

01

Исследование тепловых режимов в средах с объемным тепловыделением

© Г.А. Павлов,¹ Ю.В. Троцкий²

¹ Институт проблем химической физики РАН,
142432 Черноголовка, Московская область, Россия

² Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
119991 Москва, Россия
e-mail: pav14411@yandex.ru

(Поступило в Редакцию 11 января 2012 г.)

Рассмотрены традиционная и барнеттовская модели тепломассообмена в двухэлементной среде с тепловыделением, пропорциональным доле одного из элементов. Анализ моделей выполнен с помощью компьютерной программы для многопараметрического анализа. Исследованы и сопоставлены многообразия и характеристики режимов в обеих моделях. Результаты моделирования целесообразно использовать, например, при изучении нелинейных процессов тепломассообмена в новых энергетических устройствах.

В течение длительного времени в связи с многочисленными задачами тепломассообмена в физике, химии, биологии теоретически и экспериментально исследуются так называемые диссипативные структуры [1]. Такие структуры, как известно, образуются вследствие взаимодействия процессов переноса с источниками в открытых системах. Теоретические исследования диссипативных структур проводятся на основе системы нелинейных диффузионных уравнений с источниками (диффузионно-кинетические задачи) и описываются устойчивыми пространственно-неоднородными решениями системы. Как правило, в системе уравнений переносные процессы рассматриваются в линейном приближении с простейшей (диагональной с постоянными элементами) матрицей коэффициентов переноса, но источники фигурируют в виде сложных нелинейных зависимостей.

В последнее время появился ряд исследований вклада барнеттовских процессов переноса в различных газо- и гидродинамических задачах, о структуре ударных волн (см., например, [2]), распространении звука, термострессовой конвекции и т.п. Заметим, что в исследованиях, посвященных барнеттовскому приближению, не рассматривались эффекты взаимодействия переносных процессов с источниками.

Кроме перечисленных имеют место случаи, когда при моделировании тепломассообмена в среде с источниками следует принять во внимание сложную структуру диффузионной матрицы, т.е. учитывать ее недиагональность и нелинейность (см., например, [3]). При этом возникает необходимость учета барнеттовских вкладов в процессы переноса, так как вклады традиционных и барнеттовских членов в потоки как в разреженных средах (см., например, [2]), так и в плотных [4] могут быть сравнимы. Источник может иметь простой вид объемного тепловыделения, в частности, в двухэлементной среде пропорционального доле одного из элементов. Такое описание естественно использовать, например, при

моделировании взаимодействия переносных процессов с тепловыделением, связанным с ядерными реакциями, в полости газофазного ядерного реактора (ГЯР) [5].

Поэтому представляется актуальным исследование режимов тепломассообмена в средах с объемным тепловыделением, сложной структурой диффузионной матрицы в барнеттовском приближении при описании переносных процессов. Данное исследование позволит сопоставить характер тепломассообмена в традиционном приближении (когда потоки тепла, массы, импульса и заряда в среде линейно зависят от термодинамических сил) и в барнеттовском приближении. Это, в частности, определит степень „устойчивости“ традиционной модели тепломассообмена относительно усложнения описания переносных процессов.

Численный анализ традиционной и „барнеттовской“ моделей проведен в настоящей работе с помощью компьютерной программы для многопараметрического анализа, основанной на теории особенностей [6,7]. Технология параметрического анализа достаточно подробно описана в [6–8], поэтому остановимся подробнее на постановке задачи и результатах.

1. Рассмотрим традиционное и барнеттовское приближения единым образом так, чтобы традиционное приближение представляло собой частный случай в данном подходе. Выпишем систему уравнений сохранения в барнеттовском приближении. При физической формулировке задачи и выборе констант будем ориентироваться на условия, реализующиеся в полости ГЯР, которые подробно обсуждались в различных публикациях (см., например, [5,3,9] и ниже). Так, взаимодействие диффузионных процессов с объемным тепловыделением в полости ГЯР исследуем в приближении локального термодинамического равновесия с использованием эффективных коэффициентов переноса [3,10]. Для наглядности изучим двухэлементную среду (в отсутствие электрического и магнитного полей, электрического тока и при постоянном давлении). Тогда система уравнений (рассмотрим

плоский случай на отрезке $(0, l)$) состоит из уравнений движения, диффузии химического элемента (урана), создающего объемное тепловыделение, и уравнения энергии со следующими граничными условиями:

$$\begin{aligned} \rho_m \partial \mathbf{u} / \partial t &= -\operatorname{div} \pi, \quad u''(0) = 0, \quad u'(0) > 0 (< 0), \quad u(l) = u_1, \\ \rho_m \partial c / \partial t &= -\operatorname{div} \mathbf{J}_c, \quad c'(0) = 0, \quad c(l) = c_1, \\ \rho_m \partial \tilde{u} / \partial t &= -\operatorname{div} (\mathbf{J}_q + \mathbf{J}_R) + Ac, \quad T'(0) = 0, \quad T(l) = T_1. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь \mathbf{u} — массовая скорость, π — тензор вязких напряжений, c — доля урана в среде ($0 < c < 1$), член Ac соответствует объемному тепловыделению, $A > 0$ — константа, \mathbf{J}_c — массовый поток (химического элемента) урана в среде, \mathbf{J}_R и \mathbf{J}_q — лучистый и конвективный тепловые потоки соответственно, T и ρ_m — температура и плотность среды, \tilde{u} — внутренняя энергия. В плазме при параметрах, реализующихся в ГЯР, естественно пренебречь конвективным тепловым потоком по сравнению с лучистым потоком, поэтому выражение для теплового потока используем в форме

$$\mathbf{J}_R = -\lambda_R \nabla T, \quad (2)$$

где λ_R — лучистая теплопроводность, далее $\lambda_R > 0$ — const. Исследование системы проведем без учета конвективных и квадратичных по массовой скорости членов в уравнениях. Нелинейные и линеаризованные барнеттовские коэффициенты в потоках рассмотрим в виде, позволяющем получить компактные выражения без потери основных эффектов. В уравнении диффузии примем во внимание барнеттовский вклад, при этом массовый поток имеет вид (см., например, [4] и ссылки там)

$$\mathbf{J}_c = -D_c \nabla c - D^T \nabla T - \alpha \nabla^2 \mathbf{u}. \quad (3)$$

В соотношении (3) D_c и D^T — эффективные коэффициенты диффузии и термодиффузии, далее $D_c > 0$ — const. Поскольку эффективный коэффициент термодиффузии не имеет определенного знака [3,4], положим $D^T = \pm D_0^T c(1-c)$ с учетом естественного условия $D^T(c=0,1) = 0$, D_0^T — положительная константа. Знак „минус“ в выражении для эффективного коэффициента термодиффузии соответствует диффузии урана в область более высоких температур. В (3) α — линеаризованный барнеттовский кинетический коэффициент, для которого примем аппроксимацию $\alpha = \pm c(1-c)\alpha^0$ (по аналогии с эффективным коэффициентом термодиффузии, так как $\alpha(c=0,1) = 0$, $\alpha^0 > 0$ — const).

В уравнении движения удержим нелинейные барнеттовские члены в аппроксимациях, позволяющих разделить слагаемые с градиентами температуры и концентрации. Для плоской геометрии на отрезке $(0, l)$ выпишем стационарный вариант системы уравнений (1)

с учетом (2), (3)

$$\begin{aligned} \eta u'' + \beta_1 T'' + \beta_2 c'' &= 0, \\ D_c c' + D^T T' + \alpha u'' + K_1 &= 0, \quad K_1 = -u''(0)\alpha_1, \quad (4) \\ \lambda_R T'' + Ac &= 0, \\ c'(0) = T'(0) = 0, \quad c(l) = c_1, \quad T(l) = T_1, \\ u(l) = u_1, \quad u'(0) > 0 (< 0), \quad u''(0) = 0. \end{aligned}$$

Два последних условия соответствуют антисимметричному профилю скорости относительно начала координат. Барнеттовские коэффициенты $\{\beta\}$ ($>$ или < 0) — const, вязкость $\eta > 0$ — const. После преобразований система (4) может быть сведена к одному уравнению относительно доли c

$$\begin{aligned} 0 = [D_1 \lambda_R / D^T A l^2 c']' - c - (\alpha \lambda_R / D^T A l) [(\beta_1 / \eta)(-A / \lambda_R) c \\ + (\beta_2 / \eta l^2) c'']' + (K_1 \lambda_R / D^T A l)'. \end{aligned}$$

Или короче ($x = r/l$)

$$\begin{aligned} 0 = \mp k_1 [c' / c(1-c)]' - c \\ - (-k_2 c + k_3 c'')' + k_4 (1/c(1-c))', \quad (5) \\ c''(0) = c_0 c(0), \quad c'(0) = 0, \quad c(1) = c_1. \end{aligned}$$

Выражения для констант в (5) очевидны из сравнения двух последних уравнений. В (5) константа k_1 положительна, первые два члена в правой части представляют собой вариант задачи (1), (4) в традиционном приближении, т.е. при отсутствии барнеттовских вкладов в потоки. Остальные константы соответствуют барнеттовским членам и, вообще говоря, могут иметь различные знаки.

Уравнение (5) содержит 6 параметров k_1-k_4 , c_0 и c_1 . Если $k_3 = 0$, то третьи производные в уравнении отсутствуют и граничное условие со второй производной можно не учитывать. Поясним понятия, необходимые при исследовании (5) в пространстве допустимых параметров и соответствующую процедуру.

2. Пусть при фиксированных значениях параметров найдены решения уравнения (5) $c(x)$. Решение может быть единственным или таких решений может быть несколько. Если найти решения $c = c(x)$ при всех возможных значениях некоторого параметра (например, c_1), который будем называть бифуркационным при фиксированных остальных параметрах, то получится зависимость, в общем случае неоднозначная, $c(c_1)$ (под символом c понимается функция $c(x)$). Такая зависимость, называемая бифуркационной диаграммой (например, рис. 1, b), может состоять из регулярных точек, в которых решение в некоторой окрестности однозначно может быть продолжено по параметру c_1 , и точек бифуркации (значения бифуркационного параметра в точках бифуркации называются бифуркационными), где система является вырожденной (точки поворота) и число решений обычно меняется. В бифуркационных

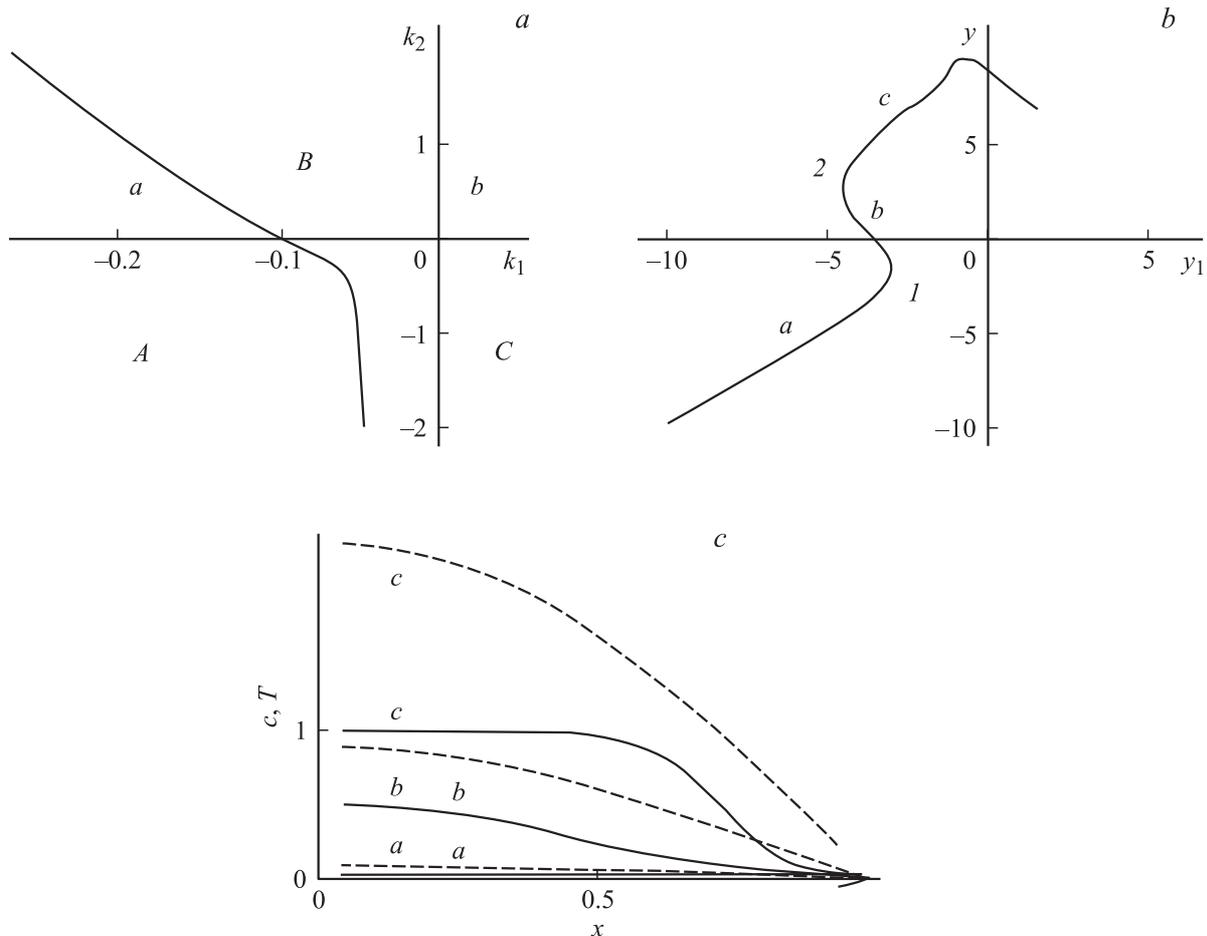


Рис. 1. Бифуркационная карта, примеры бифуркационных диаграмм и решений (5) для случая $k_3 \equiv 0$. *a* — бифуркационная карта; *b* — бифуркационная диаграмма $y(y_1)$ ($c = \exp(y)/(1 + \exp(y))$, $y \in (-\infty, +\infty)$) при $(-k_1, k_2) = (-0.05, 0)$ в традиционной модели, состоящая из трех ветвей *a*, *b* и *c* и двух точек бифуркации 1 и 2 (по вертикальной оси даны значения y при $x = 0$); *c* — профили концентраций и температуры при $k_3 \equiv 0$, $k_2 \equiv 0$ (в традиционной модели). Три решения (5) $c(x)$ (сплошные линии), $T(x)$ (штриховые линии) соответствуют нижней (*a*), средней (*b*) и верхней (*c*) точкам пересечения прямой $y_1 = -3.5$ ($c_1 = 0.0293$) с кривой на рис. 1, *b*.

диаграммах содержится информация о числе решений и об изменении состояния системы при варьировании бифуркационного параметра.

Вид бифуркационной диаграммы, вообще говоря, зависит от значений остальных параметров. Выберем переменными еще два параметра, например, k_1 и k_2 , которые назовем параметрами карты. Значения остальных параметров (в данном случае k_3, k_4, c_0) фиксированы. Выбирая различные точки на плоскости (k_1, k_2) и строя при таких значениях параметров бифуркационные диаграммы, получим различные графики. Другими словами, на плоскости (k_1, k_2) могут существовать границы, при переходе через которые на бифуркационных диаграммах могут появляться новые или исчезать прежде существовавшие точки бифуркации (см. рис. 1, *a*). Построение таких границ является информативным, так как структурирует пространство параметров. Структурирование пространства позволяет получить представление о возможных режимах исследуемой задачи (часто обо всех

возможных режимах) и определить, что именно и в какой области параметров следует искать. Если поменять значения фиксированных параметров, то получится другая бифуркационная карта. Можно также в качестве параметров карты выбрать другую пару параметров.

Множество бифуркационных значений бифуркационного параметра над плоскостью параметров карты образует некоторую поверхность. Сечения этой поверхности при фиксированных значениях одного из параметров карты дают представление о перемещении бифуркационных значений при варьировании другого параметра карты.

Рассмотренные выше понятия и вычислительные процедуры использованы при параметрическом анализе (5). Данный анализ производился численно путем аппроксимации уравнения (5) на сетке из 20 точек. При построении диаграмм, сечений и карт применен метод продолжения по параметру для достаточно сложной иерархии систем уравнений, построенной на основе тео-

рии особенностей (подробнее см. [6–8]). В дальнейшем положим $k_4 = 0$ (так как $u''(0) = 0$).

Сначала проанализируем (5) при $k_3 \equiv 0$, в этом случае бифуркационная карта (k_1, k_2) уравнения имеет вид (см. рис. 1, *a*; слева от нуля по оси k_1 берется верхний знак в (5), справа — нижний). Бифуркационная карта (k_1, k_2) состоит из трех областей *A*, *B* и *C*, границами которых являются линии *a* и *b*. В области *A* рис. 1, *a* (слева от кривой *a*) бифуркационная диаграмма $c(c_1)$ однозначна. В промежутке между линиями *a* и *b* в области *B* на бифуркационной диаграмме существует интервал по переменной c_1 , в котором на зависимости $c(c_1)$ существуют две точки поворота, в промежутке между которыми одному значению c_1 соответствуют три значения $c(0)$ (рис. 1, *b*). В области *C* зависимость $c(c_1)$ однозначна. На рис. 1, *b* приведен пример *S*-образной диаграммы $c(c_1)$ для области *B* (когда $k_3 = 0$ и $k_2 = 0$ на рис. 1, *a*), в областях *A* и *C* диаграммы монотонны. При верхнем знаке при k_1 в (5) на бифуркационной диаграмме существуют две точки бифуркации 1 и 2. При увеличении k_1 по абсолютной величине, примерно при $k_1 = -0.1$, бифуркации сливаются и исчезают. Заметим, что данный частный случай соответствует традиционному приближению при описании тепломассообмена в полости ГЯР, когда барнеттовские вклады в потоки не учитываются ($\alpha, \{\beta\} = 0$ и $k_2, k_3 = 0$ — см. выше). Определено, что традиционная модель описания процессов тепломассообмена в полости ГЯР устойчива относительно параметра k_2 , т. е. решения (5) при $k_2 \rightarrow 0$ справа или слева стремятся к решениям при $k_2 = 0$. Можно показать, что если третье уравнение системы (1) быстро подстраивается под медленно меняющееся решение второго уравнения, то ветвь *b* неустойчива, ветви *a* и *c* устойчивы (и наоборот). На рис. 1, *c* приведены графики решений $c(x)$ уравнения (5) при $k_3 = 0, k_2 = 0$ (в традиционной модели): три стационара, соответствующие точкам пересечения прямой $y_1 = -3.5$ с кривой на рис. 1, *b*. На этом же рисунке приведены профили температуры (в традиционной модели стационарные профили концентраций и температуры связаны простым соотношением, как это следует из (4) при заданной аппроксимации D^T). Стационарный профиль (*b*), соответствующий точке пересечения прямой с ветвью *b*, неустойчив, а стационарные профили (*a*) и (*c*) — устойчивы. Заметим, что резкое различие значений $c'(1)$ и $T'(1)$ для устойчивых решений определяет существенное отличие тепловых режимов, реализующихся в полости реактора (так как тепловые потоки на ограничивающие поверхности полости реактора определяются значениями производных профиля температуры на границе).

Рассмотрим далее случай $k_3 \neq 0$. На рис. 2 изображена бифуркационная карта (k_1, k_3) при $k_2 \equiv 0$ и нижнем знаке при k_1 в (5), $k_3 < 0$. Граница *a* разделяет квадрант $k_1, k_3 < 0$ на две части *A* и *B*. При переходе через эту границу из области *A* в область *B* бифуркационные диаграммы резко меняются. Вид графиков существенно усложняется по сравнению со случаем $k_3 \equiv 0$. Можно

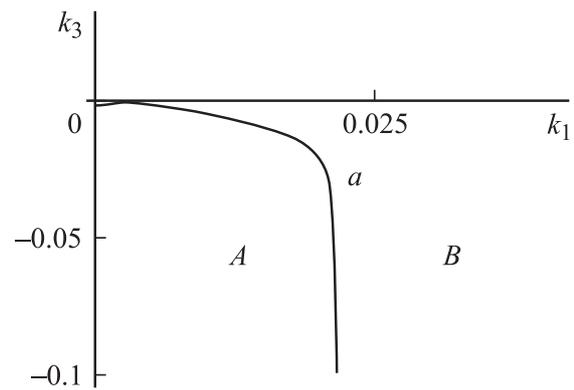


Рис. 2. Бифуркационная карта на плоскости (k_1, k_3) в квадранте $k_1, k_3 < 0$ при $k_2 = 0, c_0 = 0$.

показать, что традиционная модель, вообще говоря, неустойчива относительно включения параметра k_3 .

В случае $k_2, k_3 \neq 0$ картина качественно меняется по сравнению с рис. 1 и 2, как показано на рис. 3. При этом рис. 3, *a* и *b* аналогичны рис. 1, *a* и *b* соответственно (значение k_3 фиксировано и равно -0.05). Очевидно, разбиение плоскости (k_1, k_2) не имеет ничего общего с аналогичным разбиением при $k_3 \equiv 0$ (рис. 1, *a*). Включение k_3 качественно меняет картину, так как при этом меняется порядок уравнения (5). Естественно, что карты, сечения и диаграммы могут резко меняться и при изменении k_3 .

Итак, для выяснения особенностей поведения решений (5) построены карты, сечения и бифуркационные диаграммы $c(c_1)$ для двух случаев $k_3 = 0, k_2 = 0$. Исследовано изменение этих графиков при варьировании параметров карты (k_1, k_2) или (k_1, k_3) соответственно. Определено, как воздействует по отдельности включение параметра k_2 или параметра k_3 . Приведен также пример бифуркационной карты (k_1, k_2) при $k_3 \neq 0$. Анализ бифуркационных диаграмм для уравнения (5) показывает увеличение числа возможных тепловых режимов в „барнеттовском“ приближении по сравнению с их количеством в традиционной модели ($k_3 \equiv 0, k_2 \equiv 0$). Показано, что традиционная модель описания процессов тепломассообмена в полости ГЯР устойчива относительно включения k_2 (так как при включении данного параметра остается столько же решений и с теми же свойствами, как и при $k_2 \equiv 0$). При включении параметра k_3 вид карт, сечений и диаграмм качественно усложняется. Однако и при $k_3 \neq 0$ задача также устойчива относительно включения k_2 .

Заметим, что значения параметров, использованных при построении рисунков, соответствуют реалистическим значениям теплофизических свойств вещества в полости ГЯР, в частности, барнеттовских кинетических коэффициентов и параметра тепловыделения *A* [3–5,9] (см. (1)).

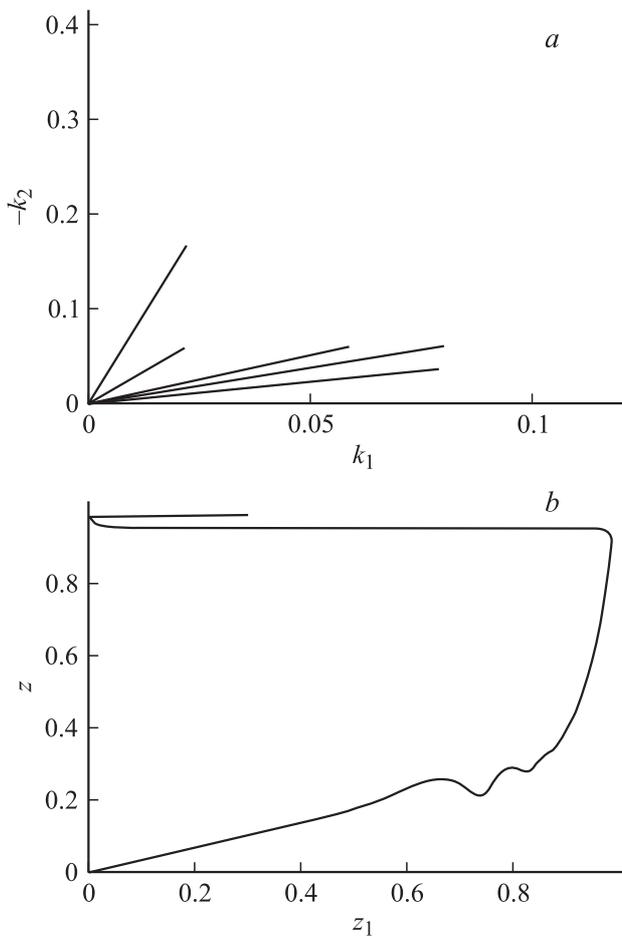


Рис. 3. Бифуркационная карта (k_1, k_2) и пример бифуркационной диаграммы при $k_3 \neq 0$. *a* — бифуркационная карта, разбиение полуплоскости (k_1, k_2) (при нижнем знаке при k_1 в (5), $k_3 = -0.05$, $c_0 = 0.1$) на области с качественно различными бифуркационными диаграммами $c(c_1)$; *b* — бифуркационная диаграмма $z(z_1)$ при нижнем знаке при k_1 в (5) $(k_1, k_2, k_3) = (0.07, -0.05, -0.05)$; $c = 1 - (1 - z)^3$, $z \in (0, 1)$, по вертикальной оси даны значения z при $x = 0$, $c_0 = 0.1$.

Обсудим подробнее модель взаимодействия переносных процессов с объемным тепловыделением (1)–(4) (сравни с [10]), поскольку в последнее время возрождается интерес к ГЯР как к устройству, которое может быть применено в межпланетных перелетах и в наземных энергетических установках. Как известно, вещество в полости ГЯР находится при высоких температурах и давлениях (до нескольких десятков тысяч градусов и тысяч атмосфер), т.е. в состоянии многокомпонентной плазмы с сильным межчастичным взаимодействием. Для сред с сильным межчастичным взаимодействием (неидеальных сред) теплофизические константы в системе уравнений сохранения обладают рядом особенностей (см., например, [3–5,9]). Так, условие параболичности матрицы при старших производных, которое традиционно используется при анализе диффузионно-кинетических задач, для неидеальных сред не выполняется автома-

тически при расчетах теплофизических констант [3]. Выполнение данного условия обеспечивают корректные подходы к расчету соответствующих термодинамических констант. Кроме того, многокомпонентность плазмы и как следствие этого необходимость использования обширного массива теплофизической информации затрудняют адекватное моделирование процессов в полости реактора даже в простейшей геометрии. Поэтому система уравнений сохранения формулируется относительно химических элементов, образующих плазму в полости реактора, количество которых существенно меньше, чем компонентов. Соответствующее сокращение числа уравнений диффузии и массива констант корректно проводится с помощью эффективных коэффициентов переноса [3]. Данный прием позволяет исключить межкомпонентные реакции из рассмотрения и принять во внимание „ядерные“ реакции. Перечисленные особенности описания процессов в полости ГЯР относятся к традиционному подходу, когда потоки тепла, массы, импульса и заряда в среде линейно зависят от термодинамических сил. Использование эффективных коэффициентов переноса также возможно и в барнеттовском приближении (см. (4) — вязко-диффузионный коэффициент α).

Таким образом, установлено, что знаковая неопределенность эффективного коэффициента термодиффузии (его отрицательность — см. (3)) в среде с объемным тепловыделением и является причиной многообразия тепловых режимов при моделировании (в традиционной постановке) тепломассообмена в полости ГЯР. Рассмотрен симметричный плоский случай. Найдены условия, при которых тепловые режимы (потоки) из-за разности градиентов на границе резко (в разы) отличаются. Такое отличие подчеркивает важность учета взаимодействия процессов диффузии и тепловыделения при исследовании процессов тепломассообмена в полости ГЯР.

Показано, что включение барнеттовских кинетических коэффициентов в различных комбинациях в задачу о тепловых режимах приводит к качественному усложнению характера режимов и при положительном коэффициенте термодиффузии (нижнем знаке при k_1 в (5)). Причем устойчивость традиционной модели зависит от того, какой барнеттовский кинетический коэффициент учтен в (1), (4) наряду с вязко-диффузионным коэффициентом α . Определено, что традиционная модель устойчива, если принят во внимание термовязкий коэффициент β_1 (параметр k_2) и неустойчива относительно использования диффузионно-вязкого коэффициента β_2 (параметр k_3). В целом результаты работы дают информацию о поведении тепловых режимов в средах с объемным тепловыделением в широком диапазоне параметров и служат исходными данными при расширении пространства изучаемых параметров и выборе наиболее интересной области в этом пространстве для подробного исследования.

Список литературы

- [1] Пригожин И. От существующего к возникающему / Пер. с англ., М.: Наука, 1985.
- [2] Галкин В.С., Русаков С.В. // ПММ. 2005. Т. 69. С. 419.
- [3] Pavlov G.A. Transport processes in plasmas with strong Coulomb interactions. Amsterdam: Gordon&Breach, 2000. 200 p.
- [4] Павлов Г.А. // ЖТФ. 2011. Т. 81. Вып. 11. С. 7–12.
- [5] Иевлев В.М. // Изв. АН СССР. Сер. Энергетика и транспорт. 1977. № 6. С. 24.
- [6] Трощев Ю.В. // Математическое моделирование. 2005. Т. 17. № 1. С. 10–18.
- [7] Еленин Г.Г., Трощев Ю.В. Программа для бифуркационного анализа нелинейных задач АРИАДНА. Версия ag98. Ч. 1. М. Препринт Диалог-МГУ (з.1130). 1997. 21 с.
- [8] Еленин Г.Г., Трощев Ю.В. // Математическое моделирование. 1999. № 5. С. 126–127.
- [9] Теплофизические свойства рабочих сред газофазного ядерного реактора / Под ред. В.М. Иевлева. М.: Атомиздат, 1980. 200 с.
- [10] Павлов Г.А., Ширяев А.А. // Письма в ЖТФ. 1983. Т. 9. № 21. С. 1301–1305.