

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ИНСТИТУТ
ПРОБЛЕМ БЕЗОПАСНОГО
РАЗВИТИЯ АТОМНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ

RUSSIAN ACADEMY OF
SCIENCES
NUCLEAR
SAFETY INSTITUTE

Препринт № IBRAE-97-17

Preprint IBRAE-97-17

А. Е. Аксенова, В. А. Первичко, В. Н. Семенов, В. В. Чуданов

**НЕКОТОРЫЕ МОДЕЛИ
ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ
ЗАДАЧ ДИФфуЗИИ/КОНВЕКЦИИ
С УЧЕТОМ МАКРОСЕГРЕГАЦИИ И
СТРАТИФИКАЦИИ**

Москва
1997

Moscow
1997

Аксенова А.Е., Первичко В.А., Семенов В.Н., Чуданов В.В. НЕКОТОРЫЕ МОДЕЛИ ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ДИФФУЗИИ/КОНВЕКЦИИ С УЧЕТОМ МАКРОСЕГРЕГАЦИИ И СТРАТИФИКАЦИИ. Препринт № ИБРАЭ-97-17. Москва: Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН, 1997. 19 с.

Аннотация

В работе обсуждаются некоторые подходы к численному моделированию поведения многокомпонентного расплава топлива в реакторе при тяжелой аварии. Рассматривается модель согласованной тепловой и концентрационной конвекции с учетом фазовых превращений в предположении термодинамического равновесия и приводятся результаты численных расчетов для упрощенной постановки. Дается классификация подходов для моделирования многофазных течений и рассматриваются некоторые возможные многожидкостные модели.

©ИБРАЭ РАН, 1997

Aksenova A.E., Pervichko V.A., Semenov V.N., Chudanov V.V. SOME MODELS FOR THE NUMERICAL SOLVING OF DIFFUSION/CONVECTION PROBLEMS TAKING ACCOUNT OF MACROSEGREGATION AND STRATIFICATION. (in Russian). Preprint IBRAE-97-17. Moscow: Nuclear Safety Institute, November 1997. 19 p.

Abstract

The some approaches for the numerical simulation of multicomponent molten corium behaviour under severe accident in reactor are discussed. Thermal-concentration convection model taking account of phase changes in thermodynamic equilibrium approximation is considered. Results for the simplified setting are reported. Classification of approaches for the modelling of the multiphase flows is given and the some possible multifluid models are considered.

Некоторые модели для численного решения задач диффузии/конвекции с учетом макросегрегации и стратификации

А.Е. Аксенова, В.А. Первичко, В.Н. Семенов, В.В. Чуданов

ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ БЕЗОПАСНОГО РАЗВИТИЯ АТОМНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ

113191 Москва, ул. Б.Тулльская, 52

тел.. (095) 952–24–21, факс: (095) 230–20–29, эл. почта: pbl@ibrae.msk.su

1 Введение

Многофазные течения существенны для широкого круга задач, включающих поведение капель и аэрозолей, горение топлива, образование кокса, сажи и дыма, дождь и процессы осаждения, а также поведение многокомпонентного расплава топлива в реакторе при тяжелой аварии. Отличительные характеристики перечисленных выше задач делают невозможным использование единого подхода к многофазному моделированию. В результате образуется много не связанных научных групп, каждая из которых использует собственные формулировки и приближения.

Численно рассматривать многофазные системы каким-либо детальным способом, подобным газофазным системам, — задача совершенно не подъемная. Поэтому широкое развитие получили упрощенные вычислительные модели. Один из подходов состоит в упрощении уравнений, основанных на хорошо изученных предположениях о системе. Тем не менее, даже написать полностью согласованную систему уравнений очень трудно. Другой подход — феноменологический — сводится к перенесению важных физических свойств системы на простые модели динамики жидкости. Однако использование такого подхода может приводить к упущению из вида важных условий взаимодействия. В общем случае решение о том, что рассматривать на основе первых принципов, а что представлять с помощью упрощающей феноменологии, часто не очевидно.

Существуют многочисленные обзоры основных уравнений и приближений, используемых в многофазных течениях. Среди них следует отметить статью Стюарта и Вендрофа [1], посвященную обсуждению численных методов для двухфазных задач, несколько обобщающих работ по многофазным течениям Ишии [2] и Су [3, 4], в которых представлены уравнения для многокомпонентной жидкости, а также труды конференции по многофазным системам под редакцией Алпера [5], посвященные практическим вопросам решения проблемы многофазных течений.

2 Моделирование согласованной тепловой и концентрационной конвекции в расплаве кориума с учетом квазибинарной фазовой диаграммы

Одним из возможных подходов к моделированию фазовых превращений в кориуме, представляющем собой сложную многокомпонентную смесь оксидных и металлических составляющих активной зоны реактора является использование модели термо-концентрационной конвекции с фазовой диаграммой для бинарной смеси.

Обзор основных подходов к решению данной проблемы подробно представлены в работе [6]. Кратко отметим некоторые особенности моделирования процессов плавления/затвердевания в бинарных смесях:

- В отличие от фазовых изменений в чистых материалах, которые происходят при определенной температуре, фазовые превращения в сложных (бинарных) веществах, определяются температурным диапазоном.
- Если в чистых материалах выделяют два состояния вещества. твердое и жидкое, разделенные почти плоским фронтом, то в бинарных — три: твердое, жидкое и mushy область, представляющую собой твердо-жидкую область со сложной границе раздела. Теплоперенос в такой области существенно сложнее в сравнении с переносом тепла в чисто твердом или чисто жидком материалах, поскольку связан с изменением концентрации примеси, входящей в вещество, как в твердой так и в жидкой фазе, через фазовую диаграмму

Система уравнений для описания процесса затвердевания двухфазной смеси имеет вид:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{v}) + \nabla(\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = -\nabla P + \nabla(\mu_l \frac{\rho}{\rho_l} \nabla \mathbf{v}) + \rho \mathbf{g} - \frac{\mu_l}{K} \frac{\rho}{\rho_l} (\mathbf{v} - \mathbf{v}_s), \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \nabla(\rho \mathbf{v} h) = \nabla(k \nabla T) - \nabla[\rho(h_l - h)(\mathbf{v} - \mathbf{v}_s)], \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho C) + \nabla(\rho \mathbf{v} C) = \nabla(\rho f_l D_l \nabla C) + \nabla[\rho f_l D_l \nabla(C_l - C)] - \nabla[\rho(C_l - C)(\mathbf{v} - \mathbf{v}_s)], \quad (4)$$

В приведенной системе уравнений (1)-(4) параметры смеси ρ , \mathbf{v} , h , k , C , обозначающие соответственно плотность, скорость, энтальпию, коэффициент теплопроводности и концентрации, определяются из соотношений, связывающих компоненты твердой s и жидкой l фаз:

$$\rho = r_s \rho_s + r_l \rho_l, \quad (5)$$

$$\mathbf{v} = f_s \mathbf{v}_s + f_l \mathbf{v}_l, \quad (6)$$

$$h = f_s h_s + f_l h_l, \quad (7)$$

$$k = r_s k_s + r_l k_l, \quad (8)$$

$$C = f_s C_s + f_l C_l \quad (9)$$

Обозначения f_l , f_s и r_l , r_s в представленной модели использованы для массовой и объемной долей жидкой и твердой фаз, которые связаны между собой следующими соотношениями:

$$f_s = \frac{\rho_s r_s}{\rho}, \quad (10)$$

$$f_l = \frac{\rho_l r_l}{\rho}, \quad (11)$$

$$f_s + f_l = 1, \quad (12)$$

$$r_s + r_l = 1. \quad (13)$$

Остальные параметры системы уравнений (1)-(4) t , P , μ , \mathbf{g} , K , D_l обозначают соответственно время, давление, коэффициент динамической вязкости, вектор силы тяжести, проницаемость и коэффициент диффузии примеси в жидкой фазе.

Для замыкания приводимой выше системы уравнений необходимы также соотношения энтальпия-температура

$$h_l = \bar{c}_{pl} T + L, \quad \bar{c}_{pl} = \frac{1}{T} \int_0^T c_{pl} dT, \quad (14)$$

$$h_s = \bar{c}_{ps}T, \quad \bar{c}_{ps} = \frac{1}{T} \int_0^T c_{ps} dT, \quad (15)$$

где c_{pl} — удельная теплоемкость жидкой фазы, L — скрытая теплота фазовых превращений, c_{ps} — удельная теплоемкость твердой фазы.

Кроме того, потребуются также термодинамические уравнения, связывающие массовые доли и концентрации жидкой и твердой фаз, полученные из фазовой диаграммы:

$$f_l = 1 - \frac{1}{1 - k_p} \frac{T - T_{liq}}{T - T_m}, \quad (16)$$

$$C_l = \frac{C}{1 + (1 - f_l)(k_p - 1)}, \quad (17)$$

$$C_s = \frac{k_p C}{1 + (1 - f_l)(k_p - 1)}, \quad (18)$$

где использованы обозначения k_p для коэффициента равновесия фаз, равного C_s/C_l , T_m для температуры смеси и T_{liq} для ликвидус температуры, вычисляемой из соотношения

$$T_{liq} = T_m + (T_e - T_m)C/C_e, \quad (19)$$

где индекс e указывает на принадлежность параметра эвтектической точке на фазовой диаграмме.

Решение полной системы уравнений (1)-(4) требует значительных вычислительных затрат, поэтому делаются упрощающие предположения, например, такие:

- плотности твердой и жидкой фаз постоянны и равны: $\rho_l = \rho_s = \rho$;
- удельная теплоемкость твердой и жидкой фаз постоянны, но не равны: $c_{pl} \neq c_{ps}$,
- скорость твердой фазы равна нулю. $\mathbf{v}_s = 0$.

С учетом сделанных предположений упрощенная система уравнений для описания процесса затвердевания сложного материала при условии термо- концентрационной конвекции выглядит следующим образом:

$$\nabla \mathbf{v} = 0, \quad (20)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla(\mathbf{v}\mathbf{v}) = -\nabla P + \nabla(\nu_l \nabla \mathbf{v}) + g[\beta_T(T - T_0) + \beta_C(C_l - C_0)] - \frac{\nu_l}{K} \mathbf{v}, \quad (21)$$

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \nabla(\mathbf{v}h) = \nabla\left(\frac{\kappa}{c_p} \nabla T\right) + S_q, \quad (22)$$

где h — энтальпия, определяемая согласно соотношению

$$h = \int_0^T \bar{c}_p(T) dT, \quad \bar{c}_p = f_s \bar{c}_{ps} + f_l \bar{c}_{pl},$$

а S_q — объемное тепловыделение.

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla(\mathbf{v}C) = \nabla(f_l D_l \nabla C) + S_C, \quad (23)$$

где

$$S_C = \nabla[f_l D_l \nabla(C_l - C)] - \nabla[\mathbf{v}(C_l - C)].$$

Остальные величины входящие в приведенные выше соотношения обозначают соответственно: ν — кинематическая вязкость, β_T — коэффициент теплового расширения, β_C — коэффициент концентрационного расширения.

Ниже представлены результаты численного моделирования задачи согласованной тепловой и концентрационной конвекции, полученные с помощью CONV2D кода, для материала с фазовой диаграммой вида (см. Рис. 1):

Для того, чтобы продемонстрировать влияние учета концентрации на основные характеристики задачи проводится сопоставление расчетов, в которых одновременно учитывается

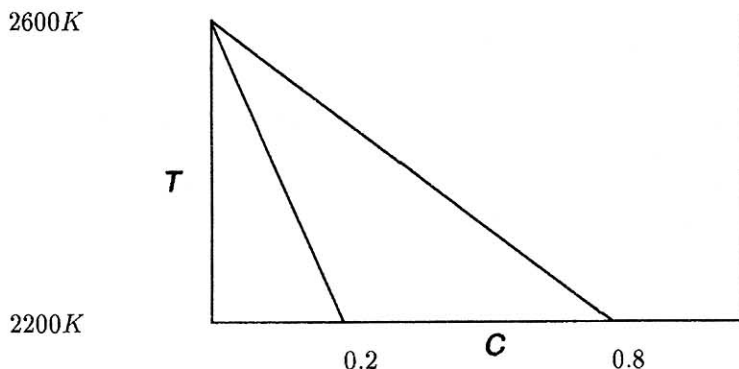


Рис. 1: Фазовая диаграмма

тепловая и концентрационная конвекция с результатами, полученными при учете только конвекции за счет тепла. Сравниваются варианты с различными граничными условиями на верхней поверхности расчетной области, а именно, рассматриваются адиабатический и изотермический случаи.

На рисунке 2 показаны поля температур для теплового модифицированного числа Релея $Ra_q = 10^{12}$ и незначительного в сравнении с ним концентрационного Релея Ra_C для изотермического случая. Сопоставление температурных полей демонстрирует появление тонкого концентрационного погранслоя в расчете с учетом концентрации и подавление конвекции вблизи названного слоя.

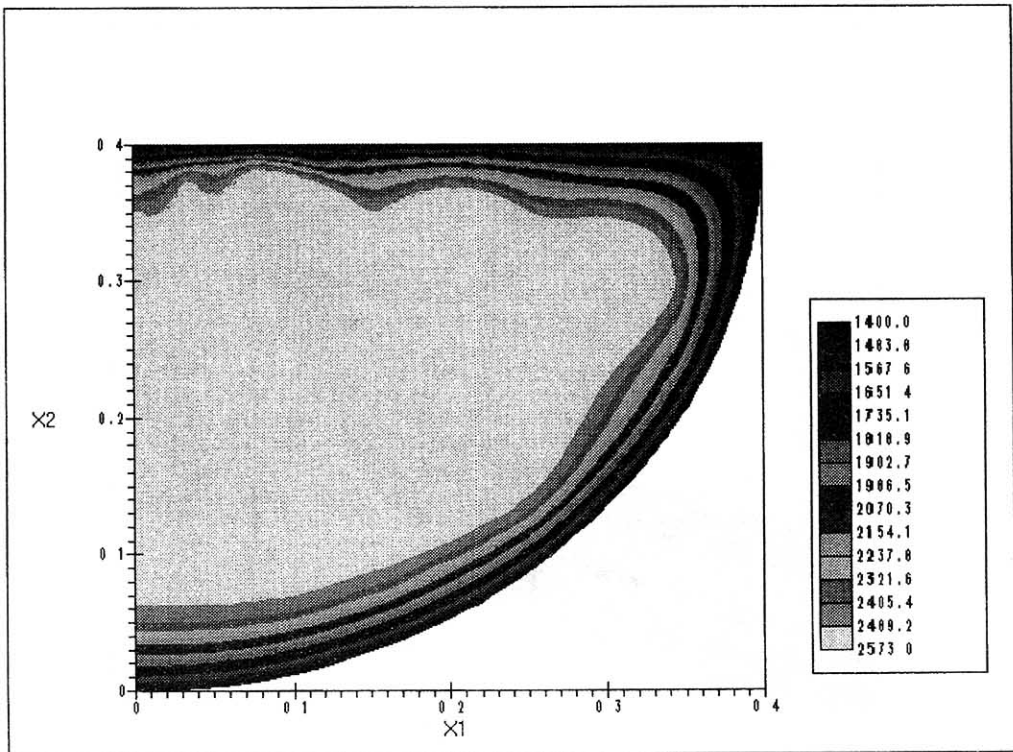
На рисунке 3 представлены поля температур для расчета с адиабатической верхней границей. Подобно изотермическому случаю, мы можем наблюдать здесь влияние концентрации, в виде появления концентрационного погранслоя и подавления конвекции вблизи него.

Изменение массовой доли примеси в жидкой фазе для изотермического и адиабатического случая показано соответственно на рисунках 4 и 5. Массовая доля демонстрирует наличие mushy области. Область, где значение $f_l = 1$ является жидкой, там где $f_l = 0$ — твердой. В области, где f_l лежит в диапазоне от нуля до единицы, присутствует mushy зона. Поскольку массовая доля в твердой фазе ведет себя аналогично, но с точностью до наоборот, т.к. $f_s = 1 - f_l$, мы ее не приводим.

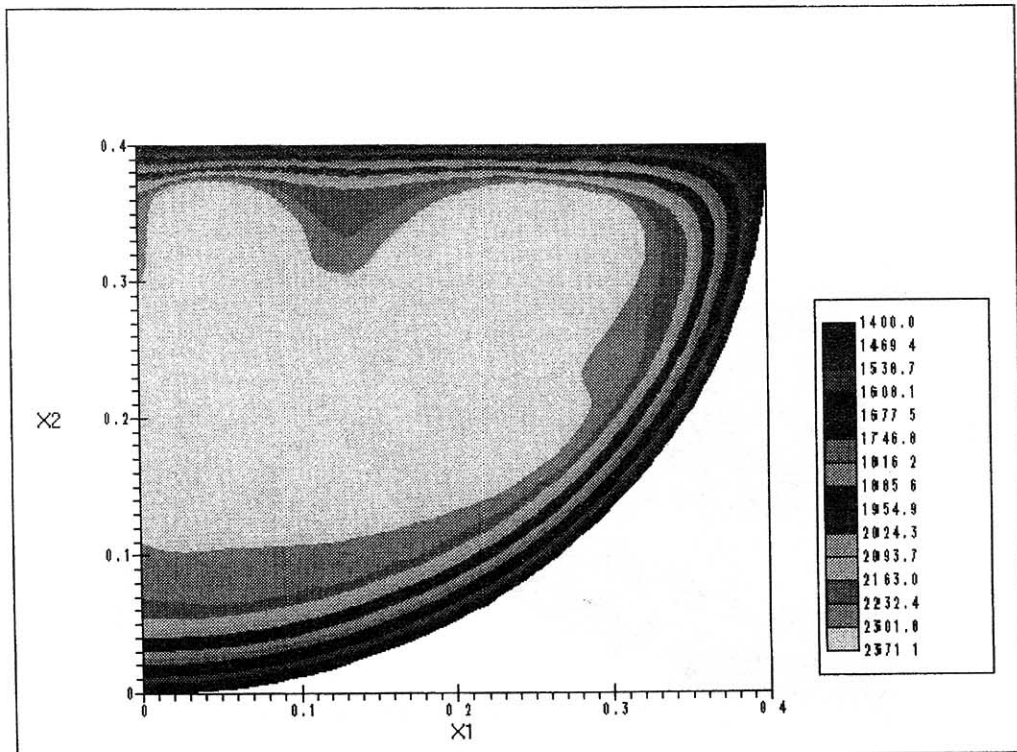
Следующей особенностью расчетов учитывающих концентрацию является изменение динамики охлаждения расплавленной области по сравнению с неконцентрационными вариантами. Так, на рисунке 6 представлены изменения со временем максимальной температуры расплавленной области для изотермического и адиабатического случаев. В обоих случаях наблюдается замедление динамики охлаждения расплавленной области при учете концентрации по сравнению с вариантом, в котором концентрация не рассматривается.

Подобно максимальной температуре расплавленной области ведет себя и, тесно связанный с указанной характеристикой, объем жидкой фазы. На рисунке 7 представлено изменение со временем доли жидкой фазы для изотермического и адиабатического вариантов расчета. И в том и в другом случае сокращение доли жидкой фазы происходит медленнее в концентрационном расчете по сравнению с расчетом, где рассматривается только тепловая конвекция.

И наконец, необходимо обратить внимание на изменение плотности теплового потока, проходящего через нижнюю границу вычислительной области, в зависимости от угла ϕ (см. Рис. 8).

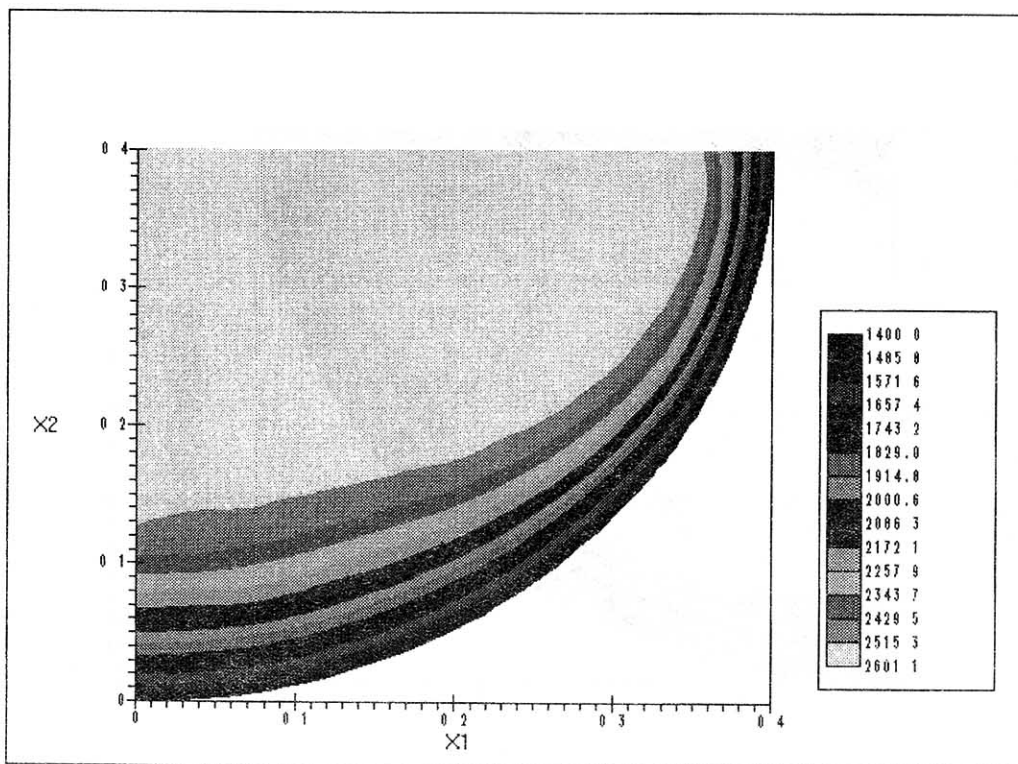


а) с учетом концентрации

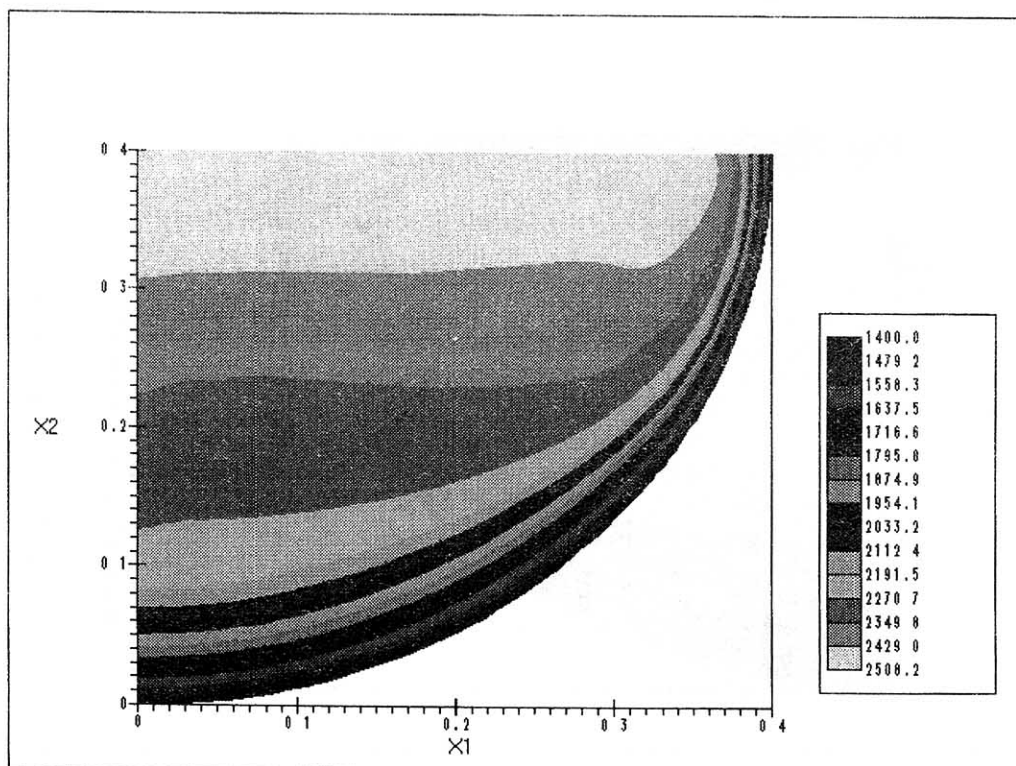


б) без учета концентрации

Рис. 2: Поля температур. Изотермический случай

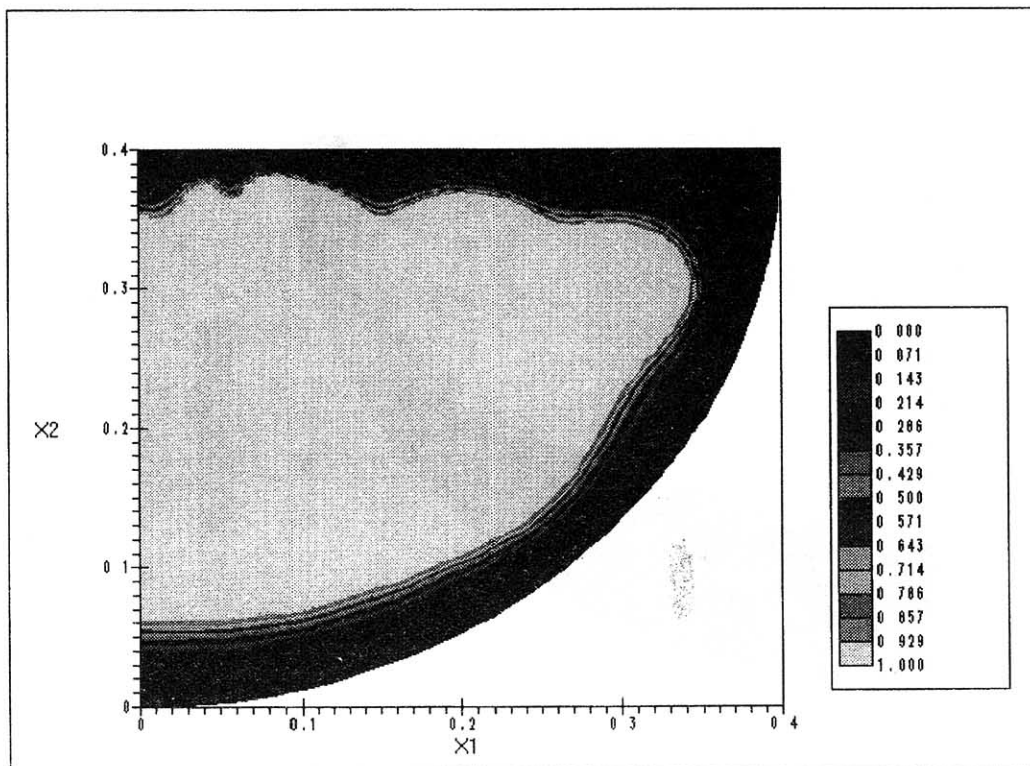


а) с учетом концентрации

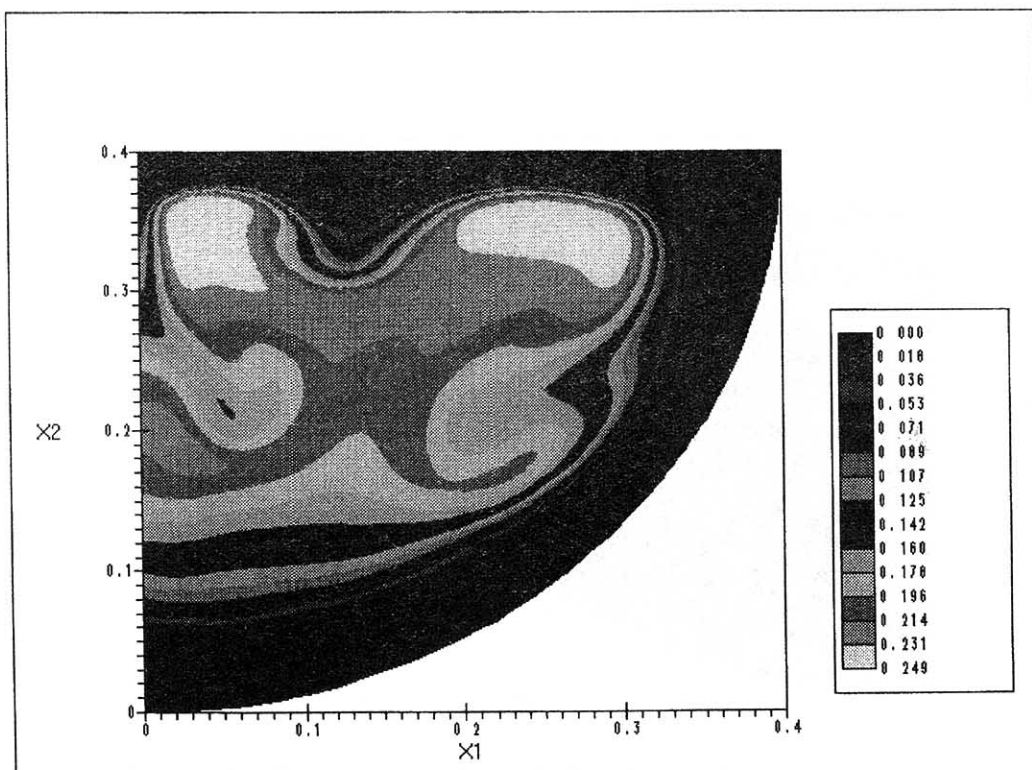


б) без учета концентрации

Рис. 3: Поля температур. Адиабатический случай

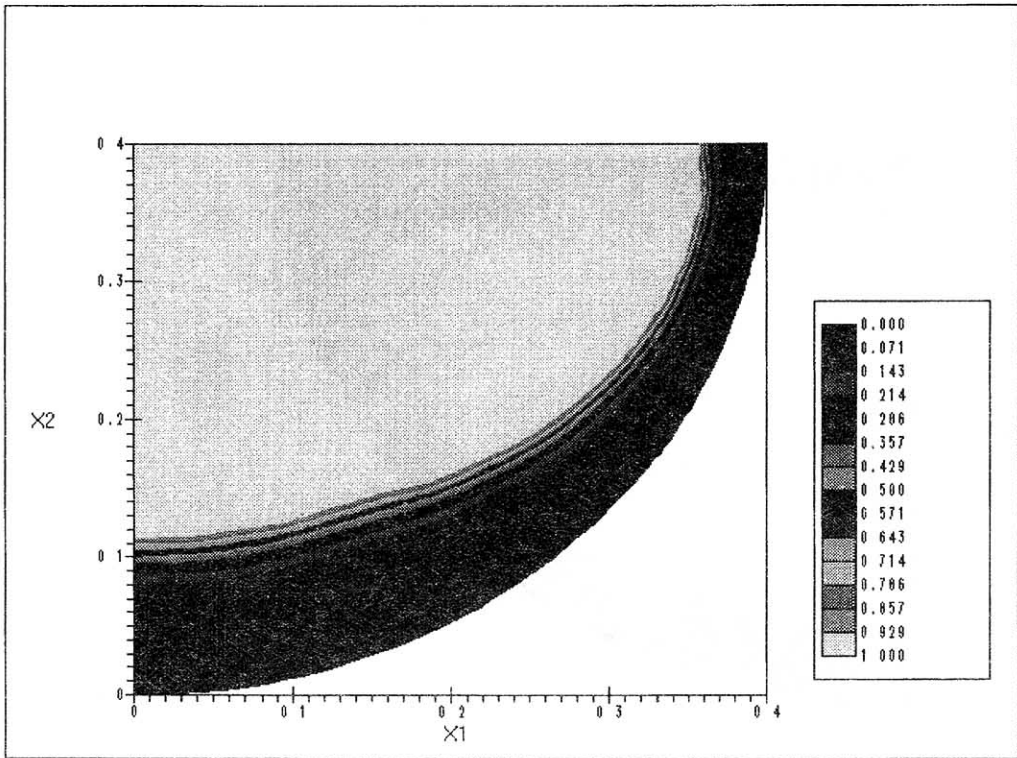


а) с учетом концентрации

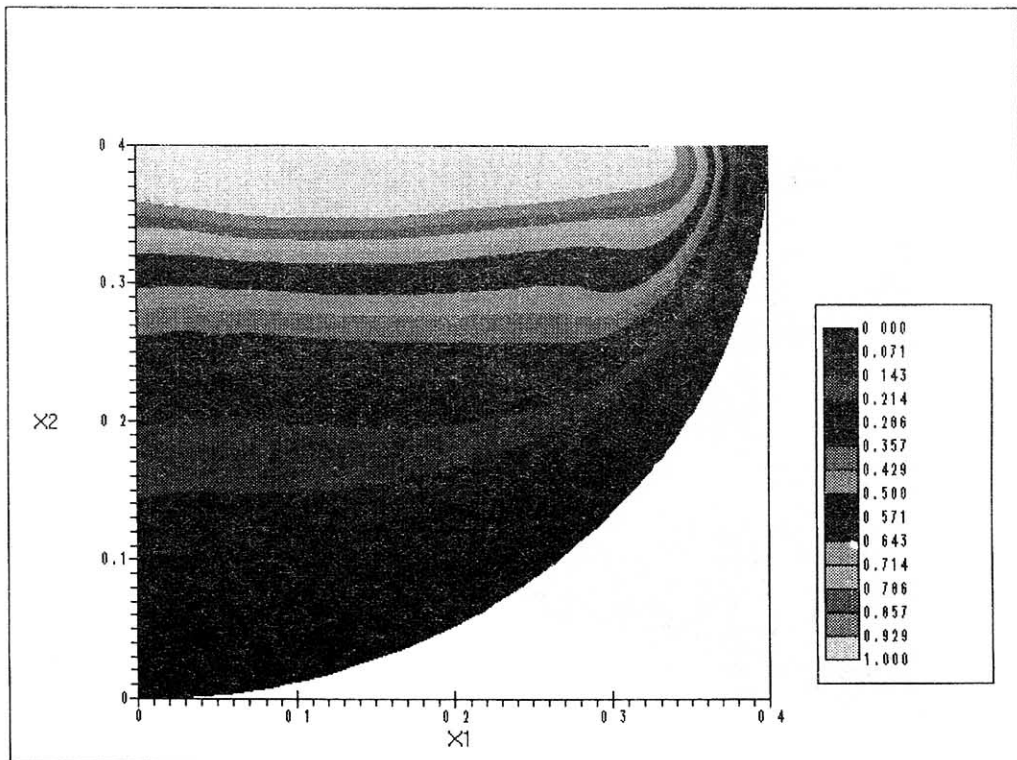


б) без учета концентрации

Рис. 4: Массовая доля жидкой фазы. Изотермический случай

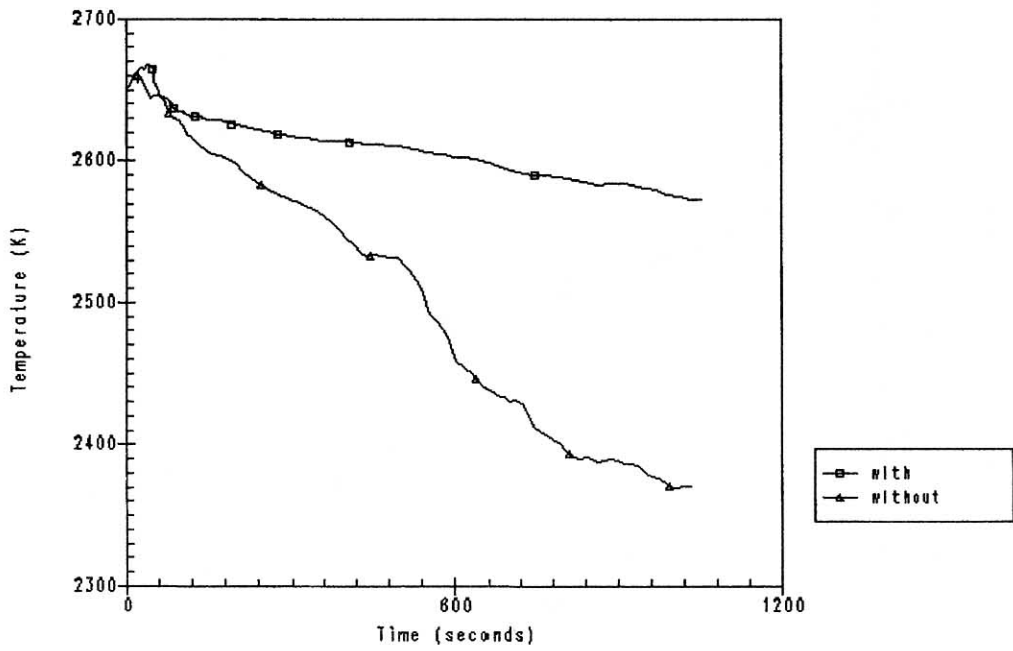


а) с учетом концентрации

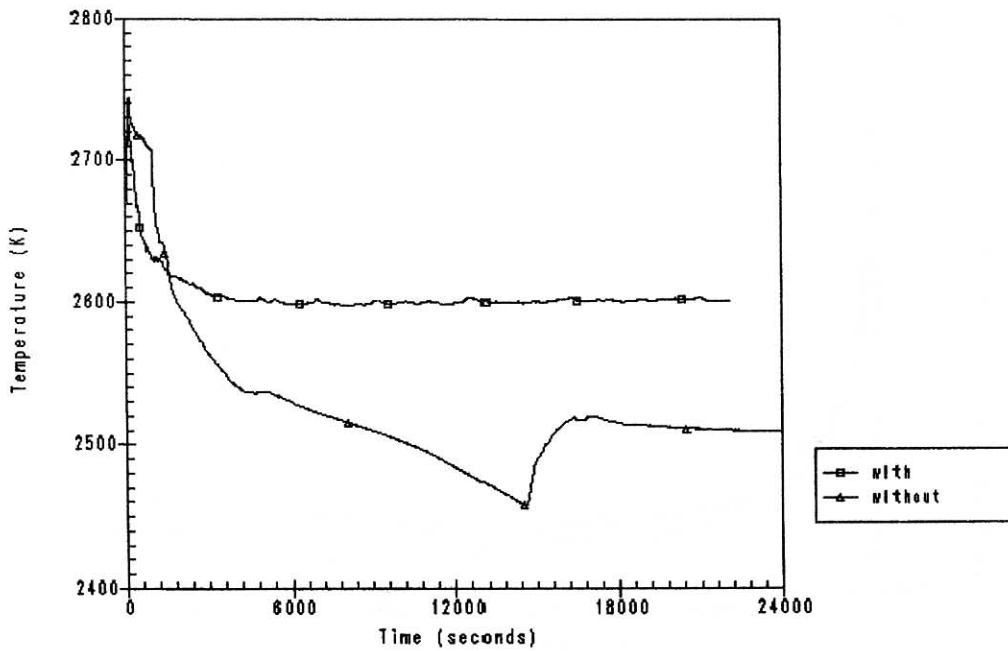


б) без учета концентрации

Рис. 5: Массовая доля жидкой фазы. Адиабатический случай

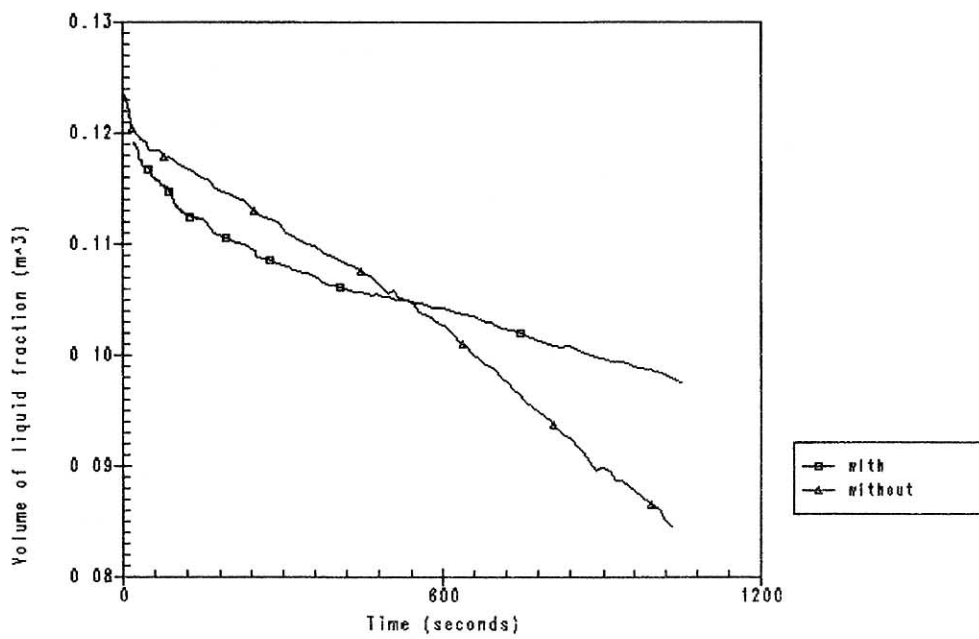


а) Изотермический случай

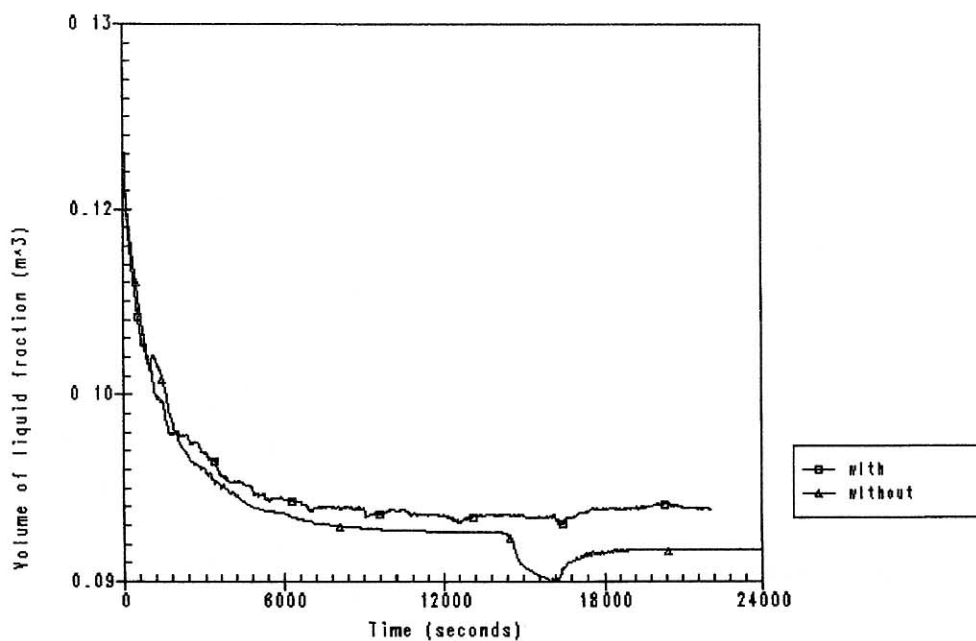


б) Адиабатический случай

Рис. 6: Максимальная температура расплавленной области

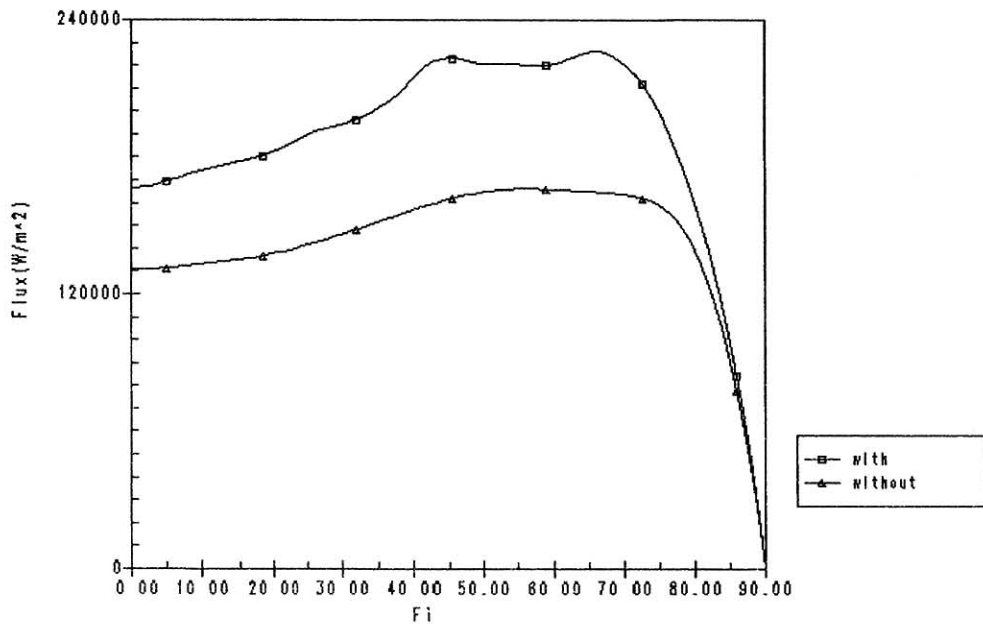


а) Изотермический случай

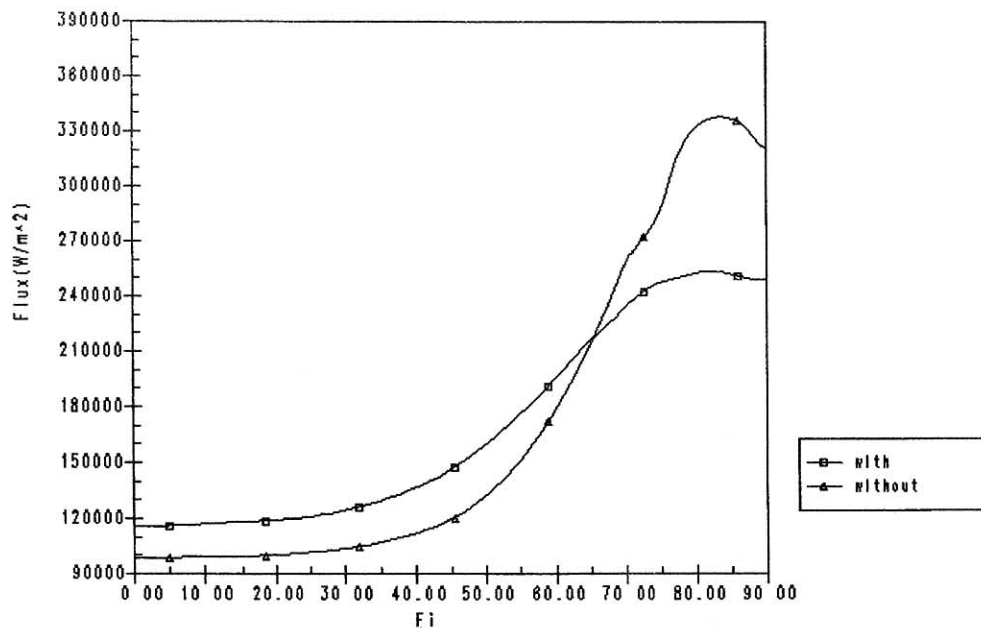


б) Адиабатический случай

Рис. 7: Изменение доли жидкой фазы со временем



а) Изотермический случай



б) Адиабатический случай

Рис. 8: Распределение потока через нижнюю границу в зависимости от угла

В изотермическом случае максимальная плотность теплового потока на нижней границе достигается в концентрационном расчете и составляет порядка 230 kW/m^2 , тогда как без учета концентрации эта величина не превышает 170. В адиабатическом случае максимальная плотность теплового потока на нижней границе достигается в не концентрационном расчете и составляет порядка 340 kW/m^2 , тогда как с учетом концентрации ее значение не превышает 260.

Оговоримся, что представленные выше результаты получены с помощью модели, справедливой в предположении о гомогенности кориумной смеси с упрощенной фазовой диаграммой (Рис. 1). Однако, как показывают экспериментальные исследования с прототипами кориумных материалов, поведение кориумной смеси при определенном процентном соотношении ее составляющих, характеризуется возникновением двух несмешивающихся жидкостей и описывается более сложной фазовой диаграммой (см. Рис. 9).

Последнее обстоятельство требует модификации представленной модели с целью учета возможной гетерогенной природы расплава кориума (стратификации). С этой целью ниже будет рассмотрена классификация многофазных течений в предположении двухфазной природы расплава кориума.

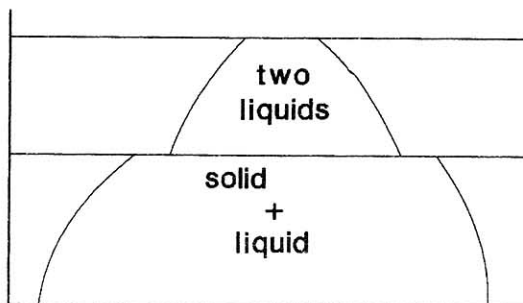


Рис. 9: Фазовая диаграмма

3 Модели многофазных течений

в предположении двухфазного расплава кориума

Для формулировки модели многофазного течения необходимо рассмотреть характер взаимодействия между фазами. При этом полезно знать, являются ли справедливыми допущения о динамическом и температурном равновесии. Помочь определить это позволяет оценка так называемого уровня столкновительности между фазами. Принято различать полностью столкновительные, бесстолкновительные и почти бесстолкновительные течения. Когда течения являются полностью столкновительными, все фазы движутся вместе и единое макроскопическое поле скорости адекватно описывает движение. Такое упрощение называют одножидкостной моделью. Следующий уровень приближения рассматривает малые отличия скоростей отдельных фаз от осредненной скорости течений. Различные скорости позволяют более полно трактовать взаимное проникновение без необходимости учитывать множество конвективных скоростей компонентов.

Использование локального термодинамического равновесия для каждого из бесстолкновительно проникающих компонентов привлекательно, но может оказаться несправедливым. В бесстолкновительных или почти бесстолкновительных системах использование модели с непрерывной плотностью импульса открыто для обсуждения. В почти бесстолкновительных случаях делается приближение, называемое многожидкостным. Каждая фаза имеет собственное поле скорости. Предположение о том, что столкновения не имеют места, означает, что локальное термодинамическое равновесие реализуется редко.

3.1 Одножидкостные модели

в предположении термодинамического равновесия

В самом грубом приближении различные фазы рассматриваются как одна жидкость, свойства которой определяются свойствами различных фаз. Все фазы течения предполагаются сильно взаимодействующими и движущимися с одной скоростью. Течения, содержащие очень малые капли или частицы, могут часто рассматриваться таким же образом.

Когда фазы находятся в тепловом и динамическом равновесии, применимы приближения однотемпературной и односкоростной модели жидкости. Отдельные фазы ведут себя подобно отдельным химическим компонентам. Предполагается, что точное положение частиц в макроскопическом объеме не важно. Осреднение этой информации ведет к локально однородной модели низкого разрешения. Примером одножидкостной модели может служить приведенная выше модель согласованной тепловой и концентрационной конвекции при фазовых превращениях в кориуме, так как в ней различные фазы рассматриваются как одна жидкость, свойства которой определяются свойствами отдельных фаз в предположении термодинамического равновесия. Особенность указанной модели является равенство плотностей фаз.

Следующим этапом в усложнении моделей фазовых превращений в кориуме является отказ от предположения о постоянстве и равенстве друг другу плотностей различных фаз.

В реальных условиях плотность жидкости зависит от температуры T , концентрации растворенных веществ C и давления P . Однако при исследовании стратифицированных течений зависимость плотности от давления, как правило, пренебрегают. Часто используется простейшая линейная связь между плотностью, температурой и концентрацией [7, 8]:

$$\rho = \rho_0[1 + \beta_T(T - T_0) + \beta_C(C - C_0)], \quad (24)$$

где ρ_0, T_0, C_0 — характерные значения плотности, температуры и концентрации соответственно, β_T, β_C — коэффициенты термического и концентрационного расширения.

С учетом приведенного выше соотношения для плотности система уравнений для описания динамики неоднородной несжимаемой вязкой жидкости имеет вид:

$$\operatorname{div} \mathbf{v} = 0, \quad (25)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) \mathbf{v} = \mathbf{g} - \frac{1}{\rho} \nabla P + \nu \Delta \mathbf{v}, \quad (26)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) T = k_T \Delta T + f_T, \quad (27)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) C = k_C \Delta C + f_C, \quad (28)$$

где \mathbf{v} — вектор скорости, t — время, \mathbf{g} — сила, действующая на единицу массы, P — давление, ν — коэффициент кинематической вязкости, T — температура, k_T — коэффициент температуропроводности, k_C — коэффициент турбулентной диффузии.

В системе уравнений (25)–(28) $f_T = \varepsilon/c_p$, где ε — энергия, которая подводится к единице массы в единицу времени (за счет физико-химических превращений), а f_C — внутренние источники вещества.

Условие (26), т.е. $\operatorname{div} = 0$ может быть получено в предположении, что отдельные составляющие смеси являются несжимаемыми, т.е. $d\rho/dt = 0$, тогда система уравнений (25)–(28) может быть заменена на

$$\operatorname{div} \mathbf{v} = 0, \quad (29)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (30)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) \mathbf{v} = \mathbf{g} - \frac{1}{\rho} \nabla P + \nu \Delta \mathbf{v}, \quad (31)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) T = k_T \Delta T + f_T, \quad (32)$$

в которой соотношение (24) не используется.

Более адекватным обобщением часто является увеличение сложности модели посредством учета различных температур разных фаз. Двухтемпературные и многотемпературные модели более сложны, чем одготемпературные, но они справедливы в широком диапазоне условий многофазных течений. Такое обобщение ведет к появлению связующих членов между двумя уравнениями энергии, пропорциональными $T_1 - T_2$.

3.2 Дрейфовые модели

Простейшие модификации одножидкостной модели предполагают, что различные фазы движутся с одной средней скоростью. Несовпадение скоростей различных фаз часто достаточно мало, и можно предположить, что разные фазы движутся с единой скоростью, определяемой объемной конвекцией. Однако это различие может быть достаточным для того, чтобы быть заметным источником членом при наличии сжатия или расширения системы или при описании осаждения или всплытия более тяжелых частиц. Оно также может привести к существенным возмущениям импульса в ускоряющихся течениях, в которых различные фазы не приходят к механическому равновесию так же быстро, как изменяются свойства осредненного течения.

При решении уравнений конвекции для различных фаз можно использовать различие между уравнениями для импульса каждой фазы с целью описания различных движений. Общее допущение состоит в том, что вещество одной фазы ведет себя одинаковым образом. Например, все частицы в твердой фазе ведут себя как частицы одного типа или размера. Однако при действии сил тяжести всегда существует различие скоростей, так как более тяжелые частицы не имеют тенденции оседать из газа или жидкости при предельной скорости. Во вращающемся течении более тяжелые фазы мигрируют во внешнюю часть потока.

Уравнения, описывающие этот тип течения, обычно записывают в терминах дрейфовых скоростей составных частей относительно среднего течения и часто разность этих скоростей может быть оценена довольно грубо. Полностью самосогласованные расчеты по двухжидкостным моделям должны проводиться в случаях, когда разность скоростей может быть сравнима с самой осредненной скоростью.

Примером модели дрейфовых скоростей в предположении динамического равновесия, т.е. $P_1 = P_2 = P$, может быть следующая система уравнений:

$$\operatorname{div} \mathbf{v} = 0, \quad (33)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) \rho = 0, \quad (34)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla)(\rho \mathbf{v}) = -\nabla P + \mathbf{f} + D(\mathbf{v}), \quad (35)$$

$$\frac{\partial (\alpha_1 \rho_1 \delta \mathbf{v}_1)}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla)(\alpha_1 \rho_1 \delta \mathbf{v}_1) = \alpha_1 \mathbf{f}_1, \quad (36)$$

$$\frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} + \operatorname{div}(\alpha_1 \rho_1 \delta \mathbf{v}_1) = 0, \quad (37)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + (\mathbf{v} \nabla) E = -\nabla q + f_T, \quad (38)$$

$$\alpha_2 = 1 - \alpha_1, \quad (39)$$

где \mathbf{v} — вектор скорости, ρ — плотность, t — время, α_1 — объемная доля первой компоненты, ρ_1 — плотность первой компоненты, $\delta \mathbf{v}_1$ — дрейфовая скорость первой компоненты, \mathbf{f} — осредненная массовая сила, $D(\mathbf{v})$ — диссипативный член, E — энтальпия, q — тепловой поток, f_T — удельная мощность, \mathbf{f}_1 — массовая сила, которая обеспечивает дрейф первой компоненты. Природа массовой силы \mathbf{f}_1 — это вопрос открытый. Она может характеризовать выталкивающую силу, трение, химические взаимодействия и т.д.

Другим примером дрейфовой модели, является представленная ниже система уравнений, записанная в предположении, малого изменения плотностей $\Delta \rho = \rho_1 - \rho_2 \ll \rho_1$ и скорости относительного движения компонент в сравнении со среднемассовой скоростью $\Delta \mathbf{v} \ll \mathbf{v}$. Особенностью представленной модели является использование явной оценки разности скоростей составных частей двухжидкостной системы — $\Delta \mathbf{v}$

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v}(\nabla \mathbf{v}) = -\frac{\nabla P}{\rho_0} + \beta g T' + g \frac{\Delta \rho}{\rho_0} \alpha' \quad (40)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v}(\nabla T) = \nabla(\kappa \nabla T) \quad (41)$$

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + (\mathbf{v} + (1 - 2\alpha)\Delta \mathbf{v}) \nabla \alpha = \nabla(D_\alpha \nabla \alpha) \quad (42)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{v} = 0 \quad (43)$$

$$\Delta \mathbf{v} = C^{-1} \bar{g} \frac{\Delta \rho}{\rho} \frac{r^2}{\mathbf{v}} \quad (44)$$

Параметр α характеризует объемную долю более легкой жидкости, а $\alpha' = \alpha - \alpha_0$, где α_0 — исходное значение α . Параметр D_α представляет собой коэффициент турбулентной диффузии. Система учитывает турбулентное перемешивание жидкости в предположении, что этот процесс перемешивания имеет одну природу с диффузией непрерывно распределенных растворенных примесей и коэффициент D должен быть близок к коэффициенту турбулентной вязкости и температуропроводности. Величина $\Delta \mathbf{v}$, обозначающая скорость относительного движения компонент, получена из уравнения движения путем подстановки в него соотношения для силы межфазного трения F_{Tp} , выраженного через $\Delta \mathbf{v}$. В качестве модельного выражения рассмотрена сила трения, возникающая при движении капле жидкости 1 через жидкость 2 при характерном радиусе капле r . Для изолированной капли сила трения определяется по формуле Стокса. $F_1 = 6\pi r \rho_2 \nu \Delta \mathbf{v}$, где ρ_2 — плотность окружающей жидкости. При этом вязкости обеих жидкостей считаются равными. В этом случае для получения объемной силы необходимо умножить это выражение на концентрацию капле, равную $\alpha \rho_1 / \rho_1 \Omega = 3\alpha / 4\pi r^3$, где Ω — объем капли. В результате получаем соотношение для силы трения $F_{Tp} = C \Delta \mathbf{v} \mu \alpha / r^2$, где $C = 9/2$, а μ — динамическая вязкость. Это выражение является корректным до тех пор, пока капли можно считать изолированными, т.е. при $\alpha \ll 1$. В другом предельном случае, при $\alpha \cong 1$, когда изолированные капли жидкости 2 содержатся в жидкости 1, сила трения равняется $F_{Tp} = C \Delta \mathbf{v} \mu (1 - \alpha) / r^2$ (плотность и вязкость считаются одинаковыми). Объединяя два предельных случая, имеем простейшую формулу для объемной силы трения: $F_{Tp} = C \Delta \mathbf{v} \mu \alpha (1 - \alpha) / r^2$. Подстановка указанного соотношения в уравнение движения для двух компонент, а затем последовательно вычитание одного уравнения из другого, умноженных соответственно на $(1 - \alpha)$ и α и пренебрежение производной $d\mathbf{v}/dt$ дает искомое соотношение (44).

Применительно к условиям кориумного эксперимента, предложенная модель дает следующие результаты.

Оценим скорости гравитационной сепарации диспергированной двухжидкостной смеси, а также характерные конвективные скорости в условиях эксперимента РАСПЛАВ.

Скорость сепарации дается формулой (44). При начальном размере капле 20 мкм и разнице плотностей 10% получается величина порядка $2 \cdot 10^{-2}$ см/с.

Конвективная скорость может быть оценена как $\sqrt{\delta \rho / \rho g h}$. Температурная вариация плотности при перепаде температур 50°C составляет примерно $4 \cdot 10^{-3}$, что дает скорость течения порядка 5 см/с. Вариации плотности от изменения состава смеси могут быть еще больше — 0.5–0.1, а соответствующая скорость — 10–20 см/с. Таким образом, скорость сепарации оказывается заметно меньше характерных скоростей течения в эксперименте.

Время гравитационной сепарации составляет порядка $h/\Delta \mathbf{v} \sim 500$ сек., что значительно меньше времени существования расплава в эксперименте.

3.3 Двухжидкостные модели

в отсутствии термодинамического равновесия

В многофазных течениях, таких, как пыль в воздухе или угольные фрагменты в воде или в воздухе, частицы различных размеров движутся с различными скоростями и реагируют, быстрее или медленнее, на изменение потока. Каждая область жидкости характеризуется распределением частиц или капле по размерам или параметрам. Модели для двухжидкостных многофазных течений существуют в том смысле, что можно записать уравнения для

описания системы. На практике использование этих уравнений связано со значительными вычислительными затратами, решать эти уравнения более трудно, чем реализовывать сложные одно- или двухжидкостные модели.

В широком диапазоне размеров частиц в одно и то же время возможны различные проявления двухфазности. Малые частицы имеют тенденцию быстро увлекаться течением жидкости, частицы большего размера ускоряются медленнее. Таким образом, относительная концентрация больших и малых частиц изменяется во времени, когда основное течение тормозится или ускоряется.

Иногда представляется привлекательная возможность рассмотрения случайного выбора типичных лагранжевых частиц или капель в сплошном основном течении для представления эффектов полного распределения. Такие гибридные модели учитывают больше физических эффектов, чем полностью непрерывные приближения, но они становятся чрезмерно дорогостоящими, так как трудно моделировать количество частиц, достаточное для получения статистически гладких, почти непрерывных взаимодействий в уравнениях гидродинамики.

В приведенных выше моделях различие скоростей различных фаз предполагалось достаточно малым. В реальных ситуациях такое предположение справедливо не всегда, поэтому следующим усложнением является переход к двухжидкостной модели, содержащей систему уравнений для каждой фазы, обозначенной индексом i :

$$\frac{\partial \alpha_i \rho_i}{\partial t} + \nabla \alpha_i \rho_i \mathbf{v}_i = \Gamma_i, \quad (45)$$

$$\frac{\partial (\alpha_i \rho_i \mathbf{v}_i)}{\partial t} + \nabla (\alpha_i \rho_i \mathbf{v}_i \mathbf{v}_i) + \nabla (\alpha_i P_i) = m_i - f_i, \quad (46)$$

$$\frac{\partial (\alpha_i E_i)}{\partial t} + \nabla (\alpha_i E_i \mathbf{v}_i) + \nabla q_i = L_i, \quad (47)$$

Здесь Γ_i , m_i , f_i , L_i — члены межфазного взаимодействия. Величины Γ_i — члены массопереноса, представляющие скорость образования i -й фазы. Влияние переноса массы на уравнение для импульса определяется членом m_i , который пропорционален Γ_i . Воздействие внешних сил учитывается в уравнении для импульса с помощью членов f_i . Например, сопротивление трения может быть представлено соотношением вида

$$f_i = \lambda_{ij}(\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j).$$

Члены энергетической связи L_i имеют форму

$$L_i = c_i \Gamma_i + \sum_j \lambda_{ij}(\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j)^2 + \sum_j \kappa_{ij}(T_i - T_j),$$

где λ_{ij} , κ_{ij} — коэффициенты связи.

Из-за наличия новых членов взаимодействия вводится новая переменная α_i . Физическое значение этой величины в любом уравнении, описывающем ее поведение, зависит от конкретной задачи. Для стратифицированных течений величина α_i может быть высотой над поверхностью. Для пузырьковых течений α_i может быть объемной долей. Параметры, характеризующие смесь, имеют тогда вид

$$\rho_m = \sum_i \alpha_i \rho_i, \quad \rho_m \mathbf{v}_m = \sum_i \alpha_i \rho_i \mathbf{v}_i$$

Заметим, что скалярное давление P предполагается одинаковым в различных фазах, хотя вязкости μ_i в выражении для тензора давления P_i могут быть разными. Если имеет место поверхностное натяжение, давления различных фаз не равны, как это указывается величинами P_i в уравнениях (45)–(47). Давление равновесия и законы сохранения позволяют определить значения различных входных коэффициентов, но большая часть основного физического содержания задачи заключена в выборе параметров взаимодействия.

Заключение

1. Для моделирования поведения кориума в случае тяжелой аварии в реакторе в предположении гомогенной неоднородной жидкости достаточно использовать согласованную модель тепловой и концентрационной конвекции с учетом фазовых превращений и квазибинарной фазовой диаграммы.
2. В предположении гетерогенной неоднородной природы кориумной смеси, когда свойства отдельных компонент отличаются незначительно, предпочтительнее использовать дрейфовую модель.
3. При значительном отличии свойств отдельных компонент кориумной смеси, например, в случае для задачи взаимодействия топлива с охладителем, когда существуют одновременно многокомпонентный расплав кориума, вода и пар, необходимо использовать многожидкостные модели.

Литература

- [1] Stewart H.B., Wendroff B., Two-Phase Flows: Models and Methods, *J Comp. Phys.*, **56**, 363–409 (1984).
- [2] Ishii M., Thermo-Fluid Dynamic Theory of Two-Phase Flows, Eyrolles, Paris, 1975.
- [3] Soo S.L., Fluid Dynamics of Multiphase Systems, Blaisdell, Waltham, MA, 1967
- [4] Soo S.L., Development of Dynamics of Multiphase Flow, Int., *J Sci. Eng.*, **1**, 13–29 (1984).
- [5] Alper E. (ed.), Mass Transfer with Chemical Reaction in Multiphase Systems, Volumes I and II, NATO ASI Series E, Applied Sciences, No.72 and 73, Nijhoff, Boston, 1983.
- [6] А.Е. Аксенова, В.В. Чуданов и др. “Численное моделирование процессов затвердевания в задачах диффузии/конвекции (обзор)” Препринт ИБРАЭ РАН, ИВРАЕ-95-11, Москва, 1995.
- [7] Васильев О Ф , Квон В.И., Лыткин Ю.М. и др. Стратифицированные течения // Гидромеханика/ Итоги науки и техники. — М.. ВИНТИ, 1975. — Т.8. — С 74–131
- [8] Марчук Г.И., Дымников В.П., Залесный В.Б. Математические модели в геофизической гидродинамике и численные методы их реализации. — Л. Гидрометеоиздат, 1987
- [9] Оран Э , Борис Дж. Численное моделирование реагирующих потоков: Пер. с англ. — М.. Мир, 1990.