

TOMASZ KOZŁOWSKI¹ MARTA KOLANKOWSKA² ŁUKASZ WALASZCZYK³ Kielce University of Technology ¹e-mail: tomkoz@tu.kielce.pl ²e-mail: kolankowska.marta@wp.pl ³e-mail: lukaszw@tu.kielce.pl

A FINITE DIFFERENCE SCHEME TO SOLVE ONE-DIMENSIONAL PROBLEMS ASSOCIATED WITH SOIL FREEZING AND THAWING

Abstract

A finite difference scheme, which can be easily used for PC-programming to solve one-dimensional problems associated with soil freezing and thawing is presented. The method takes into account the real phase equilibria in the soil-water system, thereby being better interpretable both physically and in terms of soil mechanics. Some special computational procedures have been given, among them those relating to the crossing the freezing point and to determining the initial temperature distribution.

Keywords: heat transfer, soil, phase changes, soil freezing point, unfrozen water content

Nomenclature

- a thermal diffusivity (m² K⁻¹)
- C volumetric heat capacity (J m⁻³ K⁻¹)
- c_{ice} specific heat of ice (J kg⁻¹ K⁻¹)
- c_s specific heat of dry soil (J kg⁻¹ K⁻¹)
- c_u specific heat of unfrozen water (J kg⁻¹ K⁻¹)
- erf Gauss error function
- G geothermal gradient (K m⁻¹)
- L latent heat of fusion of ice (J kg⁻¹)
- Q heat (J)
- t time(s)
- *T* temperature (K)
- T_a air temperature (°C)
- T' fictional value of temperature (°C)

1. Introduction

Knowledge about the possible depth of frost or thaw in the subsoil is essential in a variety of problems in civil and environmental engineering. However, the existing analytical solutions are useful, as a rule, only in the cases of homogeneous and isotropic ground conditions [1]. Though some such methods deal with multilayer subsoil [1], they are still a little too flexible for most engineering computations. Instead, the numerical techniques are used for the calculation of the ground thermal regime.

- T_{f} equilibrium freezing point (°C)
- T_a average annual temperature (°C)
- w water content (% of dry mass)
- w_{μ} unfrozen water content (% of dry mass)
- z vertical coordinate (m)
- w_{μ} unfrozen water content (% of dry mass)
- z vertical coordinate (m)

Greek symbols

- α convective heat transfer (W m⁻² K⁻¹)
- ρ_d soil dry density (kg m⁻³)
- λ thermal conductivity (W/mK)
- Δz_i vertical size of an element *i* (m)

A number of such methods have been developed during the last few decades. They cover solutions for oneand two-dimensional problems solved by the finite difference method (FDM) [2], [3] and in some cases by the finite element method (FEM) [4], [5], [6]. However, the characteristic features of the soil-water system, particularly relating to the phase phenomena (e.g. the freezing point depression and the unfrozen water content) are usually not taken into account, although the distribution of the latent heat of fusion plays a very significant role in the thermal balance. When a simplified model, in which all water in the soil-water system freezes at 0°C is assumed, the obtained values of the depth of frost are under-predicted by up to 30% [7]. Moreover, in a number of the models some soil parameters are misapplied. In turn, the approximate analytic solutions do not take the temperature dependence of the soil phase composition into account.

The aim of the paper is to present a finite difference scheme, which can be easily used for PCprogramming to solve one-dimensional problems associated with soil freezing and thawing. The method takes into account the real phase equilibriums in soilwater system, thereby being better interpretable both physically and in terms of soil mechanics.

2. Theory

2.1. The finite difference scheme

The case of transient, geometric one-dimensional heat conduction will be discussed for a horizontally stratified region representing the ground (Fig. 1). Material properties within a given layer are uniform. Each layer is subdivided into a number of Δz_i – sized elements, thereby establishing a grid with nodes 1, ..., *i*, ..., *n* in the centres of the elements. Thus the primary assumption made is that the temperature (or other properties) at nodal *i* represents the temperature over the entire element. In the region in question, the equation of transient, one-dimensional heat conduction with an internal heat source

$$\frac{\delta^2 T}{\delta z^2} + \frac{q_g}{\lambda} = \frac{1}{a} \frac{\delta T}{\delta t}$$
(1)

is to be solved for time $t > t_0$, whilst considering the boundary conditions at the top and the bottom. The initial temperature distribution T_{i0} for i = 1, 2, ..., n is given.

The general energy balance for an element i can be written, relating to the first law of thermodynamics, as

$$Q_{i+1,j} + Q_{g\,j,j} - Q_{i-1,j} = Q_{s,i,j} \tag{2}$$

where $Q_{i+1,j}$ is the heat entering the element from the lower side, calculated in relation to the state of the system in a time moment *j* (in the paper, the subscripts *i* and *j* denote the space and time coordinate respectively; in the case of time independent values, the time subscripts *j* will be omitted), $Q_{g,i,j}$ is the heat generated within the element, $Q_{i-1,j}$ is the heat leaving the element from the upper side and $Q_{s,i,j}$ is the heat stored in the element, the latter being an equivalent of the change of enthalpy.



environ

Fig. 1. Discretization of one-dimensional heat transfer in stratified ground: a) division of the layers into final elements numbered 1,... *i*,... *n*, b) temperature $T_{i,j+1}$ of the element *i* after a final time increment Δt_j as a function of current temperatures of the element and of the adjacent elements

According to the widely known Fourier's law of heat conduction and making use of the concept of thermal resistances, we can write

$$Q_{i+1,j} = \frac{T_{i+1,j} - T_{i,j}}{\frac{\Delta z_{i+1}}{2\lambda_{i+1}} + \frac{\Delta z_i}{2\lambda_i}} \Delta t_{i,j}$$
(3)

and analogically

$$Q_{i-1,j} = \frac{T_{i,j} - T_{i-1,j}}{\frac{\Delta z_i}{2\lambda_i} + \frac{\Delta z_{i-1}}{2\lambda_{i-1}}} \Delta t_{i,j}$$
(4)

To formulate the expression for the heat generated in an element *i*, the unfrozen water concept should be introduced. It is widely known that an amount of liquid water remains unfrozen in a soil water system in a wide range of temperatures beneath the freezing point T_{c} [8-11]. Thus, the temperature called the freezing point of soil water, in contrary to the freezing point of normal water in bulk, is comprehended as the temperature at which equilibrium freezing of liquid soil water (i.e. its solidification) begins. Any lowering of the temperature beneath the freezing point leads to the production of an amount of ice, which at any temperature $T < T_{f}$ will remain in thermodynamic equilibrium with the unfrozen water. Oppositely, any increasing of the temperature melts an amount of ice, creating a new balance between liquid water and ice. A further increase in temperature will finally result in the melting of the last crystals of ice at the freezing

point T_f . In other words, in the case of the soil-water system, the freezing point is the highest temperature at which ice is present in the system.

Hence, the unfrozen water content w_u , defined analogically to the water content w as the ratio of the mass of unfrozen water to the mass of dry soil, is a function of temperature:

$$w_u = \begin{cases} w & T \ge T_f \\ w_u(T) & T < T_f \end{cases}$$
(5) with

Now the heat generated in the element i can be written as

$$Q_{g_{i,j}} = -\rho_d L[w_u(T_{i,j}) - w_u(T_{i,j+1})]\Delta z_i \quad (6)$$

for temperatures beneath the freezing point and, according to (5), it is equal to zero as $T_{i,j}$ and $T_{i,j+1}$ are higher than the freezing point.

Finally, the heat stored in the element i can be expressed as

$$Q_{s,i,j} = C_{i,j} (T_{i,j} - T_{i,j+1}) \Delta z_i$$
(7)

where $C_{i,j}$ is the volumetric heat capacity of the element, J/m³K. It should be noted that $C_{i,j}$, depending on the phase composition, is a function of temperature and can be written as

$$C_{i,j} = [c_s + c_u w_u(T_{i,j}) + c_{ice} (w_i - w_u(T_{i,j})] \rho_d \quad (8)$$

Notice that two simplifications have been made in relation to the temperature dependence of C_{ii} . Firstly, it is assumed that the specific heats of soil constituents, c_s , c_{μ} and c_{ice} , are temperature independent, although such a dependence indeed occurs and could easily be taken into account. However, thermal effects associated with it are of two orders of magnitude less than those ones connected with the release or absorbing of the latent heat. For that reason the temperature dependence of the unfrozen water function must always be taken into consideration. On the other hand, the second assumption consists in keeping the unfrozen water content constant as the temperature changes from T_{ii} to $T_{i,i+1}$. Moreover, taking into account the definition given by Equation (5), one can see that the volumetric heat capacity C_{ii} is temperature dependent only for temperatures below the freezing point and becomes constant as ice is absent in the system.

Substituting Equations (3), (4), (6) and (7) into (2) and rearranging gives the searched temperature of the element *i* at the moment j+1 as

$$T_{i,j+1} = T_{i,j} \left(1 - \frac{A_{i+1} + A_{i-1}}{C_{i,j} \Delta z_i} \Delta t_{i,j}\right) - \frac{A_{i+1}T_{i+1,j} + A_{i-1}T_{i-1,j}}{C_{i,j} \Delta z_i} \Delta t_{i,j} - \frac{\rho_d L[u(T_{i,j}) - u(T_{i,j+1})]}{C_{i,j}}$$
(9)

vhere

and

$$A_{i+1} = \frac{1}{\frac{\Delta z_{i+1}}{2\lambda_{i+1}} + \frac{\Delta z_i}{2\lambda_i}}$$
(10)

$$A_{i-1} = \frac{1}{\frac{\Delta z_i}{2\lambda_i} + \frac{\Delta z_{i-1}}{2\lambda_{i-1}}}$$
(11)

Taking into account Equation (5), at temperatures higher than the freezing point, the last term in the Equation (9) equals zero and the volumetric heat $C_{i,j}$ is temperature independent, so the equation takes on the form of a so-called explicit FDM scheme (Baehr and Stephan [12]). The stability condition for such a scheme is a consequence of the requirement that no coefficient in such an equation is negative. Hence:

$$1 - \frac{A_{i+1} + A_{i-1}}{C_{i,j} \Delta z_i} \Delta t_{i,j} > 0$$
 (12)

which yields a restriction for time increment Δt_{ij} :

$$\Delta t_{i,j} > \frac{C_{i,j} \Delta z_i A_{i-1} A_{i+1}}{2(A_{i-1} + A_{i+1})}$$
(13)

Below the freezing point, all the terms in Equation (9) have non-zero values. Additionally, the volumetric heat capacity $C_{i,j}$ becomes temperature dependent. The temperature $T_{i,j+1}$ cannot be obtained in an explicit form and a special technique must be used to solve Equation (9).

Another problem arises relating to the stability of Equation (9). The limitation of the time step set by the inequality (13) may now not guarantee the stability. Smith [13] shows that such a stability condition remains unaltered if the coefficient in the implicit FDM scheme depends linearly on the temperature. However, in the case of Equation (9), the temperature dependency follows from the unfrozen water content w_u being a non-linear function of temperature. However, there is no need to establish the stability theoretically in

this case. According to Allen et al. [14], a possible approach consists in conducting a series of numerical experiments for a program based on the algorithm in question. The behaviour of the method over a spectrum of mesh geometries and coefficient values is examined and certain conclusions regarding the stability can be drawn. As will be shown below, the approach, often referred to as the heuristic stability analysis, has been applied in the case of the considered algorithm.

The upper boundary condition will be established by assuming a fictional, additional node for which I = 0 and rewriting Equation (4):

$$Q_{i-1,j} = \frac{T_{1,j} - T_{0,j}}{\frac{\Delta z_i}{2\lambda_i} + \frac{1}{\alpha}} \Delta t_{1,j}$$
(14)

where: α is the convective heat transfer coefficient, W/m²K, and $T_{0,i}$ refers to the air temperature.

The lower boundary condition needs the introduction of the temperature of a fictional element n+1 outside the region in question:

$$T_{n+1,j} = T_{n,j} + G \Delta z_n \tag{15}$$

where: G is the geothermal gradient, K/m.

2.2. Solution of the FDM scheme

Basing on the FDM scheme presented in section 1, a PC-program Daisy 2.0 has been written enabling a complex thermal analysis of freezing and thawing ground. The applied step-by-step numerical procedure will be presented below.

- 1. Collecting data about the ground profile in question (thicknesses of layers, basic physical properties of soils).
- 2. Introducing the grid down to 8 m (it has been assumed that changes of temperature at this depth are negligible).
- 3. Establishing the initial temperature profile. It can be done by two alternate ways; the first one based on linear distribution from point to point, according to data provided by the user, and the second based on the Gauss error function, assuming that at the depth of 8 m the temperature is constant and equalled to the average annual temperature T_g for the region in question [15]:

$$T(z,t) = T_a + (T_g - T_a) \operatorname{erf}\left(\frac{z}{2\sqrt{\frac{\lambda}{C}t}}\right) \quad (16)$$

where: *t* is the length of a period, immediately before the simulation, for which the mean air temperature T_a is known. In Equation (16), the uniformity of the thermal properties over the entire profile is assumed. For the layered ground profile, the following recurrent procedure is proposed to establish the initial temperature distribution. The temperature in the first soil layer is calculated by use of the thermal parameters of this layer:

$$T(z,t) = T_{a} + (T_{g} - T_{a}) \operatorname{erf}\left(\frac{z}{2\sqrt{\frac{\lambda_{1,0}}{C_{1,0}}t}}\right)$$
(17)

Temperature in a layer *i* is calculated as a function of the temperature T_{i-1} at the lower boundary of the previous layer *i*-1, by use of the thermal properties of the layer *i*:

$$T(z,t) = T_{i-1} + (T_g - T_{i-1}) \operatorname{erf}\left(\frac{z - \sum_{k=1}^{k=i-1} h_k}{2\sqrt{\frac{\lambda_{i,0}}{C_{i,0}}t}}\right) (18)$$

The principle of the method is shown in Figure 2. For the purpose of numerical computations, the error function can be effectively approximated by the Taylor series:

erf
$$x = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(x - \frac{x^3}{3} + \frac{1}{2!} \cdot \frac{x^5}{5} - \frac{1}{3!} \cdot \frac{x^7}{7} + \dots \right)$$
 (19)

- 4. Collecting data about the thicknesses and physical properties of the insulating layers if any exist.
- 5. Collecting data about the air temperature as a number of pairs $(T_{0,k}, t_k)$, where $T_{0,k}$ is a constant air temperature for the period of t_k .
- Computing the temperature independent thermal properties of soils in the profile: the freezing point *T_f* and the thermal conductivity λ.
- 7. For the current temperature profile, computing the temperature dependent thermal properties of soils in every final element in the profile: the unfrozen water content and the volumetric heat capacity according to Equation (8).
- 8. For every final element *i*, computing the allowed time step with regard to the stability condition given by Equation (13) and then computing the minimal time increment for the stage *j* as

$$\Delta t_i = \max\{\Delta t_{i,i}, i = 1..n\}$$
(20)

9. For every final element *i*, computing the temperature on the next stage j+1 as $T_{i,j+1}$, i=1...n according to Equation (9) and taking the constant value for the time step in accordance with Equation(20). Because of the temperature dependency of the unfrozen water content, the Equation (9) is in fact an implicit function of $T_{i,j+1}$, therefore a special procedure must be applied to obtain the solution. In this case, the Newton method proved very useful. To be solved, the Equation (9) had to be rearranged to the form

$$\Phi(T_{i,i+1}) = 0 \tag{21}$$

and next the iteration scheme was successfully used giving a quick convergence.

10. Assigning the temperature distribution for the next stage $\{T_{i,j+1}, I = 1...n\}$ to the current temperature distribution $\{T_{i,j}, I = 1...n\}$ and going to the point (7).



Fig. 2. Establishing the initial temperature profile (see details in text)

A special attention should be paid on the case when temperature crosses the freezing point. All thermal effects associated with freezing or thawing must be taken into account, especially in the vicinity of the freezing point where the slope of the phase composition curve is particularly steep. In the program in question, the problem has been solved as follows. Assume, for simplicity, three possible situations on cooling $(T_{ij} \ge T_{ij+1})$:

$$T_{ij} > T_f \text{ and } T_{ij+1} \ge T_f$$
 (22)

$$T_{ij} > T_f \text{ and } T_{ij+1} < T_f$$
 (23)

$$T_{i,j} \le T_f \text{ and } T_{i,j+1} < T_f \tag{24}$$

In the case given by Equation (22), the heat generated in the element *i* equals zero while in the case given by Equation (24) the heat generated in the element *i* is calculated according to Equation (6). The situation given by Equation (23) refers to the "crossing" of the freezing point and needs special attention. It should be noted that on cooling the appearance of the condition (23) always follows the condition (22), thus the temperature $T_{i,j+1}$ is calculated supposing that phase changes have not been initiated which is at variance with the fact that the freezing point has been exceeded. The following procedure is used in this case:

- a) Until the condition (22) is satisfied, T_{i,j+1} in the next time step is calculated by use of Equations (8) and (9) with the unfrozen water content w_u(T) equal to zero.
- b) If $T_{i,j+1}$ calculated during a subsequent time step satisfies the condition (23), the phase change is assumed to begin. Actually, the calculated value of $T_{i,j+1}$ does not occur in the element so it is treated as a fictional value *T*^{*}. Now the loss of heat related to the current time step can be expressed as

$$\Delta Q = C_{i,j} (T_{i,j} - T') \Delta z_i \tag{25}$$

which can be divided into two parts:

$$\Delta Q = \Delta Q_1 + \Delta Q_2 \tag{26}$$

where:

$$\Delta Q_1 = C_{i,j} (T_{i,j} - T_f) \Delta z_i \tag{27}$$

is the loss of heat needed to reach T_f during cooling from $T_{i,j}$ without phase change. The second part of ΔQ refers to the latent heat of the freezing of a quantity of water in the element *i*:

$$\Delta Q_2 = -\rho_d L \left[w_i - w_u(T_{i,j+1}) \right] \Delta z_i \qquad (28)$$

Substituting Equations (27) and (28) into Equation (25) via Equation (26) and using a function describing the temperature dependence of the unfrozen water, the real temperature $T_{i,i+1}$ can be calculated.

3. Conclusions

The presented model is a relatively simple and convenient tool for the calculation of frost or thaw penetration in soils. Despite its straightforwardness, the model takes into account the phase phenomena

characteristic for real soil-water systems, i.e. the existence of unfrozen water and the freezing point depression.

References

- [1] Jumikis A.R.: *Thermal Geotechnics*, Rutgers Univ. Press, New Brunswick 1977.
- [2] Goodrich L.E.: *Efficient numerical technique for onedimensional thermal problems with phase change*, Int. J. Heat & Mass Transfer 21 (1978), pp. 615-621.
- [3] Sheng D., Knutsson S., Axelsson K.: Verification and application of a numerical model for frost front penetration, in: Frost in Geotechnical Engineering, VTT 94, Espoo, pp. 401-413, 1989.
- [4] Blanchard D., Fremond M.: Soils frost heaving and thaw settlement, in: Ground Freezing, Proceedings of The Fourth International Symposium on Ground Freezing, A.A.Balkema, Rotterdam/Boston, pp. 209-216, 1985.
- [5] Comes-Pintaux A.M., Nguyen-Lamba M.: Finiteelement enthalpy method for discrete phase change, Num. Heat Transfer 9 (1986), pp. 403-417.
- [6] Shen M., Ladanyi B.: Numerical solutions for freezing and thawing of soils using boundaryconforming curvilinear coordinate systems, in: Frost in Geotechnical Engineering, VTT Symposium 94, Espoo, pp. 391-400, 1989.
- [7] Smith M.W., Riseborough D.W.: The sensitivity of thermal predictions to assumptions in soil properties,

[in:] Ground Freezing, Proceedings of The Fourth International Symposium on Ground Freezing, A.A.Balkema, Rotterdam/Boston, 1985, pp. 17-24.

- [8] Kozlowski T.: A comprehensive method of determining the soil unfrozen water curves; 1: Application of the term of convolution, Cold Regions Science & Technology, 36 (2003), pp. 71-79.
- [9] Kozlowski T.: A comprehensive method of determining the soil unfrozen water curves; 2: Stages of the phase change process in frozen soil-water system, Cold Regions Science & Technology, 36 (1-3) (2003), pp. 81-92.
- [10] Kozlowski T.: Soil freezing point as obtained on melting, Cold Regions Science & Technology, 38(2-3) (2004), pp. 93-101.
- [11] Kozlowski T.: A semi-empirical model for phase composition of water in clay–water systems, Cold Regions Science and Technology, 49 (2007), pp. 226–236.
- [12] Baehr H.D., Stephan K.: Heat and Mass Transfer, Springer-Verlag, Berlin, 1998.
- [13] Smith G.D.: Numerical solution of partial differential equations, in: Finite Difference Methods, Clarendon Press, Oxford, 1985.
- [14] Allen M.B., Herrera I., Pinder G.F.: Numerical Modelling in Science and Engineering, John Willey & Sons, New York, 1988.
- [15] Lukyanov W.S., Golovko M.D.: Calculation of the Frost Depth in Soils (Razchet Glubiny Promerzaniya Gruntov, in Russian), Gosudarstvennoye Transportnoye Zheleznodorozhniye Izdatelstvo, Moskva, 1958.

Tomasz Kozłowski Marta Kolankowska Łukasz Walaszczyk

Metoda różnic skończonych do rozwiązywania jednowymiarowych problemów związanych z zamarzaniem i rozmarzaniem gruntu

1. Wprowadzenie

Wiedza dotycząca głębokości przemarzania lub odmarzania podłoża gruntowego jest niezbędna przy projektowaniu fundamentów oraz innych konstrukcji w zimnych regionach. Istniejące rozwiązania analityczne są jednak użyteczne tylko w przypadkach jednorodnych i izotropowych warunków gruntowych [1]. Pomimo iż niektóre metody radzą sobie z wielowarstwowym podłożem [1], nadal są one niewystarczająco precyzyjne dla większości obliczeń inżynierskich. Metody numeryczne z kolei są wykorzystywane do modelowania przepływu ciepła w podłożu gruntowym. W ciągu ostatnich kilku dekad opracowano wiele takich metod. Obejmują one rozwiązania metodą różnic skończonych (MRS) [2, 3], a w niektórych przypadkach metodą elementów skończonych (MES) [4-6] dla zagadnień jednoi dwuwymiarowych. Jednakże cechy charakterystyczne systemu wodno-gruntowego, zwłaszcza związane z przemianami fazowymi (np. obniżenie temperatury

krzepnięcia i zawartości wody niezamarzniętej), zwykle nie są brane pod uwagę, chociaż rozkład ciepła utajonego lodu odgrywa znaczącą rolę w równowadze termicznej. W przypadku uproszczonego modelu, w którym cała woda w systemie woda-grunt zamarza w temperaturze 0°C przyjmuje się, że uzyskane wartości głębokości przemarzania są zaniżone nawet o 30% [7]. Niestety, pomimo uproszczeń, modele nie zawsze są łatwe do programowania komputerowego. Ponadto w wielu modelach niektóre parametry gruntu są błędnie zastosowane. Z kolei przybliżone rozwiązania analityczne nie biorą pod uwagę zależności temperatury od składu fazowego gruntu. Dodatkowo, ich zastosowanie do warstwowego podłoża jest zwykle ograniczone.

Celem pracy jest przedstawienie metody różnic skończonych, która może być łatwo zastosowana do komputerowego programowania rozwiązań jednowymiarowych zagadnień związanych z zamarzaniem i rozmarzaniem gruntu. Metoda ta uwzględnia rzeczywiste równowagi fazowe w systemie wodno-gruntowym, co pozwala na lepszą interpretację fizyczną, również z punktu widzenia mechaniki gruntów.

2. Teoria

2.1. Metoda różnic skończonych

W tej części omówiony został przypadek nieustalonego, geometrycznie jednowymiarowego przewodzenia ciepła w poziomo warstwowym podłożu gruntowym (rys. 1). Właściwości materiału w danej warstwie są jednorodne. Każda warstwa jest podzielona na szereg elementów o wielkości Δz_i , tym samym ustanawiając siatkę z węzłów 1, ..., *i*, ..., *n* znajdujących się w środku elementów. Podstawowym założeniem jest, że temperatura (lub inne właściwości) w węźle *i* oznacza temperaturę w całym elemencie.

W danym obszarze równanie nieustalonego, jednowymiarowego przewodzenia ciepła z wewnętrznym źródłem ciepła (1) jest rozwiązywane dla czasu $t > t_0$, przy jednoczesnym uwzględnieniu warunków brzegowych na górze i na dole. Początkowy rozkład temperatury $T_{i,0}$ dla i = 1, 2, ... n jest dany.

Ogólny bilans energii dla elementu *i* można zapisać, odnosząc się do pierwszej zasady termodynamiki, jako (2), gdzie $Q_{i+1,j}$ jest ciepłem dostarczanym do elementu od dołu, obliczanym w stosunku do stanu systemu w chwili *j* (w artykule, indeksy *i* oraz *j* oznaczają odpowiednio współrzędne przestrzenne i czas, w przypadku wartości niezależnych od czasu, indeksy *j* będą pominięte), $Q_{g,ij}$ jest ciepłem wytworzonym wewnątrz elementu, $Q_{i+1,j}$ jest ciepłem opuszczającym element od góry, natomiast $Q_{s,ij}$ to ciepło przechowywane w elemencie, będące odpowiednikiem zmiany entalpii.

Zgodnie z powszechnie znanym prawem przewodzenia ciepła Fouriera oraz w oparciu o pojęcie oporów cieplnych, możemy zapisać (3) oraz analogicznie (4).

Aby sformułować wyrażenie dla ciepła wytwarzanego w elemencie *i*, należy wprowadzić pojęcie wody niezamarzniętej. Wiadomo, że pewna ilość wody w stanie ciekłym pozostaje niezamarznięta w systemie woda-grunt w szerokim zakresie temperatur poniżej punktu zamarzania T_{ϵ} [8-11]. Tak więc, temperatura nazywana temperaturą zamarzania wody w gruncie, w przeciwieństwie do temperatury zamarzania normalnej wody w dużej masie, jest rozumiana jako temperatura, w której rozpoczyna się zamarzanie ciekłej wody gruntowej (tj. jej krzepnięcie). Jakiekolwiek obniżenie temperatury poniżej punktu zamarzania prowadzi do wytwarzania takiej ilości lodu, która w danej temperaturze $T < T_{s}$ pozostanie w równowadze termodynamicznej z niezamarzniętą wodą. Przeciwnie, jakiekolwiek zwiększenie temperatury powoduje topnienie pewnej ilości lodu, tworząc nową równowagę między ciekłą wodą i lodem. Dalszy wzrost temperatury doprowadza ostatecznie do stopienia ostatnich kryształków lodu w temperaturze krzepnięcia T. Innymi słowy, w przypadku systemu woda-grunt temperatura krzepniecia jest najwyższą temperatura, w której lód jest obecny w systemie.

Stąd zawartość wody niezamarzniętej w_u , określona analogicznie do zawartości wody w jako stosunek masy wody niezamarzniętej do masy suchego gruntu, jest funkcją temperatury (5). Dokładna postać funkcji w_u zostanie omówiona w dalszej części artykułu.

Teraz ciepło wytwarzane w elemencie *i* można zapisać jako (6) dla temperatur poniżej temperatury krzepnięcia, natomiast dla $T_{i,j}$ oraz $T_{i,j+1}$ wyższych od temperatury krzepnięcia jest równe zero, zgodnie ze wzorem (5). Wreszcie, ciepło przechowywane w elemencie *i* może być wyrażone jako: (7), gdzie $C_{i,j}$ jest to objętościowa pojemność cieplna elementu, J/m³K. Należy zauważyć, że $C_{i,j}$, w zależności od składu fazowego, jest funkcją temperatury i może być zapisana jako (8).

Należy zwrócić uwagę, że dokonano dwóch uproszczeń w zakresie zależności C_{ij} od temperatury. Po pierwsze, zakłada się, że w procesie ogrzewania składników gruntu c_s , c_u oraz c_{ice} , są niezależne od temperatury, chociaż taka zależność w rzeczywistości występuje i może być brana pod uwagę. Jednakże związane z tym efekty termiczne są o dwa rzędy wielkości mniejsze niż te związane z uwalnianiem lub absorbcją ciepła utajonego. Z tego powodu funkcja zależności wody niezamarzniętej od temperatury musi być zawsze brana pod uwagę. Drugie założenie polega na utrzymaniu stałej zawartości wody niezamarzniętej podczas zmiany temperatury od $T_{i,j}$ do $T_{i,j+1}$. Ponadto biorąc pod uwagę równanie (5), można zauważyć, że objętościowa pojemność cieplna $C_{i,j}$ jest zależna od temperatury, wyłącznie dla temperatur poniżej temperatury krzepnięcia i osiąga stałą wartość, gdy lód jest nieobecny w systemie.

Podstawiając wyrażenia (3), (4), (6) i (7) do (2) oraz przekształcając je dostajemy szukaną temperaturę elementu i, w chwili j+1 w postaci (9).

Na podstawie równania (5) ostatnie wyrażenie w równaniu (9) jest równe zero w temperaturach wyższych od temperatury krzepnięcia, a ciepło objętościowe C_{ij} jest temperaturowo niezależne, zatem równanie przyjmuje postać tzw. jawnego schematu MRS (Baehr Stephan [12]). Warunek stabilności takiego schematu wynika z założenia, że żaden współczynnik w równania nie jest ujemny. Stąd (12) czego efektem jest ograniczenie dla przyrostu czasu Δt_{ij} (13).

Poniżej temperatury zamarzania, wszystkie składniki równania (9) przyjmują wartości niezerowe. Dodatkowo objętościowa pojemność cieplna C₁₁ staje się zależna od temperatury. Temperatura $T_{i,i+1}$ nie może być uzyskana w jednoznaczny sposób i dlatego do rozwiązania (9) należy użyć specjalnych technik. Inny problem jest związany ze stabilnością równania (9). Ograniczenie kroku czasowego wyznaczonego przez nierówność (13), nie gwarantuje stabilności. Smith [13] wskazuje, że taki stan stabilności pozostaje niezmieniony, jeżeli współczynnik w ukrytym schemacie MRS jest liniowo zależny od temperatury. Jednakże w przypadku równania (9), zależność od temperatury wynika z zawartości wody niezamarzniętej w będącej nieliniową funkcją temperatury. Natomiast, nie ma potrzeby, w tym przypadku określać teoretycznej stabilności. Według Allen et al. [14], możliwe podejście polega na przeprowadzeniu serii eksperymentów numerycznych dla programu opartego na omawianym algorytmie. Zachowanie metody powyżej spektrum geometrii siatki i wartości współczynnika jest zbadane i można wyciągnąć pewne wnioski dotyczące stabilności. Przedstawione poniżej podejście, często określane jako heurystyczna analiza stabilności, zostanie zastosowane dla rozważanego algorytmu.

Górny warunek brzegowy zostanie ustalony przez przyjęcie fikcyjnego dodatkowego węzła, dla którego i = 0, i równanie (4) przyjmuje postać (14), gdzie α jest współczynnikiem konwekcyjnej wymiany ciepła, W/m²K oraz $T_{0,j}$ oznacza temperaturę otoczenia. Dolny warunek brzegowy wymaga wprowadzenia temperatury fikcyjnego elementu n+1 na zewnątrz obszaru (15), gdzie G jest gradientem geotermalnym, K/m.

2.2. Rozwiązanie programu FDM

W oparciu o MRS przedstawioną w pierwszej części artykułu, został napisany program komputerowy Daisy 2.0, aby umożliwić kompleksową analizę termiczną zamarzania i rozmarzania gruntu. Zastosowana krok po kroku procedura numeryczna zostanie omówiona poniżej.

- 1. Zebranie danych o profilu gruntu (grubości warstw, podstawowe właściwości fizyczne gruntów).
- 2. Wprowadzenie siatki aż do głębokości 8 m (przyjęto, że zmiany temperatury na tej głębokości są nieistotne).
- 3. Ustanowienie wstępnego rozkładu temperatury.
 - Można to zrobić dwoma sposobami; pierwszy opiera się na rozkładzie liniowym od punktu do punktu, w zależności od danych dostarczonych przez użytkownika, natomiast drugi na funkcji błędu Gaussa, przy założeniu, że na głębokości 8 m temperatura jest stała i równa średniej rocznej temperaturze T_a dla danego regionu [15]: (16), gdzie t jest długością okresu, bezpośrednio przed symulacją, dla którego średnia temperatura powietrza T_a jest znana. W równaniu (16) zakłada się jednorodność właściwości cieplnych w całym profilu. Dla uwarstwionego podłoża zaproponowano procedurę rekurencyjną do ustalenia początkowego rozkładu temperatury. Temperatura w pierwszej warstwie gruntu jest obliczana w oparciu o parametry cieplne tej warstwy (17).

Temperatura w warstwie i jest obliczana jako funkcja temperatury T_{i-1} w dolnej granicy warstwy poprzedniej *i*-1, z wykorzystaniem parametrów cieplnych warstwy i (18).

Zasadę tej metody przedstawiono na rysunku 2. Do obliczeń numerycznych, funkcję błędu można skutecznie przybliżać za pomocą szeregu Taylora (19).

- 4. Zebranie danych o grubościach i właściwościach fizycznych warstw izolacyjnych, jeśli takie istnieją.
- 5. Zebranie danych na temat temperatury powietrza jako par liczby $(T_{0'k'}t_k)$, gdzie $T_{0,k}$ jest stałą temperaturą powietrza dla okresu t_k .

- Obliczenie właściwości cieplnych gruntu niezależnych od temperatury: temperatury zamarzania *T_f* i przewodności cieplnej λ.
- Dla bieżącego profilu temperatury obliczenie właściwości termicznych gruntów zależnych od temperatury w każdym elemencie końcowym profilu: zawartości wody niezamarzniętej oraz objętościowej pojemności cieplnej zgodnie z równaniem (8).
- 8. Dla każdego elementu końcowego *i*, obliczenie dopuszczalnego kroku czasowego w odniesieniu do stanu stabilności danego równaniem (13), a następnie obliczenie minimalnego przyrostu czasu dla etapu *j* jako (20).
- 9. Dla każdego elementu końcowego *i*, obliczenie temperatury $T_{i,j+}$, i = 1,..., n w następnym etapie *j*+1, zgodnie z równaniem (9) i przy stałej wartości kroku czasowego zgodnej z równaniem (20). Ze względu na zależność temperaturową zawartości wody niezamarzniętej, równanie (9) jest w rzeczywistości funkcją ukrytą $T_{i,j+1}$, dlatego też w celu uzyskania rozwiązania należy zastosować specjalną procedurę W tym przypadku bardzo przydatna okazuje się metoda Newtona. Aby rozwiązać równanie (9), należy je przekształcić do postaci (21) i następnie zastosować schemat iteracji, dający szybką zbieżność.
- 10. Przypisanie rozkładu temperatury dla następnego etapu $\{T_{i,j+1}, i = 1...n\}$ jako bieżącego rozkładu temperatury $\{T_{i,j}, i = 1...n\}$ i przejście do punktu (7).

Szczególną uwagę należy zwrócić w przypadku, gdy temperatura przekracza temperaturę zamarzania. W odniesieniu do rysunku 2, należy wziąć pod uwagę wszelkie efekty termiczne związane z zamarzaniem lub rozmarzaniem, zwłaszcza w otoczeniu temperatury zamarzania, gdzie nachylenie krzywej przemiany fazowej jest szczególnie duże. W programie problem ten rozwiązano w następujący sposób. Załóżmy, dla uproszczenia, trzy możliwe sytuacje podczas ochładzania ($T_{ij} \ge T_{ij+1}$): (22), (23), (24).

W przypadku opisanym równaniem (22) ciepło wytworzone w elemencie *i* równa się zero, podczas gdy w przypadku danym równaniem (24) ciepło wytworzone w elemencie *i* jest obliczane zgodnie z równaniem (6). Sytuacja zadana równaniem (23) odnosi się do "przejścia" przez temperaturę zamarzania i wymaga szczególnej uwagi. Należy zauważyć, że wystąpienie podczas ochładzania warunku (23) następuje zawsze po warunku (22) w ten sposób, że temperatura T_{ija1} jest obliczana przy założeniu, że przemiana fazowa nie została zainicjowana, co jest sprzeczne z tym, że temperatura zamarzania została przekroczona. W takim przypadku stosuje się poniższą procedurę:

- a) Dopóki warunek (22) jest spełniony, temperaturę $T_{i,j+1}$ w następnym etapie oblicza się, wykorzystując równania (8) i (9), zakładając, że zawartość wody niezamarzniętej $w_u(T)$ jest równa zero.
- b) Jeśli temperatura $T_{i,j+1}$ obliczona w następnym kroku czasowym spełnia warunek (23), zakłada się, że rozpoczęła się przemiana fazowa. Faktycznie obliczona wartość $T_{i,j+1}$ nie występuje w elemencie, zatem jest ona traktowana jako wartość fikcyjna *T'*. Teraz strata ciepła związana z bieżącym krokiem czasowym może być wyrażona jako (25), którą można podzielić na dwie części (26), gdzie (27) jest utratą ciepła potrzebną do osiągnięcia T_f podczas chłodzenia od $T_{i,j}$ bez zmiany fazy. Druga część ΔQ oznacza ciepło utajone zamarzania pewnej ilości wody w elemencie *i* (28).

Podstawiając równania (27) i (28) do równania (25) za pomocą równania (26) oraz używając funkcji opisującej zależność temperaturową wody niezamarzniętej, można obliczyć temperaturę rzeczywistą $T_{i,i+1}$.

3. Wnioski

Przedstawiony model jest stosunkowo prostym i wygodnym narzędziem do obliczania głębokości przemarzania lub odwilży w gruntach. Mimo swojej prostoty, model uwzględnia zjawiska przemian fazowych charakterystyczne dla rzeczywistych systemów wodno-gruntowych, np. istnienia wody niezamarzniętej i obniżenia temperatury krzepnięcia.