выше в полную модель факторов.

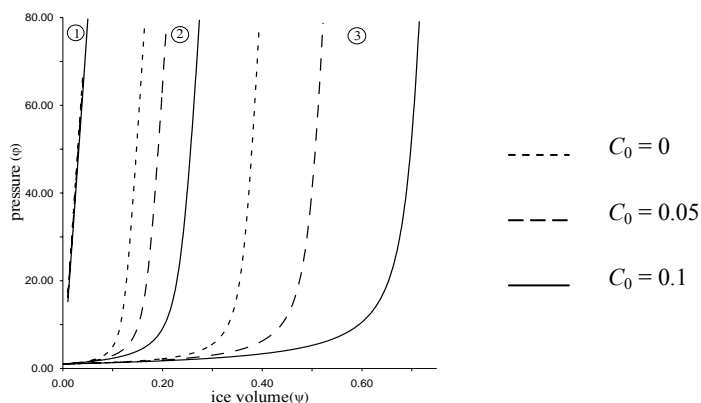


Рис. 1 Динамика роста давления при замерзании жидкости с выделением газа в свободную фазу (1 –  $\nu_0 = 0$ ; 2 –  $\nu_0 = 0.01$ ; 3 –  $\nu_0 = 0.03$ )

**Численный метод.** Предлагаемая к исследованию математическая модель приводит к термодиффузионной задаче с подвижной границей, содержащей ряд дополнительных уравнений и нелинейных связей. При решении термодиффузионных задач необходимо применять алгоритмы с явным выделением границы фазового перехода. Кроме того распределения температуры и концентрации имеют разные пространственные масштабы, различающиеся на порядки. Поэтому для расчета двух связанных частей задачи требуется различная пространственная дискретизация.

По этим причинам в основу расчетного алгоритма нами было положено использование конечно-элементных схем на подвижных сетках, для которых распределение узлов определяется самими значениями рассчитываемых температур и концентраций. Использование таких сеток снимает проблему одновременного расчета связанных процессов с разными пространственно-временными масштабами.

Поставленная задача характеризуется наличием сквозных нелинейных связей, стыкующих тепловую и диффузионную части задачи через уравнение роста давления и интенсивность газовыделения. Для численного решения полной системы уравнений применялась итерационная процедура расчета одного временного шага, состоявшая из следующих этапов.

1. Для заданного объема свободного газа  $v$  решаются уравнения теплопереноса (1) – (6) по итерационной схеме:

1.1. Для заданного положения границы замерзания из уравнения (10) рассчитывается давление в области и соответствующая ему температура замерзания  $\theta_m(\varphi)$ .

1.2. Для рассчитанного значения температуры замерзания  $\theta_m(\varphi)$  определяется поле температуры и новое положение фазовой границы.

Этапы 1.1. и 1.2. итерировуются до достижения сходимости по величине температуры замерзания. На каждой итерации координаты внутренних узлов сетки пересчитываются с учетом нового положения фронта фазового перехода.

2. Решение уравнений диффузии (7)–(9) построено на основе схемы расщепления. Давление в системе и соответствующая ему равновесная концентрация берутся из решения этапа 1.

2.1. С учетом найденного на предшествующем этапе положения границы замерзания, исходя из уравнения (8), вычисляется поток газа, отторгаемого из замерзшей воды, и распределение концентрации растворенного газа без учета его выделения в свободную фазу. На данном этапе рассчитываются новые значения концентрации на фронте  $\sigma_M$  и координаты узлов  $\eta_i$  с заданными значениями концентрации  $\sigma_i$  ( $i = 0, 1, \dots, N - 1$ ).

2.2. Концентрации растворенного газа в узлах сетки пересчитываются с учетом его выделения в свободное состояние на основе уравнения:

$$\delta \frac{\partial \sigma_i}{\partial \tau} = k_\sigma (\sigma_{eq} - \tilde{\sigma}_i)$$

для  $\tilde{\sigma} > \sigma_{eq}$ , где  $\tilde{\sigma}_i$  – значения узловых концентраций с предыдущего шага

2.1. Принимая на начало временного шага значения узловых концентраций равными  $\tilde{\sigma}_i$ , пересчет их значений с учетом выделения газа из раствора за временной шаг  $\Delta\tau$  производится по формуле:

$$\sigma_i = \sigma_{eq} + (\tilde{\sigma}_i - \sigma_{eq}) e^{-\frac{k_\sigma \Delta\tau}{\delta}}$$

2.3. Для нового значения концентрации на фронте  $\sigma_M$  пересчитываются узловые концентрации  $\sigma_i$ , исходя из равномерного разбиения интервала  $[1; \sigma_M]$ . Процедура решения повторяется до достижения сходимости по величинам концентрации на фронте и координатам узлов сетки.

3. По результатам решения уравнений для концентрации пересчитывается накопленное содержание свободного газа в объеме  $v(\tau)$  и производится возврат к этапу 1.

Таким образом, на ряду с внутренними итерациями решение уравнений теплообмена и уравнений диффузии связано внешним итерационным циклом. Критерием окончания итераций является достижение сходимости по величинам давления  $\varphi$  и объема накопленного свободного газа  $v$  на конец временного шага.

**Программная реализация исследуемой математической модели.** Описанный алгоритм численного решения исследуемой задачи в её полной

постановке был реализован в виде компьютерной программы на алгоритмическом языке Fortran.

Разработанный программный комплекс состоит из нескольких модулей, включающих основную программу и ряд функциональных процедур. По своему назначению последние можно условно разделить на служебные и процедуры, реализующие конечно-элементные аналоги дифференциальных операторов, составляющих уравнение системы. Фактически данные процедуры, написанные в виде подпрограмм, реализуют конечно-элементную схему решения задач с подвижной границей. Их назначение состоит в формировании системы численных уравнений, компонент матрицы Якоби и расчет одной итерации по методу Ньютона для полученной системы. Важно отметить, что две составные части задачи (тепловая и диффузионная) имеют подобную структуру, поэтому их расчет проводится с использованием одних и тех же функциональных модулей. Это позволяет значительно сократить трудоемкость программирования алгоритма. Отдельная процедура обеспечивает расчет начального распределения узлов расчетной сетки из асимптотических приближений. В рамках этих процедур реализована возможность расчета трёх геометрий задачи (плоской, цилиндрической, сферической).

**Апробация численного алгоритма.** Предварительная апробация алгоритма и программы была проведена на модельных задачах. В качестве первого теста бралась задача Стефана с заданной температурой замерзания в виде функции текущего положения фронта. Вторым примером являлась задача по замерзанию воды с растворенным газом без учета газовой выделенности. Последняя задача для полуограниченной однородной среды имеет точное автомодельное решение. В других случаях, где точное решение недоступно сопоставлялись результаты расчетов на последовательности сгущающихся сеток.

Далее алгоритм численного решения вместе с разработанной итерационной процедурой был протестирован на полной постановке задачи с сопоставлением результатов счета на сетках с разным числом узлов. При этом дополнительно отслеживалось выполнение баланса по объему газа отторгаемого в незамерзшую часть, растворенного в воде и выделившегося в свободное состояние. Величина дисбаланса не превосходила 0,1%. По результатам этих тестов были подобраны параметры расчетных сеток для последующих численных экспериментов.

**Сопоставление модели с экспериментальными данными.** Для оценки степени адекватности предложенной модели, а так же корректности работы вычислительного алгоритма, было получено решение задачи, для которой имеются замеры возникающих в объеме давлений. Для сопоставления были взяты результаты экспериментов по измерению давления внутри замерзающих капель воды (P.J. Visagie, 1969). Условиями эксперимента обеспечивалось выдерживание сферического объема капли и равномерность охлаждения по всей поверхности в течение замерзания. Данные эксперименты представляют интерес тем, что в них исследовалось влияние концентрации раство-

ренных газов в замерзающей капле в частности на период задержки роста давления.

Соответствующая задача для сферической геометрии была численно решена в предложенной в работе постановке. На рис. 2 представлено сопоставление результатов численного счета и давлений, измеренных в экспериментах.

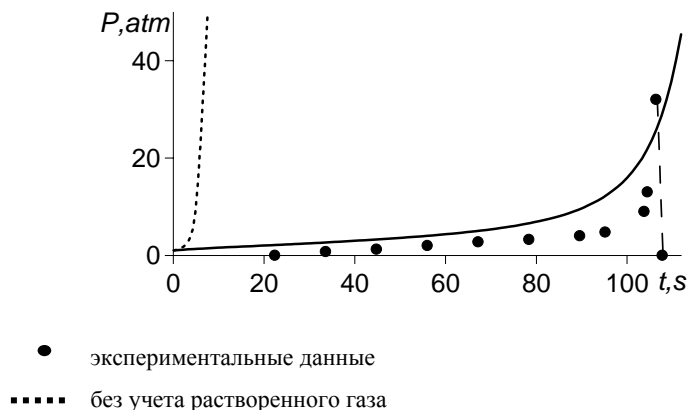


Рис. 2. Динамика роста давления в замерзающей капле.

Представленные результаты соответствуют замерзанию капли воды диаметром 7 мм, насыщенной при атмосферных давлениях двуокисью углерода ( $\text{CO}_2$ ). В силу высокой начальной концентрации растворенного газа, давление резко возрастает лишь на последней стадии замерзания, что приводит в экспериментах к разрушению капли и сбросу давления. Результаты счета показывают хорошее качественное и количественное согласование с экспериментом. Отметим, что такое согласование получено для значения эмпирического коэффициента в функции стока  $k_\sigma = 1.5 \cdot 10^4$ .

**Результаты численных экспериментов.** Целью проведения численных экспериментов являлась оценка влияния растворенного в воде газа на процесс замерзания в замкнутых объемах. Для этого сопоставлялись решения задачи при различных значениях входных параметров: температуры охлаждения  $T_b$ , безразмерного коэффициента теплоотдачи  $Bi$ , начальной концентрации растворенного газа  $C_0$ , формы объема, исходного относительного содержания свободного газа  $v_0$ . Все представленные ниже результаты, если это не оговаривается особо, соответствуют замерзанию цилиндрической полости.

Прежде всего, интерес представляла оценка **влияния интенсивности газовыделения из перенасыщенного раствора**, которая определяет сжимаемость системы и зависит от коэффициента  $k_\sigma$  функции  $f(\sigma)$ . В отсутствие необходимых экспериментальных данных, этот коэффициент варьировался в диапазоне  $10^3 \div 10^5$  безразмерных единиц. Верхнее значение диапазона соответствует практически мгновенному выделению газа сверх его равновесного значения. Расчеты показывают, что учет повышения сжимаемости за счет выделения растворенного газа приводит к существенным изменениям в моделируемой динамике процесса замерзания. От интенсивности консолидации

молекул в пузырьки свободного газа сильно зависит динамика роста давления в объеме (рис. 3 *a*). Следствием этого является различие в темпах образования льда, а также его стационарного объема, достигаемого к моменту снижения температуры замерзания до температуры охлаждения, когда замерзание воды прекращается (рис. 3 *b*). Максимальный объем льда, образующийся при  $k_\sigma = 0$ , составляет 0.363, а при  $k_\sigma = 10^5$  эта величина увеличивается до 0.523.

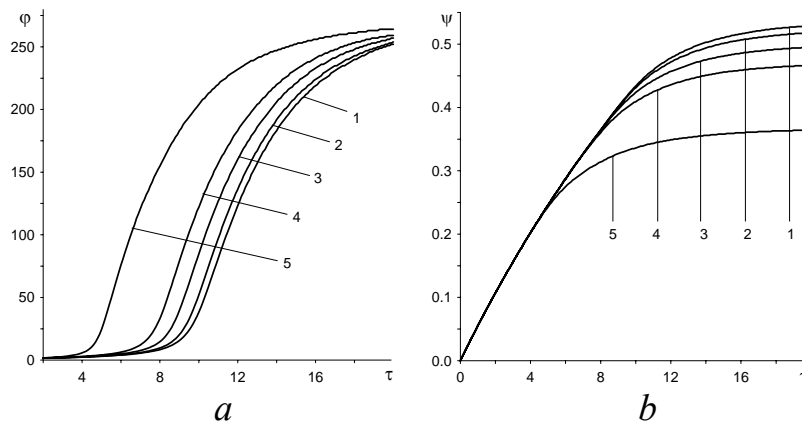


Рис. 3. Динамика роста давления (*a*) и объема образовавшегося льда (*b*),  
 $(T_b = -2^\circ\text{C}, C_0 = 0.1, v_0 = 0.02)$   
 $1 - k_\sigma = 10^5; 2 - k_\sigma = 10^4; 3 - k_\sigma = 2.5 \cdot 10^3; 4 - k_\sigma = 10^3; 5 - k_\sigma = 0$

Следующая серия вычислительных экспериментов была проведена с целью выявления **влияния условий и интенсивности охлаждения** водного объема. Нами рассматривались два режима охлаждения: при поддержании на поверхности объема фиксированной температуры и при охлаждении по закону конвективного теплообмена. Приведенные ниже результаты получены для исходных условий  $C_0 = 0.1, v_0 = 0.02, k_\sigma = 10^4$ .

На рис. 4 *a* приведены кривые зависимости безразмерного давления от доли льда в замерзающем объеме  $\varphi(\psi)$  для первой группы расчетов с варьированием температуры на поверхности охлаждения. При одинаковых объемах образовавшегося льда возникающие давления возрастают с понижением температуры охлаждения. Результаты расчетов существенно отличаются от соответствующих, но без учета фактора растворенного газа. Последние представлены единой для всех случаев пунктирной кривой.

Причину различия в интенсивности роста давления иллюстрирует рис. 4 *b*, на котором сопоставлены кривые процентного отношения газа, выделяющегося в свободное состояние, в общем объеме газа. Меньшее количество выделяющегося в свободную фазу газа для низких температур охлаждения обуславливает слабое увеличение сжимаемости. Это объясняется тем, что при сильном охлаждении темпы образования льда приводят к опережающему возрастанию давления и соответствующей равновесной концентрации газа в начальный период процесса, когда газа ещё не успевает выделиться в свободное состояние.

Вторая группа расчетов проведена для значения  $Bi = 5$  и разных температурах окружающей среды (рис. 4 *c, d*). Результаты численных экспериментов показали, что влияние на исследуемый процесс температуры охлаждения сохраняется, но в отличие от предыдущего случая, имеют противоположную тенденцию. Рост давления с увеличением доли льда в объеме при малой температуре охлаждения происходит наоборот более быстрыми темпами, чем при низкой температуре охлаждения (рис. 4 *c*). При конвективном охлаждении количество газа, выделяющегося в свободное состояние, возрастает с понижением температуры охлаждающей среды (рис. 4 *d*).

Причиной такого разнонаправленного характера является различие в скоростях движения границы замерзания в начальный момент времени: при граничных условиях первого рода она принимает бесконечное значение, а при граничном условии третьего рода – нулевое. При этом в первом случае скорость границы фазового перехода монотонно убывает со временем, а во втором – монотонно возрастает.

Таким образом, численные эксперименты показывают определяющее влияние условий охлаждения на динамику роста давления, которое зависит не только от его интенсивности, но и от режима охлаждения. Далее все расчеты проводились для условий конвективного охлаждения.

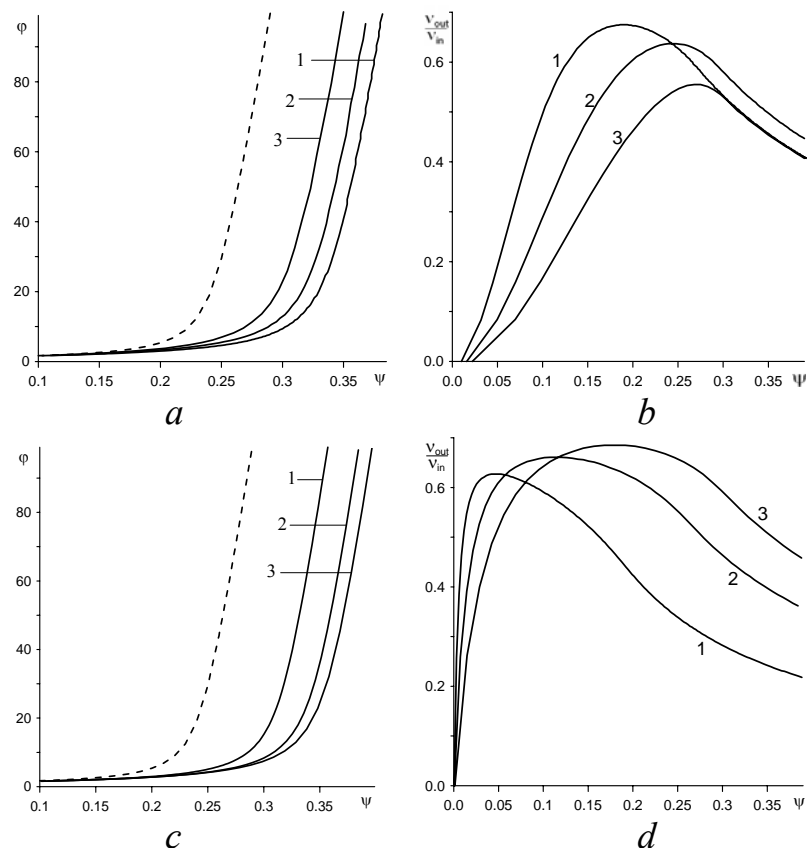


Рис. 4. Динамика роста давления (*a, c*) и изменение доли выделившегося газа (*b, d*) при фиксированной температуре на поверхности (*a, b*) и при режиме конвективного охлаждения (*c, d*): **1** –  $T_b = -2$  °C, **2** –  $T_b = -5$  °C, **3** –  $T_b = -10$  °C,

Аналогичное влияние растворенного газа проявляется в зависимости скорости роста давления от **формы замерзающего объема**. Для одной и той же доли замерзшего объема наибольший рост давления наблюдается в сферическом объеме, а наименьший – в плоском.

Представленные результаты примечательны тем, что расчет замерзания без учета растворенного газа, даст одинаковую зависимость  $\varphi(\psi)$  независимо от формы объема, для любых температур и условий охлаждения. В случае замерзания среды с постоянной сжимаемостью давление в объеме зависит только от доли образовавшегося льда и не зависит ни от каких других условий.

В предыдущих численных экспериментах всегда наблюдалась стадия резкого роста давления. В этой связи представляет интерес оценка начальных условий, при которых подобной стадии можно избежать. Здесь возможны два варианта повышения начальной концентрации растворенного газа: использование газов с высокой растворимостью и насыщение водной среды обычным воздухом при повышенных давлениях.

В первом случае интересно оценить **величину начальной концентрации газа**, достаточной для того, чтобы полностью исключить опасный рост давления. Пример соответствующих расчетов с варьированием исходной концентрации в атмосферных начальных условиях представлен на рис. 5.

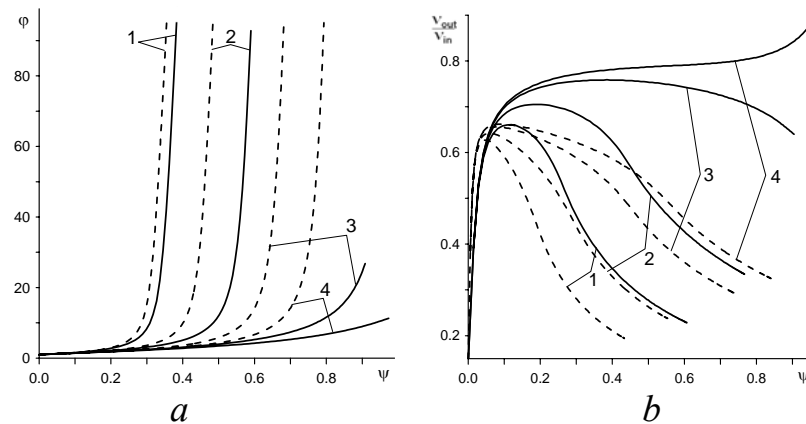


Рис. 5. Динамика роста давления (а) и изменение доли выделившегося газа (b) для различных начальных концентраций растворенного газа :

1 –  $C_0 = 0.1$ , 2 –  $C_0 = 0.2$ , 3 –  $C_0 = 0.275$ , 4 –  $C_0 = 0.3$ .

пунктирные линии – при  $T_b = -2^\circ\text{C}$ , сплошные линии – при  $T_b = -5^\circ\text{C}$

Расчеты показывают, что здесь также многое зависит от интенсивности охлаждения. Так, концентрация, исключая стадию резкого роста давления при температуре охлаждающей среды  $T_b = -5^\circ\text{C}$  недостаточна для температуры  $T_b = -2^\circ\text{C}$ .

Второй случай насыщения воды газом при повышенном давлении приводит наоборот к худшему результату. С увеличением начального давления, не смотря на пропорциональное увеличение начальной концентрации, интен-

сивность газовыделения существенно снижается, а рост давления происходит интенсивнее.

## ОСНОВНЫЕ ВЫВОДЫ И РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ

1. Предложена новая модель замерзания воды с растворенным газом в замкнутом объеме на основе системы дифференциальных уравнений, учитывающей теплообмен с фазовым переходом, диффузию растворенного газа и его выделение из перенасыщенного раствора, влияние последнего фактора на изменение давления в замкнутом объеме.

2. Для решения задачи совместного теплообмена и диффузии разработан и реализован численный метод с подвижными расчетными сетками, привязанными к значениям рассчитываемых полей.

3. Проведено сопоставление результатов моделирования с экспериментальными данными, показавшее их достаточное согласование.

4. Выполнено численное исследование процесса замерзания газонасыщенной водной среды в замкнутом объеме. На его основе выявлен ряд новых физических закономерностей, являющихся следствием наличия растворенного газа и возможности его выделения в свободную фазу. В частности:

- показано, что при условиях создающих более интенсивное газовыделение из раствора происходит снижение темпов роста давления и образуется больший объем льда к моменту наступления термодинамического равновесия;
- обнаружен эффект влияния граничных условий на динамику роста давления, заключающийся в зависимости скорости роста давления от интенсивности охлаждения;
- выявлен разнонаправленный характер данной зависимости в случае поддержания на поверхности охлаждения постоянной температуры и при режиме конвективного охлаждения;
- показано, что динамика роста давления зависит не только от объема образовавшегося льда, но и от формы замерзающего объема: для одинаковой доли замерзшего объема более медленная скорость роста давления наблюдается для плоского тела, наибольшая – для сферического;
- даны оценки величины начальной концентрации растворенного газа, необходимой для исключения возникновения больших давлений вплоть до окончания процесса замерзания; показано, что насыщение воды газом при повышенном давлении приводит к большей интенсивности его последующего роста.

Таким образом, итоговый результат состоит в разработке, программной реализации и численном исследовании новой компьютерной модели замерзания водной среды с растворенным газом в замкнутом объеме. Выполненное исследование выявило ряд новых закономерностей развития процесса, кото-



рые не воспроизводятся более простыми моделями, не учитывающими эффекты выделения газа в свободное состояние.

### СПИСОК РАБОТ, ОПУБЛИКОВАННЫХ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Сигунов Ю.А., Самылова Ю.А. Динамика роста давления при замерзании замкнутого объема воды с растворенным газом // Прикладная механика и техническая физика. – 2006. – Т. 47. – № 6. – С. 85-92.
2. Сигунов Ю.А., Самылова Ю.А. Численное моделирование замерзания жидкости с растворенным газом в замкнутом объеме // Математическое моделирование и вычислительные технологии в науке и образовании: межвуз. сб. научн. тр. – Сургут: РИО СурГПИ. – 2005. – Вып. 2. – С. 28-40.
3. Sigunov Yu.A., Samylova Yu.A. Numerical modeling of nonequilibrium dissolved-gas release freezing of water in closed volume // International Conference on the Methods of Aerophysical Research. Proceeding Part IV. – Novosibirsk: Publishing House “Parallel”. – 2007. – P. 180-185.
4. Самылова Ю.А. Численное решение сопряженной задачи теплообмена и диффузии с фазовыми превращениями и неравновесными эффектами // Сб. тезисов VIII Всероссийской конференции молодых ученых по математическому моделированию и информационным технологиям. – Новосибирск: изд-во ИВТ СО РАН, 2007. – С. 71-72.
5. Самылова Ю.А. Численное моделирование замерзания жидкости с растворенным газом // Сб. материалов лауреатов Регионального конкурса научных студенческих работ: научное издание. – Тюмень: изд-во Тюменской государственной сельскохозяйственной академии. – 2004. – С. 32-33.
6. Самылова Ю.А. Математическая модель замерзания жидкости с растворенным газом // Наука и инновации XXI века: Мат-лы открытой окружной конференции молодых ученых. – Сургут: изд-во СурГУ. – 2004. – С.28-30.
7. Самылова Ю.А. Численное исследование влияния растворенного газа на динамику замерзания в замкнутом объеме // Наука и инновации XXI века: Мат-лы открытой окружной конференции молодых ученых. – Сургут: изд-во СурГУ. – 2005. – С. 16-18.
8. Самылова Ю.А. Моделирование интенсивности выделения газа из перенасыщенного раствора // Наука и инновации XXI века: Мат-лы открытой окружной конференции молодых ученых. – Сургут: изд-во СурГУ. – 2007. – С. 20-22.
9. Сигунов Ю.А., Самылова Ю.А. Математическое моделирование замерзания газонасыщенной жидкости в замкнутых объемах // Проблемы качества образовательной системы СурГПИ: поиски и решения: Сб. тезисов докладов восьмой отчетной научной конференции преподавателей, аспирантов и соискателей института. – Сургут: РИО СурГПИ. – 2004. – С. 144-145.

10. Сигунов Ю.А., Самылова Ю.А. Численное исследование влияния растворенного воздуха на процесс замерзания воды // Проблемы качества научных исследований в СурГПИ: поиски и решения: Сб. тезисов докладов девятой отчетной научной конференции преподавателей, аспирантов и соискателей института. – Сургут: РИО СурГПИ. – 2005. – С. 172-173.