

УДК 532.546; 536.421  
PACS 47.56.+r, 64.70.D-

## Исследование особенностей неравновесного фазового перехода во флюидонасыщенном грунте

**А.Е. Прохоров, М.С. Желнин, А.А. Костина, О.А. Плехов**

Институт механики сплошных сред УрО РАН  
614013, Пермь, ул. Ак. Королева 1  
email: Prokhorov.a@icmm.ru

Проводится анализ двух математических моделей описания процесса фазового перехода первого рода в искусственно замораживаемых обводненных горных породах на основе натуральных экспериментов по замораживанию влагонасыщенного мелкодисперсного песка, заполняющего цилиндрическую форму. Рассматривается классическая модель Стефана, предполагающая мгновенную кинетику фазового перехода и четкую границу раздела фаз, и альтернативная модель с ограниченной скоростью кристаллизации воды и наличием остаточной влаги в мерзлой зоне. Натурные эксперименты проведены при постоянных условиях заморзания, с регистрацией температуры на границах и в центре заполненного объема. Анализ выполняется на основе сравнения численного решения рассмотренных моделей с экспериментальными измерениями температуры. Уточнение материальных параметров песка и параметрическая идентификация моделей проводятся на основе решения обратных задач. В результате показано, что альтернативная модель в значительной мере лучше описывает результаты эксперимента по сравнению с моделью Стефана.

**Ключевые слова:** задача Стефана; фазовый переход; замораживание

*Поступила в редакцию 31.07.2018; принята к опубликованию 31.10.2018*

## Investigation of non-equilibrium phase transition in freezing porous media

**A.E. Prokhorov, M.S. Zhelnin, A.A. Kostina, O.A. Plekhov**

Institute of continuous mechanics UB RAS Ak. Koroleva 1, 614013, Perm, Russia  
email: Prokhorov.a@icmm.ru

In the work presented, two mathematical models for the description of the process of a phase transition in artificially frozen, watered mountain rocks are analyzed on the basis of full-scale experiments on freezing of water-saturated fine-grained sand that fills a cylindrical shape. Authors consider the classical Stefan model, which assumes the instantaneous kinetics of the phase transition, and an alternative model with a limited rate of water crystallization and the presence of residual moisture in the frozen zone. The field experiments were carried out under constant freezing conditions, with the temperature recorded at the boundaries and at the center of the filled volume. The analysis is performed on the basis of a comparison of the numerical solution, the models considered, with the experimental temperature measurements. Refinement of material parameters of sand and parametric identification of models is carried out on the basis of solving inverse problems. As a result, it is shown that the alternative model largely better describes the results of the experiment in comparison with the Stefan model.

**Keywords:** phase transition; porous media; freezing

Received 31.07.2018; accepted 31.10.2018

doi: 10.17072/1994-3598-2018-4-31-37

## 1. Введение

Современные тенденции к освоению северных регионов и развитию горнодобывающей промышленности требуют глубокого изучения процессов, протекающих во влагонасыщенных грунтах при замораживании и оттаивании. Проектирование защитной завесы из искусственно замороженного грунта обуславливает необходимость точного определения времени замораживания и необходимой мощности замораживающей установки. Один из наиболее популярных способов решения подобной задачи заключается в привлечении методов математического моделирования. Математическое моделирование сложной системы, состоящей из слоев грунта с различной влагонасыщенностью, – достаточно трудоемкий процесс, нуждающийся в экспериментальной верификации. Ранее, в работах отечественных и зарубежных авторов [1–3] было показано, что процесс замораживания пористого грунта сопровождается миграцией влаги из незамерзшей области в сторону фронта фазового перехода, а также возникновением сложного напряженно-деформированного состояния [4, 5]. Широкий спектр эффектов, возникающих в процессе замораживания влагонасыщенного грунта, требует проведения лабораторных испытаний и детального исследования смежных (сопряженных) процессов, протекающих в ходе замораживания породы.

Цель данной работы – анализ математических моделей, используемых для описания процесса фазового перехода в обводненных горных породах. Рассматриваются две принципиально разные модели: базовая модель Стефана, в которой предполагается, что фазовый переход происходит мгновенно и имеет четко выраженную границу между талой и мерзлой зонами, а также модель неравновесного фазового перехода с конечной скоростью кристаллизации воды. Предполагается, что мерзлый грунт представляет собой пористую среду, в которой явление тепло-влаго-переноса сопровождается процессом образования льда в области переохлаждения. С целью верификации рассмотренных моделей проведен эксперимент по искусственному замораживанию влагонасыщенного мелкодисперсного песка. Анализ адекватности моделей фазового перехода выполняется на основе сравнения численного решения, полученного методом конечных элементов в коммерческом пакете Comsol Multiphysics, с экспериментальными данными.

Уточнение теплофизических параметров смеси и параметрическая идентификация рассмотренных

моделей проводятся на основе решения коэффициентной обратной задачи, заключающейся в определении неизвестных параметров с помощью экспериментальных данных изменения температуры от времени в заданной точке исследуемого образца.

В результате исследования показано, что математическая модель, учитывающая кинетику фазового перехода, лучше описывает результаты эксперимента по сравнению с моделью Стефана

## 2. Постановка задачи и методика исследования

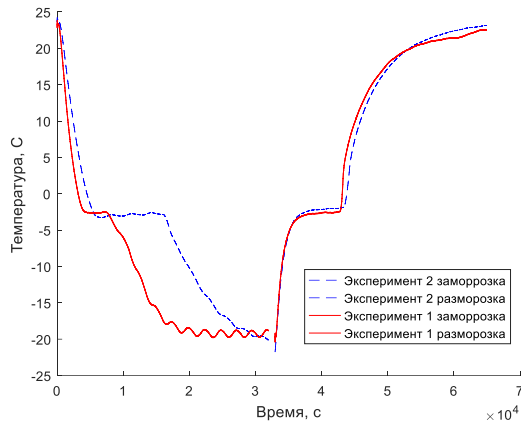
### 2.1. Экспериментальное исследование процесса искусственного замораживания грунта

Для изучения процесса замораживания влагонасыщенного грунта сквозная цилиндрическая форма, высотой 0.06 м и диаметром 0.05 м, заполнялась песком, смешанным с водой. Форма помещалась в гидроизолирующую пленку для предотвращения истекания воды через боковые и нижнюю стороны цилиндра. Условия теплообмена с окружающей средой на торцевой поверхности цилиндра и на поверхности образующей цилиндра различные, но постоянные в рамках поверхности (считается, что на торцах образца условия одинаковые), поэтому необходимо регистрировать изменение температуры не только на образующей поверхности и на торце образца, но и в центральной точке образца для контроля процесса замораживания. Для регистрации температуры в грунт были помещены три термопары ТХА К-типа с точностью измерений 0.1°C. Термопара 1 расположена в центре нижнего основания цилиндра, термопара 2 – в центре на образующей, термопара 3 – в центре цилиндра. Указанное расположение термопар обусловлено необходимостью определения граничных условий на поверхностях образца ( $T_{Ci} = T_{Ci}(t)$ ,  $i = 1, 2$ ) для последующей идентификации математических моделей. Предполагается, что на поверхностях условия теплообмена с окружающей средой постоянные. Показания термопар записывались с помощью аналого-цифрового преобразователя National Instruments USB 9211 с частотой 10 Гц на протяжении всего времени испытаний.

Условием полного замораживания системы являлась стабильность показаний термопары 3 ( $T_{C3} = T_{C3}(t)$ ). В первом эксперименте образец устанавливался на дне холодильной камеры со средней температурой  $-18^\circ\text{C}$ . Во втором случае образец

подвешивался в объеме этой же холодильной камеры. В обоих случаях после полной заморозки образца производилось его естественное размораживание при комнатной температуре.

Графики зависимости температуры  $T_{C3}$  от времени для обоих экспериментов приведены на рис. 1. Температурные колебания, наблюдаемые на рис. 1, связаны с периодическим включением/выключением компрессора холодильной камеры, которое необходимо для поддержания постоянной температуры.



**Рис. 1.** Зависимость температуры от времени, полученная в результате эксперимента по замораживанию и размораживанию водонасыщенного грунта

### 2.2. Методика определения материальных параметров грунта

Плотность песка определялась методом гидростатического взвешивания. В соответствии с данным методом образец породы сначала взвешивался в воздухе, после чего помещался в мерный стакан, частично заполненный жидкостью. Разница показаний мерного стакана с породой и без нее позволяла оценить объем образца, а затем вычислять его плотность. Оценка пористости породы осуществлялась по результатам взвешивания в воде и в воздухе одинакового объема грунта.

После определения плотности и пористости породы определялись его теплопроводность и удельная теплоёмкость. С этой целью выполнялось решение обратной задачи по определению эффективного значения коэффициента теплопроводности  $\alpha_k$  породы в талом  $k=lq$  и мерзлом  $k=sd$  состояниях для уравнения теплопроводности:

$$\frac{dT}{d\tau} = \alpha_k \Delta T, \quad (1)$$

с начальным условием

$$T|_{t=0} = T_{amb,k} \quad (2)$$

и граничными условиями первого рода

$$\begin{aligned} T|_{\Gamma_1} &= T_{C1}(t), \\ T|_{\Gamma_2} &= T_{C2}(t), \end{aligned} \quad (3)$$

где  $T$  – температура среды,  $T_{amb,k}$  – начальная температура породы,  $\alpha_k = \lambda_k / (\rho_k C_k)$ ,  $\lambda_k$  – эффективная теплопроводность,  $\rho_k$  – эффективная плотность среды,  $C_k$  – эффективная удельная теплоемкость в талом и мерзлых состояниях. Предполагается, что перечисленные характеристики мало зависят от пространственных координат и изменения температуры.

Поставленная задача решалась в осесимметричной постановке, геометрия расчетной области приведена на рис 2. Значения температур  $T_{C1}$  и  $T_{C2}$  в каждый момент времени соответствовали результатам, полученным при проведении второго эксперимента.



**Рис.2.** Геометрия расчетной области. Симметрия относительно  $r = 0$ .  $\Gamma_1$  и  $\Gamma_2$  границы области в соответствии с условиями (3)

Решение обратной задачи осуществлялось по данным изменения температуры  $T_{C3}$  от времени в центральной точке образца путем минимизации функционала невязки между решением задачи (1)-(3) и экспериментальной кривой с использованием вычислительного алгоритма, приведенного в [6]. Данный алгоритм основан на методе итеративной регуляризации и включает в себя применение алгоритма оптимизации наискорейшего спуска для поиска минимума целевого функционала.

При определении коэффициентов теплопроводности экспериментальные данные рассматривались для моментов времени, когда процесс фазового перехода в образце отсутствовал. Для талой породы идентификация коэффициента проводилась по кривой замораживания на временном промежутке, в котором температуры на границах образца были выше  $3^\circ\text{C}$ , а для мерзлой породы – по кривой размораживания на временном промежутке, при котором температуры были ниже  $6^\circ\text{C}$ .

На основе полученных эффективных значений теплопроводности выполнялась оценка теплопроводности и удельной теплоемкости породы с использованием правила смеси:

$$x = \theta x_s + (1 - \theta) x_n, \quad (4)$$

где  $x_s$  – значение параметра, характеризующего сухой скелет,  $\theta$  – пористость грунта,  $x_n$  ( $n=w,i$ ) – зна-

чение параметра, характеризующего воду ( $n=w$ )/лед ( $n=i$ ). Для этого, с использованием справочных данных для воды и льда, вычислялась теплопроводность скелета породы, а затем, на основе измеренного значения плотности скелета, определялись величины, характеризующие сухой скелет (см. таблицу). Следует отметить, что существуют более точные модели для определения теплофизических параметров многокомпонентной среды [7], однако ввиду их неуниверсальности и сложности в работе используется более грубое приближение (4).

Параметры скелета породы

$\rho$ , кг/м <sup>3</sup>	$C$ , Дж/кг·град	$\lambda$ Вт/м·град
1870	715	1.3

Сравнение решения задачи (1-3) для определенных значений теплофизических параметров с экспериментальным измерением температуры  $T_{C3}$  в центральной точке цилиндра представлено на рис. 3. Коэффициенты детерминации между полученным решением и экспериментальными кривыми принимают значение 0.98, что свидетельствует о хорошем соответствии.

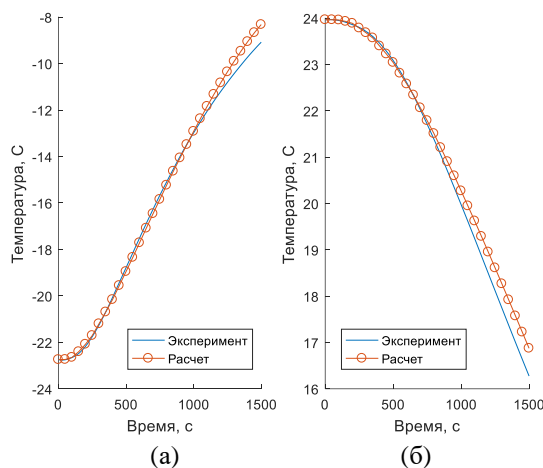


Рис.3. Результаты решения задачи теплопроводности водонасыщенного грунта в сравнении с результатами эксперимента: а – для нагревания, б – для охлаждения

### 2.3. Анализ математических моделей, используемых для описания процесса фазового перехода

Базовой моделью для описания процесса фазового перехода во влагонасыщенной породе является двухфазная задача Стефана, которая может быть записана следующим образом [8,9]:

$$(\rho C + L\rho_w \delta [T - T_{0*}]) \frac{dT}{d\tau} = \nabla(\lambda \nabla T), \quad (5)$$

где  $\rho$ ,  $C$ ,  $\lambda$  – эффективные параметры двухфазной среды,  $T_{0*}$  – температура фазового перехода,  $L$  – скрытая теплота фазового перехода. В данной

формулировке не выполняется явного выделения границы раздела фаз, а фазовый переход описывается путем введения эффективной теплоемкости, при этом общий подход к построению численного решения задачи заключается в сглаживании теплофизических коэффициентов на интервале фазового перехода  $\Delta = [T_1, T_2]$ .

Для решения задачи начальные и граничные условия задаются в виде (2), (3). Оценка эффективных параметров среды выполняется по правилу смеси (4) с использованием определенных ранее материальных констант для каждой из фаз. Значения температур  $T_{C1}$  и  $T_{C2}$  в (3) задаются на основе данных первого эксперимента. Температура фазового перехода  $T_{0*}$  определяется из эксперимента по нагреванию грунта, чтобы избежать неточностей, связанных с переохлаждением воды. Решение выполняется методом конечных элементов в коммерческом пакете Comsol Multiphysics.

Результат решения задачи Стефана в сравнении с экспериментальными значениями температуры  $T_{C3}$  представлен на рис. 4.

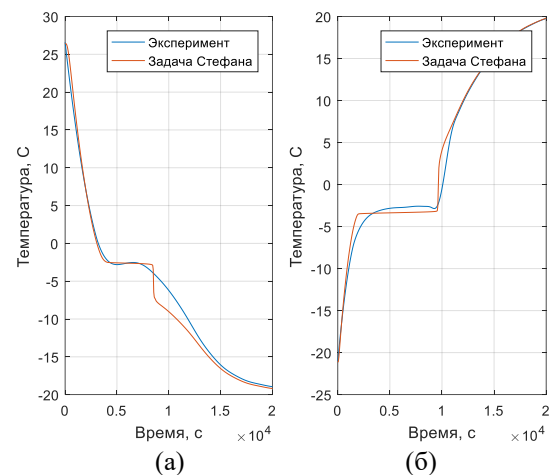


Рис.4. Результаты решения задачи Стефана для водонасыщенного грунта в сравнении с экспериментальными кривыми: а – замораживание, б – оттаивание

Анализ данных, представленных на рис. 4, позволяет утверждать, что на промежутках замораживания и оттаивания, вдали от зоны фазового перехода, экспериментальные значения температуры достаточно точно описываются полученным решением. Однако в зоне фазового перехода на графиках имеется расхождение между экспериментом и расчетом. При этом отклонение между кривыми при охлаждении значительно больше, чем при нагревании. Влияние параметров расчета на результат численного решения был исключен путем проведения исследования сеточной сходимости и длины интервала фазового перехода.

Определение оптимальных параметров расчета выполнялось на основе подхода, представленного

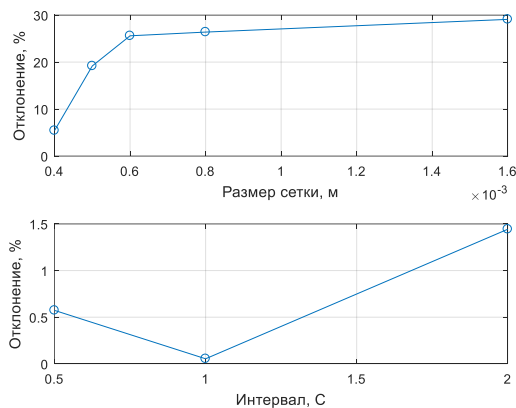
в [9]. Шаг по времени пакет Comsol Multiphysics выбирает автоматически.

В качестве эталонного было выбрано решение  $T^e$ , полученное при  $\Delta=1$  на сетке с размером элемента, не превышающим 0.0003 м. Отклонение от эталонного решения оценивалось по формуле

$$\varepsilon = \frac{\max |T_{C3}^e(t) - T_{C3}(t)|}{|T_{C3}^e(t_0)|}, \quad (6)$$

где  $T_{C3}^e$ ,  $T_{C3}$  – численные решения, рассмотренные в центре цилиндра,  $t_0$  – момент времени, в который достигается максимум отклонения между решениями.

В результате было установлено, что при расчете на сетке с размером элемента, не превышающего 0.0004 м, отклонение значительно меньше по сравнению с другими случаями и не превышает величины в 5,5% (рис. 5, сверху). Исследование влияния ширины интервала фазового перехода на погрешность, проведенное для данного решения, показало, что наименьшее отклонение достигается при  $\Delta=1$  (рис. 5, снизу). Следует отметить, что для рассмотренных размеров сетки и интервалов сглаживания качественный вид решения в центральной точке цилиндра не изменяется.



**Рис.5.** Результаты исследования влияния размера конечного элемента (сверху) и ширины интервала фазового перехода (снизу) на результат расчета

Предполагается, что обнаруженное расхождение при замораживании между решением задачи Стефана и экспериментом связано с наличием незамерзшей влаги после снижения температуры ниже температуры фазового перехода. В работе [10] утверждается, что при малой скорости замораживания миграция влаги является неотъемлемой частью процесса промерзания дисперсного грунта с высоким содержанием воды. Процесс диффузии жидкости из талой зоны водонасыщенной породы в мерзлую возникает вследствие градиента влажности, вызванного образованием льда в ходе фазового перехода. Данный процесс приводит к появ-

лению незамерзшей влаги в области породы с температурой ниже температуры фазового перехода и неравномерному распределению льдистости.

В работе [11] предлагается следующая модель для описания процесса замораживания влагонасыщенной породы с учетом влияния остаточной влажности на кинетику фазового перехода:

$$\rho C \frac{dT}{d\tau} = \nabla(\lambda \nabla T) + \rho_i L \frac{dI}{d\tau}, \quad (7)$$

где  $I$  – льдистость. Уравнение для определения льдистости, описывающее скорость кристаллизации, задается в виде

$$\frac{dI}{d\tau} = \frac{\omega - \omega_{eq}(T)}{t_*}. \quad (8)$$

Здесь  $\omega$  – влажность среды,  $\omega_{eq}$  – равновесная влажность,  $t_*$  – характерное время кристаллизации, зависящее от материала. Изменение влажности, происходящее в процессе замораживания, задается уравнением массового баланса

$$\frac{d\omega}{d\tau} = \nabla(D \nabla \omega) - \frac{dI}{d\tau} \quad (9)$$

с начальным и граничными условиями:

$$\omega|_{r=0} = \omega_0, \quad (10)$$

$$\left. \frac{d\omega}{dr} \right|_{\Gamma_1} = 0, \quad (11)$$

$$\left. \frac{d\omega}{dr} \right|_{\Gamma_2} = 0, \quad (12)$$

где  $D$  – коэффициент диффузии.

В [11] на основе экспериментальных данных для различных пород была предложена следующая аппроксимация функции  $\omega_{eq}$ :

$$\omega_{eq} = \frac{1 + \Theta}{1 - a_0 \Theta}, \quad (13)$$

где функция  $\Theta$  имеет вид

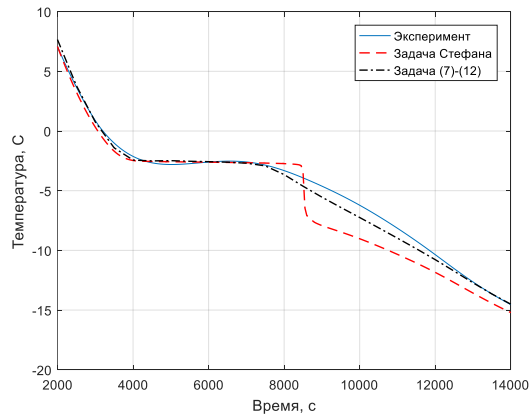
$$\Theta = \frac{(T - T_{0*})}{(T_{min} - T_{0*})}. \quad (14)$$

В последнем уравнении  $T_{min}$  – минимальная температура среды.

Решение поставленной задачи (7)–(12) проводилось методом конечных элементов для тех же величин теплофизических параметров, начального и граничных условий, что и решение задачи Стефана.

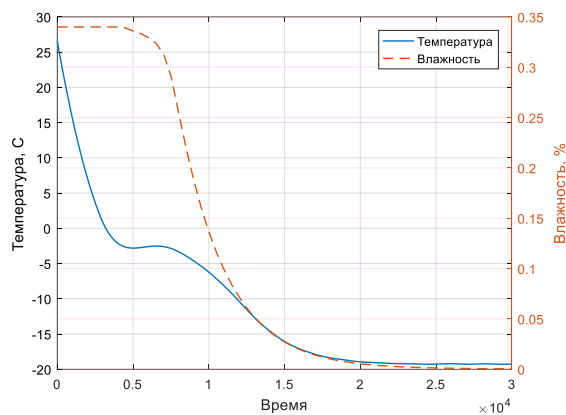
Идентификация параметра  $a_0$  проводилась с использованием того же вычислительного алгоритма, что и при определении коэффициентов теплопроводности. По результатам идентификации параметр  $a_0$  принял значение 184,2. Параметр  $a_0$  определяет вид функции остаточной влажности и не имеет физического смысла. Функции для определения коэффициента диффузии и характерного времени кристаллизации были взяты из [11].

На рис. 6 представлено сравнение численного решения задачи (7)–(12) с решением задачи Стефана и экспериментальными значениями температуры  $T_{сз}$ . Из графиков видно, что модель (7)–(12) значительно лучше описывает изменение температуры на промежутке фазового перехода и последующего охлаждения.



**Рис. 6.** Результаты решения задачи (7)–(12), задачи Стефана и результаты эксперимента по замораживанию песка

На рис. 7 представлен график распределения влажности  $\omega$ , соотнесенный с графиком температуры в центральной точке замораживаемого образца.



**Рис. 7.** Кинетика изменения влажности в центральной точке образца в сравнении с распределением температуры

Из рис. 7 видно, что на промежутке значений температуры ниже температуры фазового перехода находится значительный объем незамерзшей воды.

### 3. Заключение

Выполнен анализ двух математических моделей фазового перехода первого рода на основе экспериментальных измерений температуры в водонасыщенном мелкодисперсном песке. Идентификация параметров рассмотренных моделей основана на решении обратной задачи теплопроводности.

Показано, что модель Стефана не позволяет качественно описать изменение температуры со временем на промежутке фазового перехода, вызванного замерзанием воды в породе. Предложена модель, позволяющая учесть скорость кристаллизации воды и влияние незамерзшей влаги на распределение температуры в промежутке ниже температуры фазового перехода. Для оценки адекватности модели проведено экспериментальное исследование замораживания влагонасыщенного грунта. Установлено, что данная модель позволяет более точно описать эволюцию температуры, наблюдаемую в эксперименте, качественно и количественно.

Работа выполнена при поддержке программы фундаментальных исследований УрО РАН, проект № 18-9-1-31

### Список литературы

1. Еришов Э. Д., Акимов Ю. П., Чеверев В. Г. и др. Фазовый состав влаги в мерзлых породах. М.: изд-во Моск. ун-та, 1979. 190 с.
2. Dirksen, C., and Miller, R.D. Closed-system freezing of unsaturated soil // Soil Science Society of America Proceedings. 1966.30: 168–173.
3. Гречищев С. Е., Чистотинов Л. В., Шур Ю. Л. Основы моделирования криогенных физико-геологических процессов. М.: Наука, 1984. 230 с.
4. Bronfenbrener L., Modelling Heat and Mass Transfer in Freezing Porous Media.//Nova Science Publishers, Inc., N.Y. 2012.
5. Hoekstra P., Moisture movement in soil under temperature gradient with the cold side below freezing. //Water Resources Research. 1966. Vol. 2, P. 241–250.
6. Желнин М. С., Плехов О. А., Семин М. А. и др. Численное решение обратной задачи определения объемной теплоемкости породного массива в процессе искусственного замораживания // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. 2017. № 4. С. 56–75.
7. Chaudhary D. R., Bhandari R. C. Thermal conductivity of two-phase porous materials: dry soils. // Journal of Physics D. 1969. Vol. 2. P. 609–610.
8. Самарский А. А., Вабищевич П. Н. Вычислительная теплопередача. М.: УРСС, 2003, 784 с.
9. Вабищевич П. Н., Васильева М. В., Павлова Н. В. Численное моделирование термостабилизации фильтрующих грунтов // Математическое моделирование. 2014. Т. 26, № 9. С. 111–125.
10. Еришов Э. Д. Общая геокриология. М.: изд-во Моск. ун-та, 2002. 682 с.

11. Bronfenbrener L., Non-equilibrium crystallization in porous media: Numerical solution // *Cold Region Science and Technology*. 2013. Vol. 85. P 137–149.

### References

1. Ershov E.D., Akimov Y.P., Cheverev V.G. et al. *Phase composition of moisture in frozen soils*. Moscow: Moscow State University, 1979, 190 p. (In Russian).
2. Dirksen C., Miller R.D. Closed-system freezing of unsaturated soil. *Soil Science Society of America Proceedings*, 1966, vol. 30, pp. 168–173.
3. Grechishev S.E., Chistotinov L.V. Shur Y.L. *The modeling of cryo-flow on geological processes*. Moscow: Nauka, 1984. 230 p. (In Russian).
4. Bronfenbrener L., *Modelling heat and mass transfer in freezing porous media*. N.Y.: Nova Science Publishers, 2012.
5. Hoekstra P., Moisture movement in soil under temperature gradient with the cold side below freezing. *Water Resources Research*, 1966, vol. 2, pp. 241–250.
6. Zhelnin M.S., Plekhov O.A., Semin M.A. et al. Numerical solution for an inverse problem about determination of volumetric heat capacity of rock mass during artificial freezing. *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2017, no. 4, pp. 56–75.
7. Chaudhary D. R., Bhandari R. C. Thermal conductivity of two-phase porous materials: dry soils. *Journal of Physics D*, 1969. Vol. 2. P. 609–610.
8. Samarskiy A.A. Vabishchevich P.N. *Computational Heat Transfer*. Moscow: URSS, 2003, 784 p. (In Russian)
9. Vabishchevich P. N., Vasilyeva M. V., Pavlova N. V. Numerical simulation of thermal stabilization of filter soils. *Mathematical Models and Computer Simulations*. 2015, vol. 7, no. 2. pp. 154–164.
10. Ershov E. D. *General geocryology: tutorial*. Moscow Moscow University Press, 2002, 682 p. (In Russian)
11. Bronfenbrener L. Non-equilibrium crystallization in porous media: Numerical solution. *Cold Region Science and Technology*. 2013, vol. 85, pp. 137–149

### Просьба ссылаться на эту статью в русскоязычных источниках следующим образом:

Прохоров А. Е., Желнин М. С., Костина А. А., Плехов О. А. Исследование особенностей неравновесного фазового перехода в флюидонасыщенном грунте // *Вестник Пермского университета. Физика*. 2018. № 4 (42). С. 31–37. doi: 10.17072/1994-3598-2018-4-31-37

### Please cite this article in English as:

Prokhorov A. E., Zhelnin M. S., Kostina A. A., Plekhov O. A. Investigation of non-equilibrium phase transition in freezing porous media. *Bulletin of Perm University. Physics*, 2018, no. 4 (42), pp. 31–37. doi: 10.17072/1994-3598-2018-4-31-37