Моделирование теплопроводности в составной области с фазовыми переходами¹

Р.Ш. Мисбахов¹, В.Е. Мизонов²

¹ ФГБОУВПО «Казанский государственный энергетический университет», г. Казань, Российская Федерация

² ФГБОУВПО «Ивановский государственный энергетический университет имени В.И. Ленина»,

г. Иваново, Российская Федерация

E-mail: zerdex84@mail.ru; mizonov46@mail.ru

Авторское резюме

Состояние вопроса: Расчет распространения теплоты путем теплопроводности в составных областях при наличии фазовых переходов является сложной нелинейной задачей, не имеющей аналитических решений. Вместе с тем возможность проводить такие расчеты необходима для разработки энергосберегающих мероприятий в строительстве, для выборов рациональных технологических параметров в металлургических, химических и других процессах. Традиционные численные методы не вполне пригодны для использования в инженерной практике в силу сложности и неуниверсальности используемых алгоритмов и программ. В связи с этим актуальной является разработка универсальных моделей процессов, построенных на элементарных балансовых уравнениях и допускающих легкую перестройку при изменении специфики объекта моделирования.

Материалы и методы: Для построения математического описания процесса применен метод ячейечного моделирования, использующий математический аппарат теории цепей Маркова. Основным оператором модели является матрица теплопроводности, преобразующая вектор теплового состояния через малые промежутки времени. Модель дополнена соотношениями теплового баланса при фазовом переходе.

Результаты: Построена нелинейная ячейечная модель эволюции теплового состояния составной области с фазовыми переходами, позволяющая проводить численные эксперименты по выбору рациональной организации процесса.

Выводы: Учет нелинейных явлений в процессе теплопроводности с фазовыми переходами позволяет более адекватно описывать эволюцию теплового и фазового состояния процесса и подбирать его рациональные параметры.

Ключевые слова: теплопроводность, составная область, фазовый переход, ячейечная модель, матрица теплопроводности, вектор состояния, кинетика плавления.

Simulation of heat conduction in a composite domain with phase transformation

Rinat Misbakhov¹, Vadim Mizonov²

¹ Kazan State Power Engineering University, Kazan, Russian Federation

² Ivanovo State Power Engineering University, Ivanovo, Russian Federation

E-mail: zerdex84@mail.ru; mizonov46@mail.ru

Abstract

Background: Calculation of heat propagation by means of heat conduction in composite domains at the presence of phase transformation is a complex non-linear problem that has no analytical solutions. At the same time the possibility to perform such calculations is necessary for carrying out energy saving solutions in construction industry, for determining rational parameters of technological processes in metallurgy, chemistry and other industries. Traditional numerical methods do not fit well the engineering practice because of their complexity and non-universality of the algorithms and programs used. This is why the development of the models of such processes based on elementary balance equations and allowing easy transformation when the object of modeling is modified is an actual problem.

Materials and methods: In order to build a mathematical description of the process the method of cell modeling is used. The method uses the mathematical tools of the theory of Markov chains. Its basic operator is the matrix of heat conduction that transforms the heat state vector after small intervals of time. The heat balance relationships for the phase transformation are added to the model.

Results: A non-linear cell model of evolution of thermal state of a composite plane domain with phase transformations. The model allows performing numerical experiments to choose the rational process organization.

Conclusions: Taking into account the non-linear phenomes in the process of heat conduction with phase transformation allows more adequate describing the evolution of heat and phase state of the process and choosing its rational parameters.

Key words: heat conduction, composite domain, phase transformation, cell model, heat conduction matrix, state vector, melting kinetics.

DOI: 10.17588/2072-2672.2015.4.039-043

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект №15-38-50832.

В качестве объекта исследования выбрана теплопроводность в сложной составной области, осложненная фазовыми переходами в отдельных ее частях. Моделирование таких процессов представляет интерес для целого ряда отраслей промышленности. В [1] подчеркнуто, что при наличии промерзания тепловое сопротивление стен снижается на 7 % и более, а расчет тепловых потерь при постоянных теплофизических свойствах материала стен не адекватен реальному процессу. Особую роль в тепловых потерях играют размещенные в стенах закладные детали, обладающие, как правило, высокой теплопроводностью. Возникающая около деталей поперечная неоднородность зоны теплопроводности приводит к образованию так называемых термических мостиков, сильно влияющих на теплопроводность. Для учета этих факторов предлагаются разнообразные подходы к математическому моделированию процесса, главным образом ориентированные на то, чтобы описать переходные процессы при нестационарных краевых условиях [2–5]. Однако в большинстве работ влияние различных факторов на теплопроводность анализируется по отдельности, а не совокупно. Так, в [2] предложен аналитический метод решения этой задачи для составной стенки с раскладываемыми в ряд Фурье нестационарными краевыми условиями. Однако задача рассмотрена только в одномерной постановке, т. е. поперечная неоднородность среды не может быть учтена в принципе. В [3] использован метод эквивалентной тепловой стенки. В результате расчетов показано, что игнорирование образования термических мостиков может привести к недооценке теплового потока до 25 %. Кроме того, не выполнен полный учет всех факторов: не приняты во внимание возможные фазовые переходы; теплофизические свойства слоев стенки приняты постоянными. Теми же недостатками обладают результаты работ [4, 5], в которых, несмотря на их академический интерес, полный учет всей специфики процесса не приведен.

Рассматриваемая задача имеет важное значение не только для строительных конструкций, но и для металлургии (затвердевание металла в литейных формах), химической технологии (протекание эндо- и экзотермических реакций в ограниченных зонах тела) и других отраслей. Поэтому представляется важным построение универсальных моделей и алгоритмов численного исследования этого процесса в наиболее общем случае его реализации. Традиционные численные методы не вполне пригодны для использования в инженерной практике в силу сложности и неуниверсальности используемых алгоритмов и программ. Среди методов, наиболее близких к инженерным расчетам, можно выделить метод

клеточных автоматов [6, 7] и метод ячеечного моделирования. Причем последний, на наш взгляд, наиболее удобен для решения поставленной задачи. Теоретические основы применения ячеечных моделей к описанию процессов переноса теплоты и массы приведены в [8], а в [9] продемонстрирована эффективность применения такой модели к описанию теплопроводности в окрестности закладной детали стенки здания. Ниже предлагается описание ячеечной модели для наиболее общего случая теплопроводности в составной плоской области с фазовыми переходами.

Не нарушая общности, рассмотрим алгоритм построения модели на примере (рис. 1): рассматривается прямоугольная область (в данном случае – квадратная) тугоплавкого материала, внутри которой находится Г-образная полость, заполненная легкоплавким материалом с температурой плавления t_{me} ; область разбита на квадратные ячейки со стороной Δx ; размер области $n \times m$ ячеек; боковые края области теплоизолированы, через верхний край подводится теплота от окружающей среды с температурой t_{out1} , а через нижний край теплота отводится к среде с температурой t_{out2} .

Рис. 1. Структура ячеечной модели и краевых условий

Теплофизические свойства зон области (коэффициент теплопроводности λ , удельная теплоемкость c и плотность ρ) считаются заданными, но, поскольку в Г-образной области допускается плавление материала, она характеризуется двумя наборами свойств: в твердом и жидком состоянии.

Для описания геометрии области припишем ячейкам внешней зоны цифру 0, а внутренней – цифру 1. Тогда геометрия всей области может быть представлена матрицей формы

$$Fm = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (1)$$

Тепловое и фазовое состояние области удобно представить матрицами такого же размера: **Qm** – матрица распределения теплоты по ячейкам; **tm** – матрица распределения температуры; **Mm** – матрица распределения твердой фазы в Г-образной области.

В соответствии со стратегией ячеечного моделирования, процесс наблюдается в дискретные моменты времени $\tau_k = (k - 1)\Delta\tau$, где $\Delta\tau$ – продолжительность временного перехода; k – номер временного перехода (целочисленный аналог времени).

При переходе к расчету эволюции теплового и фазового состояния ячеек двумерная сетка ячеек должна быть преобразована в одномерную, в которой столбцы всех введенных матриц расположены последовательно друг под другом, т. е. все матрицы преобразуются в векторы-столбцы размера $nm \times 1$: **Qv** – вектор распределения теплоты по ячейкам одномерной цепи; **tv** – вектор распределения температуры; **Mv** – вектор распределения твердой фазы в Г-образной области; **Fv** – вектор формы составной области.

Эволюция распределения теплоты по ячейкам полностью теплоизолированной по периферии области описывается рекуррентным матричным равенством

$$Qv^{k+1} = P_Q Qv^k, \quad (2)$$

где **P_Q** – матрица теплопроводности размера $(nm) \times (nm)$.

Матрица **P_Q** строится по следующим правилам. Каждый столбец матрицы принадлежит ячейке с номером, соответствующим ее векторной нумерации. В этом столбце в строках с номерами ячеек, в которые возможен переход теплоты, размещены доли теплоты, которые туда переносятся. В течение временного перехода теплота перераспределяется между соседними ячейками, причем при однородной изотропной теплопроводности доля теплоты, переносимой в течение $\Delta\tau$ из данной ячейки в соседнюю, составляет $(\lambda/(c\rho))\Delta\tau/\Delta x^2$ [8, 9]. Направ-

ления переноса теплоты из ячейки и в ячейку показаны на рис. 1 стрелками. Однако в векторной нумерации непосредственно соседними оказываются только ячейки, принадлежащие одному столбцу, а соседние ячейки из соседних столбцов оказываются удалены от данной. Кроме того, теплофизические свойства в соседних ячейках могут быть разными, что также должно быть учтено при построении матрицы. С учетом сказанного, матрица теплопроводности является пятидиагональной матрицей, элементы которой рассчитываются по следующим формулам:

$$P_{Q\ n(j-1)+i-1, n(j-1)+i} = \frac{\lambda_{n(j-1)+i-1}^k}{c_{n(j-1)+i}^k \rho_{n(j-1)+i}^k} \frac{\Delta\tau}{\Delta x^2},$$

$$j = 1:m, i = 2:n; \quad (3)$$

$$P_{Q\ n(j-1)+i+1, n(j-1)+i} = \frac{\lambda_{n(j-1)+i}^k}{c_{n(j-1)+i}^k \rho_{n(j-1)+i}^k} \frac{\Delta\tau}{\Delta x^2},$$

$$j = 1:m, i = 1:n-1; \quad (4)$$

$$P_{Q\ n(j-2)+i, n(j-1)+i} = \frac{\lambda_{n(j-2)+i}^k}{c_{n(j-2)+i}^k \rho_{n(j-2)+i}^k} \frac{\Delta\tau}{\Delta x^2},$$

$$j = 2:m, i = 1:n; \quad (5)$$

$$P_{Q\ nj+i, n(j-1)+i} = \frac{\lambda_{n(j-1)+i}^k}{c_{n(j-1)+i}^k \rho_{n(j-1)+i}^k} \frac{\Delta\tau}{\Delta x^2},$$

$$j = 1:m-1, i = 1:n; \quad (6)$$

$$P_{Q\ z,z} = 1 - \sum_{e=1}^{nm} P_{Q\ e,z}, \quad z = 1:nm. \quad (7)$$

При известном распределении теплоты по ячейкам распределение температуры определяется по формуле, справедливой как для матричного, так и для векторного представления соответствующих величин:

$$t = Q./c./\rho, \quad (8)$$

где **c** и **ρ** – векторы или матрицы распределения теплоемкостей и плотностей по ячейкам; оператор **/** означает поэлементное деление векторов или матриц.

Для теплоизолированной области асимптотическое (при $k \rightarrow \infty$) распределение температуры по ячейкам должно быть равномерным. Это условие может служить тестом на правильность построения матрицы **P_Q**. Однако в рассматриваемой задаче область не является теплоизолированной: ее верхняя и нижняя границы обмениваются теплотой с окружающей средой, а в ячейках, принадлежащих Г-образной области, в зависимости от направления фазового перехода может поглощаться или выделяться скрытая теплота фазового перехода. Учет этих составляющих может быть выполнен за пределами матрицы **P_Q** и рекуррентного равенства (2) путем введения функций источников теплоты.

Рис. 2. Эволюция содержания твердой фазы в Г-образной области

Изменение теплоты в верхнем и нижнем рядах ячеек (рис. 1) в течение одного временного перехода Δt описывается обычными уравнениями теплоотдачи:

$$Qm_{1,j}^k := Qm_{1,j}^k + \alpha_1(t_{out1}(k) - tm_{1,j}^k) \Delta x \Delta t; \quad (9)$$

$$Qm_{n,j}^k := Qm_{n,j}^k + \alpha_2(t_{out2}(k) - tm_{n,j}^k) \Delta x \Delta t, \quad (10)$$

где $t_{out1}(k)$ и $t_{out2}(k)$ – температуры окружающей среды сверху и снизу области, которые могут меняться с течением времени; α_1 и α_2 – коэффициенты теплоотдачи; $:=$ – оператор присваивания.

Учет теплоты фазовых переходов осуществляется следующим образом. В каждом текущем состоянии k температура всех ячеек, принадлежащих Г-образной области, сравнивается с температурой фазового перехода, например с температурой плавления t_{me} . Если ячейка нагревается и оказывается, что $tm_{ij}^{k+1} > t_{me}$ и $Mm^k > 0$ (расплавилась не вся ячейка), то считается, что $tm_{ij}^{k+1} = t_{me}$, а теплота $\Delta Qm_{ij} = c_p(tm_{ij}^{k+1} - tm_{ij}^k)\Delta x^2$ идет на расплавление твердой фазы, содержание которой принимает следующее значение:

$$Mm_{ij}^{k+1} = Mm_{ij}^k + \Delta Qm_{ij}/r, \quad (11)$$

где r – скрытая удельная теплота плавления.

Если оказывается, что $Mm^k = 0$, расчет фазового перехода в этой ячейке прекращается и дальнейший перенос теплоты теплопроводностью рассчитывается с матрицей P_a , в которую подставляются теплофизические свойства уже расплавленного материала Г-образной области. При остывании ячейки и

затвердевании в ней жидкого материала процесс расчета идет аналогичным образом.

На рис. 2 показан пример расчета эволюции фазового состояния в Г-образной области. Расчет выполнен для следующих параметров процесса и свойств модельного материала: $t_{out1} = 600^\circ\text{C}$, $t_{out2} = 50^\circ\text{C}$, $t_{me} = 200^\circ\text{C}$, $\lambda_0 = 3,5$ Вт/м, $c_0 = 1$ Кдж/кг $\cdot^\circ\text{C}$, $\rho_0 = 2000$ кг/м 3 , $\lambda_{1S} = 0,5$ Вт/м, $c_{1S} = 4$ Кдж/кг $\cdot^\circ\text{C}$, $\rho_{1S} = 1000$ кг/м 3 , $\lambda_{1L} = 2$ Вт/м, $c_{1L} = 2$ Кдж/кг $\cdot^\circ\text{C}$, $\rho_{1L} = 900$ кг/м 3 , где для Г-образной области индекс S относится к твердому, а индекс L – к жидкому состоянию материала.

Плавление начинается с верхней части Г-образной области и становится заметным через 70 временных переходов. За 210 переходов верхняя часть области оказывается полностью расплавленной. При длительном протекании процесса (при $k \rightarrow \infty$) две ячейки нижней части области остаются нерасплавленными, так как находятся в зоне температуры, меньшей температуры плавления.

На рис. 3 показана кинетика плавления в Г-образной области в виде зависимости отношения текущей полной массы твердого материала к его полной начальной массе. Анализ полученных результатов (рис. 3) показывает, что полного расплава получить не удастся. Ступенчатый характер кривой объясняется конечностью размеров ячеек: плавление материала в ячейках, соседних с плавящейся ячейкой, не может начаться, пока плавление в ней не завершится полностью, поскольку до этого времени температура ячейки постоянна и равна температуре плавления. Поэтому тепло-

проводность не может поднять температуру в соседних ячейках до температуры плавления.

Рис. 3. Кинетика плавления твердой фазы в Г-образной области

На рис. 4 показано асимптотическое распределение температуры по ячейкам области, которая фактически состоит из трех областей: внешней области, части Г-образной области с расплавленным материалом и ее части с твердым материалом (граница между последними формируется в процессе расчета).

Рис. 4. Асимптотическое распределение температуры

Естественно, что предложенная модель работает и при отсутствии фазовых переходов. Для этого достаточно приписать теплофизические свойства внутренним областям, а температуру фазового перехода назначить заведомо большей максимальной температуры, которая может присутствовать в задаче.

Конфигурация внешней области принята прямоугольной исключительно для наглядности при первом знакомстве с моделью. Она может иметь произвольную форму, но в любом случае вокруг ее границы должен быть описан разбитый на ячейки прямоугольник, а в матрице P_q следует запретить переходы теплоты в

ячейки прямоугольника, не принадлежащие моделируемой области.

С нашей точки зрения, очевидным достоинством предложенной модели является ее универсальность. Действительно, манипулируя только матрицей формы и теплофизическими свойствами материалов, можно решать широкий спектр теплотехнических задач, не меняя алгоритма моделирования и даже программы расчета. Например, с ее помощью можно прогнозировать теплоизоляционные свойства пустотелого керамического кирпича и оптимизировать форму и взаимное расположение пустот при заданной их общей площади.

Таким образом, предложенная универсальная ячеечная математическая модель теплопроводности в составной области с возможностью фазовых переходов в отдельных ее частях может использоваться при решении разнообразных теплотехнических задач.

Список литературы

1. Kong F., Zhang Q. Effect of heat and mass coupled transfer combined with freezing process on building exterior envelope // *Energy and Buildings*. – 2013. – 62. – P. 486–495.
2. Lü X., Lu T., Viljanen M. A new analytical method to simulate heat transfer process in buildings // *Appl. Therm. Eng.* – 2006. – 26. – P. 1901–1909.
3. Aguilar F., Solano J.P., Vicente P.G. Transient modeling of high-inertial thermal bridges in buildings using the equivalent thermal wall method // *Appl. Therm. Eng.* – 2014. – 67. – P. 370–377.
4. Maestre I.R., Cubillas P.R., Pérez-Lombard R. Transient heat conduction in multi-layer walls: An efficient strategy for Laplace's method // *Energy and Buildings*. – 2010. – 42. – P. 541–546.
5. Ascione F., Bianco N., De Masi R.F., De' Rossi R., Vanoli G.P. Simplified state space representation for evaluating thermal bridges in building: Modelling, application and validation of a methodology // *Appl. Therm. Eng.* – 2013. – 61. – P. 344–354.
6. Бобков С.П. Моделирование основных процессов переноса с использованием клеточных автоматов // *Известия вузов. Химия и химическая технология*. – 2009. – Т. 52, вып. 3. – С. 109–114.
7. Бобков С.П., Войтко Ю.В. Использование систем клеточных автоматов для моделирования нелинейных задач теплопроводности // *Известия вузов. Химия и химическая технология*. – 2009. – Т. 52, № 11. – С. 126–128.
8. Berthiaux H., Mizonov V., Zhukov V. Application of the theory of Markov chains to model different processes in particle technology // *Powder Technology*. – 2005. – 157. – P. 128–137.
9. Mizonov V., Yelin N., Sakharov A. Theoretical study of the thermal state of building envelop in the neighborhood of embedded item // *Applied Thermal Engineering*. – 2015. – 79. – P. 149–152.

References

1. Kong, F., Zhang, Q. Effect of heat and mass coupled transfer combined with freezing process on building exterior envelope. *Energy and Buildings*, 2013, 62, pp. 486–495.
2. Lü, X., Lu, T., Viljanen, M. A new analytical method to simulate heat transfer process in buildings. *Appl. Therm. Eng.*, 2006, 26, pp. 1901–1909.
3. Aguilar, F., Solano, J.P., Vicente, P.G. Transient modeling of high-inertial thermal bridges in buildings using the equivalent thermal wall method. *Appl. Therm. Eng.*, 2014, 67, pp. 370–377.
4. Maestre, I.R., Cubillas, P.R., Pérez-Lombard, R. Transient heat conduction in multi-layer walls: An efficient

strategy for Laplace's method. *Energy and Buildings*, 2010, 42, pp. 541–546.

5. Ascione, F., Bianco, N., De Masi, R.F., De' Rossi, R., Vanoli, G.P. Simplified state space representation for evaluating thermal bridges in building: Modelling, application and validation of a methodology. *Appl. Therm. Eng.*, 2013, 61, pp. 344–354.

6. Bobkov, S.P. Modelirovanie osnovnykh protsessov perenosa s ispol'zovaniem kletochnykh avtomatov [Modeling of the basic transfer processes by means of cellular automata]. *Izvestiya vuzov. Khimiya i khimicheskaya tekhnologiya*, 2009, vol. 52, issue 3, pp. 109–114.

7. Bobkov, S.P., Voytko, Yu.V. Ispol'zovanie sistem kletochnykh avtomatov dlya modelirovaniya nelineynykh zadach teploprovodnosti [Application of systems of cellular automata to model non-linear problems of heat conduction]. *Izvestiya vuzov. Khimiya i khimicheskaya tekhnologiya*, 2009, vol. 52, no. 11, pp. 126–128.

8. Berthiaux, H., Mizonov, V., Zhukov, V. Application of the theory of Markov chains to model different processes in particle technology. *Powder Technology* 2005, 157, pp. 128–137.

9. Mizonov, V., Yelin, N., Sakharov, A. Theoretical study of the thermal state of building envelop in the neighborhood of embedded item. *Applied Thermal Engineering*, 2015, 79, pp. 149–152.

Мисбахов Ринат Шаукатович,

ФГБОУВПО «Казанский государственный энергетический университет»,
кандидат технических наук, доцент кафедры котельных установок и парогазогенераторов,
e-mail: zerdex84@mail.ru

Мизонов Вадим Евгеньевич,

ФГБОУВПО «Ивановский государственный энергетический университет имени В.И. Ленина»,
доктор технических наук, профессор кафедры прикладной математики,
e-mail: mizonov46@mail.ru