Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

А. В. Иванов, И. И. Овчинников, Моделирование кинетики проникания агрессивного агента в объем конструктивных элементов, *Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки*, 2006, выпуск 43, 167–174

DOI: <https://doi.org/10.14498/vsgtu469>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 3.85.183.62

26 апреля 2023 г., 13:58:01

Р и с. 7. Амплитудно–частотные зависимости при вынужденных колебаниях:
 a — оболочки; $б$ — заряда твердого топлива; $в$ — газа; $г$ — соплового днища

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Модорский В. Я. О взаимодействии подкрепленного цилиндра с газом // 14-я Зимняя шк. по механике сплошных сред: Тез. докл. — Екатеринбург: УрО РАН, 2005. — С. 227.
2. Пановко Я. Г. Основы прикладной теории упругих колебаний. — М.: Наука, 1967. — 316 с.

Поступила 3.10.2006 г.

УДК 539.3

А. В. Иванов, И. И. Овчинников

МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ ПРОНИКАНИЯ АГРЕССИВНОГО АГЕНТА В ОБЪЕМ КОНСТРУКТИВНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Проведен анализ воздействия агрессивных сред на конструктивные элементы. Рассмотрены основные методы и приемы, используемые для получения численного решения, на примере уравнения диффузии. Проведено численное исследование закона распределения агрессивной (хлоридсодержащей) среды по сечению железобетонной трубы для случаев проникания реагентов через внешнюю и внутреннюю поверхности и через всю внешнюю поверхность.

Для решения такой важной задачи, как прогнозирование поведения инженерных конструкций в условиях воздействия агрессивных сред, необходимо моделировать кинетику проникания агрессивного агента в объем конструктивных элементов, учитывая влияние напряженного состояния и других внешних воздействий на кинетику процесса проникания.

Стадия проникания представляется весьма важной, так как на ней формируется закон распределения компонентов агрессивной среды по объему конструктивного элемента, определяющий затем закон распределения механических характеристик. Поскольку концентрация агрессивной среды в точке изменяется с течением времени и зависит от положения точки по отношению к поверхности конструктивного элемента, то уравнение, описывающее изменение концентрации, должно иметь форму уравнения массопереноса [1]. Анализ литературы [2–4]

показывает, что кинетика проникания агрессивной среды в материал конструктивного элемента (например бетон) описывается уравнением диффузии:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = \operatorname{div} \left(\sum_{k=2}^N D_{ik} \operatorname{grad} C_k \right) - \operatorname{div} (C_i W) \pm Q_{mi} \quad (i = 1, 2, \dots, N). \quad (1)$$

Здесь C_i — концентрация i -того компонента агрессивной среды; t — время; D_{ik} — коэффициент диффузии i -того компонента агрессивной среды; W — скорость молярного переноса агрессивной среды; Q_{mi} — параметр, учитывающий добавление или убыль i -того компонента

среды за счет химических реакций; $\operatorname{grad} C = \frac{\partial C}{\partial x} \cdot \mathbf{i} + \frac{\partial C}{\partial y} \cdot \mathbf{j} + \frac{\partial C}{\partial z} \cdot \mathbf{k}$; $\operatorname{div} F = \frac{\partial F_x}{\partial x} + \frac{\partial F_y}{\partial y} + \frac{\partial F_z}{\partial z}$.

Согласно основным положениям термодинамики необратимых процессов коэффициенты диффузии не зависят от градиентов концентрации, но являются функциями локальных параметров состояния системы: температуры, давления, концентрации.

Ограничиваясь рассмотрением однокомпонентной среды, дифференциальное уравнение массопереноса для нестационарного состояния запишем в виде

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \operatorname{div} (D \operatorname{grad} C). \quad (2)$$

Данное уравнение справедливо при отсутствии химического взаимодействия материала с агрессивной средой. Если же такое взаимодействие имеет место, то уравнение принимает вид

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \operatorname{div} (D \operatorname{grad} C) - g(C), \quad (3)$$

где $g(C)$ — скорость изменения концентрации среды вследствие химического взаимодействия. Часто принимают

$$g(C) = kC, \quad (4)$$

где k — константа связывания.

В данной работе исследуется численное решение диффузионной задачи с помощью программного комплекса CONDUCT, приведенного в [5] и позволяющего решать широкий класс физических проблем, описываемых системой дифференциальных уравнений в частных производных типа двумерных уравнений массопереноса.

Рассмотрим основные методы и приемы, используемые для получения численного решения, на примере интересующего нас уравнения диффузии. Уравнение (3) может быть переписано в виде

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D \frac{\partial C}{\partial x_i} \right) + S = -\frac{\partial J_i}{\partial x_i} + S, \quad (5)$$

где $J_i = -D \frac{\partial C}{\partial x_i}$ — диффузионный поток в направлении координаты x_i .

Выражения для диффузионного члена уравнения (5) в декартовой, цилиндрической и полярной системах координат будут иметь следующий вид:

$$\begin{aligned} (x, y): \quad \frac{\partial J_i}{\partial x_i} &= \frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial J_y}{\partial y}, & J_x &= -D \frac{\partial C}{\partial x}; \\ (x, r): \quad \frac{\partial J_i}{\partial x_i} &= \frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial y} (r J_y), & J_y &= -D \frac{\partial C}{\partial y}; \\ (\theta, r): \quad \frac{\partial J_i}{\partial x_i} &= \frac{1}{r} \frac{\partial J_\theta}{\partial \theta} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial y} (r J_y), & J_\theta &= -\frac{D}{r} \frac{\partial C}{\partial \theta}. \end{aligned} \quad (6)$$

Обе координаты y и r направлены по радиусу, r — расстояние от оси симметрии или от центра круга, y — от начала отсчета (произвольно). Дальнейший материал излагается для декартовой прямоугольной системы координат.

Для получения численного решения необходимо провести дискретизацию исследуемой области по пространственным координатам и по времени. Затем по известному начальному распределению и граничным условиям необходимо вычислить распределение концентрации для всех последующих моментов времени с некоторым временным шагом Δt . Другими словами, необходимо рассчитать значения концентрации в выбранных дискретных положениях, образующих сетку и называемых точками сетки. Около каждой точки сетки конструируется

контрольный объем (рис. 1). Построение расчетной сетки производится следующим образом. Область, в которой проводим расчет, делится на контрольные объемы. Далее точки сетки помещаются в геометрические центры контрольных объемов. Точка сетки на границе помещается в центр грани контрольного объема. Контрольный объем, связанный с граничной точкой, удобно представить бесконечно малой толщины. Тогда угловые точки имеют бесконечно малые размеры контрольных объемов в обоих направлениях, и их влиянием на распределение концентрации пренебрегаем.

Р и с. 1. Построение расчетной сетки

Предполагаем, что значение переменной в точке сетки превалирует во всем контрольном объеме, окружающем ее. Аналогично значение в граничной сеточной точке рассматривается как превалирующее во всей грани соответствующего контрольного объема. Важно, чтобы границы контрольных объемов совпадали с разрывами в свойствах материалов, источников членов и т.д., например, при расчете полей концентрации в неоднородных материалах.

Существует несколько путей получения дискретного аналога уравнения (5). Три из них хорошо известны: явная, Кранка–Никольсона и полностью неявная схемы. В данной работе для получения дискретного аналога уравнения (5) используется полностью неявная схема, так как она является единственной схемой, которая позволяет при любом Δt получать физически разумные результаты.

В силу того, что исходное уравнение (5) представляет собой закон сохранения химической компоненты, который справедлив для любой подобласти, в том числе и для такой, как контрольный объем, дискретные уравнения получаются интегрированием уравнения (5) по всем контрольным объемам. Дискретное уравнение связывает искомую величину в данной точке со значениями в четырех соседних точках. Проинтегрировав уравнение (5) по контрольному объему произвольной внутренней точки, получим

$$\frac{\Delta V}{\Delta t} (C_{\text{т.чк}} - C_{\text{т.чк}}^0) = J_{\text{лев.гр.}} A_{\text{лев.гр.}} - J_{\text{пр.гр.}} A_{\text{пр.гр.}} + J_{\text{нижн.гр.}} A_{\text{нижн.гр.}} - J_{\text{верх.гр.}} A_{\text{верх.гр.}} + \bar{S} \Delta V, \quad (7)$$

где C^0 — значение C на предыдущем временном слое; J — диффузионные потоки через соответствующие грани контрольного объема; $\bar{S}$ — осредненный по контрольному объему источниковый член, ΔV — объем контрольного объема; A — площадь соответствующей грани контрольного объема.

Диффузионный поток на правой грани вычисляется следующим образом:

$$J_{\text{пр.гр.}} A_{\text{пр.гр.}} = K_{\text{пр.гр.}} (C_{\text{т.чк}} - C_{\text{пр.т.чк}}), \quad \text{где } K_{\text{пр.гр.}} \text{ — диффузионная проводимость через грань;}$$

$$K_{\text{пр.гр.}} = A_{\text{пр.гр.}} \left(\frac{\Delta x_{\text{т.чк}}/2}{D_{\text{т.чк}}} + \frac{\Delta x_{\text{пр.т.чк}}/2}{D_{\text{пр.т.чк}}} \right)^{-1}; \quad \Delta x \text{ — размер соответствующего контрольного объема}$$

в направлении x . Если коэффициент диффузии D является функцией концентрации или других величин, значения которых определяются в процессе вычислений, то значения данных величин берутся по предыдущей итерации, а в процессе вычислений пересчитываются. Диффузионные потоки на остальных гранях определяются аналогично.

Дискретное уравнение (7) является полностью неявным, т.е. новые, неизвестные значения концентрации рассматриваются как преобладающие на протяжении всего временного шага Δt . Важно отметить, что если $\Delta t \rightarrow \infty$, левая часть уравнения (7) становится бесконечно малой, что соответствует стационарной задаче.

Так как источниковый член S может являться нелинейной функцией концентрации, то его необходимо линеаризовать, то есть привести к виду $\bar{S} = S_c + S_p C_p$. Здесь S_c и S_p явно не зависят от C_p , причем S_p должно быть не положительным, чтобы избежать расходимости. Для

этого разложим $\bar{S}$ в ряд Тейлора $\bar{S} = \bar{S}^* + \left(\frac{d\bar{S}}{dC} \right)^* (C_p - C_p^*) + \dots$, пренебрегая членами более высокого порядка. Здесь C_p^* — полученное на предыдущей итерации значение концентрации, C_p — следующее значение (рассчитываемое на данной итерации).

Тогда $S_c = \bar{S}^* - \left(\frac{d\bar{S}}{dC}\right)^* C_p^*$; $S_p = \left(\frac{d\bar{S}}{dC}\right)^*$ — рассчитываются по предыдущей итерации, а в процессе вычислений пересчитываются.

На каждую ближайшую к границе внутреннюю точку сетки соответствующая точка границы действует как один из соседей. Поэтому для каждого C в узле на границе должна быть задана величина (граничное условие 1-го рода) или уравнение (граничные условия 2-го или 3-го рода).

С учетом выше изложенного уравнение (7) может быть переписано в виде:

$$a_{\text{тчк}} C_{\text{тчк}} = a_{\text{лев.гр.}} C_{\text{лев.тчк.}} + a_{\text{пр.гр.}} C_{\text{пр.тчк.}} + a_{\text{нижн.гр.}} C_{\text{нижн.тчк.}} + a_{\text{верх.гр.}} C_{\text{верх.тчк.}} + b, \quad (8)$$

где $a_{\text{пр.гр.}} = K_{\text{пр.гр.}}$; $a_{\text{лев.гр.}} = K_{\text{лев.гр.}}$; $a_{\text{верх.гр.}} = K_{\text{верх.гр.}}$; $a_{\text{нижн.гр.}} = K_{\text{нижн.гр.}}$; $b = S_c \Delta V + a_{\text{тчк}}^0 C_{\text{тчк}}^0$; $a_{\text{тчк}}^0 = \Delta V / \Delta t$; $a_{\text{тчк}} = a_{\text{пр.гр.}} + a_{\text{лев.гр.}} + a_{\text{верх.гр.}} + a_{\text{нижн.гр.}} + a_{\text{тчк}}^0 - S_p \Delta V$.

Уравнению (8) эквивалентно уравнение

$$a_{\text{тчк}} C_{\text{тчк}} = \sum a_{\text{сосед.}} C_{\text{сосед.}} + b. \quad (9)$$

Алгебраические уравнения (9) номинально являются линейными и их столько же, сколько неизвестных. Поэтому эту систему уравнений можно решить любым приемлемым методом. Недостатком прямых методов является потребность в значительном объеме памяти. Система линейных алгебраических уравнений может быть также разрешена с помощью итерационного метода. В данной работе рассмотрено получение решения с использованием комбинации метода переменных направлений (или «линия за линией») и схемы «блок – коррекция».

Суть метода переменных направлений заключается в следующем. Если в дискретном уравнении (9) в вертикальном направлении значения концентрации в верхней и нижней соседних точках рассматривать как известные, то в уравнении будет только три неизвестные величины. Теперь, если аналогичным образом представить дискретные уравнения для всех точек, лежащих на одной горизонтальной линии, то их коэффициенты образуют трех диагональную матрицу, т.е. система уравнений разрешается методом прогонки. Метод «линия за линией» с применением метода прогонки сначала используем вдоль всех линий по направлению x , затем — по направлению y . Как только новые значения C вдоль линии вычислены, они используются для оценки C в решении для следующей линии. В программе реализована следующая последовательность выбора линий: проходим линии вдоль направления x , начиная с нижней границы, снизу вверх, потом последовательно сверху вниз. Затем проводим прогонку для линий вдоль направления y слева направо и справа налево. Такой подход применяется для того, чтобы влияние всех граничных условий быстро поступало внутрь расчетной области.

Схема «блок – коррекция» используется для увеличения скорости сходимости метода переменных направлений. Основная идея схемы блок-коррекция заключается в следующем. Не сошедшееся поле $C_{i,j}^*$, полученное из предыдущих итераций, корректируется добавлением постоянной коррекции $\bar{C}_i$ вдоль линии с постоянным i . Коррекция $\bar{C}_i$ выбирается такой, что интегральный принцип сохранения по блокам контрольных объемов вдоль каждой линии с постоянным i в точности выполняется. Аналогичным образом может быть выполнена коррекция для линий с постоянным j . Хотя схема «блок – коррекция», в общем случае, значительно увеличивает скорость сходимости, иногда ее применение может приводить к нереальным решениям и даже к расходимости. Причина в том, что коррекция делается грубая (осредненная), и если поле $C_{i,j}^*$ существенно неоднородно, то постоянная коррекция $\bar{C}_i$, хотя и регулирует средний уровень, может привести к локальным значениям $C_{i,j}$, лежащим вне диапазона разумных значений переменной.

Для линейных уравнений метод переменных направлений гарантирует сходимость, однако в этом нельзя быть уверенным в случае нелинейных и связанных задач. Чтобы минимизировать случаи расходимости, используется нижняя релаксация. Суть метода заключается в уменьшении изменения в коэффициентах от итерации к итерации, контролируя изменение величины C . Данный прием используется только при решении стационарных задач, так как при решении нестационарных задач коэффициент, связанный с нестационарностью, играет ту же роль, что и инерция, вводимая при нижней релаксации.

В случае смешанной краевой задачи рассчитываются поля ряда физических величин, причем коэффициенты для одной физической величины могут быть подвержены влиянию другой. Из-за этих связей и нелинейностей окончательное решение необходимо получать итерациями.

На любой стадии коэффициенты дискретного уравнения вычисляются из текущей оценки значений всех физических величин. Решение дискретных уравнений дает улучшенную оценку, которая используется для пересчета коэффициентов. Когда после многих повторений этого процесса значения всех физических величин стабилизируются, решение считается найденным.

С использованием программного комплекса было проведено численное исследование закона распределения агрессивной хлоридсодержащей среды по сечению трубы: для случаев проникания реагентов хлоридов через внешнюю и внутреннюю поверхность и через всю внешнюю поверхность.

В качестве исследуемого объекта выбирается водопропускная труба (диаметр 1200 мм, толщина стенки 200 мм). Микроклимат внутри водопропускной трубы (повышенная влажность, разница температур паро-воздушной смеси и стенок трубы) способствует образованию конденсата на внутренней поверхности трубы.

В случае, когда через трубу пропускается жидкость со значительной концентрацией растворенных в ней хлоридов (рис.2, а) (морская вода, стоки промышленных предприятий), возможно протекание следующих процессов. Паро-воздушная смесь, насыщенная хлоридами (солевой туман), конденсируется в капиллярах внутренней поверхности трубы, образуя на внутренней поверхности пленку агрессивного раствора, удерживаемую капиллярными силами. Приблизительно однородная и постоянная концентрация хлоридов в данной пленке будет поддерживаться за счет ее взаимодействия с паро-воздушной смесью. Данному случаю соответствует граничное условие первого рода с постоянной концентрацией на внутренней поверхности. В случае циклического увлажнения-высыхания внутренней поверхности (за счет дневного прогрева воздуха, продувания трубы ветром) концентрация хлоридов на внутренней поверхности также будет претерпевать циклические изменения. Испарение воды при высыхании пленки приведет к увеличению концентрации хлоридов в капиллярном растворе. При последующем увлажнении концентрация хлоридов на внутренней поверхности постепенно примет исходное значение. Это произойдет за счет взаимодействия пленки с паро-воздушной смесью и конвективного переноса излишек конденсата, превышающих объем раствора, удерживаемого силами поверхностного натяжения. Данному случаю соответствует граничное условие третьего рода, зависящее от кинетики концентрации хлорида на поверхности. Однако ввиду малой скорости диффузии хлоридов в бетоне (по сравнению с циклическими явлениями) представляется возможным без особых последствий для результата смоделировать граничные условия условиями первого рода с некоторым осредненным значением концентрации хлоридов на границе.

Когда через трубу пропускается жидкость, не содержащая хлоридов (или содержащая в незначительных концентрациях), то при образовании конденсата на внутренней поверхности (постоянном или циклическом) происходит вымывание хлоридов из порового раствора. В этом случае граничные условия также моделируются условиями первого рода с некоторым значением концентрации хлоридов на границе, определяемым соотношением скоростей диффузионного и конвективного процессов. Ввиду малой скорости диффузии хлоридов в бетоне можно считать, что концентрация хлоридов на внутренней поверхности трубы равна нулю.

Случаю, когда в процессе эксплуатации на внутренней поверхности трубы не происходит образования конденсата, соответствуют граничное условие второго рода с нулевым потоком на данной поверхности (рис.2, б).

Р и с. 2. Схемы воздействия агрессивной среды на конструктивный элемент

При моделировании применялась диффузионная модель проникания хлоридов в объем конструктивного элемента с эффективным коэффициентом диффузии хлоридов в бетоне $D = 1,162 \cdot 10^{-12} \text{ м}^2/\text{с}$, идентифицированным по экспериментальным данным по прониканию хлоридов из 1% раствора соляной кислоты в тяжелый бетон с водоцементным отношением 0,4. Ввиду того, что коэффициент диффузии хлоридов в металле намного меньше, чем в бетоне, то при расчете полагалось, что арматура непроницаема для хлоридов. Принималось, что в начальный момент времени хлориды в материале элемента отсутствуют. На части поверхности, через которую происходит проникание хлоридов, характер воздействия хлоридсодержащей среды соответствует граничному условию первого рода с концентрацией ионов хлора на поверхности конструктивного элемента 10 кг/м^3 ($\approx 0,42\%$ по массе бетона), что соответствует средним значениям поверхностной концентрации хлоридов при морской экспозиции в приливно-отливных зонах и зонах брызг. Остальная часть поверхности считается изолированной от воздействий агрессивной среды, граничное условие на ней соответствует абсолютной непроницаемости (нулевой поток).

Расчет проводился в полярной системе координат на равномерной сетке размерностью 200×200 с временным шагом 10^{-2} года. В результате проведенного расчета были получены глубины проникания в структуру бетона хлоридов в различные моменты времени (рис. 3, 4, 5, 6). Случаю действия хлоридов с внешней и внутренней стороны трубы соответствуют рис. 3, 4. Случаю проникания хлоридов только с внешней стороны трубы соответствуют рис. 5 и 6.

Концентрация на рис. 3–6 указана в кг/м^3 , жирной линией выделена граница зоны с концентрацией превышающей 1 кг/м^3 , примерно равной критической концентрации хлоридов для активизации коррозионного поражения арматуры в бетоне.

Р и с. 3. Концентрационные поля хлоридов в различные моменты времени при воздействии агрессивной среды на внутреннюю и внешнюю поверхность трубы

Р и с. 4. а) эпюры концентрации хлоридов по толщине стенки в разные моменты времени;
б) эпюра времен достижения критической концентрации по толщине стенки

Р и с. 5. Концентрационные поля хлоридов в бетоне в различные моменты времени, при воздействии агрессивной среды на всю внешнюю поверхность трубы

а

б

Р и с. 6. а) эпюры концентрации хлоридов по толщине стенки в разные моменты времени;
б) эпюра времен достижения критической концентрации по толщине стенки

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Овчинников И. Г., Раткин В. В., Землянский А. А. Моделирование поведения железобетонных элементов конструкций в условиях воздействия хлоридсодержащих сред. — Саратов: СГТУ, 2000. — 232 с.
2. Лыков А. В., Михайлов Ю. А. Теория тепло- и массопереноса. — М.-Л.: Госэнергоиздат, 1963.
3. Долговечность железобетона в агрессивных средах / Алексеев С. Н., Иванов Ф. М., Модры С., Шисль П. — М.: Стройиздат, 1990. — 316 с.;
4. Berke N. S., Hicks M. C. Predicting Chloride Profiles in Concrete // Corrosion (USA), 1994. — Vol. 50, No. 3. — P. 234–239.;
5. Salta M., Goncalves A., Esteves Ferreira M. J. Long Service-Life Structures in Marine Environment. A Methodology for a Durable Concrete // Int. Conf. “New Technologies in Structural Engineering” / LNEC, IABSE (GPPE), FIP. — Lisbon (Portugal), 1997. — Vol. 1. — P. 305–312.
6. Овчинников И.Г. О методологии построения моделей конструкций, взаимодействующих с агрессивными средами // В сб.: Долговечность материалов и элементов конструкций в агрессивных и высокотемпературных средах. — Саратов, 1988. — С. 17–21.
7. Зубков П. Т. Математические методы в тепломассопереносе. — Ч. 1, 2. — Сургут: СурГУ, 1998.

Поступила 4.04.2006 г.