

Р. С. ЮРКОВ, Л. І. КНИШ

**ВЕРИФІКАЦІЯ МАТЕМАТИЧНОЇ МОДЕЛІ ДЛЯ
РОЗВ'ЯЗАННЯ ЗАДАЧІ СТЕФАНА В
РАМКАХ МЕТОДУ “MUSHY LAYER”***Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара,
пр. Гагаріна, 72, 49000, Дніпро, Україна; e-mail: romayurkov@gmail.com; lknysh@ukr.net*

Використання сонячної енергії має обмеження, пов'язані з її періодичним надходженням: сонячні установки не працюють вночі та малоефективні в похмуру погоду. Вирішення цієї проблеми пов'язано з необхідністю введення в контур перетворення систем акумулювання енергії та її дублювання. Серед систем акумулювання значні енергетичні, екологічні та економічні переваги мають фазоперехідні установки “тверде тіло – рідина”. Фізичні процеси в таких установках описуються системою нестационарних нелінійних рівнянь в часткових похідних зі специфічними граничними умовами на межі розподілу фаз. Верифікацію одного з методів розв'язання задачі Стефана для теплоакумулюючого матеріалу представлено в даній роботі.

Використання методу "Mushy layer" дозволило спростити класичну математичну модель задачі Стефана переходом до нестационарної задачі теплопровідності з неявно вираженим джерелом тепла, в якому враховується прихована теплота фазових змін. Вважається, що зміна фазового стану відбувається не в нескінченній області, а в проміжній зоні, яка визначається температурами солідуса і ліквідуса. Для розробки Python-коду застосовано неявну розрахункову схему, в якій температури солідуса та ліквідуса залишаються сталими та знаходяться в ході проведення числових експериментів.

В якості фізичної моделі для комп'ютерного моделювання та верифікації створеного алгоритму обрано процес формування шару льоду на поверхні води при постійній температурі навколишнього середовища. Отримані числові результати дозволили визначити поля температур у твердій та рідкій фаз, положення границі розподілу фаз, розрахувати швидкість її руху.

Для верифікації створеного алгоритму було проаналізовано класичний аналітичний розв'язок задачі Стефана для одновимірного випадку при постійній швидкості руху границі розподілу фаз. Значення відповідного коефіцієнта верифікації було отримано на основі числового розв'язку нелінійного рівняння з використанням спеціальних вбудованих Python-функцій. Після підстановки даних для розглянутої фізичної моделі в аналітичний розв'язок та порівняння їх з даними числового моделювання на основі методу "Mushy layer", отримано добрий збіг результатів, що свідчить про коректність створеного комп'ютерного алгоритму.

Проведені дослідження дозволять адаптувати розроблений Python-код, що базується на методі "Mushy layer" для розрахунку систем теплового акумулювання з фазовим переходом “тверде тіло – рідина” з урахуванням особливостей їх геометрії, відповідного температурного рівня, реальних граничних умов.

Ключові слова: математичне моделювання, числовий алгоритм, задача Стефана, метод “Mushy layer”, аналітичний розв'язок, верифікація.

The use of solar energy has limitations due to its periodic availability: solar plants do not operate at night and are ineffective in dull weather. The solution of this problem involves the introduction of energy storage and duplication systems into the conversion loop. Among the energy storage systems, solid-liquid phase transition modules have significant energy, ecologic, and cost advantages. Physical processes in modules of this type are described by a system of non-stationary nonlinear partial differential equations with specific boundary conditions at the phase interface. The verification of a method for solving the Stefan problem for a heat-storage material is presented in this paper.

The use of the mushy layer method made it possible to simplify the classical mathematical model of the Stefan problem by reducing it to a nonstationary heat conduction problem with an implicit heat source that takes into account the latent heat of transition. The phase transition is considered to occur in an intermediate zone determined by the solidus and liquidus temperatures rather than in an infinite region. To develop a Python code, use was made of an implicit computational scheme in which the solidus and liquidus temperatures remain constant and are determined in the course of numerical experiments.

The physical model chosen for computer simulation and algorithm verification is the process of ice layer formation on a water surface at a constant ambient temperature. The numerical results obtained allow one to determine the temperature fields in the solid and the liquid phase and the position of the phase interface and calculate its advance speed.

The algorithm developed was verified by analyzing the classical analytical solution of the Stefan problem for the one-dimensional case at a constant advance speed of the phase interface. The value of the verification coefficient was determined from a numerical solution of a nonlinear equation with the use of special built-in Python functions. Substituting the data for the physical model under consideration into the analytical solution and comparing them with the numerical simulation data obtained with the use of the mushy layer method shows that the results are in close agreement, thus demonstrating the correctness of the computer algorithm developed.

These studies will allow one to adapt the Python code developed on the basis of the mushy layer method to the calculation of heat storage systems with a solid-liquid phase transition with account for the features of their

© Р. С. Юрков, Л. І. Книш, 2021

geometry, the temperature level, and actual boundary conditions.

Keywords: *mathematical simulation, numerical algorithm, Stefan problem, mushy layer method, analytical solution, verification.*

Вступ. В даний час однією з ключових проблем розвитку сучасної енергетики є вирішення задач теплового акумулювання, яке забезпечить безперебійне функціонування сучасного енергетичного обладнання, дозволить вирівняти графіки теплового навантаження, що значно підвищить ефективність споживання теплової та електричної енергії. Теплові акумулятори поділяються на теплоємнісні та фазоперехідні.

Теплоємнісні акумулятори широко використовуються у промисловості та побуті як резервні системи теплової енергії на теплових станціях, для запуску різних типів двигунів, в енергетичних системах на основі відновлювальних джерел енергії та ін. Але такі акумулятори малоефективні, бо мають великі розміри, обмежений час функціонування, пов'язаний з низькими значеннями теплоємності відповідних матеріалів, потребують підключення систем безпеки і додаткової автоматики.

Ці недоліки відсутні у фазоперехідних акумуляторах “тверде тіло – рідина”, принцип дії яких гарантує високу щільність збереження енергії при невеликих перепадах температур і стабільну температуру на виході. Потреба у використанні фазоперехідних теплових акумуляторів суттєво зростає у зв'язку з широким впровадженням енергетичних систем на основі енергії Сонця. Зокрема, тепловий акумулятор, що містить розплави солей лужних металів, є обов'язковим елементом системи перетворення параболоциліндричних сонячних станцій [1]. Низькотемпературні теплові акумулятори на основі парафінів стають все більш розповсюдженими в системах автономного тепlopостачання [2]. Перспективними бачаться проекти високотемпературних теплоакумуляторів космічного та наземного базування, що представлені в [3]. Незалежно від температурного режиму, всі фазоперехідні акумулятори функціонують на однакових фізичних принципах і досліджуються на основі відповідних моделей, вибір яких залежить від необхідного рівня детальності розрахунків. На початкових етапах проектування та під час експериментальних досліджень актуальними є наближені квазістаціонарні моделі, що базуються на балансових співвідношеннях [4]. Але для глибокого аналізу складних взаємопов'язаних процесів, що мають місце в фазоперехідному акумуляторі, використовуються математичні моделі більш високого рівня. Розробці та верифікації однієї з таких моделей присвячена дана робота.

Загальна математична модель задачі “плавлення–затвердіння” та вибір методу її розв'язання. Процес “плавлення–затвердіння”, що має місце в теплових акумуляторах фазового переходу, описується нелінійною нестационарною математичною моделлю, в якій передбачається врахування зміни положення границі розподілу фаз. Такий клас задач в математичній фізиці відноситься до задач типу Стефана, що в класичній одномірній постановці мають вигляд [5]:

$$c_{ps}\rho_s \frac{\partial T_s(x, \tau)}{\partial \tau} = \lambda_s \frac{\partial^2 T_s(x, \tau)}{\partial x^2} \quad (\tau > 0; 0 < x < \xi), \quad (1)$$

$$c_{pl}\rho_l \frac{\partial T_l(x, \tau)}{\partial \tau} = \lambda_l \frac{\partial^2 T_l(x, \tau)}{\partial x^2} \quad (\tau > 0; \xi < x < \infty). \quad (2)$$

На границі фазового переходу маємо:

$$\lambda_s \frac{\partial T_s(\xi, \tau)}{\partial x} - \lambda_l \frac{\partial T_l(\xi, \tau)}{\partial x} = \gamma \rho_l \frac{\partial \xi}{\partial \tau}, \quad (3)$$

$$T_s(\xi, \tau) = T_l(\xi, \tau) = T_{ph} = \text{const}. \quad (4)$$

Граничні умови на поверхні теплообміну:

$$T_s(0, \tau) = \varphi(\tau). \quad (5)$$

Граничні умови на нескінченності:

$$\frac{\partial T_l(\infty, \tau)}{\partial x} = 0. \quad (6)$$

Початкові умови:

$$T_l(x, 0) = f(x) \left[\text{тому що } \xi(0) = 0 \right]. \quad (7)$$

У формулах (1) – (7), T_l, T_s, T_{ph} – температури рідинної і твердої фази та фазового переходу, відповідно, К; $c_{pl}, c_{ps}, \lambda_l, \lambda_s, \rho_l, \rho_s$ – коефіцієнт теплоємності, $\frac{\text{Дж}}{\text{кг} \times \text{К}}$, теплопровідності, $\frac{\text{Вт}}{\text{м} \times \text{К}}$, щільність, $\frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$, твердої та рідинної фази, відповідно; γ – питома теплота фазового переходу, $\frac{\text{Дж}}{\text{кг}}$; $\xi(\tau)$ – координата фазового переходу, м; $\varphi(\tau), f(x)$ – функції часу та координати.

Точні аналітичні розв’язки математичної моделі (1) – (7) отримано лише при тривіальних граничних умовах, які практично не реалізуються на практиці. Тому числові методи розв’язання задачі Стефана є найбільш популярним інструментом у розрахунковій практиці. Серед таких методів виділяються: варіаційно-ітераційний метод, який дозволяє отримати розв’язок у вигляді неперервних функцій [6]; метод апроксимації температурного поля для обох фаз однієї функції [7]; гібридний метод, який об’єднує метод гомотопічних збурень з поліпшеним методом розкладання Адоміана [8]; метод високого порядку енергії для доказу асимптотичної стійкості плоских поверхонь для задачі Стефана з поверхневим натягом [9]. Цим переліком не обмежується спектр методів розв’язання задач Стефана, але для задач теплового акумулювання найбільш актуальним бачиться метод ефективної теплоємності (“Mushy layer”), який базується на згладжуванні нескінченної зони переходу з розривом параметрів між твердою та рідкою фазами та виділенні проміжної зони скінченних розмірів, де відбувається фазовий перехід. Таким чином, два рівняння в часткових похідних в математичній моделі (1) – (7) зводяться до одного рівняння теплопровідності з функцією теплового джерела для багатошарового тіла [10]. Такий підхід було розглянуто в [11], де автори моделювали особливості фазового переходу під час формування шару морського льоду. В роботі [12] досліджується вплив вільної конвекції в проміжній зоні на теплообмін під час фазового переходу. Одновимірною моделлю була застосована для числового моделювання задачі Стефана при наявності двох шарів “плавлен-

ня–затвердіння” в [13]. Проміжну зону, в якій змішані елементи твердої і рідкої фази, було виявлено під час досліджень, проведених в [14].

Базуючись на доказах про існування проміжної зони між твердою та рідкою фазами, рівняння (1) – (3) з класичної математичної моделі Стефана можна представити в загальному вигляді так:

$$c_p(\mathbf{T})\rho(\mathbf{T})\frac{\partial\mathbf{T}}{\partial\tau} = \operatorname{div}\lambda(\operatorname{grad}\mathbf{T}) + \mathbf{q}(\mathbf{T}). \quad (8)$$

Вважається, що функція теплового джерела $\mathbf{q}(\mathbf{T})$ враховує виділення чи поглинання теплоти фазового переходу в перехідній зоні і має вигляд:

$$\mathbf{q}(\mathbf{T}) = \gamma \begin{cases} \frac{d\psi}{d\mathbf{T}}, \mathbf{T}_s \leq \mathbf{T} \leq \mathbf{T}_l \\ 0, \mathbf{T} > \mathbf{T}_l \text{ ma } \mathbf{T} < \mathbf{T}_s \end{cases}, \quad (9)$$

де $\psi(\mathbf{T})$ – функція, що характеризує співвідношення між об’ємом твердої та рідкої фази в перехідній зоні.

Тоді, аналізуючи розмірність величин, що входять в рівняння (9), рівняння (8) можна записати у вигляді:

$$(c_p(\mathbf{T}) - \mathbf{q}(\mathbf{T}))\rho(\mathbf{T})\frac{\partial\mathbf{T}}{\partial\tau} = \operatorname{div}(\lambda\operatorname{grad}\mathbf{T}). \quad (10)$$

Після підстановки значення (9) в (10) отримуємо загальний вигляд запропонованої математичної моделі у координатній формі:

$$c_{pef}(\mathbf{T})\rho_{ef}(\mathbf{T})\frac{\partial\mathbf{T}(x,y,z,\tau)}{\partial\tau} = \lambda_{ef}(\mathbf{T})\left(\frac{\partial^2\mathbf{T}(x,y,z,\tau)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\mathbf{T}(x,y,z,\tau)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\mathbf{T}(x,y,z,\tau)}{\partial z^2}\right), \quad (11)$$

де

$$\rho_{ef}(\mathbf{T}) = \begin{cases} \rho_l & \mathbf{T} > \mathbf{T}_{liq} \\ \frac{\rho_l + \rho_s}{2} & \mathbf{T}_{sol} < \mathbf{T} < \mathbf{T}_{liq} \\ \rho_s & \mathbf{T} < \mathbf{T}_{sol} \end{cases}, \quad (12)$$

$$\lambda_{ef}(\mathbf{T}) = \begin{cases} \lambda_l & \mathbf{T} > \mathbf{T}_{liq} \\ \frac{\lambda_l + \lambda_s}{2} & \mathbf{T}_{sol} < \mathbf{T} < \mathbf{T}_{liq} \\ \lambda_s & \mathbf{T} < \mathbf{T}_{sol} \end{cases}, \quad (13)$$

$\mathbf{T}_{liq}, \mathbf{T}_{sol}$ – температури ліквідуса та солідуса, відповідно.

Окремим питанням є пошук значення ефективної теплоємності, яка залежить від величини темпу кристалізації $\frac{d\psi}{dt}$. Як правило, ця величина визначається експериментально, але існують випадки, коли лінії ліквідуса і солідуса паралельні одна одній і темп кристалізації можна виразити простою формулою [10]:

$$-\frac{d\psi}{dT} = \frac{1}{(T_{liq} - T_{sol})}. \quad (14)$$

Тоді, враховуючи (9), маємо

$$c_{p\text{ef}}(T) = \begin{cases} c_{pl}, & T > T_{liq} \\ \frac{c_{pl} + c_{ps}}{2} - \frac{\gamma}{T_{liq} - T_{sol}}, & T_{sol} < T < T_{liq} \\ c_{ps}, & T < T_{sol} \end{cases}. \quad (15)$$

Система рівнянь (11) – (15) з відповідними граничними умовами формує математичну модель для розв'язання задачі Стефана в теплоакумуючому матеріалі методом “Mushy layer”. Така модель була розв'язана числовим методом, алгоритм якого наведено нижче.

Числовий алгоритм та результати розрахунку задачі про фазовий перехід. Теплоакумуючий матеріал при фазовому переході може складатися з декількох прошарків твердої та рідкої фаз. Числовий алгоритм було складено для одномірного випадку з двома фазами – рідкою та твердою. Інтегрування рівняння (12) проведено методом контрольного об'єму з використанням неявної схеми апроксимації. В якості фізичної моделі для розрахунків та верифікації було обрано процес формування льоду на поверхні шару води товщиною δ та постійною початковою температурою, що дорівнює $T_l(x/, 0) = T_0 = T_{l_0} > T_{ph}$. На поверхні води встановлюється постійна температура $T_s(0, \tau) = T_{s_0} < T_{ph}$ після чого спостерігається процес формування льоду у воді. З іншого боку, граничні умови визначаються як $T_l(\delta, \tau) = T_{l_0} > T_{ph}$. Процес фазового переходу триває повільно, тому вибирався часовий інтервал спостереження, що відповідає фізичній суті процесу. Для $\delta = 0.1$ м час спостереження дорівнював 30 хв, а співвідношення між кроком за часом та простором дорівнювало 20 x 700.

Окремим питанням було визначення температури ліквідуса T_{liq} і солідуса T_{sol} та вибір кількості розрахункових вузлів, що потрапляють в проміжну зону. Як показують практичні розрахунки, величина цієї проміжної зони достатньо сильно впливає на результати, тому неправильний вибір кількості розрахункових вузлів може призвести до неприпустимих похибок, коли теплоту фазового переходу не буде враховано. В створеному алгоритмі кількість вузлів у проміжній зоні визначалась на основі числових експериментів.

На рис. 1 показані результати розрахунку задачі Стефана, що відповідають математичній моделі (11) – (15). Числове моделювання було проведено при $T_{s_0} = -20^\circ\text{C}$, $T_{l_0} = 20^\circ\text{C}$, $T_{sol} = -0,1^\circ\text{C}$, $T_{liq} = 0,1^\circ\text{C}$. Значення теплофізичних коефіцієнтів для рідкої та твердої фази обрано згідно з табличними даними.

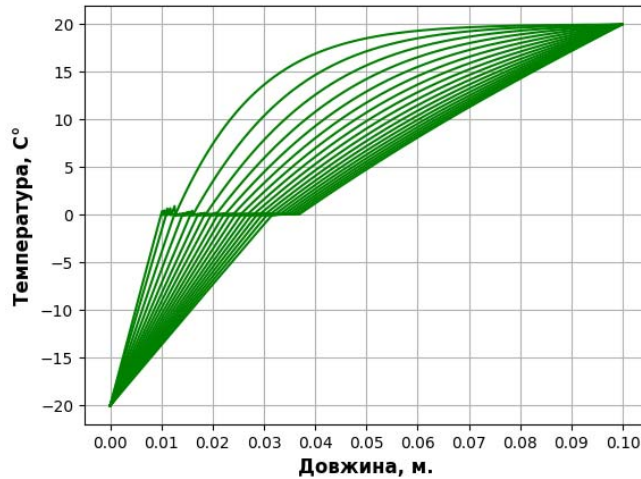


Рис. 1 – Динаміка зміни температур при фазовому переході

На графіках можна чітко прослідити формування та рух границі розподілу фаз, визначити швидкість цього руху та температурний розподіл в рідкій та твердій фазах.

Верифікація отриманих результатів. Створений числовий алгоритм, що базується на методі “Mushy layer” верифіковано за допомогою класичного розв’язку задачі Стефана, що має вигляд [4]:

$$T_s(x, \tau) = T_{s_0} + (T_{ph} - T_{s_0}) \frac{\operatorname{erf} \frac{x}{2\sqrt{a_s \tau}}}{\operatorname{erf} \frac{\beta}{2\sqrt{a_s}}}, \quad (17)$$

$$T_l(x, \tau) = T_0 - \frac{(T_0 - T_{ph})}{\operatorname{erf} \frac{\beta}{2\sqrt{a_l}}} \operatorname{erf} \frac{x}{2\sqrt{a_l \tau}}, \quad (18)$$

де a_s, a_l – коефіцієнти теплопровідності твердої та рідкої фаз $\text{м}^2/\text{с}$.

Коефіцієнт пропорційності $\beta = \frac{\xi}{\sqrt{\tau}}$ (коефіцієнт верифікації), який характеризує швидкість поглиблення зони промерзання, визначається з наступного характеристичного рівняння:

$$\frac{\lambda_s (T_{ph} - T_{s_0})}{\sqrt{a_s} \operatorname{erf} \frac{\beta}{2\sqrt{a_s}}} \exp\left(-\frac{\beta^2}{4a_s}\right) + \frac{\lambda_l (T_0 - T_{ph})}{\sqrt{a_l} \operatorname{erf} \frac{\beta}{2\sqrt{a_l}}} \exp\left(-\frac{\beta^2}{4a_l}\right) = \frac{\rho_s \gamma \sqrt{\pi}}{2} \beta. \quad (19)$$

Рівняння (19) є нелінійним трансцендентним рівнянням, яке містить спеціальні функції, що визначаються за допомогою таблиць [15]. Це характеристичне рівняння було розв’язано методом простої ітерації на основі Python-коду за допомогою спеціальних вбудованих бібліотек.

Для обраних початкових та граничних умов отримане значення дорівнює $\beta = 0,000457$. На рис. 2 показано порівняння результатів аналітичного та числового розв'язків для розглянутої фізичної моделі при фіксованому часі $\tau = 30$ хв.

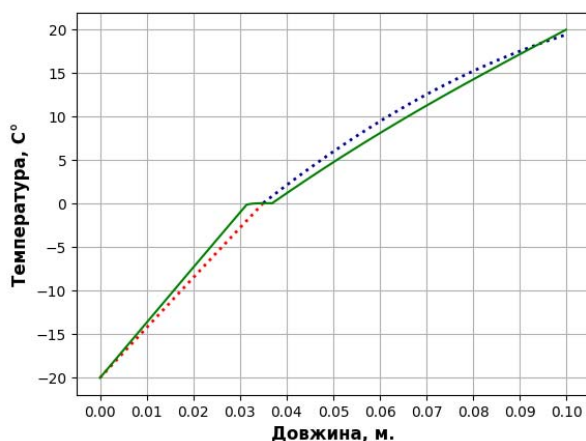


Рис. 2 – Порівняння числового та аналітичного розв'язків

На рис. 2 наглядно продемонстровано, що результати класичного аналітичного розв'язку (пунктирна лінія) майже співпадають з числовими даними, отриманими на основі методу “Mushy layer”. Як і очікувалось, деякі розбіжності спостерігаються в зоні фазового переходу, де існує розрив параметрів. Однак, ці розбіжності не впливають на розподіл температурних полів у твердій та рідкій фазах та на загальний енергетичний баланс системи, тому відповідний числовий алгоритм може служити основою для подальшого детального дослідження фазоперехідних теплових акумуляторів різного типу та призначення.

Висновки. В роботі було розглянуто особливості застосування математичної моделі задачі Стефана, що описує процес фазового переходу при акумулюванні тепла. Проведено аналіз та обґрунтовано вибір методу “Mushy layer” для дослідження температурних полів при зміні фаз. В якості фізичної моделі для розрахунків та верифікації було обрано процес формування льоду на поверхні шару води. Створено комп'ютерний алгоритм та проведені числові розрахунки для визначення положення фронту розподілу фаз, швидкості його просування та розподілу температур у рідкій та твердій фазах.

Побудований числовий алгоритм було верифіковано шляхом порівняння з відомим класичним аналітичним розв'язком задачі Стефана для тривіальних граничних та початкових умов. Визначення відповідного коефіцієнту верифікації проводилось на основі числового розв'язку нелінійного алгебраїчного рівняння з використанням спеціальних вбудованих Python-функцій. Знайдений коефіцієнт було інтегровано в основний Python-код для подальшої верифікації.

Порівняння аналітичних та числових розв'язків показало добрий збіг результатів, що свідчить про коректність числового алгоритму та можливість його застосування для розв'язку більш складних задач, що виникають під час дослідження та проєктування фазоперехідних теплоакуючих систем.

1. *Liu M., Saman W., Brun F.* Review on storage materials and thermal performance enhancement techniques for high temperature phase change thermal storage systems. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 2012. Vol.16, issue 4. P. 2118–2132.
2. *Lissner M., Tissot J., Leducq D., Azzouz K., Fournaison L.* Performance study of latent heat accumulators: Numerical and experimental study. *Applied Thermal Engineering*. 2016. Vol.102. P. 604–614.
3. *Кныш Л. И.* Моделирование процессов энергопереноса в аккумуляторе тепла «твердое тело-жидкость» космической энергетической установки. Системне проектування та аналіз характеристик аерокосмічної техніки. 2014. Т.17. С. 89–95.
4. *Кныш Л. И.* Математическое моделирование процессов теплообмена в аккумулирующих системах «твердое тело – жидкость». *Промислова теплотехніка*. 2014. Т.36, №4. С. 5–10.
5. *Лыков А. В.* Теория теплопроводности. М.: Высшая школа, 1967. 600 с.
6. *Slota D.* Direct and inverse one-phase Stefan problem solved by the variational iteration method. *Computers & Mathematics with Applications*. 2007. Vol.5, Issues 7-8. P. 1139–1146.
7. *Tarkhov D., Vasilyev A.* Problems for partial differential equations in the case of the domain with variable borders, pp. 22-30. (Book chapter). *Semi-Empirical Neural Network Modeling and Digital Twins Development*. Academic. Pr. 2019. 320 p.
8. *Yu Y., Luo X., Cui H.* The Solution of Two-Phase Inverse Stefan Problem Based on a Hybrid Method with Optimization. *Mathematical Problems in Engineering*. 2015. Vol.1. P. 1–13.
9. *Hadžić M., Cuo Y.* Stability in the Stefan Problem with Surface Tension. *Communications in Partial Differential Equations*. 2010. Vol.35, Issue 2. P. 201–244.
10. *Тимошпольский В. И., Беляев Н. М., Рядно А. А.* Прикладные задачи металлургической теплофизики. Минск:Навука і тэхніка, 1991. 320 с.
11. *Wells A. J., Hitchen J. R., Parkinson J.* Mushy-layer growth and convection, with application to sea ice. *Philosophical transactions*. 2019. Vol.377, Issue 2146. P. 377–390.
12. *Worster M. G.* Natural convection in a mushy layer. *Journal of Fluid Mechanics*. 1991. Vol. 224. P. 335–339.
13. *Lee D., Alexandrov D., Huang H.-N.* Numerical Modeling of One-Dimensional Binary Solidification with a Mushy Layer Evolution. *Numerical Mathematics: Theory, Methods and Applications*. 2012. Vol.5, Issue 2. P. 157–185.
14. *Marangunic P. R., Stampella M. B.* Appearance of mushy regions in a symmetrical Stefan problem with vanishing heat capacity. *European Journal of Applied Mathematics*. 1990. Vol.1, Issue 2. P. 177–187.
15. *Барковский В., Барковская Н., Лопатин А.* Теорія ймовірностей та математична статистика. К.: Центр навчальної літератури, 2019. 424 с.

Отримано 14.07.2021,
в остаточному варіанті 01.10.2021