Решение задач с фазовыми превращениями

В. М. Куляпин, И. С. Елисеев, И. М. Аслямов, Е. В. Бовтрикова*

ФГБОУ ВПО Уфимский государственный авиационный технический университет, РФ, e-mail: Kulyapin_vm@mail.ru *ООО "Энергопромышленные технологии", Москва, РФ

Рассмотрены процессы фазовых превращений плавления и испарения под действием поверхностного источника высокой плотности. При этом впервые предложен метод решения краевых задач, точно удовлетворяющий уравнениям краевой задачи (температура, теплота фазовых превращений) и приближенно условиям внутри зоны фазовых превращений. Этот метод позволил получить аналитическое описание движения фазовых границ и качественно (и количественно) оценить развитие процесса, в частности с точки зрения его устойчивости.

Ключевые слова: процессы фазовых превращений испарения, катодные процессы, электрический разряд.

Введение

Разработка математического аппарата для решения самых сложных с инженерно-физической точки зрения задач имеет важное значение. Ранее для их решения использовались аналитические методы и только для относительно простых областей. Позже появились численные методы. Но у численных алгоритмов есть большой недостаток — получаемые ими решения не поддаются оценке на качество. Аналитические решения более надежны — всегда можно проверить их на удовлетворение исходным уравнениям или граничным условиям и оценить величину отклонения. То есть возможность записать общее решение той или иной задачи в замкнутом виде имеет во многих случаях значительные преимущества [1—3].

Формулировка задачи

Одномерная задача нагрева тела поверхностным $q_i(t)$ и объемным $q_{VI}(t)$ источниками тепла с подвижной внешней границей испарения $X_0(t)$ и границей плавления X(t) представлена на рис. 1. Задача относится к классу нелинейных задач теплопроводности [1]. В этом разделе развит интегральный метод решения таких задач, который "дает в ряде случаев решение более точное, чем использование численного метода конечных разностей" [2]. С применением интегрального метода задача сводится к модели, позволяющей найти решение в замкнутой аналитической форме и провести сопряжение с газокинетическим процессом испарения.

При постановке задачи приняты следующие допущения:

теплофизические коэффициенты материала мишени постоянны и равны средним значениям для выбранного диапазона температур;

рассматриваются процессы в пределах действия закона Фурье, то есть при плотности тепловых потоков порядка 10^3 — 10^{10} Bt/см².

© В. М. Куляпин, И. С. Елисеев, И. М. Аслямов, Е. В. Бовтрикова, 2014



Процессы описываются дифференциальными уравнениями с частными производными и условиями на границах раздела фаз. Дифференциальные уравнения для каждой зоны имеют вид [1]

$$\frac{\partial^2 \vartheta_0}{\partial x^2} - \frac{1}{a_0} \cdot \frac{\partial \vartheta_0}{\partial t} = -\frac{q_{V0}}{\lambda_0}; \quad X_{\delta} \le x \le X_0;$$
(1)

$$\frac{\partial^2 \vartheta_1}{\partial x^2} - \frac{1}{a_1} \cdot \frac{\partial \vartheta_1}{\partial t} = 0; \quad X_0 \le x \le X;$$
(2)

$$\frac{\partial^2 \Theta_2}{\partial x^2} - \frac{1}{a_2} \cdot \frac{\partial \Theta_2}{\partial t} = 0; \ x \ge X.$$
(3)

Граничные условия на поверхности:

$$q(t) + \lambda_0 \left(\frac{\partial \Theta_0}{\partial x}\right)_{x = X_{\delta}} = c\rho(T_{\delta} - T_0)\frac{dX_{\delta}}{dt};$$
(4)

на границе испарения:

$$\lambda_0 \left(\frac{\partial \Theta_0}{\partial x}\right)_{x = X_0} + \lambda_1 \left(\frac{\partial \Theta_1}{\partial x}\right)_{x = X_0} = [L_0 + c(T_0 - T_m)]\rho \frac{dX_0}{dt};$$
(5)

на изотерме:

$$\lambda_1 \left(\frac{\partial \vartheta_1}{\partial x}\right)_{x=X} = \lambda_2 \left(\frac{\partial \vartheta_2}{\partial x}\right)_{x=X} + c(T_m - T)\rho \frac{dX}{dt};$$
(6)

$$\begin{aligned}
\Theta_0(X_{\delta}, t) &= T_{\delta}, \quad \Theta_0(X_0, t) = T_0 = \Theta_1(X_0, t); \quad \Theta_1(X, t) = T_m = \Theta_2(X, t); \\
\Theta_2(x, 0) &= T; \quad \Theta_2(\infty, t) = T.
\end{aligned}$$
(7)

Установившиеся значения скоростей испарения, плавления и температуры определяются соотношениями:

$$\rho \frac{dX_0}{dt} = W = \sqrt{\frac{M}{T_0}} \cdot \exp 2,3026(A - \frac{B}{T_0} - 4,234);$$
(8)

$$q(t) + \lambda_0 \left(\frac{\partial \vartheta_0}{\partial x}\right)_{x = X_{\delta}} = c\rho(T_{\delta} - T_0)u, \qquad (9)$$

где *W* — скорость испарения; *M* — атомная масса; *A*, *B* — табулированные постоянные скорости испарения; *u* — химическая константа.

В решении реализован принцип суперпозиции (позволяет задавать любые профили температур) с четко фиксированными границами фазовых превращений плавления, испарения [2].

Предложенная система уравнений является математической моделью физических явлений с фазовыми превращениями и уносом массы испарением при действии поверхностных и объемных источников. Число единичных решений не ограничено.

Линеаризация дифференциальных уравнений

Известны методы решения задач с нелинейностями: вариационные и интегральные, методы итераций, методы сведения к уравнениям, отличным от исходного нелинейного уравнения нестационарной теплопроводности (метод теории размерностей, подстановок и т. п.), методы возмущений, конечных разностей, метод прямых, методы линеаризации. При инженерных расчетах широко применяют линеаризацию, то есть замену нелинейных дифференциальных уравнений приближенными линейными, для которых существует общий метод интегрирования. Последние используются в подавляющем большинстве случаев.

В работе развит новый интегральный метод решения обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка. Задавая профили температур для жидкой $\mathcal{G}_1(x, t)$ и твердой фаз $\mathcal{G}_2(x, t)$ и вводя их в интеграл теплового баланса, получаем дифференциальное уравнение для величины расплавленной зоны $(X - X_0)$ с известным начальным условием $(X - X_0) = 0$ при t = 0.

Задаем профиль температур фазы 1 в виде

$$\vartheta_1(x,t) = T_0 + \frac{T_m - T_0}{X - X_0} (x - X_0) + \psi_1(t) [(X - X_0)(x - X_0) - (x - X_0)^2]$$
(10)

Определим коэффициент $\psi_1(t)$ из условия, что данный профиль температур удовлетворяет уравнению теплового баланса только на границах раздела фаз. Подставляя в уравнение теплового баланса значение

$$\frac{\partial^2 \vartheta_1}{\partial x^2} = -2\psi_1(t); \quad \frac{\partial \vartheta_1}{\partial t}\Big|_{x=x_0} = \frac{dT}{dt}$$
$$\psi_1(t) = \frac{q_V}{2\lambda_1} - \frac{1}{2a_1} \cdot \frac{dT_0}{dt}.$$

имеем

Профиль температур, удовлетворяющий уравнению теплового баланса на границах раздела фаз, имеет вид

$$\vartheta_{1}(x,t) = T_{0} + \frac{T_{m} - T_{0}}{X - X_{0}} (x - X_{0}) + \left(\frac{q_{\nu}}{2\lambda_{1}} - \frac{1}{2a_{1}} \cdot \frac{dT_{0}}{dt}\right) \left[(X - X_{0})(x - X_{0}) - (x - X_{0})^{2} \right]$$
(11)

Для второй фазы профиль температур выразим в виде [3]

$$\vartheta_2(x, t) = T_m - (T_m - T) \{ 1 - \exp[-\Theta(t)(x - X)] \}.$$
(12)

Решение сводится к дифференциальному уравнению с произвольными функциями

$$y' = f(t)y^{n} + g(t)y + h(t),$$
 (13)

где $y = X - X_0$.

Решение уравнения (13) получено только в 1925 году [2] (уравнение Chini):

$$y = \left[\frac{h(t)}{f(t)}\right]^{\frac{1}{n}} U(t), \qquad (14)$$

где U(t) определяется соотношением

$$\int \frac{dU}{U^n - \gamma U + 1} + C = \int \left[\frac{f(t)}{h(t)}\right]^n h(t)dt.$$
(15)

Соответствующий выбор постоянных ү и β будет

$$z = \left[\frac{h(t)}{f(t)}\right]^{\frac{1}{n}} = \exp\left[g(t)dt\right]\beta + \gamma\left[h(t)\exp-\int g(t)dtdt\right]$$
 (16)

То есть, если z есть решение линейного уравнения

$$z' - g(t)z = \gamma h(t)$$

на основе интегрального метода, задача сводится к модели, позволяющей найти решение в замкнутой аналитической форме. Решение уравнения (13) дает значение величины зоны $(X - X_0)$ в функции времени, из него находят законы перемещения границ фазовых переходов X(t) и $X_0(t)$. То есть решение удовлетворяет уравнению теплового баланса, а не основным уравнениям. Поскольку исходными являются условия на границах, в дифференциальное уравнение (13) входят только граничные значения.

Фазовые превращения

Для случая действия поверхностного теплового потока $q_i(t)$ исходная система дифференциальных уравнений и краевых условий преобразуется к следующим видам:

для расплавленной зоны —

$$\frac{\partial^2 \vartheta_1}{\partial x^2} - \frac{1}{a_1} \cdot \frac{\partial \vartheta_1}{\partial t} = \pm \frac{q_{V1}}{\lambda_1}; \ X_0 \le x \le X;$$
(17)

для твердой фазы —

$$\frac{\partial^2 \mathfrak{P}_2}{\partial x^2} - \frac{1}{a_2} \cdot \frac{\partial \mathfrak{P}_2}{\partial t} = 0; X \le x;$$
(18)

$$\vartheta_1(X,t) = \vartheta_2(X,t). \tag{19}$$

На границе плавления *X*(*t*) подводимое тепло идёт на покрытие теплоты плавления и теплопередачу в твердую фазу:

$$\lambda_1 \left(\frac{\partial \vartheta_1}{\partial x}\right)_{x=X} = \lambda_2 \left(\frac{\partial \vartheta_2}{\partial x}\right)_{x=X} - L\rho \frac{dX}{dt};$$
(20)

$$\vartheta_2(x,0) = T; \tag{21}$$

$$\vartheta_2(\infty, t) = T. \tag{22}$$

Тепловой поток, подводимый к поверхности, идет на испарение и теплопередачу внутрь:

$$q_i(t) + \lambda_1 \left(\frac{\partial \Theta_1}{\partial x}\right)_{x = X_0} = \left[L_0 + c_1(T_0 - T_m)\right] \rho \frac{dX_0}{dt}.$$
 (23)

Переход вещества из одной фазы в другую описывается нелинейными дифференциальными уравнениями, которые не имеют аналитического решения:

$$q_{i}(t) + \lambda_{1} \left(\frac{\partial \Theta_{1}}{\partial x}\right)_{x = X_{0}} = \left[L_{0} + c_{1}(T_{0} - T_{m})\right] \sqrt{\frac{M}{T_{0}}} \exp(2,3026(A - \frac{B}{T_{0}} - 4,234)).$$
(24)

Задаем профили температур жидкой и твердой фаз, удовлетворяющие дифференциальным уравнениям (18), (19) на границах раздела фаз. Для жидкой фазы принимаем профиль температур вида

$$\vartheta_{1}(x,t) = T_{0} + \frac{T_{m} - T_{0}}{X - X_{0}} \left[x - X_{0} \right] + \psi(t) \left[x - X \right] \left[x - X_{0} \right]$$
(25)

Профиль температур (25) удовлетворяет соотношению (18) при

$$\psi(t) = \frac{1}{2a_1} \cdot \frac{dT_0}{dt}$$

Действительно,

$$\frac{\partial^2 \vartheta_1}{\partial x^2} = 2\psi(t), \frac{\partial \vartheta}{\partial t} \bigg|_{x = X_0} = \frac{dT_0}{dt}.$$

Подставляем в (18) и получаем

$$\Psi(t) = \frac{1}{2a_1} \cdot \frac{dT_0}{dt}.$$
(26)

С учетом (25) имеем профиль температур жидкой фазы вида

$$\vartheta_1(x,t) = T_0 + \frac{T_m - T_0}{X - X_0} (x - X_0) + \frac{1}{2a_1} \cdot \frac{dT_0}{dt} (x - X)(x - X_0).$$
(27)

Аналогично для твердой фазы задаем профиль температур [2]

$$\vartheta_2(x, t) = T_m - (T_m - T) \{ 1 - \exp[-\theta(t)(x - X)] \}.$$
(28)

Профиль температур (28) удовлетворяет уравнению баланса энергии в объеме (18) при

$$\theta = \frac{1}{a_2} \cdot \frac{dX}{dt}.$$

Тогда

$$\vartheta_2(x,t) = T_m - (T_m - T) \left\{ 1 - \exp\left[-\frac{1}{a_2} \cdot \frac{dX}{dt} (x - X) \right] \right\}.$$
 (29)

Уравнения (25), (29) удовлетворяют всем перечисленным ранее условиям. Используем уравнения (21), (22) для определения остающихся неизвестных X(t), $X_0(t)$.

Используя полученные профили температур (25), (29), определяем градиенты температур на границе плавления:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \Theta_1}{\partial x} \end{pmatrix}_{x=X} = \frac{T_m - T_0}{X - X_0} + \frac{1}{2a_1} \cdot \frac{dT_0}{dt} (X - X_0); \\ \begin{pmatrix} \frac{\partial \Theta_2}{\partial x} \end{pmatrix}_{x=X} = (T_m - T) \frac{-1}{a_2} \cdot \frac{dX}{dt}.$$

Вводя значения градиентов температур, из (22) получаем выражение для скорости перемещения границы плавления

$$\frac{dX}{dt} = \frac{\lambda_1}{L\rho + (\lambda_2/a_2)(T_m - T)} \left[\frac{T_0 - T_m}{X - X_0} - \frac{1}{2a_1} \cdot \frac{dT_0}{dt} (X - X_0) \right].$$
 (30)

Аналогично для границы испарения $X_0(t)$

$$\left(\frac{\partial \Theta_{1}}{\partial x}\right)_{x=X_{0}} = \frac{T_{m} - T_{0}}{X - X_{0}} - \frac{1}{2a_{1}} \cdot \frac{dT_{0}}{dt} (X - X_{0});$$

$$\frac{dX_{0}}{dt} = \frac{1}{L_{0}\rho + (\lambda_{1}/a_{1})(T_{0} - T_{m})} \left\{ q_{0} - \lambda_{1} \left[\frac{T_{0} - T_{m}}{X - X_{0}} + \frac{1}{2a_{1}} \cdot \frac{dT_{0}}{dt} (X - X_{0}) \right] \right\}.$$
(31)

Для величины расплавленной зоны (*X* – *X*₀) имеем

$$\frac{d(X-X_0)}{dt} = \frac{\lambda_1(T_0-T_m)}{X-X_0} \left[\frac{1}{L\rho + c_2\rho(T_m-T)} + \frac{1}{L_0\rho + c_1\rho(T_0-T_m)} \right] - \frac{\lambda_1}{2a_1} \cdot \frac{dT_0}{dt} (X-X_0) \left[\frac{1}{L\rho + c_2\rho(T_m-T)} + \frac{1}{L_0\rho + c_1\rho(T_0-T_m)} \right] - \frac{q_0(t)}{L_0\rho + c_1\rho(T_0-T_m)}.$$
(32)

Таким образом, системы дифференциальных уравнений (18)—(23) приводятся к дифференциальному уравнению (32) относительно величины расплавленной зоны $X - X_0$.

Уравнение (32) представляет собой уравнение вида

$$y' = f(t)y^n + g(t)y + h(t),$$
 (33)

где $y = X - X_0$, n = -1.

$$f(t) = \lambda_1 (T_0 - T) \left[\frac{1}{L_0 \rho + c_1 \rho (T_0 - T_m)} + \frac{1}{L \rho + c_2 \rho (T_m - T)} \right]; \quad (34)$$

$$g(t) = \frac{\lambda_1}{2a_1} \cdot \frac{dT_0}{dt} \left[\frac{1}{L_0 \rho + c_1 \rho (T_0 - T_m)} + \frac{1}{L \rho + c_2 \rho (T_m - T)} \right]; \quad (35)$$

$$h(t) = -\frac{q_0(t)}{L_0 \rho + c_1 \rho (T_0 - T_m)}.$$
(36)

Решение уравнения (33) имеет вид

$$X - X_0 = y = \left(\frac{h}{f}\right)^n U(t).$$
(37)

Используя решение для величины расплавленной зоны (37), определяют законы перемещения границ раздела фаз жидкость—металл X(t), границы испарения $X_0(t)$ и температуру поверхности T_0 .

Постоянный тепловой поток

Рассчитаем переходный процесс воздействия поверхностного источника с постоянной плотностью теплового потока q_0 при постоянстве температуры поверхности T_0 , $q(t) = q_0 = \text{const}$ (рис. 2).

Из соотношений (30), (31) задача сводится к решению уравнений

$$\frac{dX}{dt} = \frac{\lambda_1 (T_0 - T_m)}{L\rho + c_2 \rho (T_m - T)} \cdot \frac{1}{X - X_0};$$
(38)

$$\frac{dX_0}{dt} = \frac{1}{L_0\rho + c_2\rho(T_0 - T_m)} \left[q_0 - \frac{\lambda_1(T_0 - T_m)}{X - X_0} \right];$$
(39)
$$\frac{d(X - X_0)}{dt} = \frac{\lambda_1(T_0 - T_m)}{X - X_0} \left[\frac{1}{L\rho + c_2\rho(T_m - T)} + \frac{1}{L_0 + c_1\rho(T_0 - T_m)} \right] - \frac{q_0}{L_0\rho + c_1\rho(T_0 - T_m)}.$$

Или
$$yy' = f(t) + h(t)y;$$

где $y' = d(X - X_0)/dt;$

$$f(t) = \lambda_1 (T_0 - T_m) \cdot \left[\frac{1}{L_0 \rho + c_1 \rho (T_0 - T_m)} + \frac{1}{L \rho + c_2 \rho (T_m - T)} \right]; \quad (40)$$

$$h(t) = -\frac{q_0}{L_0 \rho + c_1 \rho (T_0 - T_m)}.$$
(41)

Величина расплавленной зоны равна

$$y = X - X_0 = \left(\frac{h}{f}\right)^n U(t) = -\frac{\varepsilon}{q_0}U(t),$$
(42)
$$\varepsilon = \lambda (T - T) \left[1 + \frac{L_0 + c_1(T_0 - T_m)}{1 + c_1(T_0 - T_m)}\right]$$
(43)

где

$$\varepsilon = \lambda_1 (T_0 - T_m) \left[1 + \frac{L_0 + c_1 (I_0 - I_m)}{L + c_2 (T_m - T)} \right].$$
(43)
При равенстве теплоемкости в твердой и жидкой фазах $c_1 = c_2 = c$

выражение для є преобразуется к виду
$$\begin{bmatrix} L_0 + c(T_0 - T_r) \end{bmatrix}$$
 (44)

$$\varepsilon = \lambda_1 (T_0 - T_m) \left[1 + \frac{L_0 + c(T_0 - T_m)}{L + c(T_m - T)} \right].$$
(44)

В дальнейшем используем для є выражение (44). Функцию времени *U*(*t*) определяем из соотношения (19)

$$\int \frac{dU}{U^n - \gamma U + 1} + C = \int \left(\frac{f}{h}\right)^{\frac{1}{n}} h dt.$$

При t = 0, U = 0 постоянная интегрирования C = 0. При g(t) = 0, $\gamma = 0$ функция U(t) определяется трансцендентным уравнением

$$U - \ln(1+U) = \frac{q_0^{2t}}{\rho \varepsilon [L_0 + c(T_0 - T_m)]}.$$
(45)



Рис. 2. Модель процесса фазовых превращений плавления и испарения при действии постоянного поверхностного потока q_0 .

Параметр U в относительных единицах представляет ширину зоны реакции $X - X_0$ и асимптотически приближается к –1. Безразмерный комплекс содержит в себе аргумент задачи t и составлен из известных при постановке задачи параметров. В конечном виде имеем следующее решение задачи нестационарной теплопроводности с фазовыми превращениями плавления и испарения.

Введем обозначение безразмерного комплекса.

$$\bar{t} = \frac{q_0^{2_t}}{\rho \varepsilon [L_0 + c(T_0 - T_m)]},$$
(46)

тогда $U - \ln(1 + U) = \overline{t}$.

$$\ln(1+U) = U - \frac{U^2}{2} + \frac{U^3}{3} - \frac{U^4}{4} + \dots + (-1)^{n+1} \cdot \frac{U^n}{n} + \dots$$

Для вычисления интегралов (38), (39) необходимо преобразовать трансцендентное уравнение (45) к явной форме относительно $U(\bar{t})$. Для малых времен \bar{t} используем разложение функции $\ln(1 + U)$ в ряд для области сходимости $-1 \le U \le 1$.

Если ограничиться в разложении первыми двумя членами, то с учетом соотношения (46) получим приближенную формулу, которую можно использовать при $t \le 0,1$:

$$U(\bar{t}) \approx \sqrt{2\bar{t}} \ . \tag{47}$$

Выводы

Разработан математический аппарат для решения сложных задач теплопроводности с фазовыми превращениями и уносом массы испарением.

Получено замкнутое решение процессов с фазовыми превращениями с использованием дифференцирования и интегрирования уравнения Chini.

Предложена система безразмерных параметров, позволяющих решить сложные задачи теплопроводности.

- 1. *Куляпин В. М.* Некоторые задачи теплопроводности с фазовыми превращениями // Инж.-физ. журн. 1971. **20**, № 3. С. 497—504.
- Камке Э. Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям. М.: Наука, 1971. — 576 с.
- 3. Шарма О. Задачи переноса тепла при наличии фазовых превращений и переменной температуре поверхности / О. Шарма, М. Ротенберг, С. Пеннер // Ракетная техника и космонавтика. 1967. **5**, № 4. С. 84—89.

Рішення задач з фазовими перетвореннями

В. М. Куляпін, І. С. Елісєєв, І. М. Аслямов, О. В. Бовтрикова

Розглянуто процеси фазових перетворень плавлення і випаровування під дією поверхневого джерела високої щільності. При цьому вперше запропоновано метод розв'язання крайових задач, що точно задовольняє рівнянням крайової задачі (температура, теплота фазових перетворень) і наближено — умовам в середині зони фазових перетворень. Цей метод дозволяє отримати аналітичний

опис руху фазових границь і якісно (і кількісно) оцінити розвиток процесу, зокрема з точки зору його стійкості.

Ключові слова: фазові перетворення випаровування, катодні процеси, електричний розряд.

Solving problems with phase changes

V. M. Kulyapin, I. S. Eliseev, I. M. Aslyamov, E. V. Bovtrikova

The article examines the processes of phase transformations of melting and evaporation under the action of high-density surface source. For the first time a method for solving boundary value problems exactly satisfy the equations of the problem (temperature, heat of phase transformations) and approximate conditions within the zone of phase transformations. This method allowed us to obtain an analytical description of the motion of the phase boundaries that allows high-quality (and quantity) to evaluate the development process, particularly in terms of its sustainability.

Keywords: processes of phase transformations, evaporation, cathodic processes, electric discharge.