

Б. РЫСБАЙУЛЫ, А. А. АДАМОВ

## ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ ФАЗОВОЙ ЗОНЫ В МНОГОСЛОЙНОМ ГРУНТЕ

Коэффициент теплопроводности  $\lambda$  представляет собой некоторую усредненную характеристику вещества. Поэтому величина  $\lambda$  определяется не только составом грунта и теплопроводностью отдельных его компонент (минеральный скелет, вода, лед, воздух), но и структурой и текстурой породы.

Большое влияние на величину коэффициента теплопроводности  $\lambda$  оказывает влажность грунта (Чудновский, 1948, 1954; Франчук, 1941, 1949; Kersten, 1949). Это происходит потому, что при замене содержащегося в порах воздуха водой улучшаются контакты между частицами ( $\lambda_{\text{возд.}} = 0,02$  ккал/м·час·град,  $\lambda_{\text{воды}} = 0,47$  ккал/м·час·град).

Величина  $\lambda$  зависит от минералогического состава грунта (Чудновский, 1948, 1954; Kersten, 1949). В литературе есть указания на то, что слоистые грунты анизотропны в отношении теплопроводности, причем последняя может меняться до 30% в зависимости от изменения направления теплового потока (Щербань, 1953). Аналогичное явление наблюдал Г. В. Порхаев и в мерзлых грунтах.

Наиболее исследована зависимость  $\lambda$  от объемного веса грунта  $\square$  (Чудновский, 1948), являющегося интегральной характеристикой текстуры. К сожалению, однозначного соответствия между текстурой и объемным весом нет, и судить о влиянии текстуры на теплопроводность по зависимости  $\lambda = \lambda(\square)$  можно лишь весьма приближенно. Заметим только, что в естественных условиях объемный вес грунта меняется в сравнительно небольших пределах и изменение  $\lambda$ , вызванное им, как правило, также невелико. Однако тенденция здесь совершенно четкая: чем больше  $\lambda$ , тем контакт между частицами лучше и тем  $\lambda$  больше.

В грунтах тепло может распространяться как по минеральному скелету путем кондукции, так и через поры, причем через последние оно переносится кондукцией, конвекцией и излучением. При измерении величины  $\lambda$  всегда определяется суммарный поток тепла, состоящий из перечисленных выше элементарных потоков. Поэто-

му коэффициент теплопроводности является по существу некоторой эффективной характеристикой породы, учитывающей сразу несколько различных механизмов теплопередачи. Однако введение эффективной характеристики возможно лишь тогда, когда действие каждого механизма обусловлено одной и той же причиной (например, градиентом температуры).

Температурная зависимость  $\lambda$  проявляется несколько более четко, но она также довольно слаба (при повышении температуры на  $\sim 50^\circ$  коэффициент теплопроводности возрастает на 10–20%; Чудновский, 1954). Последнее объясняется тем, что в обычных условиях доля тепла, переносимого с помощью внутриводной конвекции и излучения, интенсивность которых особенно сильно меняется с температурой, ничтожно мала.

Поток тепла и теплопроводность. Основной закон, кондуктивного механизма теплопередачи

$$\vec{Q} = -\lambda \nabla T$$

справедлив и для зоны фазовых переходов. Однако, в отличие от других зон, коэффициент теплопроводности  $\lambda$  здесь зависит от температуры даже в случае тонкодисперсных грунтов. В этом случае эффективный коэффициент теплопроводности определяется по формуле

$$\lambda_{\text{эф}} = \lambda + q_0 \gamma_0 \beta.$$

Поскольку  $q_0 = 80$  ккал/кг,  $\gamma_0 \cong 1500$  кг/м<sup>3</sup>,  $\beta \cong 10^{-5} \div 10^{-6}$  м<sup>2</sup>/град·час, то  $\lambda_{\text{эф}} - \lambda \cong 0,1 \div 1,0$  ккал/м·час·град, т. е. изменение коэффициента теплопроводности в результате миграции – вполне ощутимая величина.

Известно что, промерзающие и протаивающие грунты по своей структуре всегда неоднородны. Действительно, даже в тех случаях, когда их литологический состав, влажность, плотность и т.д. совершенно одинаковы по объему, они не могут рассматриваться как однородные, поскольку в одних частях грунта вода уже замерзла, а в других – еще нет. В зависимости от фазового состава воды, в промерзающих и протаивающих грунтах можно выделить три зоны – талого грун-

та, фазовых переходов и мерзлого грунта. В талой зоне грунта термоактивная влага находится только в жидкой форме, в зоне фазовых переходов вода и лед могут находиться в термодинамическом равновесии друг с другом и, наконец, в зоне мерзлого грунта практически вся термоактивная влага находится в фазе льда. В зависимости от того, в какой зоне протекает процесс переноса, механизм его существенно меняется, что заставляет рассматривать каждую зону отдельно. Теплопроводность грунта в фазовой зоне меняется нелинейно и зависит от температуры и влажности грунта. Зависимость теплопроводности фазовой зоны многослойного грунта от температуры и влаги до сих пор не изучена с математической точки зрения. Поэтому в настоящей работе мы исследуем изменения теплопроводности многослойного грунта в зависимости от толщины каждого слоя и продолжительности времени промерзания.

В основу деления промерзающих грунтов на зоны был положен температурный признак. Это нашло свое отражение, в том, что границами зон является  $\theta$ -изотерма талой зоны,  $\theta_1$ -изотерма мерзлой зоны. Математический модель изучаемой задачи подробно описано в работе [1], а сходимость разностной схемы для этой задачи изучена в работе [2].

*Система уравнений термовлагопроводности для ненасыщенных грунтов.* При совместном сосуществовании нескольких зон механизм распространения тепла и влаги в каждой из них остается тем же, что и при отсутствии других зон; взаимодействие же между зонами осуществляется только на подвижных границах, разделяющих их. Поэтому, учитывая эти особенности в работе [1] получено следующие системы уравнения:

$$\left. \begin{aligned} \gamma_0 \bar{c}_T \frac{\partial T_T}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial z} \left( \lambda_T \frac{\partial T_T}{\partial z} \right) \\ \frac{\partial \omega_T}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial z} (\gamma^2 \kappa_\phi g) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \kappa \frac{\partial \omega_T}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \kappa \delta \frac{\partial T_T}{\partial z} \right) \end{aligned} \right\}, \quad 0 < z < h(t) \quad (2)$$

$$\left. \begin{aligned} \gamma_0 \bar{c}_\phi \frac{\partial T_\phi}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial z} \left( \lambda_\phi \frac{\partial T_\phi}{\partial z} \right) \\ \frac{\partial \omega_\phi}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial z} \left( \beta \frac{\partial T_\phi}{\partial z} \right) \end{aligned} \right\}, \quad h(t) < z < h_1(t) \quad (3)$$

$$\gamma_0 \bar{c}_m \frac{\partial T_m}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left( \lambda_m \frac{\partial T_m}{\partial z} \right), \quad h_1(t) < z \leq \infty \quad (4)$$

где  $\bar{c}_\phi = \bar{c}_{\phi\bar{\phi}} = \bar{c} + q_0 \nu$  – коэффициент эффективной теплоемкости,  $\lambda_\phi = \lambda_{\phi\bar{\phi}} = \lambda + q_0 \gamma_0 \beta$  – коэффициент эффективной теплопроводности, и  $h(t), h_1(t)$  – пространственные границы зон, соответствующие изотермам  $\theta$  и  $\theta_1$ .

Найдем условия сопряжения на границах  $h(t), h_1(t)$ . По определению

$$\left. \begin{aligned} z = h(t), \quad T_T(h, t) = \theta, \quad T_\phi(h, t) = \theta \\ z = h_1(t), \quad T_\phi(h_1, t) = \theta_1, \quad T_m(h_1, t) = \theta_1 \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

Кроме того, на подвижных границах должен выполняться закон сохранения энергии:

$$z = h(t), \quad \lambda_\phi \frac{\partial T_\phi}{\partial z} - \lambda_T \frac{\partial T_T}{\partial z} = p \frac{dh}{dt}, \quad (6)$$

Аналогично (6), можно написать уравнение баланса массы:

$$z = h(t), \quad \left[ -\beta \frac{\partial T_\phi}{\partial z} \right] + \left[ k \frac{\partial \omega_T}{\partial z} + \delta \frac{\partial T_T}{\partial z} \right] \Delta_2 \omega \frac{dh}{dt}, \quad (7)$$

где  $-k \left( \frac{\partial \omega_T}{\partial z} + \delta \frac{\partial T_T}{\partial z} \right)$  (представляет собой поток влаги к границе промерзания из талой зоны,  $-\beta \frac{\partial T_\phi}{\partial z}$  – поток влаги от границы промерзания в зону фазовых переходов и  $\Delta_2 \omega \frac{dh}{dt}$  – количество влаги, фиксирующееся непосредственно на границе.

На границе между зоной фазовых переходов и зоной полностью мерзлого грунта миграция влаги невозможна и  $I_z = -\gamma_0 \beta \frac{\partial T_\phi}{\partial z} = 0$ , независимо от величины градиента температуры. Это объясняется тем, что  $\beta(\theta_1) = 0$ . Непосредственным следствием является  $z = h_1(t), \frac{d\omega_n}{dt} = 0$  и

$$z = h_1(t), \quad \frac{d\omega_\phi}{dt} = 0.$$

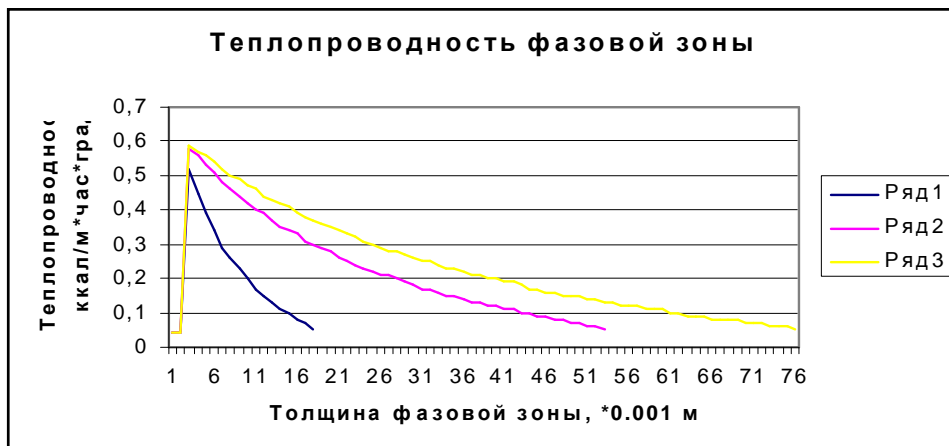


Рис. 1. Сравнительный график изменение коэффициента теплопроводности многослойного грунта. Ряд 1 – через 4 дня; ряд 2 – через 40 дней; ряд 3 – через 82 дня после начала замерзаний

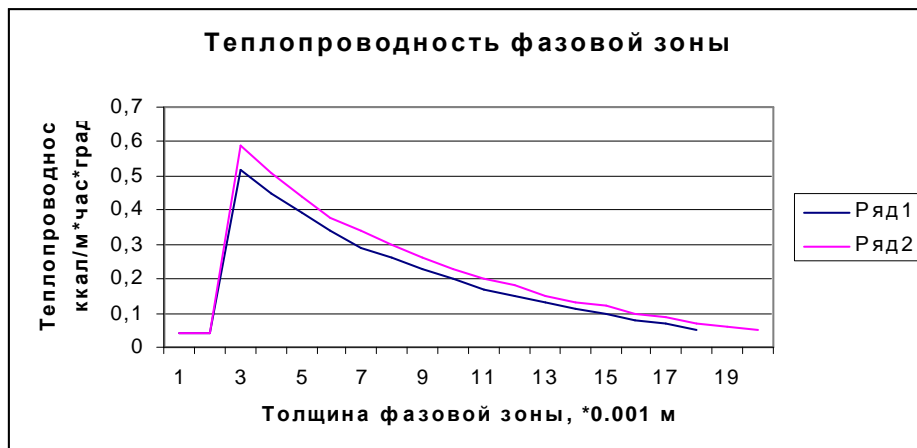


Рис. 2. Сравнительный график изменения теплопроводности многослойного грунта. Через 4 дня после начала замерзания; ряд 1 – толщина песка 1 м; ряд 2 – толщина песка 0,2 м

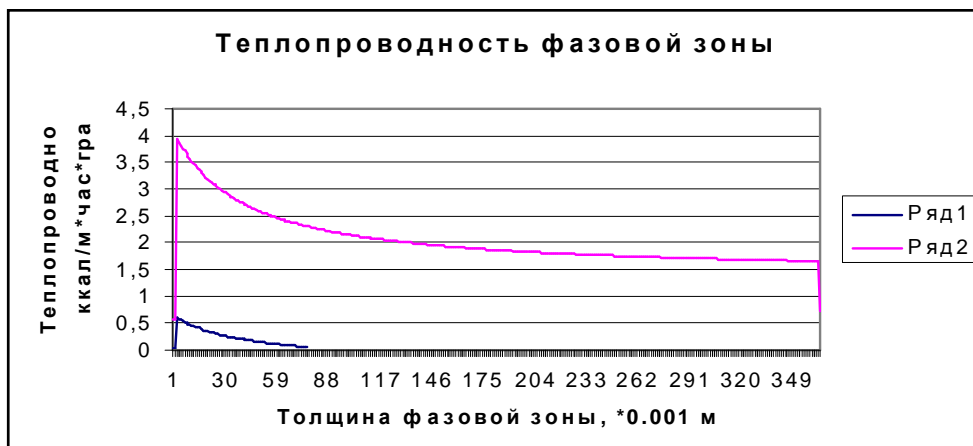


Рис. 3. Сравнительный график изменения теплопроводности многослойного грунта. Через 82 дня после начала замерзания; ряд 1 – толщина песка 1 м; ряд 2 – толщина песка 0,2 м

В работе [2] приведены численные методы решения задачи (1)–(7) и доказаны сходимость решения приближенной задачи к решению исходной в пространстве Соболева.

**Первый эксперимент.** Трехслойный грунт: верхний слой песок с толщиной 1 м; второй слой суглинка с толщиной 1 м; третий слой глина толщиной 3 м; теплоемкость каждого слоя соответственно равны 0,67; 2,01; и 1,089 ккал/кг·град. Первоначальная влага соответственно равно 10, 25 и 35 процентов.

**Второй эксперимент.** Трехслойный грунт: верхний слой песок с толщиной 0,2 м; второй слой суглинка с толщиной 1 м; третий слой глина толщиной 3 м; теплоемкость каждого слоя соответственно равны 0,67; 2,01; и 1,089 ккал/кг·град. Первоначальная влага соответственно равно 10, 25 и 35 процентов.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Мартынов Г.А. Тепло- и влагоперенос в промерзающих и оттаивающих грунтах. Основы геокриологии (мерз-

ловедения). М.: 1959. под. ред. Н. А. Цытович. Гл. VI. С. 153-192.

2. Рысбайулы Б., Адамов А.А. Сходимость разностной схемы для уравнения кондуктивного теплообмена в многослойной области // Вестник НАН РК. 2007. №1. С. 60-62.

3. Рысбайулы Б., Адамов А.А. Устойчивость и сходимость приближенной задачи одномерного уравнения возмущения пучин на железнодорожном пути // ДАН НАН РК. 2004. №4. С. 5-8.

4. Рысбайулы Б., Адамов А.А. Сходимость приближенного метода расчета промерзания грунтов земельного полотна // Вестник НАН РК. 2005. №4. С. 54-57.

5. Бэр Я., Заславский Д., Ирмей С. Физико-математические основы фильтраций воды. М.: Мир, 1971. 451 с.

#### Резюме

Тоңу кезіндегі көп қабатты грунттың фазалық аймағының жылуөткізгіштігі зерттеліп, әр қабат қалыңдығының жылуөткізгіштікке әсері анықталған.

Казахстанско-Британский технический Университет, г. Алматы;

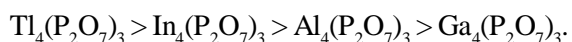
Евразийский национальный университет им. Л. Н. Гумилева, г. Астана

Поступила 20.08.07г.

К. У. ДЖАМАНСАРИЕВА, Г. Ж. СДИКОВА, Г. С. КУАНЫШЕВА

## КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ ФОСФАТОВ p<sup>1</sup>-ЭЛЕМЕНТОВ

Настоящая работа является продолжением систематического исследования устойчивости конденсированных фосфатов, образуемых s, p, d-элементами периодической системы. В ранее проведенных работах по изучению устойчивости дифосфатов, образуемых p<sup>1</sup>-элементами были установлены ряды их устойчивости в воде. Результаты кинетических исследований позволили получить следующий ряд по склонности к гидролизу:



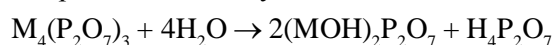
Для изучения электронного и пространственного строения ряда линейных фосфатов, а также выяснения природы гидролитического расщепления рассматриваемых дифосфатов были проведены квантово-химические расчеты методом РМЗ [1]. Этот метод представляет полуэмпирический вариант метода молекулярных орбит

(МО ЛКАО) самосогласованного поля Хартри-Фока-Рутана. Были использованы программы МОРАС 6 и HyperChem 7.01.

Для всех молекул проводилась полная оптимизация геометрии, сначала предварительно методом молекулярной механики (ММ) [2], затем методом РМЗ. Квантово-химические расчеты были проведены для ди- и трифосфатов p<sup>1</sup>-элементов:  $\text{Al}_4(\text{P}_2\text{O}_7)_3$ ,  $\text{Ga}_4(\text{P}_2\text{O}_7)_3$ ,  $\text{In}_4(\text{P}_2\text{O}_7)_3$ ,  $\text{Al}_5(\text{P}_3\text{O}_{10})_3$ ,  $\text{Ga}_5(\text{P}_3\text{O}_{10})_3$ ,  $\text{In}_5(\text{P}_3\text{O}_{10})_3$ .

Известно, что результат гидролиза зависит от природы катиона и аниона, входящих в состав соединения. Поэтому с целью определения преобладающей роли ионов в дифосфатах, образуемых p<sup>1</sup>-нами были рассмотрены все три возможных варианта реакции протекания гидролиза:

Гидролиз по катиону:



Гидролиз по аниону: