

Thermisches Problem mit Phasenübergang

Christian B. Silbermann, Thomas Nagel

9. Juni 2022

1 Verifizierung anhand analytischer Lösung

Die Wärmeleitung mit Phasenübergang kann mit Hilfe einer Wärmeleitungsgleichung mit variablen Parametern erfasst werden. Dazu muss die Energiebilanz erweitert werden. Zur Verständlichkeit wird zunächst das rein thermische Problem betrachtet (ohne advektiven Wärmetransport), wobei auch keine Wärmequellen vorliegen. Das Problem wird eindimensional (x -Koordinate) betrachtet mit stückweise konstanten Eigenschaften. Die entsprechende Differentialgleichung lautet nun:

$$\rho \dot{h} = \lambda T_{,xx}$$

Die thermischen Größen haben folgende Bedeutung:

$[h] = \text{J kg}^{-1}$: spezifische Enthalpie

$[\lambda] = \text{W m}^{-1}\text{K}^{-1}$: Wärmeleitfähigkeit

$[\rho] = \text{kg m}^{-3}$: Massendichte

Um konkret die Wärmeleitung im Boden mit Phasenübergang fest \leftrightarrow flüssig zu beschreiben, sind mehrere Phasen zu berücksichtigen. Entsprechend wird eine Mischung aus Festkörper (Solid, S) mit Porenwasser (W) und -Eis (Ice, I) angenommen, sodass für die Volumenanteile gilt:

$$\phi = \phi_I + \phi_W \quad \text{und} \quad \phi_S = 1 - \phi \quad \text{sodass} \quad \phi_S + \phi_I + \phi_W = 1 ,$$

wobei ϕ die Porosität bezeichnet. Der Eisvolumenanteil sei als Gleichgewichtsfunktion gegeben, sodass gilt

$$\phi_I = \phi \left[1 + e^{k(T-T_m)} \right]^{-1} \quad \text{mit} \quad k > 0 . \quad (1)$$

Es handelt sich um eine Sigmoid-Funktion, die für $k \rightarrow \infty$ zur Sprungfunktion wird (vgl. Abbildung 1). Die spezifische Enthalpie des Gemisches ist eine Zustandsfunktion der Form $h(T, \phi_I)$. Entsprechend lautet das totale Differential

$$dh = \left(\frac{\partial h}{\partial T} \right) dT + \left(\frac{\partial h}{\partial \phi_I} \right) d\phi_I = c_p dT + (-\ell) d\phi_I , \quad (2)$$

wobei die Konstanten c_p und ℓ die spezifische Wärmekapazität bzw. Schmelzenthalpie darstellen.¹ Zur Kontrolle der Plausibilität wird folgender Prozess betrachtet:

1. $T = T_m - \Delta T$, $\phi_I = \phi$ (Porenraum komplett vereist)
2. $T = T_m + \Delta T$, $\phi_I = 0$ (Porenraum komplett flüssig)

¹Bei Verwendung von ϕ_W entspricht $\partial h / \partial \phi_W$ der Kristallisationsenthalpie und es ändert sich das Vorzeichen.

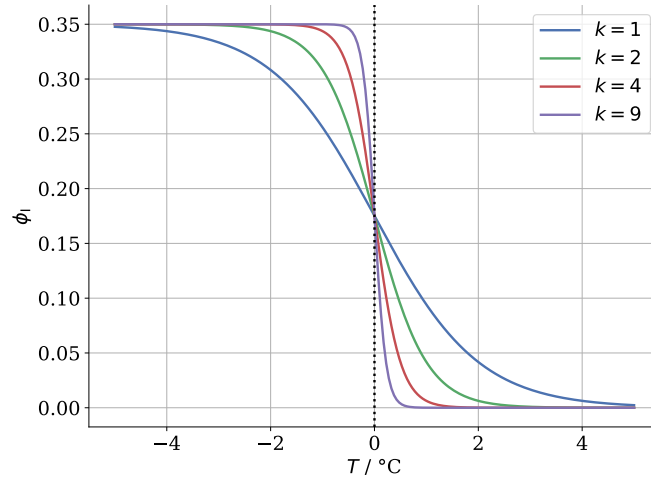


Abbildung 1: Darstellung der Gleichgewichtsfunktion (1) für den Poreneisvolumenanteil in Abhängigkeit der Temperatur bei $T_m = 0^\circ\text{C}$: für $k \rightarrow \infty$ würde eine Sprungfunktion erhalten.

Die Integration von Differential (2) von Zustand 1 zu 2 ergibt dann:

$$\int dh = [c_p T] - [\ell \phi_I] \rightarrow \int_1^2 dh = \Delta h = 2c_p \Delta T + \ell \phi$$

Für den Grenzfall $\Delta T \rightarrow 0$ (unendlich schmales Temperaturintervall) bleibt bloß der Phasenübergang selbst übrig und $\Delta h = \ell \phi$. Für ein bestimmtes Gebiet ergibt sich dann korrekt

$$\Delta H = \int \Delta h dm_I = \int \ell \phi \varrho_{IR} dV = \ell \varrho_{IR} \int \phi dV = \ell \varrho_{IR} V_I = \ell m_I ,$$

d. h. die Enthalpieänderung für den Schmelzvorgang entspricht der Schmelzenthalpie, die auch als latente (verborgene) Wärme bezeichnet wird im Gegensatz zur sensiblen (fühlbaren) Wärme. Unter Berücksichtigung von $\phi_I(T)$ gilt weiter

$$\varrho \dot{h} = \varrho \left\{ \frac{\partial h}{\partial T} \dot{T} + \frac{\partial h}{\partial \phi_I} \frac{\partial \phi_I}{\partial T} \dot{T} \right\} = \varrho \left\{ c_p - \ell \frac{\partial \phi_I}{\partial T} \right\} \dot{T} = \left\{ C - L \frac{\partial \phi_I}{\partial T} \right\} \dot{T}$$

und mit den volumetrischen Größen $C = \varrho c_p$, $L = \varrho \ell$ lautet die vollständige Energiebilanz nun

$$\left[C - L \frac{\partial \phi_I}{\partial T} \right] \dot{T} \equiv C_{\text{app}}(T) \dot{T} = \lambda T_{,xx} \quad \text{mit}$$

$$[L] = \text{J m}^{-3} : \text{volumetrische Schmelzenthalpie}$$

$$[C] = \text{J m}^{-3} \text{K}^{-1} : \text{volumetrische Wärmekapazität}$$

$$[C_{\text{app}}] = \text{J m}^{-3} \text{K}^{-1} : \text{scheinbare volumetrische Wärmekapazität}$$

Die effektiven (temperaturabhängigen) Eigenschaften der Mischung aus Feststoff, Porenwasser und -eis ergeben sich aus folgenden Mischungsregeln:

$$\begin{aligned} \varrho &= (1 - \phi) \varrho_{SR} + \phi_I \varrho_{IR} + (\phi - \phi_I) \varrho_{WR} , \\ \varrho c_p &= C = (1 - \phi) c_{pS} \varrho_{SR} + \phi_I c_{pI} \varrho_{IR} + (\phi - \phi_I) c_{pW} \varrho_{WR} , \\ \lambda &= (1 - \phi) \lambda_{SR} + \phi_I \lambda_{IR} + (\phi - \phi_I) \lambda_{WR} . \end{aligned}$$

Daneben existiert eine weitere, für reale Probleme oftmals passendere Mischungsregel für die effektive Wärmeleitfähigkeit über Potenzen:

$$\lambda = \lambda_{\text{SR}}^{\phi_{\text{S}}} \cdot \lambda_{\text{IR}}^{\phi_{\text{I}}} \cdot \lambda_{\text{WR}}^{\phi_{\text{W}}}.$$

Zur Validierung wurde das sogenannte Stefan-Problem herangezogen: Dabei wird ein eindimensionaler Schmelzvorgang betrachtet, wobei sich die Phasengrenze flüssig–fest kontinuierlich weiter bewegt. Die zugehörige analytische Neumann-Lösung basiert auf folgenden Vereinfachungen (mit T_{m} als Schmelztemperatur):

- Anfangsbedingungen : $T_0 = T_{\text{m}}$ überall, feste Phase füllt gesamtes Gebiet
- Temperatur der festen Phase bleibt konstant bei T_{m}
- linke Randbedingung vom Dirichlet Typ: $T(x = 0, t) = T_l = \text{const} > T_{\text{m}}$

Eine analytische Lösung für das Intervall $x \in [0, s(t)]$ kann unter Verwendung der Fundamentallösung mit einer Ähnlichkeitsvariablen erzielt werden (Beispiel Wasser/Eis):

$$T(x, t) = T_l + \frac{(T_0 - T_l)}{\text{erf}(\Lambda)} \text{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{a_{\text{W}} t}}\right) = T_l + (T_0 - T_l) \frac{\text{erf}\left(\Lambda \frac{x}{s}\right)}{\text{erf}(\Lambda)},$$

$$s(t) = 2\Lambda \sqrt{a_{\text{W}} t}, \quad a_{\text{W}} = \frac{\lambda_{\text{WR}}}{\rho_{\text{WR}} c_{\text{pW}}},$$

wobei $s(t)$ die Position der Phasengrenze beschreibt und zur Bestimmung der Konstante Λ die transzendente Gleichung

$$\Lambda \exp(\Lambda^2) \text{erf}(\Lambda) = \frac{\text{St}}{\sqrt{\pi}} \quad \text{mit} \quad \text{St} = \frac{c_{\text{pW}} (T_l - T_0)}{L}$$

gehört. Das Stefan-Problem wurde in *OpenGeoSys* gelöst für eine 20 m lange Eissäule mit $T_{\text{m}} = 0^\circ\text{C}$, $T_l = 100^\circ\text{C}$ und den bekannten thermischen Eigenschaften von Wasser/Eis, woraus sich auch die entsprechende Zeitskala ergibt. Der eigentliche Interessenbereich betrifft nur die Hälfte der Säule. Um aber den Einfluss des rechten Rands mit der Bedingung $T_r = 0^\circ\text{C}$ gering zu halten, wurde der Simulationsbereich verdoppelt.

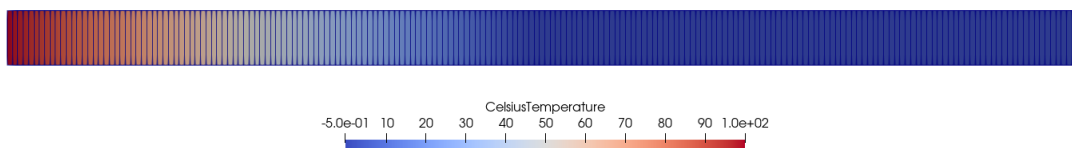


Abbildung 2: Stefan-Problem: dargestellt ist das Temperaturfeld der Säule, nachdem die Hälfte (von links betrachtet) geschmolzen ist.

Eine Gegenüberstellung der analytischen und numerischen Ergebnisse zeigt eine gute Übereinstimmung bzgl. der Position der Phasengrenze (vgl. Abbildung 3). Allerdings gibt es leichte Abweichungen bei den Temperaturverläufen in der Eissäule zu verschiedenen Zeiten (vgl. Abbildung 4).

Die Abweichungen zwischen analytischer und numerischer Lösung gehen auf mehrere Ursachen zurück. Die folgende Tabelle gibt eine Übersicht über die Unterschiede:

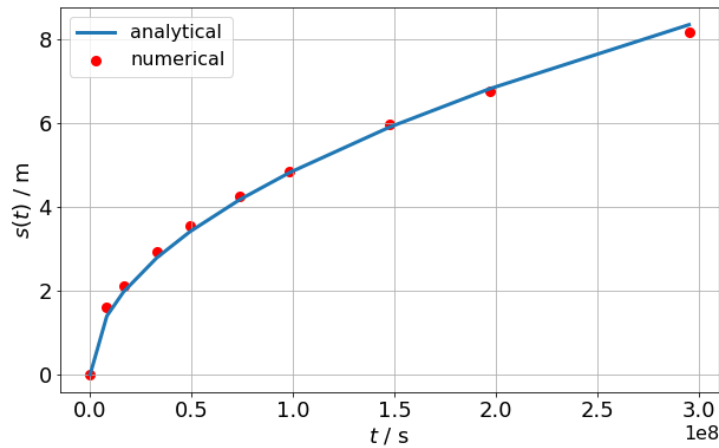


Abbildung 3: Stefan-Problem: dargestellt ist der Vergleich zwischen analytischer und numerischer Lösung anhand der Verschiebung $s(t)$ der Phasengrenze. Es zeigt sich der charakteristische Verlauf in Form einer Wurzelfunktion.

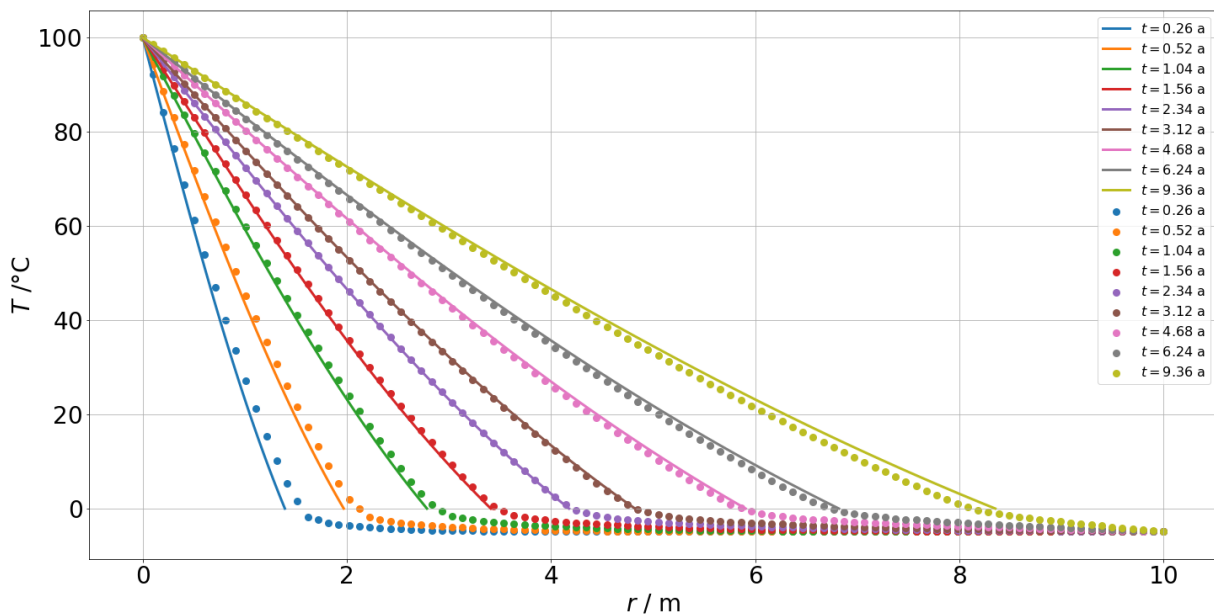


Abbildung 4: Stefan-Problem: dargestellt ist der Vergleich zwischen analytischer (durchgezogen) und numerischer Lösung (gepunktet) anhand der Temperaturverteilung zu ausgewählten Zeitpunkten.

2 Einfluss und Interpretation Phasenwechselfunktion

Die analytische Neumann-Lösung des Stefan-Problems wurde von [1] verallgemeinert und zur Beschreibung der Entwicklung von Permafrost angewendet. Hierbei wird die Körnigkeit des (ge-

	analytische Lösung	numerische Implementierung
Eigenschaften	nur Wasser relevant sowie lat. Wärme	effektiv vom Gemisch aus Wasser/Eis
Gebiet	halb-unendlich	endliches Gebiet
Ränder	links und Phasengrenzfläche	links und rechts
Phasenübergang	Sprungfunktion	Sigmoidfunktion
Phasengrenze	diskret (Knick)	stetig (verschwommen)

frorenen) Bodens (von grob bis fein) mit dem Gehalt an flüssigem (ϕ_W) bzw. gefrorenem Wasser ($\phi - \phi_W$) in Verbindung gebracht, was wiederum die Permafrostdegeneration (das Auftauen) stark beeinflusst. Grundsätzlich wird unterschieden in

- Typ A: grobkörniger Boden mit geringem Gehalt an flüssigem Wasser,
- Typ B: feinkörniger Boden mit hohem Gehalt an flüssigem Wasser.

In Abhängigkeit dieser Parametrisierung wird der Phasenübergang fest/flüssig über einen schmalen Temperaturbereich (Typ A) oder einen weiten Bereich (Typ B) modelliert. Der von außen eingebrachte Wärmestrom führt dann einerseits zum Schmelzen des gefrorenen Wassers und andererseits zum Erwärmen des Bodens, was bei Typ A und B zu unterschiedlichem Verhalten führt.

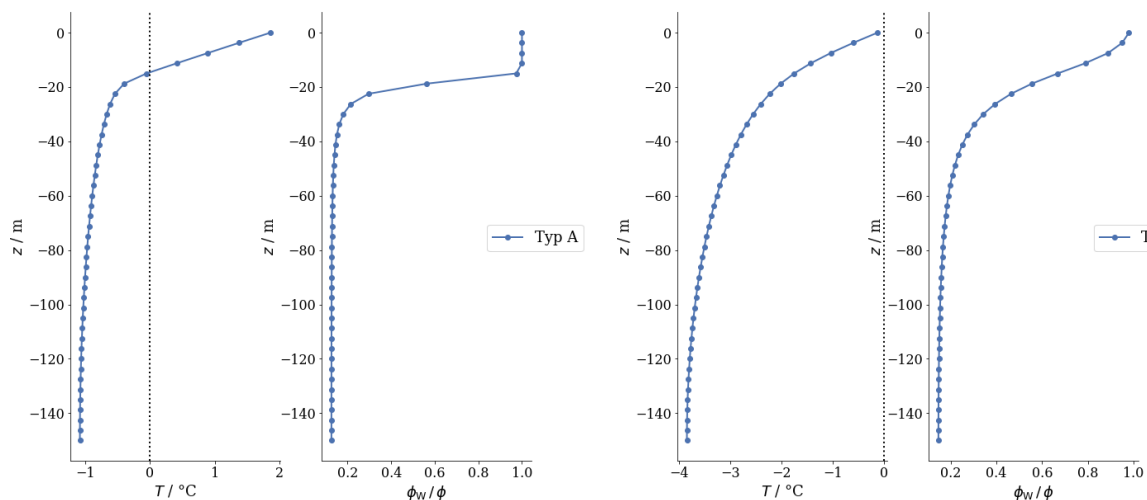


Abbildung 5: Verteilung der Temperatur und des Gehaltes an flüssigem Wasser (ϕ_W) über der Höhe z einer Bodensäule: Reproduktion der numerischen Ergebnisse von [1]

Mit Hilfe eines einfachen FEM-Testcodes unter Nutzung von Python (*Jupyter Notebook*) wurden die numerischen Ergebnisse von (author?) [1] erfolgreich reproduziert (s. Abbildung 5). Danach erfolgte die Implementierung in *OpenGeoSys*.

Literatur

- [1] D. J. Nicolsky and V. E. Romanovsky. Modeling Long-Term Permafrost Degradation. *Journal of Geophysical Research: Earth Surface*, 123(8):1756–1771, 2018.