

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

RUSSIAN ACADEMY OF
SCIENCES

ИНСТИТУТ

ПРОБЛЕМ БЕЗОПАСНОГО
РАЗВИТИЯ АТОМНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ

NUCLEAR
SAFETY INSTITUTE

Препринт № IBRAE-97-19

Preprint IBRAE-97-19

А.Е.Аксенова, А.Д.Васильев, В.В.Варенков, А.М.Волчек,
С.Ф.Крылов, Е.П.Пахомов, В.А.Первичко, А.Г.Попков,
В.Ф.Стрижов, В.В.Чуданов

КОМПЛЕКС ПРОГРАММ ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО
МОДЕЛИРОВАНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТОВ
ПО ВЗАИМОДЕЙСТВИЮ
ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ РАСПЛАВОВ
МЕТАЛЛОВ С ДИОКСИДИРКОНИЕВЫМ
БЕТОНОМ

Москва
1997

Moscow
1997

Аксенова А.Е., Васильев А.Д., Варенков В.В., Волчек А.М., Крылов С.Ф., Пахомов Е.П., Первичко В.А., Попков А.Г., Стрижов В.Ф., Чуданов В.В. КОМПЛЕКС ПРОГРАММ ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТОВ ПО ВЗАИМОДЕЙСТВИЮ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ РАСПЛАВОВ МЕТАЛЛОВ С ДИОКСИДЦИРКОНИЕВЫМ БЕТОНОМ. Препринт № ИБРАЭ-97-19. Москва: Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН, 1997. 42 с.

Аннотация

В работе описывается комплекс программ и результаты моделирования экспериментов по взаимодействию высокотемпературных расплавов металлов с диоксидциркониевым бетоном — жаропрочным материалом, перспективным для использования в устройствах для удержания (ловушках) расплавленного топлива вне корпуса реактора. Рассмотрены модели теплового и химического взаимодействия, модель расчета коэффициента связи системы расплав-индуктор. Приведены результаты моделирования экспериментов НИЦ ТИВ по взаимодействию расплавов железа с диоксидциркониевым бетоном. Рассмотрено влияние определяющих параметров задачи: вкладываемой мощности, температуры плавления бетона и металла, теплопроводности бетона и металла, излучательной способности материалов, энергии плавления материалов. Получены распределения температурных полей в бетоне и расплаве, динамика изменения температуры во времени в заданных точках, динамика потоков на поверхностях тигля. Проведено сравнение с экспериментальными данными.

©ИБРАЭ РАН, 1997

Aksenova A.E., Vasilev A.D., Varenkov V.V., Volchek A.M., Krylov S.F., Pakhomov E.P., Perovichko V.A., Popkov A.G., Strizhov V.F., Chudanov V.V. A COMPUTER CODE FOR NUMERICAL MODELING THE EXPERIMENTS ON INTERACTION OF A HIGH-TEMPERATURE MOLTEN METALS WITH ZIRCONIUM DIOXIDE CONCRETE. (in Russian). Preprint IBRAE-97-19. Moscow: Nuclear Safety Institute, November 1997. 42 p.

Abstract

The paper contains a description of a program code for the modeling the interaction of a high-temperature molten metals and zirconium dioxide concrete. The concrete is considered as a perspective refractory material to use in the ex-vessel core retention devices (core catchers). The models of thermal and chemical interactions, model of metal-inductor system coefficient are considered. The results of numerical modeling the metal melts and zirconium dioxide concrete are presented. The influence of main parameters of the problem has been investigated: power released, temperature of melting of concrete and metal, heat conductivity, emissivity, latent heat. Temperature distribution in the melt and concrete, evolution of the temperature in given points, dynamics of the heat fluxes are obtained. The comparison against experimental data are performed.

©Nuclear Safety Institute, 1997

Комплекс программ для численного моделирования экспериментов по взаимодействию высокотемпературных расплавов металлов с диоксидциркониевым бетоном

А.Е. Аксенова, А.Д. Васильев, В.В. Варенков, А.М. Волчек, С.Ф. Крылов, Е.П. Пахомов, В.А. Первичко, А.Г. Попков, В.Ф. Стрижов, В.В. Чуданов

ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ БЕЗОПАСНОГО РАЗВИТИЯ АТОМНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ
113191, Москва, ул. Б. Тульская, 52
тел.. (095) 955-26-20, факс: (095) 230-20-29, эл. почта: pkv@ibrae.ac.ru

Содержание

Содержание	3
1. Введение	4
2. Краткое описание экспериментов	5
3. Описание моделей	6
3.1 Тепловая модель	6
3.1.1 Базовые уравнения	7
3.1.1.1 Граничные условия для уравнения теплопроводности	8
3.2 Модель расчета коэффициента связи расплав-индуктор	9
3.2.1 Система уравнений	9
3.2.2 Коэффициент связи в случае двухслойной структуры боковой поверхности металла	14
3.2.3 Влияние геометрических и электрических параметров на коэффициент связи	14
3.3 Модель химического взаимодействия диоксидированного бетона с металлическим расплавом циркония	16
3.3.1 Физические основы модели	16
3.3.2 Уравнения модели для двух температурных интервалов	18
3.3.3 Оценки основных параметров модели	21
3.3.4 Тепловой эффект реакции циркония с диоксидом циркония	22
4. Программные средства для организации кода	23
4.1 Архитектура кода	23
4.1.1 Формат данных SDF	25
4.1.2 Командный язык RCL	25
4.1.3 Внутренняя база данных DBV	25
4.2 Вычислительный модуль	26
4.3 Входные данные	27
4.4 Выходные данные	28
5. Свойства материалов	28
6. Параметрические расчеты	29
6.1 Основные неопределенности	29
6.2 Результаты расчетов	30
6.3 Оценка влияния определяющих параметров	36
7. Основные результаты	40
Список литературы	41

1. Введение

С целью предотвращения последствий тяжелых аварий с плавлением активной зоны в течение нескольких последних лет в различных странах предпринимаются попытки разработки концепции удержания кориума вне корпуса реактора [1-13]. При разработке таких устройств удержания (ловушек) необходимо рассматривать совокупность факторов, влияющих на условия выхода кориума из корпуса реактора. Условия истечения кориума из корпуса и его характеристики определяются сценарием разрушения корпуса. Классификация возможных типов сценариев, приводящих к разрушению или нарушению целостности корпуса с дальнейшим выходом кориума, приведена в работах [1,5], где рассматриваются сценарии выхода расплава из корпуса реактора, отличающиеся в частности, скоростями истечения, температурой и составом кориума.

При проектировании ловушек особое внимание уделяется выбору материалов, из которых сделана ловушка. В качестве перспективных материалов для использования в устройствах ловушек различными авторами рассматривается возможность использовать оксиды Y_2O_3 , MgO , BeO , ZrO_2 , CaO , SrO [4,5]. Предлагаются конструкции ловушек, облицованных керамическим слоем, контактирующим с кориумом, с возможностью охлаждения как снаружи, так и изнутри. В общем случае необходимо обеспечить удержание кориума как в случае сухой, так и мокрой ловушки, так как в ходе тяжелой аварии не может быть гарантировано отсутствие воды в ловушке. При анализе возможности использования оксидов важны такие свойства, как плотность, температура плавления, растворимость в воде.

Защитные материалы находятся в непосредственном контакте с кориумом, поэтому они должны быть устойчивы к высоким температурам и иметь температуру плавления выше, чем предполагаемая температура кориума. Материалы не должны реагировать с кориумом с выделением газов, чтобы избежать увеличения давления в контейменте. Материалы должны обладать хорошей совместимостью с водой. При анализе возможности использования материалов в условиях мокрых ловушек рассматривается степень растворимости в воде (холодной и горячей) и возможность химических реакций с водой. Теплопроводность материалов особенно важна в случае сухой ловушки с точки зрения увеличения тепла выносимого с границы. Более предпочтительно использование материалов с высокой плотностью, поскольку в случае частичного разрушения защитных материалов они сохраняют местоположение, не всплывая на поверхность кориума.

Среди других важных свойств защитных материалов: сопротивление механическому и тепловому ударам, сохранение свойств с течением времени. Необходимо проведение анализа устойчивости оксидов по отношению к термическому удару при падении кориума на защитные материалы ловушки. Основная проблема последствий теплового удара - возможность возникновения трещин, в которые может проникать расплавленный кориум. При этом может происходить эрозия материала с дальнейшим всплыванием разрушенных фрагментов на поверхность кориума, в случае используемых материалов с малой плотностью. Для того чтобы минимизировать высокие механические нагрузки в керамических слоях, должен быть решен вопрос о конструкции, расположении и размерах керамических кирпичей или плиток, а также связанная с этим проблема выбора цементного состава, с помощью которого происходит закрепление керамики. Материалы должны сохранять свои свойства в течение длительного промежутка времени. Этот промежуток времени определяется времени жизни ловушки (около 50 -60 лет). Если материалы подвергаются воздействию влаги или прямому попаданию воды, это может приводить к образованию соединений, вызывающих, изменения объема и возникновение напряжений.

В НИЦ ТИВ ОИВТ РАН предложен бетон на основе диоксида циркония [14] и показана перспективность его использования в качестве материала защитного слоя в системах удержания расплава активной зоны. Термохимическая стойкость диоксидциркониевого бетона при тепловом воздействии на него расплавов металлов с температурой 2200К приблизительно на два порядка выше стойкости обычного строительного бетона. Полученные результаты, а также результаты дальнейших исследований [15], дают основания полагать, что использование диоксидциркониевого бетона в сочетании с другими огнеупорными бетонами (высокоглиноземистым, шамотным) позволит удержать расплав кориума в ловушках в течение времени, в сотни раз превосходящего время удержания при использовании обычных строительных бетонов или полностью предотвратить распространение расплава. Состав диоксидциркониевого бетона следующий: 94% мас. диоксида циркония, стабилизированного оксидом иттрия и 6% алюмината бария. Бетон содержит небольшой процент воды 3-4%.

В настоящей работе описывается комплекс программ для моделирования экспериментов по взаимодействию высокотемпературных расплавов металлов с диоксидциркониевым бетоном - жаропрочным материалом, перспективным для использования в устройствах для удержания расплавленного топлива вне корпуса реактора. Рассмотрены модели теплового и химического взаимодействия, модель расчета коэффициента связи системы расплав-индуктор. Приведены результаты моделирования экспериментов НИЦ ТИВ по взаимодействию расплавов металлов с диоксидциркониевым бетоном. Исследовано влияние определяющих параметров задачи: вкладываемой мощности, температуры плавления бетона и металла, теплопроводности бетона и металла (в том числе температурной зависимости коэффициента теплопроводности), излучательной способности материалов, энергии плавления материалов. Получены температурные поля в бетоне и расплаве, динамика изменения температуры во времени в заданных точках, динамика потоков на поверхностях тигля. Проведено сравнение с экспериментальными данными.

2. Краткое описание экспериментов

Экспериментальные исследования взаимодействия высокотемпературных расплавов с диоксидциркониевым бетоном проводились методом неизтермического тигля. Методика эксперимента включала в себя нагрев и поддержание требуемой температуры расплава в течение заданного времени, создание различной газовой атмосферы, периодическое измерение температуры расплава, определение состава выделяющихся газов. Выводы о характере взаимодействия расплав-бетон и протекающих при этом процессах делались по конечному холодному состоянию бетонного тигля и металлического слитка, для чего выполнялся анализ состава и распределения продукта взаимодействия.

Измерение температуры производилось пирометрическим методом. Для измерения истинной температуры расплава создавалась модель черного тела. Для этого тигель закрывался сверху крышкой из диоксидциркониевого бетона того же состава, что и сам тигель. В центре крышки имеется сквозное отверстие диаметром 2-3 мм, через которое оптический пирометр фокусируется на поверхность ванны расплава. Моделью черного тела служит полость, образованная поверхностью крышки, стенкой тигля и поверхностью расплава. К измеренным значениям вносится поправка на пирометрическое ослабление защитного стекла нагревательной камеры.

Проведены серии экспериментов с высокотемпературными расплавами железа, циркония, смесью железа и циркония (20% циркония, 80% железа). Во всех экспериментах с железом с температурой расплава ниже температуры плавления ZrO_2 , не наблюдалось эрозии бетона, что подтверждает высокую стойкость диоксидциркониевого бетона и возможность его использования в качестве материала ловушки.

Экспериментальная установка состоит из нагревательной камеры, внутри которой находится бетонный тигель, содержащий металлический образец. Тигель стоит на подставке из диоксидциркониевого бетона, стоящем на керамике из оксида магния. Сверху тигель закрывается бетонной крышкой. Нагрев металлического образца осуществляется индукционным способом. Весь металлический образец находится в зоне индуктора. Базовые размеры тигля, используемого в экспериментах, приведены на рис 2.1.

В ходе экспериментов фиксировалось изменение напряжения на индукторе, и проводились измерения температуры на поверхности расплава в одной точке - в центре полости (например, в экспериментах 1-1, 1-2, 2-5, 3-2) или двух точек - в центре и на краю полости (как в эксперименте 4-1). В ряде экспериментов дополнительно измерялась температура в бетоне под дном тигля (эксперимент 4-6).

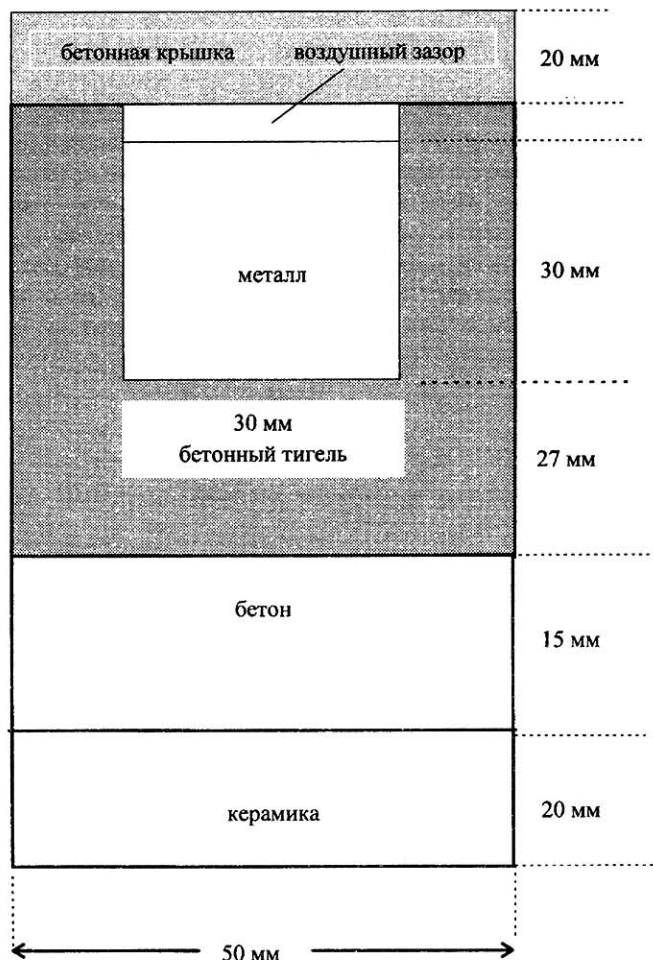


Рис 2.1 Размеры тигля

3. Описание моделей

3.1 Тепловая модель

Расчетная область, соответствующая исходной постановке, состоит из четырех сред: бетонного тигля, металлического образца, керамической подложки и воздушных зазоров. В используемом подходе предполагается, что все энерговыделение за счет индукционного нагрева происходит в скин-слое металлической капсулы. В результате этого происходит разогрев металла и его дальнейшее плавление. Полученный высокотемпературный расплав взаимодействует с бетонным тиглем. При превышении температуры плавления бетона начинается его плавление. Продукты плавления бетона поднимаются на поверхность расплава, образуя слой шлака. При отключении напряжения на индукторе происходит охлаждение и затвердевание расплава.

3.1.1 Базовые уравнения

Для моделирования процесса теплового взаимодействия расплавов металлов с диоксидциркониевым бетоном решается нестационарное уравнение теплопроводности с фазовым переходом.

$$C_p \rho \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \lambda \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial z} \lambda \frac{\partial T}{\partial z} + q \quad (3.1.1)$$

где (r, z) - цилиндрические координаты, t - время, T - температура, q - удельное тепловыделение, C_p - удельная теплоемкость, λ - коэффициент теплопроводности, ρ - плотность.

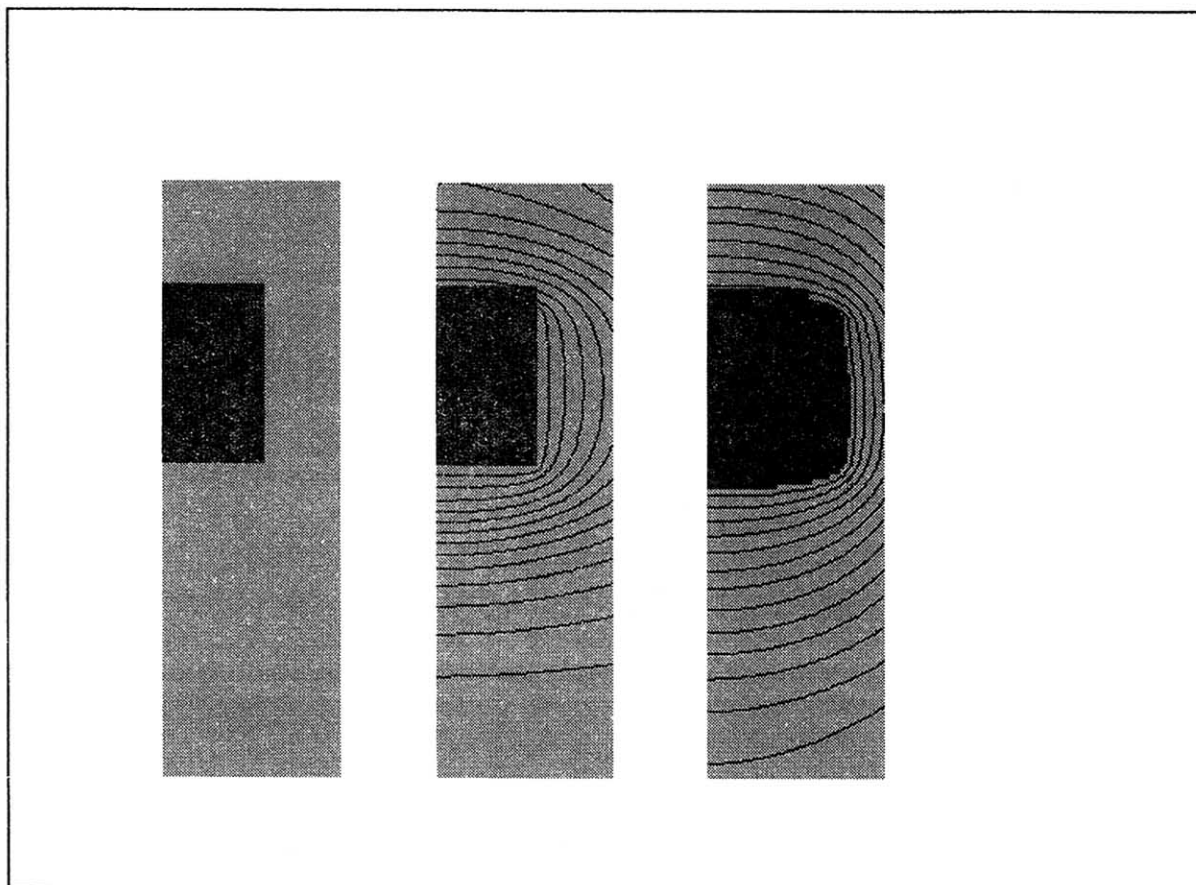


Рис. 3.1.2. Динамика температурного поля и изменение расположения материалов

Фазовый переход моделируется скачком теплоемкости в зоне температуры плавления материала. Задача решается на прямоугольной неравномерной сетке с количеством узлов, обеспечивающим достаточное разрешение с использованием сгущения в областях высоких градиентов температур и малых геометрических размеров. Расчет проводится сквозным методом без выделения границ материалов. Для численного решения уравнения теплопроводности используются итерационные разностные методы [18].

Для идентификации материалов в расчетной области задается карта области - целочисленный массив, имеющий размерность сетки, в котором для каждого узла указаны номера сред (материалов). Изначально карта области определяется в файле входных данных, в дальнейшем местоположение материалов может меняться в соответствии с происходящими процессами (плавление и разрушение материалов, образование трещин, изменение воздушных зазоров, стратификация материалов). С номером материала связаны свойства и характеристики материала. Свойства материалов могут быть определены во входных данных как постоянные величины или табличные зависимости от температуры. Для каждого материала

во входном файле могут быть заданы свои начальная температура, вес, объем. В ходе расчета для заданных материалов программами обработки вычисляются интегральные и экстремальные характеристики (средняя, максимальная, минимальные температуры, объем, вес, суммарное тепловыделение).

Разработанная численная модель позволяет учитывать стадию плавления бетона. На рис. 3.1.2 показаны динамика изменения расположения материалов при плавлении тигля и изменение температуры в металле и тигле в ходе эксперимента для трех стадий: начальной, развитой стадия плавления металла и этапа эрозии бетона.

3.1.1 Граничные условия для уравнения теплопроводности

Граничные условия задаются в обобщенном виде

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial n} = h(T - T_s) + g, \quad (3.1.2)$$

где h - коэффициент теплопередачи на границе, T_s - температура окружающей среды, g - функция, имеющая размерность теплового потока.

Соответствующий выбор коэффициентов позволяет задать граничные условия первого, второго или третьего рода [1].

При $h \rightarrow \infty$ выражение (3.1.2) определяет граничное условие первого рода (задана температура на границе):

$$T = T_s;$$

при $h=0$ - условие второго рода (задан тепловой поток).

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial n} = g,$$

при $g=0$ - граничное условие третьего рода, учитывающее конвективный теплообмен на границе

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial n} = h(T - T_s).$$

Для учета радиационного теплообмена на границе обобщенное граничное условие приобретает вид:

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial n} = h(T - T_s) + g + \varepsilon \sigma (T^4 - T_s^4),$$

где σ - постоянная Стефана-Больцмана, ε - излучательная способность материала.

В воздушной полости рассматривалось условие переизлучения между поверхностью расплава и бетонной крышкой в приближении узкой щели с эффективной излучательной способностью поверхности:

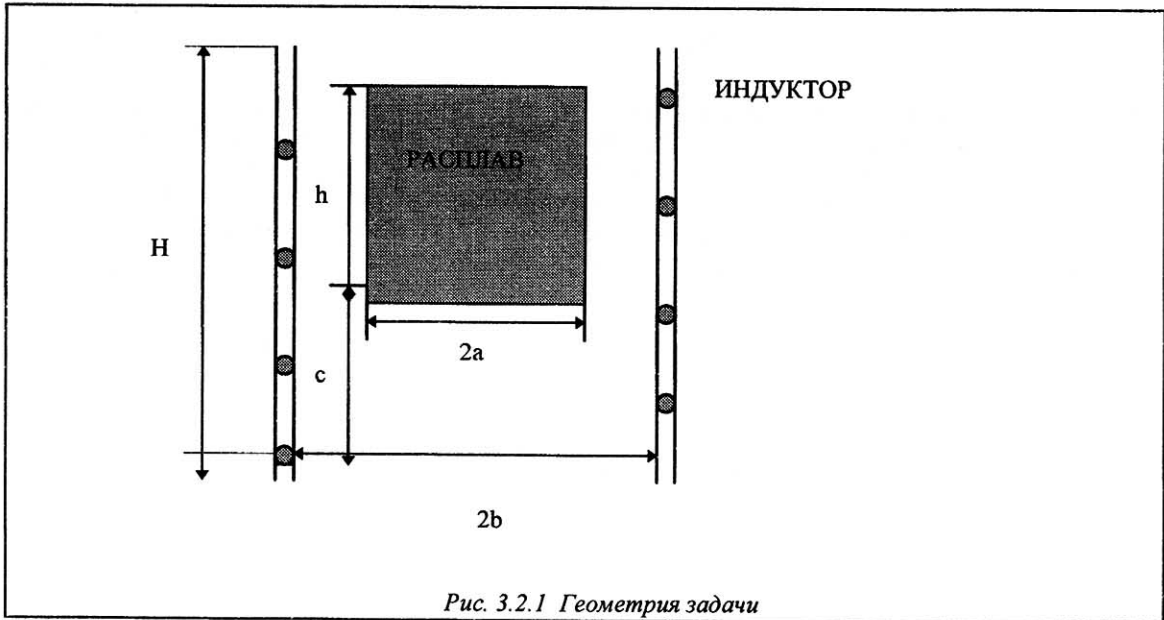
$$\varepsilon = \frac{1}{1/\varepsilon_1 + 1/\varepsilon_2 - 1}.$$

Предполагается, что все тепловыделение происходит в скин-слое металла, соответственно тепловой источник в уравнении теплопроводности отличен от нуля только в зоне скин-слоя. Суммарное

энерговыведение определялась как $P = k U^2$, где U - напряжение на генераторе, k - коэффициент связи. Коэффициент связи рассчитывался с использованием модели системы расплав-индуктор.

3.2 Модель расчета коэффициента связи расплав-индуктор

Рассмотрим задачу о распределении энерговыведения в расплаве металла при индукционном нагреве (рис.3.2.1).



3.2.1 Система уравнений

Частота электромагнитного поля ν в описываемых экспериментах составляет $\nu = 0,44$ МГц и 60 кГц, т.е. угловая частота $\omega = 2\pi\nu \approx 2,76$ МГц и 370 кГц. Поскольку выполняется неравенство $\omega \ll c/L$, где c - скорость света, L - характерный размер задачи, то поле можно считать квазистационарным. Таким образом, распределение магнитного поля вне расплава в каждый момент времени описывается уравнениями статического поля:

$$\text{div} \vec{B} = 0, \text{rot} \vec{H} = 0, \quad (3.2.1)$$

где \vec{H} - напряженность магнитного поля, $\vec{B} = \mu \vec{H}$ - индукция магнитного поля, μ - магнитная проницаемость. Вне расплава полагаем $\mu=1$

Внутри расплава полная система уравнений поля и тока запишется в виде:

$$\text{div} \vec{B} = 0, \text{rot} \vec{H} = \frac{4\pi}{c} \vec{j}, \quad (3.2.2)$$

$$\text{rot} \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \vec{j} = \sigma \vec{E},$$

где \vec{j} - плотность тока, σ - проводимость расплава.

Определим толщину скин-слоя δ . Из системы уравнений (3.2.2) можно получить следующую цепочку равенств в предположении однородности σ и μ :

$$\operatorname{rot} \bar{E} = \frac{1}{\sigma} \operatorname{rot} \bar{j} = \frac{c}{4\pi\sigma} \operatorname{rot} \operatorname{rot} \bar{H} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \bar{B}}{\partial t},$$

откуда следует:

$$\operatorname{rot} \operatorname{rot} \bar{H} = -\frac{4\pi\sigma\mu}{c^2} \frac{\partial \bar{H}}{\partial t},$$

что, с учетом равенства $\operatorname{div} \bar{H} = 0$ дает:

$$\Delta \bar{H} = \frac{4\pi\sigma\mu}{\tilde{n}^2} \frac{\partial \bar{H}}{\partial t} \quad (3.2.3)$$

Примем допущение, оправдываемое дальнейшими расчетами, что толщина скин-слоя (слой, в котором магнитное и электрическое поля, а также ток спадают экспоненциальным образом до нуля) много меньше характерных размеров расплава. В опытах с частотой индуктора 60 кГц толщина скин-слоя может оказаться сравнимой с радиусом расплава, поэтому ниже приводится также решение для цилиндрической геометрии. В плоской геометрии для временной гармоники H компоненты магнитного поля H_t , касательной к поверхности расплава (т.е. $H_t = H \exp(i\omega t)$) получим из (3.2.3) (x - координата, направленная внутрь расплава):

$$\frac{d^2 H}{dx^2} = \frac{4\pi i \omega \mu}{\tilde{n}^2} H, \quad (3.2.4)$$

т.е.

$$H = H(0) \exp(-(2\pi\sigma\omega\mu)^{1/2} (1+i)x/c)$$

Таким образом, толщина скин-слоя δ равна:

$$\delta = \frac{c}{(2\pi\sigma\omega\mu)^{1/2}}. \quad (3.2.5)$$

По этому же закону изменяются ток и электрическое поле.

Для цилиндрического расплава уравнение скин-слоя для магнитного поля (3.2.3) записывается следующим образом (в цилиндрической системе координат):

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left[r \frac{dH}{dr} \right] = \frac{4\pi i \omega \mu}{c^2} H \quad (3.2.6)$$

или

$$r^2 \frac{d^2 H}{dr^2} + r \frac{dH}{dr} - k^2 r^2 H = 0, \quad k = (1+i)(2\pi\sigma\omega/c^2)^{1/2} = (1+i)/\delta, \quad (3.2.7)$$

где δ - толщина скин-слоя.

Решением уравнения (3.2.7) является модифицированная функция Бесселя нулевого порядка:

$$H = H(0) I_0(kr),$$

где $H(0) = H(r=0)$.

Плотность тока в расплаве определяется из следующего соотношения:

$$j = \frac{kc}{4\pi} H(0) I_1(kr), \quad (3.8)$$

а полный ток по сечению расплава равен:

$$J = h \int_0^a j \dot{r} = \frac{c}{4\pi} hN(0) (1 - I_0(ka)) \quad (3.2.9)$$

Для характерных параметров задачи $\omega = 2,76 \cdot 10^6$ Гц, $\sigma = 1,8 \cdot 10^{16}$ СГСЭ толщина скин-слоя оказывается равной: $\delta \approx 0,55$ мм. Такая толщина скин-слоя характерна для твердого железа, для которого удельное сопротивление $\rho \approx 0,5 \cdot 10^{-4}$ Ом см. Для жидкого расплава с удельным сопротивлением $\rho \approx 1,4 \cdot 10^{-4}$ Ом см толщина скин-слоя несколько больше: $\delta \approx 1$ мм. Отметим, что при расчете толщины скин-слоя магнитная проницаемость μ в формуле (3.2.5) бралась равной 1, что справедливо для циркония и железа при температуре, превышающей температуру Кюри (около 1040К [20]).

Перейдем теперь к расчету коэффициента связи k индуктора и расплава, определяемого из соотношения $Q = k \cdot U^2$, где Q - энерговыделение в расплаве, U - напряжение на индукторе. Задача о расплаве внутри индуктора может быть приближенно представлена в виде нахождения параметров электрической схемы с сосредоточенными параметрами (рис. 3.2.2):

Применим нашу методику расчета коэффициента связи расплав-индуктор на случай осесимметричного расплава с переменным по высоте радиусом. Для этого разобьем зону расплава на последовательность цилиндров с различными радиусами и высотами, так чтобы аппроксимировать реальную форму расплава. Соответственно, эквивалентная электрическая схема представится в этом случае в виде, как изображено на рис. 3.2.2 (для примера произведено разбиение на 3 цилиндра).

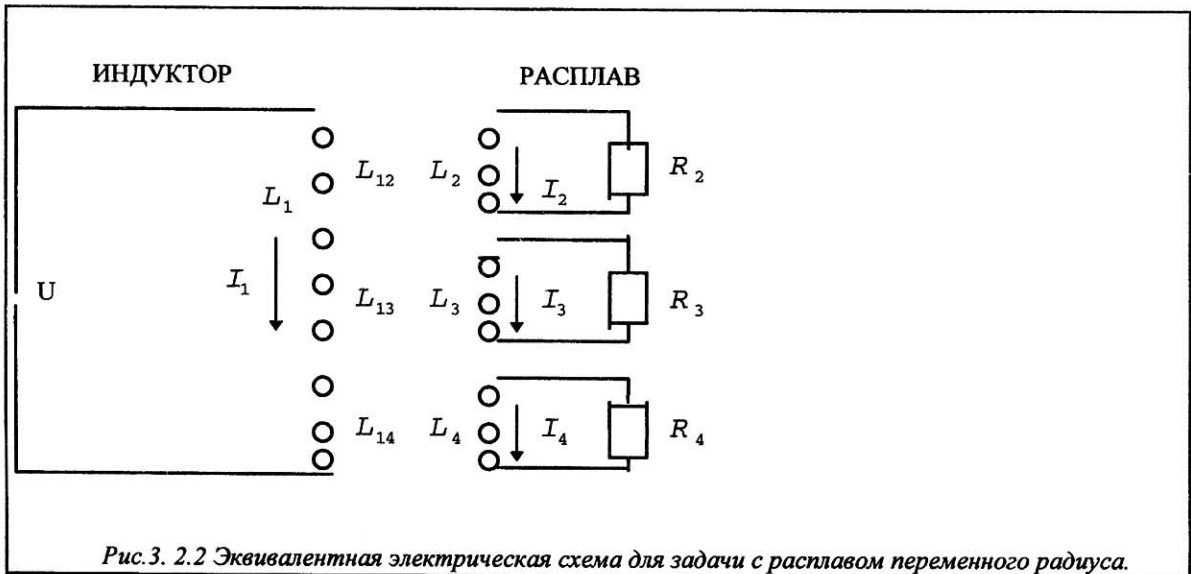


Рис. 3. 2.2 Эквивалентная электрическая схема для задачи с расплавом переменного радиуса.

Система уравнений для протекающих токов запишется следующим образом:

$$U = \frac{L_1}{c^2} \frac{dI_1}{dt} + \frac{1}{c^2} \sum_{i=2}^k L_{1i} \frac{dI_i}{dt} \quad (3.2.10)$$

$$\frac{L_{i1}}{c^2} \frac{dI_1}{dt} \cong - \frac{L_i}{c^2} \frac{dI_i}{dt} - I_i R_i, \quad i=2,3,\dots,k$$

Переходя в системе уравнений к временным гармоникам $U, I \propto \exp(i\omega t)$, получим для гармоники тока I_i :

$$I_i = - \frac{U L_{i1}}{\left[L_1 - \sum_2^k \frac{L_{1j} L_{j1} i\omega}{i\omega L_j + c^2 R_j} \right]} \frac{c^2}{(i\omega L_i + c^2 R_i)} \quad (3.2.11)$$

Соответственно, энерговыделение в i -ом цилиндре составит:

$$Q_i = \frac{|I_i|^2 R_i}{2} = \frac{0.5 U^2 (L_{i1} / L_1)^2 R_i}{R_i^2 + \frac{\omega^2}{c^4} \left[L_i - \sum_2^k \frac{L_{1j} L_{j1}}{L_1} \frac{a_i h_j}{a_j h_i} \right]^2} \quad (3.2.12)$$

где a_i и h_i - радиус и высота i -го цилиндра.

Перейдем к расчету индуктивностей $L_{11} \equiv L_1$, $L_{22} \equiv L_2$ и L_{12} . Для этого воспользуемся выражениями для свободной энергии системы двух проводников с током, данными в [19]:

$$F_{ik} = \frac{1}{c^2} L_{ik} J_i J_k = \frac{1}{4\pi} \int_V \bar{H}_i \bar{B}_k dv = \frac{1}{c} \int_{V_a} \bar{j}_i \bar{A}_k dv_i, \quad (3.2.13)$$

для $i \neq k$ и

$$F_{ii} = \frac{1}{2c^2} L_{ii} J_i J_i = \frac{1}{8\pi} \int_V \bar{H}_i \bar{B}_i dv = \frac{1}{2c} \int_{V_a} \bar{j}_i \bar{A}_i dv_i,$$

где J_i - ток через проводник i , H_i, B_i, A_i - магнитное поле, магнитная индукция и векторный магнитный потенциал, создаваемые проводником i , а интегрирование ведется по всему объему V или по объему проводника V_i

Если магнитная проницаемость среды равна единице, то будем иметь следующие выражения:

$$F_{ik} = \frac{1}{c^2} \iint_{V_i V_k} \frac{\bar{j}_i \bar{j}_k}{R} dv_i dv_k, \quad F_{ii} = \frac{1}{2c^2} \iint_{VV} \frac{\bar{j} \bar{j}'}{R} dv dv', \quad (3.2.14)$$

где R - расстояние между соответствующими элементами объемов dv

Таким образом, коэффициенты индуктивности записываются следующим образом:

$$L_{11} = 2\pi b^2 n_1^2 \int_0^h dz_1 \int_0^h dz_2 \int_0^{2\pi} d\phi \frac{\cos\phi}{[(z_2 - z_1)^2 + 4b^2 \sin^2(\phi/2)]^{1/2}},$$

$$L_{12} = 2\pi ab n_1 n_2 \int_{-c}^c dz_1 \int_0^h dz_2 \int_0^{2\pi} d\phi \frac{\cos\phi}{[(z_2 - z_1)^2 + (b - a \cos\phi)^2 + a^2 \sin^2\phi]^{1/2}}, \quad (3.2.15)$$

$$L_{22} = 2\pi a^2 n_2^2 \int_0^h dz_1 \int_0^h dz_2 \int_0^{2\pi} d\phi \frac{\cos\phi}{[(z_2 - z_1)^2 + 4a^2 \sin^2(\phi/2)]^{1/2}},$$

где n_1 и n_2 - числа витков на единицу длины.

Выполняя интегрирования, окончательно получим:

$$L_{12} = 4\pi ab n_1 n_2 (F + G),$$

$$F = (h + c)^2 F_2 (h + c) + (H - c)^2 F_2 (H - c) - (H - h - c)^2 F_2 (H - h - c) - c^2 F_2 (c),$$

$$G = -F_1 (h + c) - F_1 (H - c) + F_1 (H - h - c) + F_1 (c), \quad (3.2.16)$$

$$F_1 (y) = 2 \int_0^{\pi/2} d\phi (1 - 2 \sin^2 \phi) (y^2 + (a - b)^2 + 4ab \sin^2 \phi)^{1/2},$$

$$F_2 (y) = 8 \int_0^{\pi/2} d\phi \sin^2 \phi \cos^2 \phi \frac{1}{(y^2 + (a - b)^2 + 4ab \sin^2 \phi)^{1/2}} \frac{1}{(a - b)^2 + 4ab \sin^2 \phi}$$

В частности, если радиальные размеры задачи много меньше аксиальных ($a, b \ll H, h, c$), из (3.2.16) можно получить.

$$L_{12} \cong 4\pi^2 abn_1 n_2 h \left(1 - \frac{(a - b)^2}{2ab} \left(1 + 4ab / (a - b)^2\right)^{1/2} - 1\right) \quad (3.2.17)$$

Если, кроме того, $a \ll b$, то:

$$L_{12} \cong 4\pi^2 abn_1 n_2 h \frac{ab}{(a - b)^2} \quad (3.2.18)$$

Для коэффициента индукции L_{11} (3.2.15) получим:

$$L_{11} = 8\pi b^2 n_1^2 (I_1 H - I_2 H - 4b / 3),$$

$$I_1 = 2 \int_0^1 dx \frac{(1 - x^2)^{1/2}}{(1 + 4b^2 x^2 / H^2)^{1/2}}, \quad (3.2.19)$$

$$I_2 = \int_0^{\pi} d\phi \cos \phi (1 + 4b^2 \sin^2 (\phi / 2) / H^2)^{1/2}$$

В частности, при выполнении неравенства $b \ll H$, будет выполняться следующее равенство:

$$L_{11} = 4\pi^2 b^2 n_1^2 (H - 8b / (3\pi)) \quad (3.2.20)$$

Полученные выражения для коэффициентов индукции L_{12} и L_{22} относятся к случаю, когда ток течет в бесконечно узком слое вблизи поверхности расплава. Если принять во внимание распределение тока в скин-слое, то можно показать, что эти коэффициенты изменятся в δ / a раз:

$$L_{12} = L_{12} \frac{\delta}{a}, \quad L_{22} = L_{22} \frac{\delta}{a} \quad (3.2.21)$$

Произведем расчет эквивалентного сопротивления R расплава. Мы исходим из выражений для полного тока через расплав

$$J = h \int_0^{\infty} j dz = \frac{\sigma E (0) \delta h}{(1 + i)}$$

и для электродвижущей силы $E = JZ = E (0) 2\pi a$. Из написанных соотношений получаем значение импеданса Z :

$$Z = \frac{2\pi a}{\sigma \delta h} (1 + i) \quad (3.2.22)$$

Реальная и мнимая части импеданса описывают соответственно активное сопротивление R и коэффициент индуктивности L_{22} .

3.2.2 Коэффициент связи в случае двухслойной структуры боковой поверхности металла

Рассмотрим случай образования на поверхности расплава Zr слоя ZrO_x с другой электрической проводимостью. Рассчитаем коэффициент связи k расплав-индуктор для данной геометрии. Обозначим электрические проводимости слоев Zr и ZrO_x через σ и σ_2 соответственно. Выражения для толщин скин-слоев запишутся тогда в виде:

$$\delta = \frac{\tilde{\mu}}{(2\pi\sigma\omega\mu)^{1/2}}, \delta_2 = \frac{\tilde{\mu}}{(2\pi\sigma_2\omega\mu_2)^{1/2}}.$$

Обозначим толщину внешнего слоя через d , ось координат x направлена с поверхности внешнего слоя внутрь расплава. Тогда, записав уравнения скин-слоя для обоих слоев и сшив величины токов и полей на границе между ними, можно получить распределение полей и токов в двухслойной геометрии.

В приведенной ниже таблице 3.2.1 показана зависимость коэффициента связи k системы расплав-индуктор (нижняя строка) от толщины d слоя ZrO_x в см (верхняя строка). Проводимость Zr бралась равной $\sigma=3.9 \cdot 10^{15}$ ед.СГСЭ, а проводимость ZrO_x $\sigma_2=2.0 \cdot 10^{15}$ ед.СГСЭ.

Таблица 3.2.1 зависимость коэффициента связи k системы расплав-индуктор (нижняя строка) от толщины d слоя ZrO_x

d, см	0	0.01	0.02	0.03	0.04	0.05	0.06	0.07	0.08	0.09	0.1	0.11
k, Вт/КВ ²	34.2	38.1	41.5	44.4	46.9	48.9	50.6	51.9	52.8	53.4	53.8	54.0

d, см	0.12	0.13	0.14	0.15	0.16	0.2	0.25	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8
k, Вт/КВ ²	53.5	53.6	53.3	52.9	52.4	50.4	48.6	47.7	47.5	47.7	47.8	47.8	47.8

В базовом варианте рассматривался расплав Zr . Геометрические параметры следующие:

$H=4$ см - высота индуктора;

$h=1.5$ см - высота расплава;

$b=3.3$ см - радиус индуктора;

$a=1.0$ см - радиус расплава;

$c=1.25$ см - расстояние между основаниями индуктора и расплава;

$\sigma=3.9 \cdot 10^{15}$ ед.СГСЭ - электрическая проводимость расплава Zr .

Из таблицы 3.2.1 видно, что существует максимум коэффициента связи в зависимости от толщины слоя ZrO_x . Для исследуемой геометрии и свойств это значение равно 54 Вт/КВ^2 при толщине слоя 0.11 см.

3.2.3 Влияние геометрических и электрических параметров на коэффициент связи

На базе разработанной модели проведены расчеты коэффициентов связи для стандартных тиглей, используемых в экспериментах. В таблице 3.2 приведены результаты исследования влияния геометрических и электрических параметров системы расплав-индуктор на величину коэффициента связи k .

Таблица 3.2.2 Влияние геометрических и электрических параметров системы расплав-индуктор на величину коэффициента связи

c, см	1.25	1.1	0.9	0.7	0.5	0.3	0.1	-0.1	-0.3
		1.4	0.6	1.8	2.0	2.2	2.4	2.6	2.8
k, Вт/КВ ²	34.2	34.1	33.6	32.7	31.5	29.9	28.1	26.0	23.9

b, см	3.3	3.2	3.1	3.0	2.9	2.8	3.4	3.5	3.6	3.7	3.8
k, Вт/КВ ²	34.2	39.4	45.7	53.1	62.1	72.9	29.8	26.0	22.8	20.1	17.7

a, см	1.0	0.9	0.8	0.7	0.6	0.5	1.1	1.2	1.4	1.6	1.8	2.0
k, Вт/КВ ²	34.2	30.6	27.0	23.5	20.0	16.6	37.9	41.7	49.7	58.1	67.0	76.7

H, см	4	3.9	3.8	3.7	3.6	3.5	4.1	4.2	4.3	4.4
k, Вт/КВ ²	34.2	33.7	33.1	32.5	31.8	31.1	34.7	35.2	35.6	36.0

h, см	1.5	1.4	1.3	1.2	1.1	1.0	1.6	1.7	1.8	1.9	2.0
k, Вт/КВ ²	34.2	32.0	29.8	27.5	25.3	22.9	36.3	38.4	40.4	42.4	44.2

σ, ед.СГСЭ	3.9	4.2	4.4	5.0	6.0	6.4	3.6	3.3	3.0	2.0
k, Вт/КВ ²	34.2	33.0	32.2	30.2	27.6	26.7	35.6	37.2	39.0	47.8

В таблицах 3.2.3, 3.2.4 показаны значения коэффициентов связи k для стандартных тиглей, используемых в экспериментах.

Таблица 3.2.3 Коэффициенты связи (Вт/КВ²) для стандартных тиглей, используемых в экспериментах. Частота генератора 0.44МГц.

Нтигля (0.44МГц)	N опыта	Коэф.загрузки η	Коэф.связи k (Zr)	Коэф.связи k (Fe)
1	2-3	0.66	24.1	18.8
	2-4	0.6	22.5	17.6
2	1-4	0.52	44.2	34.5
	1-3	0.28	32.2	25.1
	1-1	0.9	66.6	51.6
	2-1	0.43	41.1	32.0
3	3-1	0.62	25.7	20.0
4	2-6	1.14	20.5	16.0

Таблица 3.2.4 Коэффициенты связи (Вт/КВ²) для стандартных тиглей, используемых в экспериментах.
Частота генератора $\nu=60$ кГц.

$\nu=60$ кГц	Коэф.загрузки η	Коэф.связи k (Zr)	Коэф.связи k (Fe)
	0.25	1125	877
	0.5	2044	1593
	0.75	2891	2251

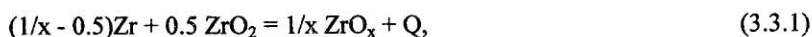
Разработанная аналитическая модель для определения коэффициента связи системы расплав-индуктор рассматривает случай осесимметричного расплава. Величина коэффициента связи оказывается зависящей от геометрических и электрических параметров системы. Образование на боковой поверхности расплава слоя с электрической проводимостью, в несколько раз меньшей проводимости расплава, приводит к росту коэффициента связи в число раз, изменяющееся от единицы до корня из отношения удельных проводимостей (в зависимости от толщины слоя).

3.3 Модель химического взаимодействия диоксидированного бетона с металлическим расплавом циркония.

Состав диоксидированного бетона характеризуется очень высоким содержанием (94%) электроплавленного, стабилизированного оксидом иттрия, диоксида циркония. Представленная ниже модель определяется, в основном, взаимодействием циркония с матрицей ZrO_2 при температурах выше температуры плавления металла ($T > 2030$ К).

3.3.1 Физические основы модели.

Образование жидкого раствора ZrO_x из чистого циркония и оксида происходит согласно основному уравнению реакции



где x — содержание кислорода в жидком металле, Q — скрытая теплота реакции.

В качестве основного предположения модели примем, что процесс растворения ZrO_2 (3.3.1) определяется переносом кислорода из оксида в металл: анионы кислорода диффундируют по решетке оксида и сравнительно легко преодолевают потенциальный барьер на границе оксид/металл. Металлический цирконий, приобретая кислород, играет роль восстановителя по отношению к оксиду. Данное предположение было подтверждено экспериментально (см. ,например, [21]).

Согласно бинарной фазовой диаграмме $Zr-O$ (см. рис. 3.3.1, взятый из [22]) процесс реакции может существенно различаться на следующих двух характерных температурных интервалах:

I. $T_\alpha > T > T_\beta = 2030$ К.

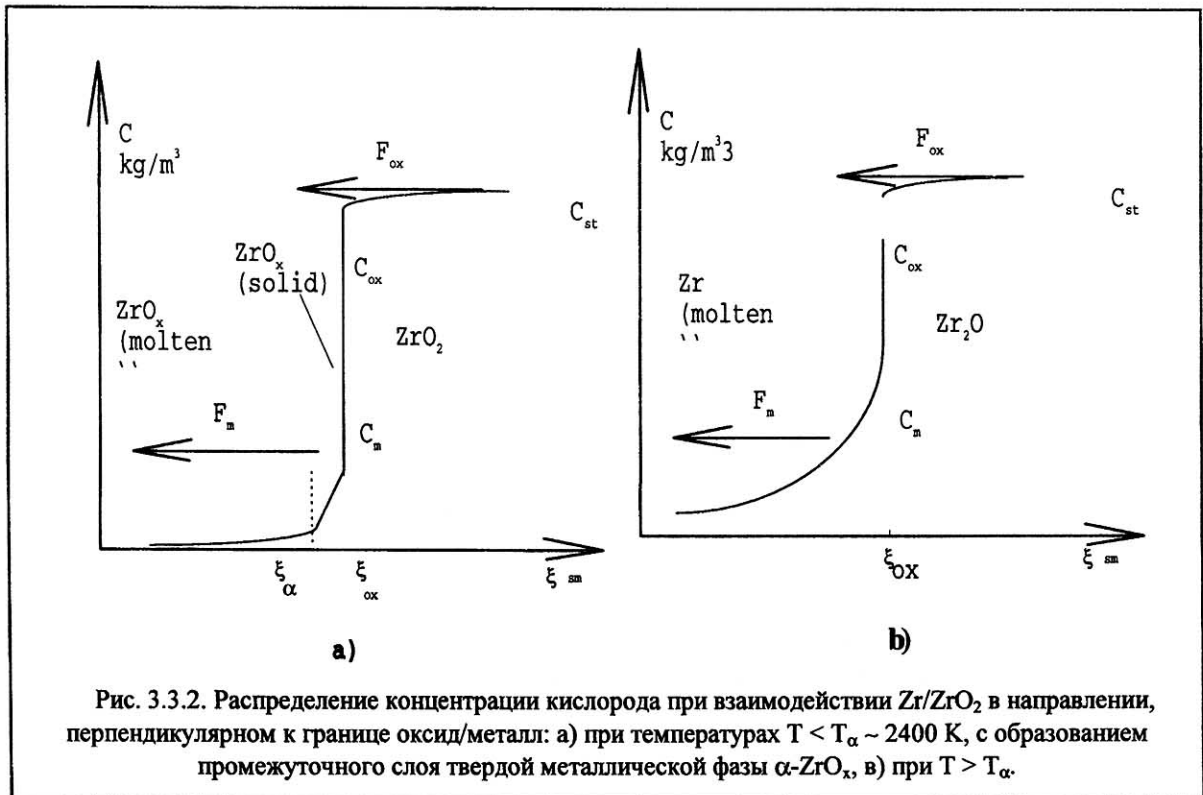
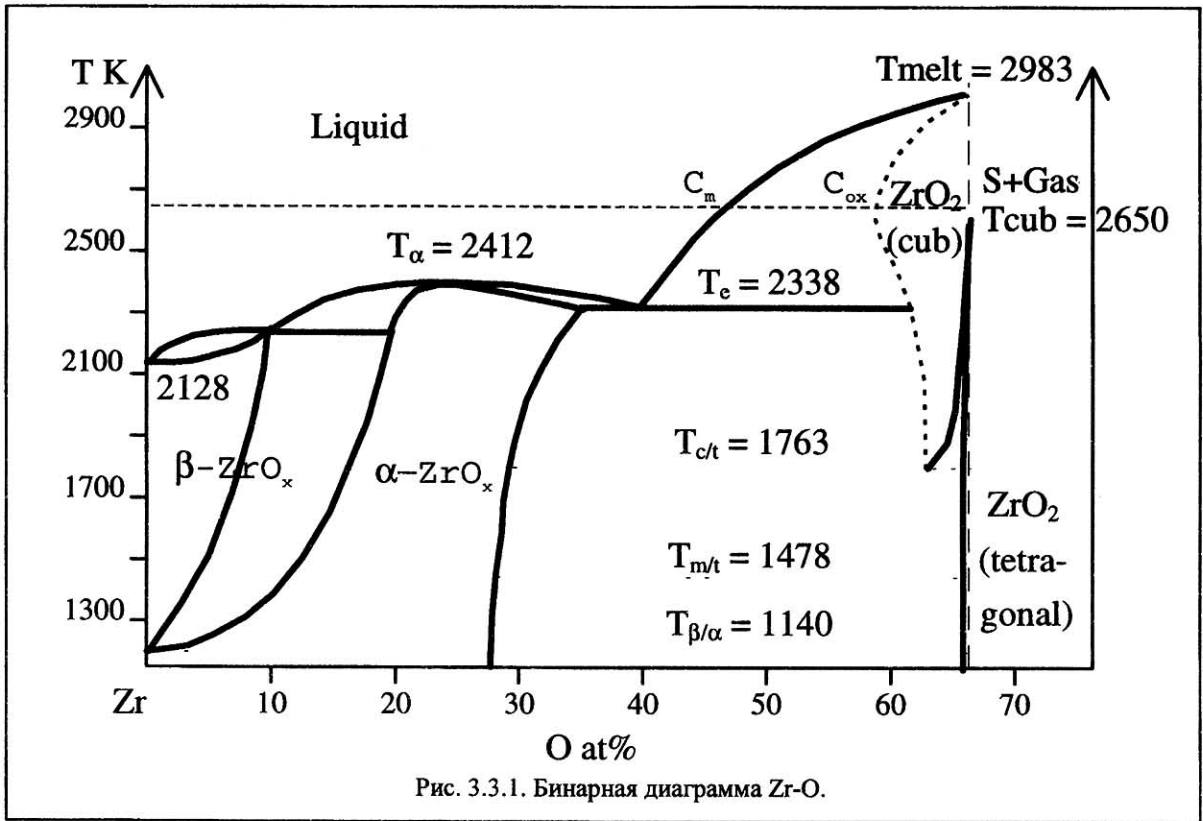
Между жидким $\beta-Zr$ и оксидом образуется дополнительный слой твердой металлической фазы $\alpha-ZrO_x$, причем последний существует равновесно только при стабилизации кислородом.

II. $T > T_\alpha \sim 2400$ К (выше точки плавления $\alpha-Zr(O)$).

Жидкий цирконий имеет очень высокий предел насыщения кислородом, $C_m > 41\%$ ат.

Нижняя граница нестехиометричности в ZrO_{2-x} (C_{ox}) на Рис. 3.3.1, показана пунктиром. Она соответствует экспериментальным данным для чистого оксида циркония [22], однако при стабилизации иттрием, по-видимому, сдвигается в сторону меньших значений x .

Скорость растворения ZrO_2 определяется процессами переноса по металлическим фазам циркония и возникающими градиентами кислородной концентрации вблизи границы раздела оксид/металл. На рис.3.3.2, а) представлено возможное распределение кислорода при относительно низких температурах с образованием промежуточной α -фазы, на рис.3.3.2, в) — при высоких температурах с высоким уровнем насыщения кислородом.



В конкретных экспериментальных условиях возможны два существенно различных процесса переноса кислорода по расплаву:

- объемная диффузия;
- конвекция в неоднородном поле температур вследствие неоднородного энерговыделения при индукционном нагреве расплава в экспериментальной установке (см. например [23]).

Вынужденная конвекция, вызванная силами электромагнитного взаимодействия кольцевых токов с собственным магнитным полем на данном этапе не учитывалось. Как показывают предварительные оценки, в используемой экспериментальной установке определяющую роль в развитии конвекции может играть именно он.

Существенной особенностью низкотемпературного режима ($T < 2400 \text{ K}$) является наличие дополнительного твердого слоя $\alpha\text{-ZrO}$. При этом большая часть индукционной мощности выделяется в скин-слое ($\sim 1 \text{ мм}$) в твердой фазе. Поэтому в данном диапазоне температур предпочтительным является взаимодействие жидкого циркония с оксидом по диффузионному механизму.

В экспериментах Хофманна [21] (нагрев циркалоя в цилиндрическом тигле из ZrO_2) в ходе процесса растворения стенок и дна тигля при температурах выше температуры плавления циркалоя наблюдалось перемещение границы жидкий металл/оксид внутрь оксида. Скорость перемещения оказалась обратно пропорциональной корню квадратному из времени с коэффициентом пропорциональности, резко зависящим от температуры. На Рис. 3.3. 3 представлены результаты расчета эквивалентного одномерного движения границы (мм) в зависимости от корня квадратного из времени ($\text{сек}^{1/2}$), полученные в [25], исходя из конкретной геометрии тигля и экспериментальных данных о массе растворенного ZrO_2 . Данных при высоких температурах ($T > 2400 \text{ K}$) в экспериментальном наборе [21] недостаточно, чтобы с уверенностью можно было идентифицировать физический механизм реакции.

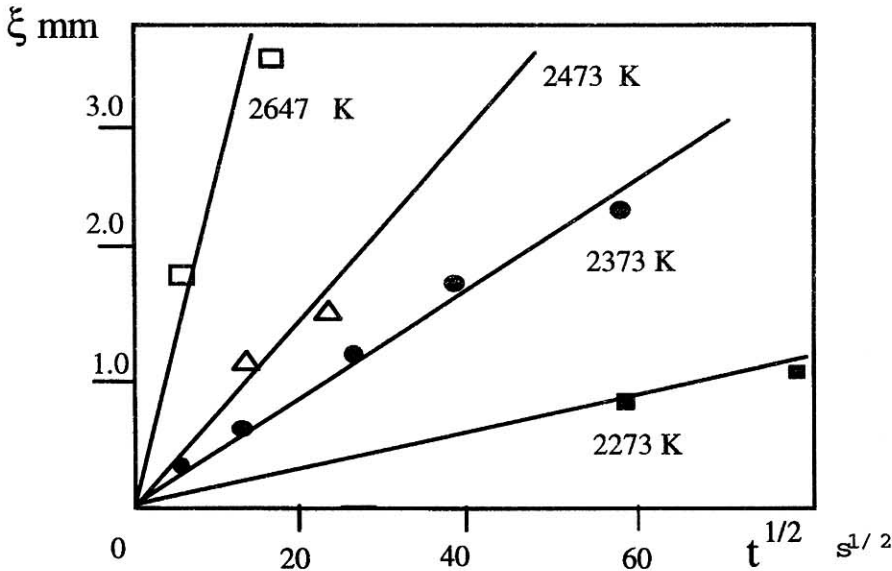


Рис. 3.3. 3. Экспериментальные результаты из [25].

3.3.2 Уравнения модели для двух температурных интервалов.

Диффузионное растворение ZrO_2 , $T < 2400 \text{ K}$ Примем следуя [21], что скорость реакции определяется только диффузией кислорода от оксида к металлу и для описания процесса используем наиболее простое, параболическое приближение. В этом пределе, строго справедливом при решении одномерной задачи в неограниченной среде, скорости перемещения границ $\alpha\text{-ZrO}_x$ и оксида (ξ_α и ξ_0 на Рис. 3.3.2) задаются уравнениями:

$$\frac{d\xi_\alpha}{dt} = \frac{K_\alpha(T)}{2\xi_\alpha} \tag{3.3.2}$$

$$\frac{d\xi_{ox}}{dt} = \frac{K_{ox}(T)}{2 \xi_{ox}}, \quad (3.3.3)$$

где $K_{\alpha}(T)$, $K_{ox}(T)$ — параболические константы, зависящие только от температуры.

Поскольку прямых экспериментальных измерений $K_{\alpha}(T)$, $K_{ox}(T)$ не проводилось (например, при достаточном количестве экспериментальных данных это можно было бы сделать, исходя из наклона прямых на графике Рис. 3.3. 3), в настоящей работе они были вычислены аналитически.

Для этого вначале при различных температурах определялись коэффициенты диффузии кислорода в кубической фазе оксида ZrO_2 и жидком Zr (прямые экспериментальные измерения при высоких температурах неизвестны). В работе [23] описана методика решения обратной задачи на основании исследования автоматического решения одномерных диффузионных уравнений Фика и Стефана с соответствующими граничными условиями, выбранными исходя из бинарной фазовой диаграммы $Zr-O$ (Рис. 3.3.1). В работах [27,28] данная методика применена для согласованного определения в широком диапазоне температур коэффициентов диффузии в различных фазах циркония. На основании ряда экспериментов (по окислению циркония [29] растворению оксида [21]) получены следующие зависимости от температуры:

$$\begin{aligned} D_{\beta-Zr} &= 2.63 \cdot 10^{-6} \cdot \exp(-14315/T) \\ D_{\alpha-Zr} &= 3.2 \cdot 10^{-6} \cdot \exp(-17120/T) \\ D_{ox} &= 4.2 \cdot 10^{-3} \cdot \exp(-26380/T) \text{ (м}^2/\text{с)} \end{aligned} \quad (3.3.4)$$

Решение прямой задачи вычисления параболических коэффициентов $K_{\alpha}(T)$, $K_{ox}(T)$ на основании приведенных диффузионных коэффициентов (3.3.4) приводит к следующим результатам.

$$\begin{aligned} K_{\alpha}(T) &= 2\sqrt{D_{\beta-Zr}(T)} (A_2 + B_2(T - 2225) + C_2(T - 2225)^2) \\ K_{ox}(T) &= K_2(T) - L(T) \\ L(T) &= 2\sqrt{D_{\beta-Zr}(T)} \cdot (A_1 + B_1(T - 2225) + C_1(T - 2225)^2) \end{aligned}, \quad (3.3.5)$$

где константы A_i , B_i , C_i зависят от текущей стадии процесса согласно Таб. 3.3.4

Таб. 3.3.4 Расчетные константы A_i , B_i .

Стадия	A_1 / A_2	B_1 / B_2	C_1 / C_2
нет насыщения в расплаве, нет насыщения в оксиде	-0.378, 0.244	$5.1 \cdot 10^{-5}$, $-4.0 \cdot 10^{-4}$	$3.07 \cdot 10^{-7}$, $5.18 \cdot 10^{-7}$
насыщение в расплаве, нет насыщения в оксиде	-0.218, 0.319	$6.14 \cdot 10^{-4}$, $-4.98 \cdot 10^{-4}$	$1.33 \cdot 10^{-6}$, $-1.02 \cdot 10^{-6}$
нет насыщения в расплаве, насыщение в оксиде	-0.536, 0.363	-0.001 $4.66 \cdot 10^{-4}$	$-2.45 \cdot 10^{-6}$, $1.69 \cdot 10^{-6}$
насыщение в расплаве, насыщение в оксиде	0.476, -0.408	$-7.81 \cdot 10^{-4}$ $6.63 \cdot 10^{-4}$	$-2.13 \cdot 10^{-6}$, $1.89 \cdot 10^{-6}$

Конвективное растворение ZrO_2 , $T > 2400$ K На рис. 3.3.4а) показан тип жидкого движения, вызванного положительной разностью температур между жидкостью в пристеночном слое и объеме металла. Перегретая жидкость пристеночного слоя всплывает вдоль вертикальной стенки тигля. При достижении верха расплава происходит смешивание теплой и холодной частей с последующим образованием нисходящего обратного потока. На рисунке 3.3.4б) общая картина циркуляции представлена с точки зрения ее влияния на пристеночные процессы. В нижней части изображен схематично аксиальный профиль скоростей, в верхней - приближенный профиль концентрации кислорода в металле и тигле. Вихревое движение жидкости приводит к выравниванию кислородного содержания во всем объеме за исключением узкого пограничного слоя толщиной R_c . Внутри слоя высокая продольная (вдоль стенки) скорость жидкости сильно уменьшается и реализуется

диффузионный режим переноса кислорода, вне слоя концентрация кислорода C_o постоянна и может только расти с течением времени.

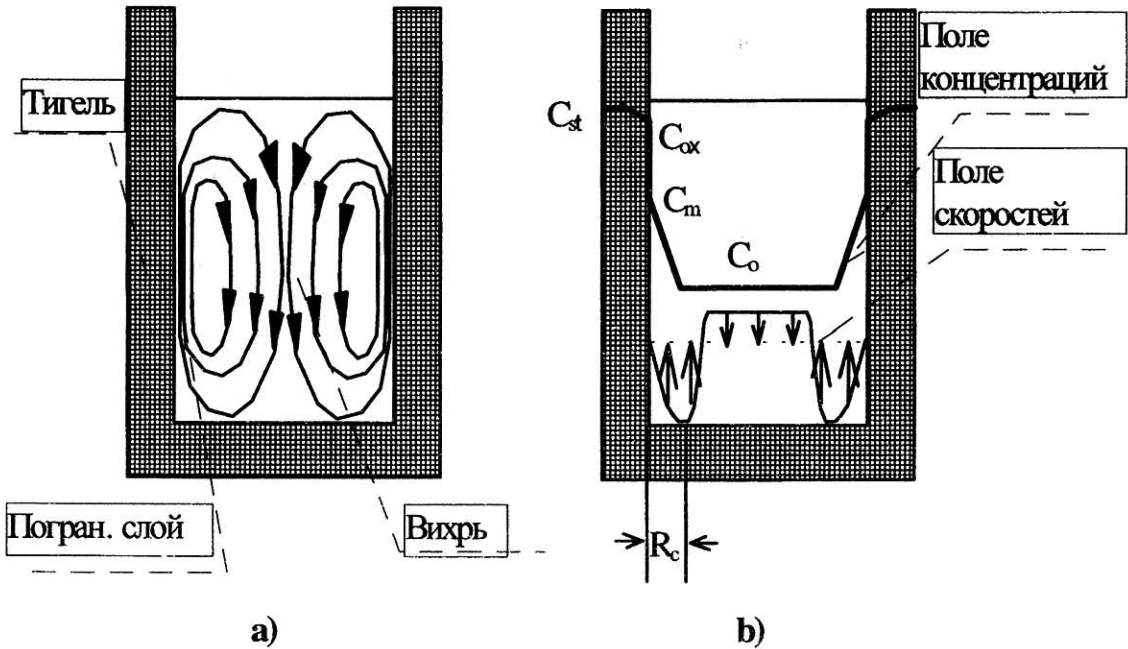


Рис. 3.3.4. Тип жидкого движения при индукционной неустойчивости: а) циркуляция жидкости в объеме, в) аксиальные профили скоростей и концентраций.

Ускорение процесса переноса кислорода по жидкости по сравнению с чисто диффузионным происходит за счет того, что слой R_c достаточно мал, зависит только от величины продольной скорости жидкости и геометрии установки и с течением времени практически не изменяется (в случае увеличения энергозклада в разогрев жидкости и ускорения конвективных течений он может и уменьшаться). Чисто диффузионное на очень коротком начальном этапе растворение ZrO_2 сменится конвективным выносом кислорода и скорость растворения перестанет падать обратно пропорционально корню квадратному из времени.

Уравнения конвективной модели имеют следующий вид.

1. Уравнение движения границы раздела.

$$\frac{d(\xi_{ox})}{dt} \left(C_{ox} - \frac{C_m}{PB} \right) = D_{\beta-zr} \frac{(C_m - C_o)}{R_c}, \quad (3.3.6)$$

где PB — фактор Пиллинга-Бедфорда, $PB = \frac{\rho_{liq}}{\rho_{ZrO_2}} \cdot \frac{M_{ZrO_2}}{M_{liq}}$, ρ_{ZrO_2} , ρ_{liq} , M_{ZrO_2} , M_{liq} — соответственно

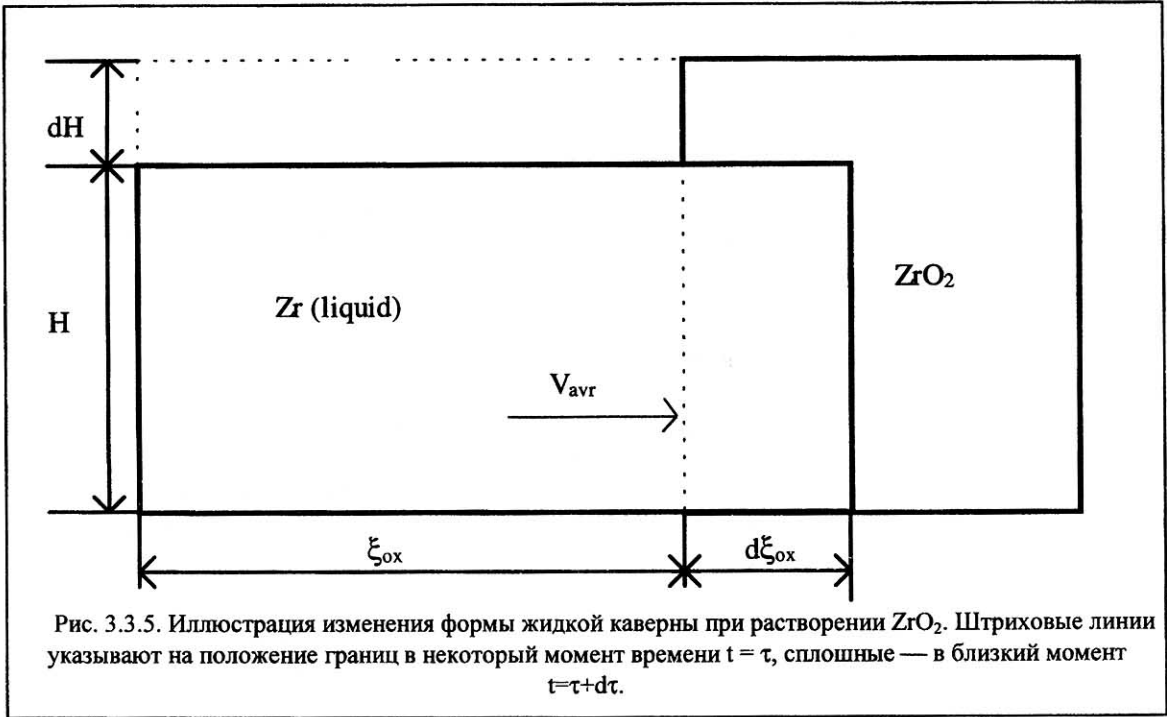
плотности и молярные массы оксида и расплава (для расплава без кислородного содержания $PB \sim 1.44$)

2. Уравнение сохранения массы.

$$\frac{d(\xi_{ox})}{dt} \cdot \left(1 - \frac{1}{PB} \right) \cdot C_o + \frac{d(\xi_{ox})}{dt} \cdot C_{ox} = \frac{d(\xi_{ox} \cdot C_o)}{dt}, \quad (3.3.7)$$

где положено $C_{ox} \approx C_{st}$.

При выводе уравнений, (3.3.6), (3.3.7) использовано, что с учетом разности плотностей оксида и металла при движении границы раздела ξ_{ox} внутрь оксида общий уровень жидкости опускается и возникает усредненное движение расплава V_{avr} к стенке (Рис. 3.3.5).



При использовании уравнений (3.3.6), (3.3.7), их удобно представить в безразмерной форме

$$\tilde{t} = \frac{t}{t_o}, \quad t_o = \frac{L \cdot R_c}{D_{\beta-Zr}}$$

$$X = \frac{\xi_{ox} + L}{L} \geq 1, \quad Y = \frac{C_o}{C_m} \leq 1, \quad A_{ox} = \frac{C_{ox}}{C_m} \geq 1$$

(L — характерный начальный линейный размер жидкости) и проинтегрировать второе уравнение в квадратурах.

Окончательно, уравнения конвективной модели имеют следующий вид.

$$\frac{dX}{dt} = \frac{1 - Y(X)}{\left(A_{ox} - \frac{1}{PB}\right)}, \quad Y(X) = A_{ox} \cdot PB - \left(\frac{C}{X}\right)^{\frac{1}{PB}}, \quad (3.3.8)$$

где C — константа интегрирования, зависящая от начальных условий $C = X_{ini} \cdot (A_{ox} \cdot PB - Y_{ini})^{PB}$

3.3.3 Оценки основных параметров модели.

1. Характерный размер.

Согласно (3.3.2), (3.3.5) толщина слоя промежуточной фазы $\alpha-ZrO_x$ $l \approx 10^{-3}$ м за 4 минуты.

2. Толщина пограничного слоя R_c и скорость пристеночного течения.

Толщина ламинарного пограничного слоя R_c и скорость пристеночного течения связаны известной формулой [31]

$$R_c = \frac{L}{\sqrt{R}} \quad (3.3.8)$$

где $R = \frac{U \cdot L_1}{\nu}$ — число Рейнольдса,

U — величина продольной скорости,

L_1 — характерные линейные размеры системы, $L_1 \approx 2$ см,

ν — кинематическая вязкость.

Измерить количественно скорость U достаточно сложно, экспериментально отмечалось только очень интенсивное движение жидкости. Поэтому оценим R_c на основании характерной скорости растворения $ZrO_2 \dot{\xi}_{ox} \sim 4 \cdot 10^{-6}$ м/сек, наблюдаемой при $T > 2400$ К и уравнения (3.3.6). Подставляя $C_{ox} = 1500$ кг/м³, $C_m = 700$ кг/м³, $D_{\beta-Zr} = 6.7 \cdot 10^{-9}$ м²/сек при $T = 2400$ К получим $R_c \approx 1$ мм.

Характерное значение конвективной скорости при этом согласно (3.3.8) и вязкости $\nu = 1.4 \cdot 10^{-6}$ м²/сек): $U \approx 3$ см/сек.

3. Начальный промежуток времени τ_0 , когда диффузионный механизм растворения меняется на конвективный и возможно использование чисто конвективной модели.

Неоднородность концентрационного профиля в металле вблизи границы металл/жидкость при чистой диффузии с течением времени перемещается в пространстве по закону $2\sqrt{D_{Zr}\tau}$. Приравняв этот размер радиусу R_c получим $\tau_0 = 50$ сек.

4. Предел насыщения расплава кислородом.

Оценим максимальный размер слоя диоксидированного бетона X_{max} , который может быть растворен за большое время в результате взаимодействия с жидким цирконием с заданным начальным размером расплава L и нулевым начальным содержанием кислорода. В изотермическом режиме $T = const$ согласно (3.3.8) при $X_{ini} = 1$, $Y_{ini} = 0$ и конечном значении $Y = 1$ имеем

$$X_{max} = \left(\frac{C_{ox} \cdot PB}{C_{ox} \cdot PB - 1} \right) PB \cdot L.$$

При $T = 2400$ К $X_{max} = 1.76 \cdot L$. С ростом температуры это значение медленно повышается. При температурах сравнимых с температурой плавления ZrO_2 ($T = 2985$ К) $X_{max} \rightarrow \infty$.

3.3.4 Тепловой эффект реакции циркония с диоксидом циркония.

В заключение данного раздела приведем оценки энерговыделения реакции (3.3.1) при температуре $T = 2550$ К в соответствии с вычисленной кодом GEMINI2 (Франция) энтальпией образования исходных и конечных продуктов.

В Таб. 3.3.2 представлены данные для энтальпии образования Zr_yO_{1-y} при различном значении y и результаты расчетов по энерговыделению. При этом использовалось соотношение

$$x = \frac{1-y}{y},$$

связывающее значение x с y в ат% и энерговыделение рассчитывалось по формуле

$$W = (1.5 \cdot \Delta H(Zr_{1/3}O_{2/3}) - 1/(1-y) \cdot \Delta H(Zr_yO_{1-y}))$$

Таблица 3.3.2. Энтальпия образования Zr_yO_{1-y} .

Вещество	Энтальпия образования на 1 моль ΔH (кДж)	Энерговыведение W для реакции (1) кДж
$Zr_{1/3}O_{2/3}$	-367.336	0
$Zr_{0.8}O_{0.2}$	-110.315	+0.6
$Zr_{0.7}O_{0.3}$	-164.015	-4.3
$Zr_{0.6}O_{0.4}$	-216.095	-10.8

Согласно проведенным расчетам реакция (3.3.1) является в целом слабо экзотермической.

Тест GEMINI2 кода.

Вычислялась приближенно скрытая теплота плавления ZrO_2 при температуре плавления $T_{melt} = 2985\text{K}$.

Для этого проводились расчеты энерговыведения согласно формуле (3.3.1) в пределе $T \rightarrow T_{melt} = 2985\text{ K}$, $y \rightarrow 1/3$. Получено значение $W = -42.747$ Дж/моль(на $1/2 ZrO_2$). Литературное значение $W = -43.514$ Дж/моль (на $1/2 ZrO_2$) ([32]).

4. Программные средства для организации кода

4.1 Архитектура кода

Вычислительный процесс в коде организован с использованием вычислительной среды RCS (Rasplav Command System) [33], разработанной в ИБРАЭ РАН для поддержки вычислительных работ по моделированию тяжелых аварий на АЭС. Программная среда RCS включает средства для работы с вычислительными модулями и данными вычислительного эксперимента. Разработанные средства позволяют подключать различные наборы вычислительных модулей для решения конкретных задач и обеспечивают базовые механизмы для подготовки и обработки данных, а также поддерживают обмен данными между отдельными подсистемами вычислительного комплекса. Функционирование программного кода и его отдельных подсистем рассматривается как процесс преобразования данных: вычислительные процедуры обрабатывают входные данные, преобразуют их в выходные, формируют новые. Обмен между модулями производится по именам данных, хранимых как в оперативной памяти, так и в файлах, что позволяет добавлять или исключать общие данные локально внутри одного модуля без какого-либо внесения изменений в других модулях. Добавление новых модулей не изменяет общего вида системы.

Вычислительный модуль реализован на языке ФОРТРАН, а интерпретатор командного языка системы, блоки подготовки данных, визуализации, обработки - на языке С. Система обеспечивает согласование модулей при выполнении ряда принятых соглашений на передачу параметров. Обмен данными между вычислительными модулями осуществляется через файлы.

Схема основных компонент программного кода для моделирования экспериментов по взаимодействию расплавов металлов с диоксидциркониевым бетоном приведена на рис. 4.1.1.

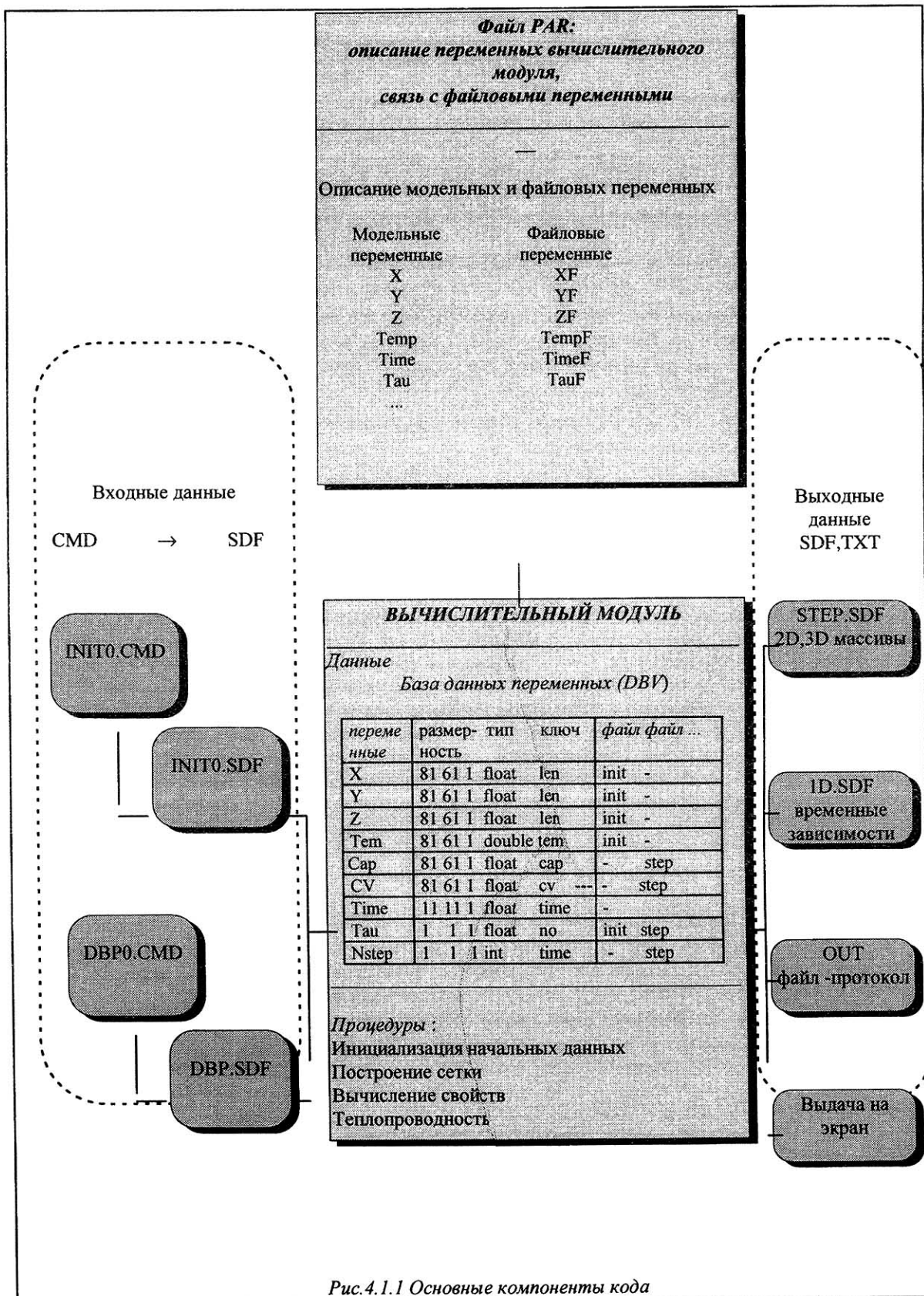


Рис.4.1.1 Основные компоненты кода

4.1.1 Формат данных SDF

Для организации вычислительного процесса разработан специальный формат хранения данных - «самодокументируемый файл данных»[34], для краткости называемый SDF-файлом. SDF-файл помимо самих данных содержит их описание (имя, тип, размерность и т.п.), что дает возможность построения универсальных средств подготовки и обработки данных. Такая структура является основой для организации базы данных вычислительного эксперимента и позволяет хранить информацию по входным и выходным данным расчетов. Файл такого формата содержит всю необходимую информацию по переменным задачи, в том числе их имена, типы, размеры, значения и комментарии. Ключевым параметром является имя переменной. Данные в SDF-файле понимаются всеми компонентами системы, включая вычислительные процедуры, программы обработки и визуализации, а также процедуры, введенные пользователем. Это обеспечивается за счет используемой единой структуры файлов, и соответствующих библиотек программ чтения/записи данных, позволяющих производить операции обмена с внешней памятью из различных процедур, в том числе, написанных на разных алгоритмических языках.

Базы данных по свойствам материалов, необходимые константы, управляющие параметры, сеточные функции и т.д. хранятся в том же формате и соответственно поддерживаются единым аппаратом чтения/записи. Вместе с тем, предусмотрена возможность использования простейших текстовых форматов (типа столбцов чисел) непосредственно, без дополнительных преобразований. В случае необходимости использования данных уникальных форматов (в качестве входных данных или для связи с другими кодами) требуется написание специальных конверторов между форматами. Предусмотрен механизм переносимости данных на различные типы платформ с использованием файлов как текстового так и двоичного форматов.

Входные и выходные данные, общие для всех моделей или группы моделей хранятся в общем информационном поле и могут претерпевать изменения после прохода каждой вызываемой модели. Входные и выходные данные, необходимые только одной модели хранятся в локальных файлах этой модели.

4.1.2 Командный язык RCL

Для описания данных и задания процедур обработки и визуализации разработан командный язык RCL(Rasplav Command Language)[33]. Язык обеспечивает гибкость в построении программных кодов: позволяет компоновать вычислительные модули и различные подсистемы работы с данными. Обеспечивает возможность введения новых пользовательских модулей, использования их в различных комбинациях. Работа с командным процессором происходит либо в режиме интерпретации команд, путем последовательного набора команд, либо путем запуска командного файла, созданного с помощью текстового редактора.

При работе системы генерируются сообщения нескольких уровней, информирующие о состоянии системы и возникающих ошибках.

4.1.3 Внутренняя база данных DBV

Для организации внутренней базы переменных в оперативной памяти вычислительной программы и поддержки обмена данными между внутренней базой переменных и SDF-файлами разработана подсистема DBV (Data Base of Variables)[35].

При работе кода данные рассматриваются как переменные - объекты, имеющие символьные имена и атрибуты, отображающие характеристики данных. Атрибуты дают возможность контролировать соответствие типов и размерностей данных, а также строить универсальные процедуры ввода/вывода, автоматически производящие необходимые преобразования. Для хранения переменных в файлах используется SDF формат.

Вычислительный модуль получает информацию о переменных и входных/выходных файлах из текстового файла параметров модуля (PAR-файла), используя в качестве посредника подсистему DBV. При этом DBV анализирует синтаксическую правильность входного файла и выполняет необходимые преобразования данных. В процессе работы вычислительный модуль при помощи подсистемы DBV может добавлять новые переменные во внутреннюю базу данных, а также использовать переменные для вычислений и преобразований данных.

Входные и выходные данные вычислительного модуля имеют имена и размещаются во внутренней базе данных, доступ к которой осуществляется посредством специальных функций. В эту базу данных могут заноситься также и локальные переменные модуля. С точки зрения структуры база данных занимает несколько больших сегментов машинной памяти - для каждого типа переменных резервируется свой массив. Эта память располагается в головной части вычислительного модуля, а ее размеры определяются исходя из конкретных вычислительных потребностей. Библиотечные функции по работе с базой данных поддерживают необходимое позиционирование в буферных массивах на данные по запрашиваемым именам.

Подсистема DBV осуществляет чтение и запись переменных в SDF-файлах, а также вывод на экран. Вычислительный модуль осуществляет ввод-вывод, обращаясь к соответствующим подпрограммам подсистемы DBV. При нехватке памяти подсистема DBV выдаёт соответствующее диагностическое сообщение и работа программы завершается. Внутри вычислительной программы переменные могут динамически добавляться, поэтому потребности в памяти могут зависеть как от размеров используемых массивов, так и от включения в работу тех или иных веток кода.

4.2 Вычислительный модуль

Вычислительный модуль программного комплекса для моделирования экспериментов по взаимодействию расплавов металлов с диоксидциркониевым бетоном реализован на языке ФОРТРАН и выполняет следующие функции:

- Работа с базой данных переменных (DBV)
 - Инициализация базы данных переменных
 - Чтение данных из файлов в DBV
 - Добавление внутренних переменных к базе данных
 - Проверка свободного пространства DBV
- Инициализация управляющих параметров
- Начальный вывод данных
 - Выдача в протокол
 - Запись в файл *STEP.SDF*
- Выполнение подготовительных операций перед основным вычислительным циклом
 - Основной вычислительный цикл
- Заключительный вывод данных
 - Выдача в протокол
 - Запись в файл *STEP.SDF*
 - Запись в файл *ID.SD*

Основной вычислительный цикл включает в себя

- процедуру формирования расчетного шага,
- выполнение основных вычислительных процедур,
- процедур обработки (вычисление интегральных величин),
- вывод необходимой информации на экран,
- запись данных на диск в файлы *STEP.SDF* и *ID.SDF* (сеточных функций и временных характеристик).

Основные вычислительные процедуры включают в себя

- расчет на каждом временном шаге свойств материалов (теплоемкость, теплопроводность),
 - вычисление коэффициента связи системы расплав-индуктор удельного тепловыделения в металле,
- формирование массивов граничных условий,
- вызов модуля химического взаимодействия,
- анализ и перерасчет карты области,
- заполнение матрицы коэффициентов системы линейных уравнений,

- решение системы линейных уравнений.

4.3 Входные данные

Входные данные задаются в текстовых командных файлах(CMD) с использованием командного языка RCL. Файлы содержат описание геометрии области, свойств материалов, граничных условий, начальные условия, управляющие параметры расчета, таблицы точек мониторинга. Данные могут содержаться в одном или нескольких файлах. Перед расчетом текстовые CMD Файлы транслируются командным процессом в SDF формат. После чего данные зачитываются и обрабатываются вычислительной программой.

В коде используются таблицы различного типа для описания свойств материалов и способов их вычисления, задания геометрии, граничных условий, начальных условий, точек мониторинга.

Свойства материалов

Заложены два основных способа вычисления свойств материалов

- Константа
- Таблица

В простейшем случае свойства материалов могут рассматриваться как постоянные величины, не зависящие от каких-либо параметров: температуры, геометрии и т.д. Для этого случая предусмотрена возможность задания свойств материалов в виде констант. При этом необходимо описать таблицу свойств-констант во входном файле.

Таблица граничных условий

Позволяет задать граничные условия в обобщенном виде на четырех гранях прямоугольной области:

Имеется возможность задавать излучательную способность на границе в виде табличной зависимости от температуры.

Таблицы для задания карты области

Таблица задает параметры для построения карты области. В ней описывается расположение материалов в расчетной области. Таблица содержит следующие поля: номер материала, резервный флаг и координаты четырехугольной области.

Таблицы для задания начальных условий

Таблица определяет:

- начальную температуру для отдельных материалов
- вес материалов

В настоящей версии таблица совмещена с таблице задания способа вычисления свойств материалов.

Таблица для задания точек мониторинга

Таблица состоит их двух столбцов, задающих координаты точек для мониторинга. Максимальное количество точек связано с обрабатываемыми программами, вычисляющими температуру в этих точках. В ходе вычислительного эксперимента значения температур в указанных точках записываются в выходной файл 1D.SDF.

Данные для модуля химического взаимодействия

Все необходимые данные задаются внутри самого модуля. Во входном файле задается флаг, определяющий включать модуль или нет.

Данные для расчета тепловыделения в металле

Во входном файле задается таблица зависимости входного напряжения от времени. В вычислительном модуле табличные данные интерпретируется ступенчатой функцией. В левом столбце задается время в минутах, в правом - напряжение в Кв. Введена константа для учета неравномерности распределения тепловыделения в скин-слое

Коэффициент связи металл-индуктор может быть задан в виде константы, таблицы или рассчитываться с использованием модели, описанной в разделе 3.2.

Дополнительно задаются данные для описания размеров индуктора и металлического образца.

Управляющие параметры и данные для построения сетки

- Начальное время

- Конечное время
- Шаг по времени
- Шаг записи в STEP.SDF-файл
- Шаг выдачи в протокольный файл (*.OUT)
- Шаг для выдачи на экран
- Размерность расчетной сетки

4.4 Выходные данные

В качестве выходных результатов рассматривались следующие характеристики:

- Расположение материалов(карта области)
- Расчетная сетка
- Распределение температур в материалах.
- Температура на поверхности расплава в центре ванны.
- Температура на краю ванны.
- Максимальная температура расплава.
- Температура на дне ванны.
- Температура на нижней поверхности крышки в центре.
- Температура на боковой поверхности полости в воздушном зазоре в тигле посередине между крышкой и ванной.
 - Температура на поверхности крышки.
 - Температура на внешней поверхности тигля.
 - Температура на нижней поверхности тигля.
 - Тепловые потоки на дне тигля, боковой поверхности тигля, на всей внешней поверхности крышки.

В расчетах в качестве базового варианта использовалась сетка размерностью $51 \cdot 116$ узлов. При этом обеспечивается разрешение 0.5 мм на ячейку в радиальном направлении и 1 мм - в аксиальном. Для проверки точности численного решения проводились сравнительные расчеты на сгущающихся пространственных сетках и с измельчением шага интегрирования.

5. Свойства материалов.

При моделировании экспериментов по взаимодействию расплава железа с диоксидциркониевым бетоном в качестве базовых величин рассматривались следующие свойства материалов:

Таблица 5.1. Свойства материалов

	Бетон	Металл	Расплав	Керамика
Теплоемкость (Дж/кг/К)	700	660	660	700
Теплопроводность (Вт/(м К))	1.2	30	30	1.5
Плотность (кг/м ³)	4600	7800	7870	3600
Т плавления (К)	2900	1800		1900
Е плавления (Кдж/моль)	40	13.8		40

Для уточненных расчетов использовались табличные зависимости коэффициентов теплопроводности и излучательной способности материалов от температуры [16,17].

Таблица 5.2. Зависимость излучательной способности диоксидциркониевого бетона (ϵ) от температуры (T).

T, К	700	800	900	1000	1100	1200	1300	1400	1500	1600	1700
ϵ	0.7	0.68	0.64	0.60	0.57	0.54	0.51	0.49	0.48	0.47	0.47

В ряде оценочных расчетов температурная зависимость бетона рассматривалась в виде:

Таблица 5.3. Зависимость теплопроводности диоксидциркониевого бетона (λ) от температуры (T).

T, К	1000	1400	1700	1900	2100	2200	2300	2500
λ , Вт/(м К)	1.2	1.2	1.5	2	3	4.5	8.8	12

6. Параметрические расчеты

6.1 Основные неопределенности

Среди основных неопределенностей, возникающих при моделировании процесса взаимодействия высокотемпературных расплавов с диоксидциркониевым бетоном - свойства материалов (электропроводность, теплопроводность, излучательная способность) и особенности условий проведения экспериментов - режимы охлаждения тигля, состояние загружаемого металла (порошок, куски металла, цельный образец), геометрическое расположение тигля относительно индуктора, наличие воздушных зазоров, оказывающих влияние на результаты моделирования на стадии разогрева холодного металла. Данные по свойствам материалов в области высоких температур ограничены, зачастую вообще отсутствуют или являются неоднозначными. Поэтому необходимо проведение анализа чувствительности модели к основным входным параметрам. Для изучения влияния определяющих параметров задачи на ход процесса взаимодействия проведена серия параметрических расчетов с варьированием следующих величин: вкладываемой мощности, температуры плавления бетона и металла, теплопроводности бетона и

металла (в том числе температурной зависимости коэффициента теплопроводности), излучательной способности материалов, энергии плавления материалов.

Для параметрических расчетов выбраны эксперименты с железом, как наиболее изученные и простые, с точки зрения набора основных взаимовлияющих процессов. Как показал анализ результатов экспериментов с железом, этот материал является химически нейтральным элементом по отношению к диоксидциркониевому бетону. Характер взаимодействия в этом случае определяется в основном тепловыми процессами, поэтому моделирование процесса взаимодействия расплава железа с диоксидциркониевым бетоном проводилось на базе тепловой модели с использованием модели расчета коэффициента связи расплав - индуктор.

В соответствии с условиями экспериментов в расчетных вариантах полагалось, что на внешней поверхности тигля и подложки заданы граничные условия третьего рода: комбинированное условие радиационного - $\epsilon \sigma(T^d - T^e_s)$ и конвективного теплообмена - $h(T-T_s)$. Начальная температура полагалась во всей области постоянной и равной 300 К.

В расчетах варьировались следующие параметры:

Таблица 6.1. Варьируемые параметры

Теплопроводность металла Вт/(м К)	5	10	30	50
Теплопроводность бетона (Вт/м/К)	1.2	0.3	3	таб(Т)
Излучательная способность металла	0.5	0.2	0.8	
Излучательная способность бетона	0.5	0.2	0.8	
Толщина скин-слоя (мм)	0.6	0.3	1.2	
Форма скин-слоя	1	2		
Козф. Конв. тепл. (Вт/м ² /К)	0.2	20	20	50
Теплота плавления металла (КДж/моль)	13	6.5	26	

В первом столбце указано базовое значение, остальные величины - варьируемые.

Кроме толщины скин-слоя варьировалась его форма. В качестве базового значения рассматривалось равномерное распределение источника, в варьируемых вариантах вводилось неравномерное тепловыделение вблизи торцовых границ цилиндрического слоя.

6.2 Результаты расчетов

Рассмотрим основные результаты численного моделирования процесса взаимодействия на примере эксперимента 1-1.

Геометрия задачи показана на рис 6.1 Исходные данные по изменению напряжения на индукторе и измеренная в эксперименте температура металла, приведены в таблицах 6.2, 6.3.

Таблица 6.2 Эксперимент 1-1. Таблица изменения напряжения на индукторе в зависимости от времени

Время, мин	Напряжение, кВ
0	3.25
19	3.50
30	3.75
39	4.00
43	3.75
46	3.50
57	3.75
60	3.70

Время, мин	Напряжение, кВ
73	0.00

Таблица 6.3 Эксперимент 1-1. Экспериментальные измерения температуры на поверхности расплава в зависимости от времени

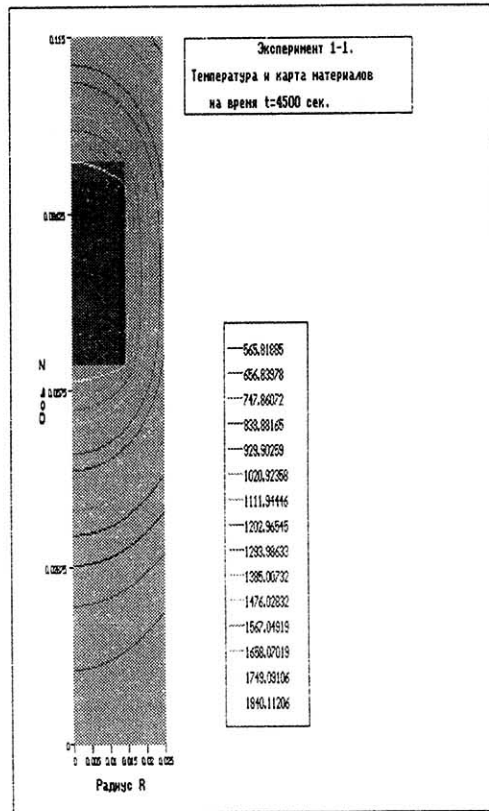
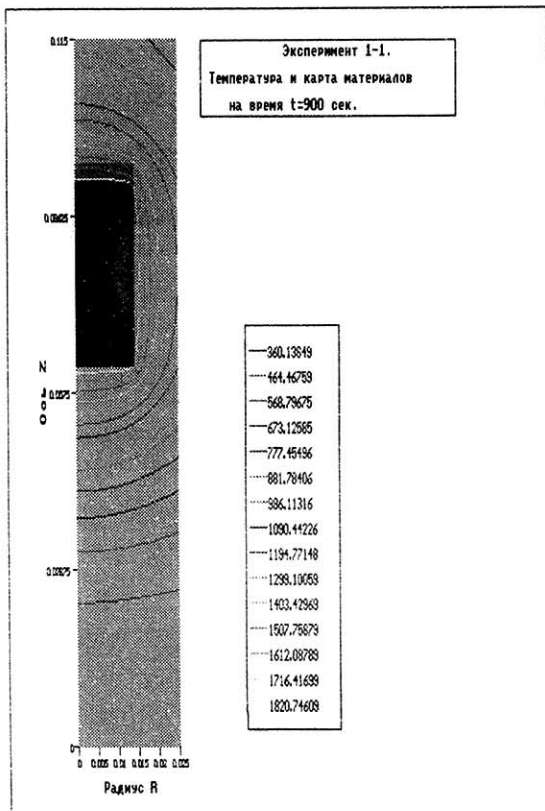
Время, мин	Температура, К
0	283
7	1610
16	1771
24	1977
35	2160
43	2368
45	2369
49	2328
52	2293
56	2275
59	2301
66	2308
72	2305
79	1491

Эксперимент продолжался 79 мин. Максимальная температура, измеренная на поверхности расплава, в эксперименте достигла 2369К. По окончании опыта не наблюдалось эрозии бетонного тигля. В опыте использовался прокаленный тигель.

Для анализа результатов расчетов строились следующие графические зависимости:

- Карта области
- Расчетная сетка
- Двумерные картины распределения температур
- Сравнение экспериментальных и расчетных значений температуры расплава
- Температуры на внутренней поверхности крышки, на внешней поверхности тигля, на нижней поверхности тигля.
- Температуры на поверхности расплава (в центре ванны, у края полости).
- Совместные графики: объемное тепловыделение и температура расплава.
- Совместные графики: объемное тепловыделение и вложенная энергия.
- Динамика изменения объема расплава.
- Эрозия бетона: вертикальная и горизонтальная.
- Интегральные тепловые потоки: с боковой, верхней, нижней поверхностей тигля.
- Суммарный поток с крышки тигля.

Динамика изменения распределения температуры в тигле и расплаве для двух последовательных моментов времени отображена на рис. 6.1 Показаны линии уровня температуры, полученные равномерным делением между максимальной и минимальной температурами на два момента времени 900 и 4500сек. На рис. 6.1а можно видеть стадию частичного расплавления металла (более светлая палитра) вблизи зоны источника (скин-слой). Часть металла находится в твердой фазе. Второй рисунок (рис.6.1б) соответствует стадии охлаждения после отключения напряжения на индукторе.



а) время = 900 с

б) 4500 с

Рис. 6.1 Эксперимент 1-1 Распределение температур на два момента времени.

На рис 6.2 показано распределение температур в расплаве на момент времени 2700 сек. Приведена расчетная сетка и изотермы в диапазоне температур (2380, 2447K). Величина 2447K соответствует максимальной температуре расплава на этот момент времени.

Зависимости от времени температуры расплава (расчетной и экспериментальной) в центре полости, вместе с выделяемой в металле мощностью, показаны на рис. 6.3. Максимальная расчетная температура составляет 2418K, максимальная температура в эксперименте - 2370.

Динамика температуры в различных точках металла и бетона в ходе вычислительного эксперимента приведена на рис. 6.4. Разница между максимальной и минимальной температурой в расплаве составляет около 70K. Максимальная температура боковой поверхности тигля - порядка 1400K, температура внутренней поверхности крышки - около 2250K.

На рис. 6.5 приведена зависимость объема расплава от времени. Плавление металла происходит за время порядка 6 минут: плавление начинается на 960-ой секунде, а к 1290-ой секунде весь металл расплавлен.

Изменение мощности, выделяемой в расплаве, и величина объемного тепловыделения отображены на рис. 6.6. Максимальная мощность составляет порядка 800 Вт, максимальное удельное тепловыделение - порядка $4 \cdot 10^8 \text{ Вт/м}^3$.

Рис. 6.7 показывает зависимость от времени интегральных потоков на боковой поверхности тигля, верхней и нижней поверхностях, а также суммарный поток с бетонной крышки тигля. Как видно из графиков, основная часть тепла снимается с боковой поверхности тигля: его величина на порядок превосходит поток снимаемый сверху. При этом доля потока снимаемого с крышки, составляет около 20% от бокового потока.

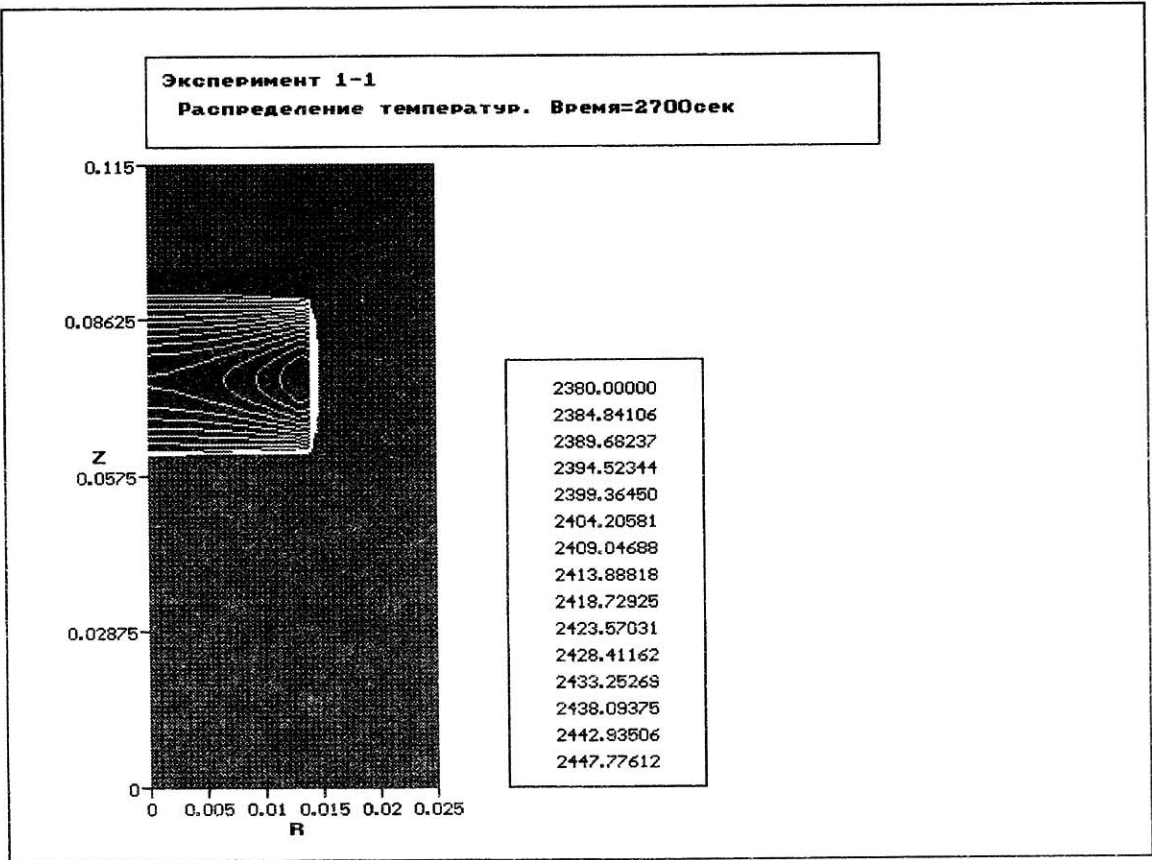


Рис. 6.2 Эксперимент 1-1 Распределение температур в расплаве.

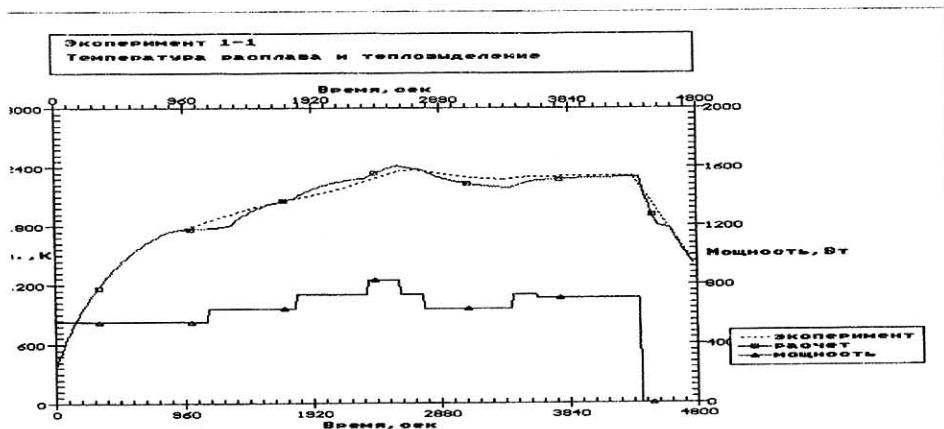


Рис. 6.3 Зависимость температуры расплава от времени

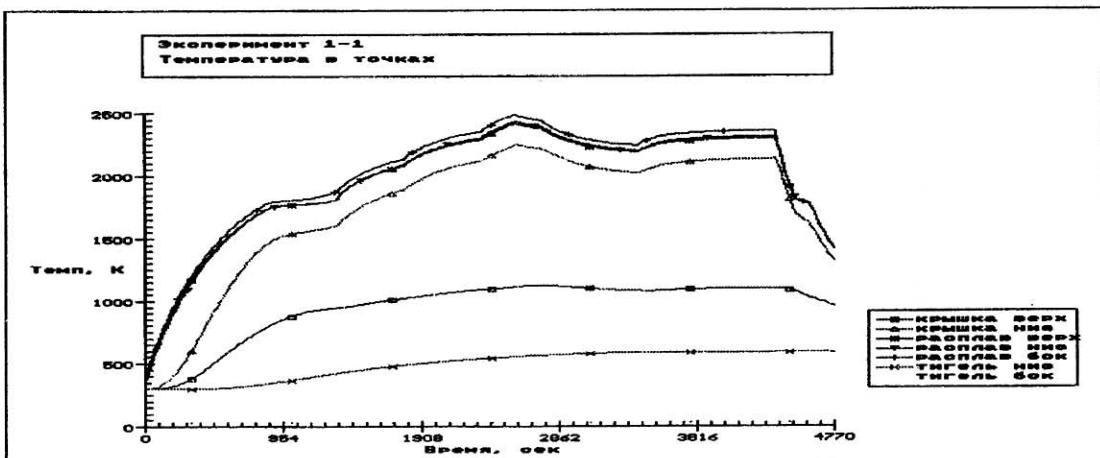


Рис. 6.4 Изменение температуры в различных точках металла и бетона

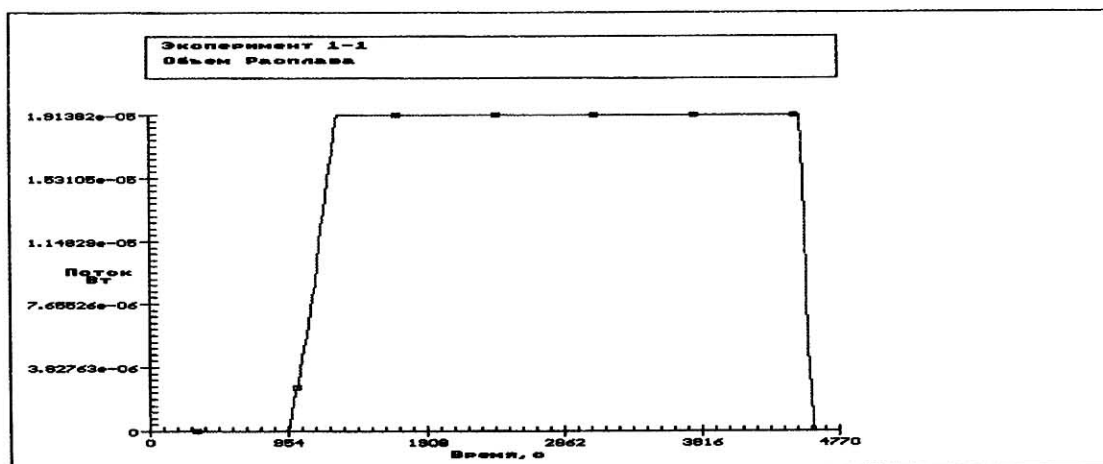


Рис 6.5 Зависимость объема расплава от времени

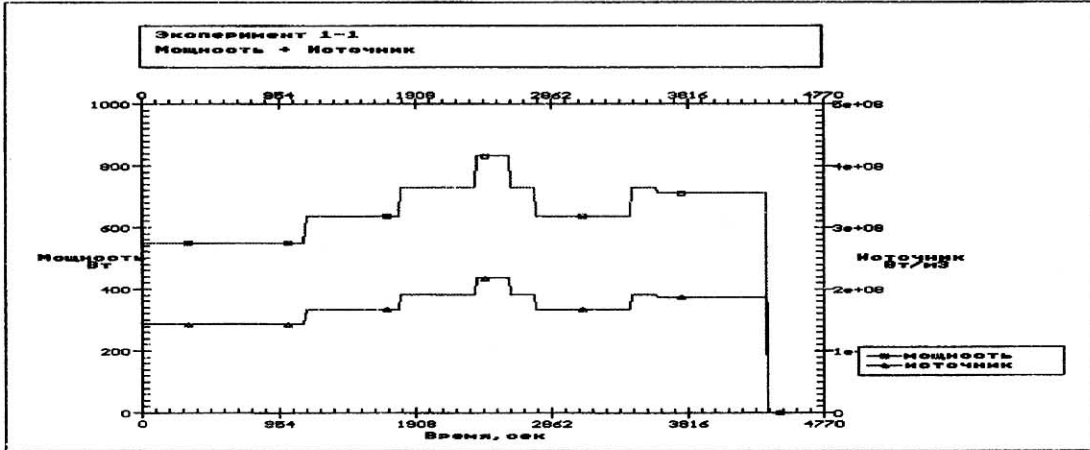


Рис. 6.6 Изменение мощности, выделяемой в расплаве и величина объемного тепловыделения

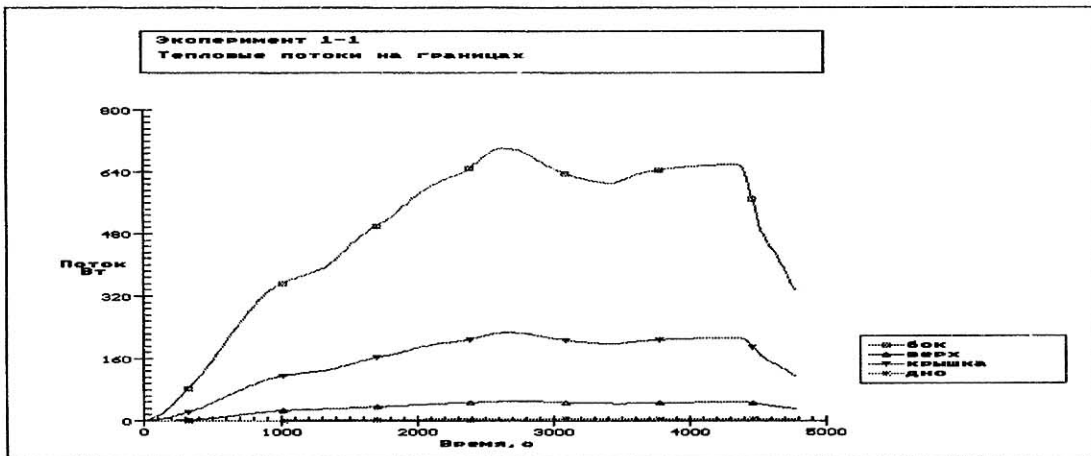


Рис. 6.7 Зависимость от времени интегральных потоков на боковой поверхности тигля, верхней и нижней поверхностях, суммарный поток с бетонной крышкой тигля

Ниже приведены результаты расчетов с варьированием основных параметров задачи.

6.3 Оценка влияния определяющих параметров

Влияние коэффициента теплопроводности бетона

Проводились расчеты со следующими значениями коэффициента теплопроводности бетона: $\lambda = 0.6, 1.2, 3.6, 4.8 \text{ Вт/(м К)}$, ($\lambda = 1.2 \text{ Вт/(м К)}$ - базовый вариант). Сравнение температур расплава для вариантов, соответствующим различным значениям коэффициента теплопроводности, показаны на рис.6.8. Можно видеть, что изменения этого параметра оказывает существенное влияние на распределение температуры в металле и бетоне. Уменьшение коэффициента в два раза относительно базового варианта (до $\lambda = 0.6 \text{ Вт/(м К)}$) приводит к быстрому росту температуры расплава и достижению в течение нескольких минут температур разложения бетона. При увеличении коэффициента теплопроводности до 3.6 Вт/(м К) температура металла не превосходит точки плавления.

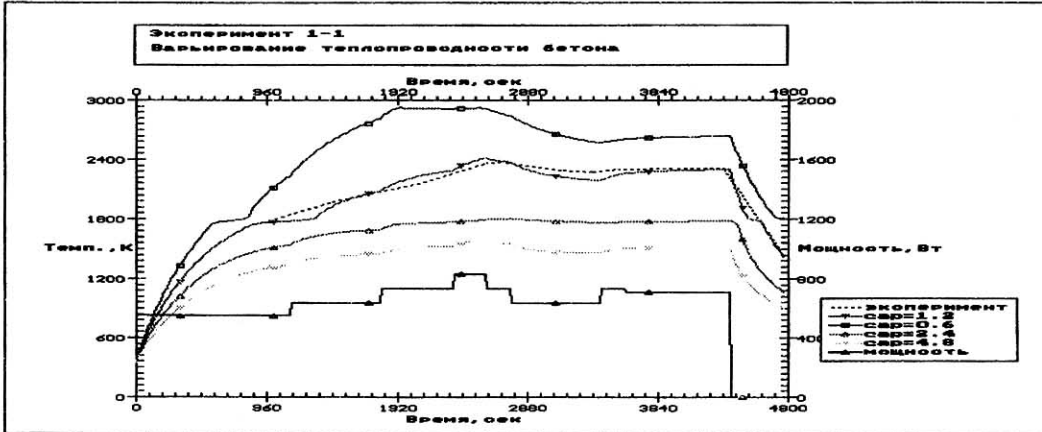


Рис. 6.8. Влияние коэффициента теплопроводности бетона

Влияние коэффициента теплопроводности расплава

Коэффициент теплопроводности металла варьировался в следующих пределах: $\lambda = 5, 10, 30, 50 \text{ Вт/(м K)}$ (30 Вт/(м K) - базовый вариант). Сопоставительные результаты расчетов приведены на рис. 6.9. Максимальное различие в температуре металла для различных вариантов составляет менее 100K .

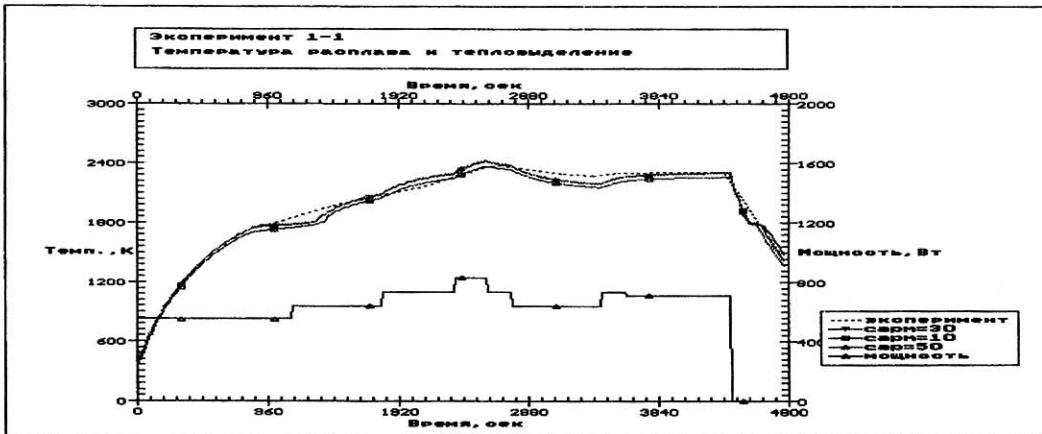


Рис. 6.9. Влияние коэффициента теплопроводности металла

Влияние излучательной способности материалов

Рассматривались следующие значения излучательной способности бетона $\epsilon=0.2, 0.5, 0.8$. Рис. 6.10 демонстрирует влияние коэффициента ϵ на температуру металла ($\epsilon=0.5$ базовый вариант). С уменьшением ϵ наблюдается заметное возрастание температуры расплава.

Для металла использовались те же значения излучательной способности $\epsilon = 0.2, 0.5, 0.8$. Варьирование этого параметра не оказывает значительного влияния на температуру металла.

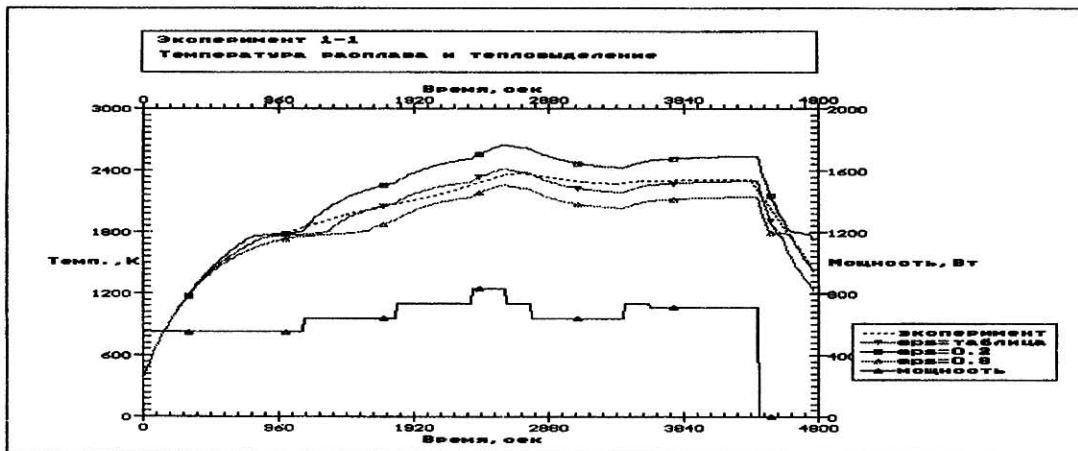


Рис. 6.10 Влияние излучательной способности бетона

Влияние энергии плавления металла

Рис. 6.11 показывает влияние величины энергии плавления металла на динамику роста температуры. Рассмотрены три значения $E=13\text{КДж/моль}$, $E=6.5\text{КДж/моль}$ и $E=26\text{КДж/моль}$. Заметное различие в поведении кривых проявляется в зоне температуры плавления. Однако эта фаза практически не сказывается на дальнейшем поведении температурной кривой. С момента времени 2400 с все расчетные кривые практически сливаются.

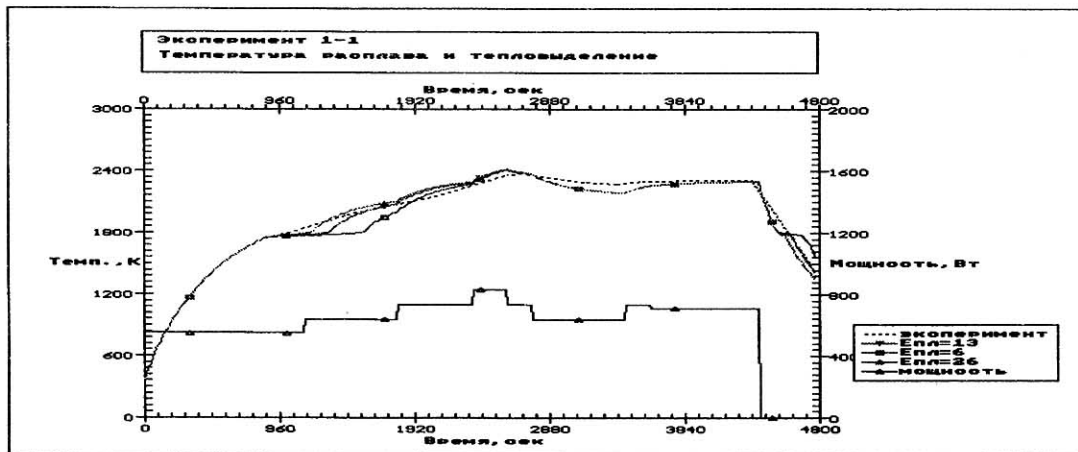


Рис. 6.11 Влияние энергии плавления бетона

Влияние коэффициента теплопередачи

Коэффициент теплопередачи на границах бетонного тигля варьировался в следующих пределах: $\alpha=0.2, 2, 20, 50\text{Вт/м}^2\text{К}$ ($2\text{Вт/м}^2\text{К}$ - базовый вариант). Сравнительные результаты расчетов приведены на рис. 6.12. Кривые, соответствующие $\alpha=0.2\text{Вт/м}^2\text{К}$ и $\alpha=2\text{Вт/м}^2\text{К}$, практически не различаются. Увеличение коэффициента теплопередачи до $50\text{Вт/м}^2\text{К}$ приводит к значительному понижению температуры расплава. Максимальное различие в температуре для различных вариантов составляет более 300К .

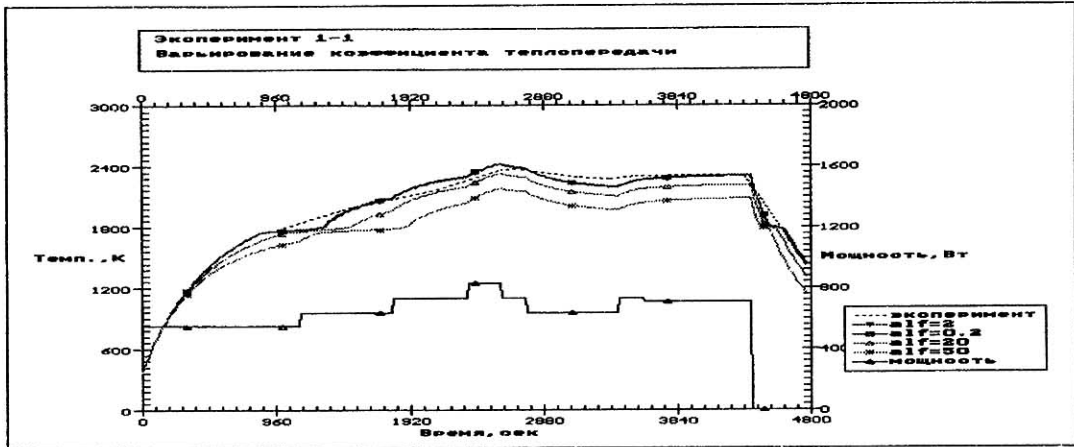


Рис. 6.12. Влияние коэффициента теплопередачи

Влияние толщины и формы скин-слоя

В условиях проводимых опытов толщина скин-слоя оценивается порядка 0.6 мм. Расчеты с варьированием толщины скин-слоя в пределах 0.3 - 1.6 мм показывают, что в этом диапазоне параметр практически не влияет на изменение температуры расплава. Учет увеличения тепловыделения на верхней и нижней поверхности металла, также оказывает незначительное влияние на температуру (в пределах 10-ти градусов).

Влияние коэффициента связи

В ходе расчетов проводились уточнение и тестирование модели расчета коэффициента связи расплав-индуктор. Для проверки модели и уточнения используемых свойств материалов проведены расчеты серии экспериментов с железом. В частности, подробно рассмотрены эксперименты 1-1 и 1-2, выполненные в близких условиях: одна и та же геометрия тиглей и индуктора при одинаковой степени загрузки металла. Незначительное отличие опытов заключалось в режимах нагрева (напряжение на индукторе) и в свойствах тиглей: в эксперименте 1-1 использовался прокаленный тигель, а в эксперименте 1-2 - не прокаленный тигель.

Расчеты экспериментов с железом (1-1, 1-2, 4-1) подтверждают, что теплопроводность бетона слабо зависит от температуры. Использование данных по теплопроводности прокаленного и не прокаленного

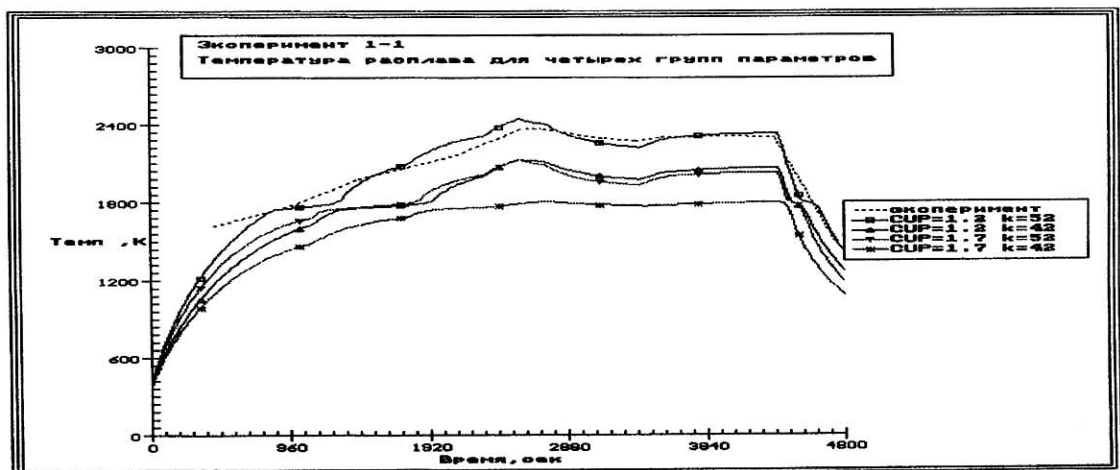


Рис. 6.13 Эксперимент 1-1. Температура расплава для $\lambda=1.2$ Вт/м К, $\lambda=1.7$ Вт/м К, $\kappa=42$ Вт/κВ², $\kappa=52$ Вт/κВ²

тиглей (табл. 5.2) дает хорошее совпадение с экспериментальными измерениями температуры расплава. В проведенных расчетах варьировались коэффициент связи и теплопроводность бетона. На рис. 6.13 приведены результаты расчета эксперимента 1-1: четыре кривые, показывающие зависимость температуры расплава для двух значений коэффициента теплопроводности бетона $\lambda=1.2 \text{ Вт/м К}$, $\lambda=1.7 \text{ Вт/м К}$ и двух значений коэффициента связи $\kappa=42 \text{ Вт/кВ}^2$, $\kappa=52 \text{ Вт/кВ}^2$. Видно, что хорошее совпадение с экспериментом дает кривая, соответствующая $\lambda=1.2 \text{ Вт/м К}$ и $\kappa=52 \text{ Вт/кВ}^2$.

На рис. 6.14 приведены результаты расчета эксперимента 1-2 для тех же четырех параметров: $\lambda=1.2 \text{ Вт/м К}$, $\lambda=1.7 \text{ Вт/м К}$, $\kappa=42 \text{ Вт/кВ}^2$, $\kappa=52 \text{ Вт/кВ}^2$. Хорошее совпадение с экспериментом дает кривая, соответствующая, как и в эксперименте 1-1 коэффициенту связи $\kappa=52 \text{ Вт/кВ}^2$, и коэффициенту теплопроводности бетона $\lambda=1.7 \text{ Вт/м К}$, что соответствует свойствам не прокаленного тигля.

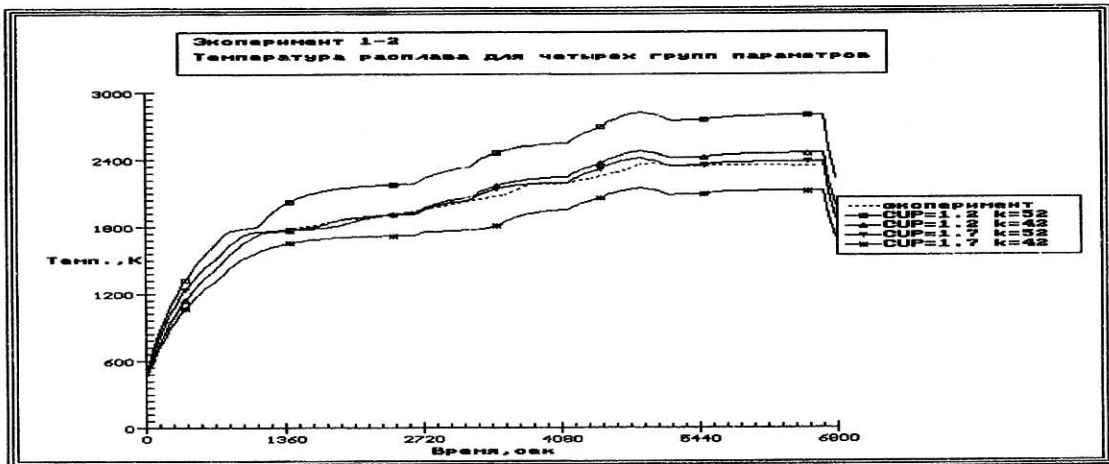


Рис. 6.14 Эксперимент 1-2. Температура расплава $\lambda=1.2 \text{ Вт/м К}$, $\lambda=1.7 \text{ Вт/м К}$, $\kappa=42 \text{ Вт/кВ}^2$, $\kappa=52 \text{ Вт/кВ}^2$

Таким образом, результаты параметрических расчетов показали, что среди наиболее важных параметров, определяющих процесс взаимодействия - коэффициент теплопроводности бетона, излучательная способность бетона, мощность, выделяемая в расплаве. Варьирование коэффициента теплопроводности металла, его излучательной способности и энергии плавления оказывают незначительное влияние этих параметров на температуру расплава.

7. Основные результаты

Проведена разработка математических моделей, которые реализованы в виде комплекса программ для анализа взаимодействия высокотемпературных расплавов с диоксидциркониевым бетоном.

Разработана модель теплового поведения расплава и окружающих конструкций, основанная на решении уравнения теплопроводности с фазовым переходом в предположении аксиальной симметрии задачи. Реализованы граничные условия радиационного и конвективного теплообмена на внешней поверхности тигля и крышке. Для моделирования экспериментов учтено переизлучение в воздушной полости между поверхностью расплава и бетонной крышкой. Введена возможность задания различных конфигураций скин-слоя: от случая, когда энерговыведение происходит в тонком внешнем слое металла, до различных распределений толщины слоя по радиусу на верхней и нижней поверхностях металла.

Разработана аналитическая модель для определения коэффициента связи системы расплав-индуктор для случая осесимметричного расплава. С помощью модели рассчитаны коэффициенты связи для стандартных тиглей при различной степени заполнения. Образование на боковой поверхности расплава слоя с электрической проводимостью, в несколько раз меньшей проводимости расплава, приводит к росту коэффициента связи в число раз, изменяющееся от единицы до корня из отношения удельных

проводимостей (в зависимости от толщины слоя). Разработанная модель электродинамической системы расплав-индуктор реализована в программном модуле, который позволяет по заданным геометрическим параметрам индуктора и расплава, их расположению, электромагнитным коэффициентам расплава и индуктора рассчитывать коэффициент связи индуктор-расплав и определять пространственную и временную структуру энерговыделения в расплаве.

Разработана аналитическая модель химического взаимодействия основного компонента диоксидированного бетона (диоксида циркония) с наиболее активным элементом расплава - жидким цирконием. Определены основные механизмы реакции (диффузионный и конвективный) для двух характерных диапазонов температур. Разработан численный алгоритм реализации аналитической модели как в виде отдельного модуля, так и в рамках общего комплекса расчетных программ. Исследовано одномерное приближение на размере численных ячеек общей тепловой задачи и подтверждено соответствующими численными оценками. Численный алгоритм реализован в виде отдельного модуля, модуль состыкован с основным комплексом и протестирован на экспериментальном материале.

Разработаны программные средства для организации вычислительного процесса: форматы входных данных, средства для поддержания организации обмена данными между вычислительными модулями и внешней памятью, организация хранения и обмена данными внутри вычислительной программы, библиотека процедур для обработки данных, программы визуализации расчетных данных.

На базе разработанного комплекса программ проведены расчеты серии экспериментов НИЦ ТИВ по взаимодействию высокотемпературных металлических расплавов с диоксидциркониевым бетоном. Расчеты показали соответствие имеющихся модельных представлений экспериментальным результатам.

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта МНТЦ-П-64-94

Авторы выражают благодарность сотрудникам НИЦ ТИВ за полезные обсуждения и предоставленную информацию при подготовке этой работы.

Список литературы

1. Szabo I. Survey of design principles and basic mechanisms of ex-vessel molten core retention devices. Proceedings of 5th international seminar on containment of nuclear reactors, 1993, Karlsruhe, Germany.
2. Alsmeyer H., Tromm W. A Core Catcher Concept and Basic Experimental results. pp. 101- 105.
3. Weisshaupt H.A. Large spreading of core melt for melt retention/stabilization. Proceedings of 5th International Seminar on containment of nuclear reactors, 1993, Karlsruhe, Germany.
4. Valin F., Boncoeur M. some investigations on core catcher materials. Proceedings of 5th International Seminar on containment of nuclear reactors, 1993, Karlsruhe, Germany.
5. Theofanus T.G., Amarasooriya W.H., Yan H., Ratnam V. The Probability of Liner Failure in Mark 1 Containment. Nureg/CR-5423, 1990.
6. Humbert J.M., David O., Norge P. Preliminary studies on a flat core catcher with promotion of radiative heat transfer. Proceedings of 5th International Seminar on containment of nuclear reactors, 1993, Karlsruhe, Germany.
7. Szabo I., Richard P., Bergmaschi Y., Seiler J.M. A multi crucible catcher concept: design consideration and basic calculational results. Abstracts of 5th International Seminar on containment of nuclear reactors, 1993, Karlsruhe, Germany.
8. Tromm W., Alsmeyr H. experiments for a core catcher concept based on water addition from below. Proceedings of 5th International Seminar on CONTAINMENT OF NUCLEAR REACTORS, 1993, Karlsruhe, Germany.
9. Fish J.D., Piltch M., and Arelano. Demonstration of Passively-Cooled Particle-Bed Core Retention. Proc. LMFBR Safety Topical Meeting, Lyon, 1982, p. III-327.

10. Turrichia A., How to avoid molten core/concrete interaction (and steam explosions. Proc. 2nd OECD (NEA) CSNI Specialists Meeting of Molten Debris-Concrete Interaction, Karlsruhe, April 1992 Kfk 5108, NEA.CSNI/R(92) 10 Nov 92 (Editor: H. Alsmayer) p.503
11. Parrozi F., Magallon D., Wider H.U., Fiorovanti D., Lombardi C. Feasibility of an experimental programme on the corium retention issue for alwr plants. Proceedings of the workshop OECD/CSNI/NEA on large molten pool heat transfer, Grenoble, March 1994, p. 479
12. Арутюнян Р.В., Большов Л.А., Киселев В.П., Попков А.Г., Стрижов В.Ф., Чуданов В.В. Моделирование систем удержания расплава топлива. Сборник работ Проблемы Безопасного Развития Атомной Энергетики. М.Наука, 1990
13. Арутюнян Р.В., Большов Л.А., Головизнин В.М., Киселев В.П., Попков А.Г., Стрижов В.Ф., Чуданов В.В. Моделирование проплавления корпуса реактора и опускания топлива в бетоне при тяжелых авариях на АЭС с ВВЭР с помощью комплекса программ РАСПЛИВ, М. 1989, 40 с, Препринт ИАЭ им. Курчатова N 4778/3
14. Р.В.Арутюнян, Л.А.Большов, А.Д.Васильев, С.В.Онуфриев, В.А.Петухов, В.Е.Фортов, Е.Н.Шестаков. ДАН СССР, 1991, т.316 N1, с.104-107
15. S.V.Onufriev, E.P.Pakhomov, V.A.Petukov, E.N.Shestakov, V.E.Fortov. Investigation of the intrraction of high-temperature mrtal melts with refractory concretes. High Tempertaures-High Pressures, 1994, vol. 26, pp. 765-771.
16. Р.Е.Кржижановский, З.Ю. Штерн, Теплофизические свойства неметаллических материалов.
- 17 SCDAP/RELAP5/MOD2 CODE, Manual , Volume 4: MATPRO-A. Library fo Material Properties for Light Water Reactors Accident Analysis. NUREG/CR - 5273, EGG-255, Vol.4 R3, 1990.
18. Самарский А.А. Теория разностных схем. 1989
19. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Электродинамика сплошных сред. М.. Наука, 1982, 624 с.
20. Бабичев А.П., Бабушкина Н.А., Братковский А.М. и др. Физические величины. Справочник/Под ред. Григорьева И.С., Мейлихова Е.З. М.. Энергоатомиздат, 1991, 1232 с.
21. P Hofmann et al., "Mechanisches und chemisches Verhalten von Zircaloy-4 Hullrohren und UO2-Brennstoff bei honen Temperaturen", Kfk - 4100, Kernforschungszentrum Karlsruhe, (1987).
22. J .P. Abriata, J. Garces and R. Versaci, "The O-Zr (Oxygen-Zirconium) System", Bull. of Alloy Phase Diagrams, 7, No 2 (1986), 116.
23. А.В. Егоров "Электроплавильные печи черной металлургии", Металлургия, 1985.
24. К.Т. Kim, D.R.Olander. "Dissolution of Uranium Dioxide by Molten Zircaloy, II. Convective-controlled reaction". J.Nuc.Mat., 154 (1988), 102.
25. A.N.Wilhelm and E.A.Carcia., Simulation of the Dissolution of the kinetics of ZrO2 by molten Zircaloy-4 between 2000 and 2400 оС. - J.Nuc.Mat., Vol 171, (1990), pp. 245-252.
26. R.E.Pawel, J.Electrochem.Soc., Vol.126, No. 7, (1979).
27. А.М.Волчек. К моделированию взаимодействия оболочки ТВЭЛа с топливной таблеткой и паром. - Препринт NSI-14-93, Москва: ИБРАЭ РАН, 1993.
28. А.М. Voltchek, А.Е. Kisselev, V.F. Strijov, A. Porracchia, R. Gonzalez, P. Chatelard, "Assessment of the modified ICARE2 code oxygen diffusion model for UO2/Zr/H2O interactions", Technical committee MAGATE, Dimitrovograd, Russia, October 9-13, 1995.
29. J.T. Prater, E.L. Courtright, - "High-Temperature Oxidation of Zircaloy-4 in Steam and Steam-Hydrogen Environments", NUREG/CR-4476, PNL-5558, U.S. National Regulatory Commission (1986).
30. H.Z.Barakat, J.A.Clark, in Proc. Int. Heat Transfer Conf., Vol. 2, (1966), p. 152.
31. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Гидродинамика. - Москва, 1986, с.300.
32. JANAF Tables. J.Phys. Chem.Ref. Data, Vol. 14, Suppl. 1, 1985, p. 1691.

33. Варенков В.В., Первичко В.А., Попков А.Г., Чуданов В.В. Программная система RCS: организация вычислений для моделирования физических процессов. Препринт ИБРАЕ-95-05. Москва: Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН, 1995.
34. Варенков В.В., Первичко В.А., Попков А.Г. Самодокументированный файл данных. Препринт NSI-16-93. М.: Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН, 1993.
35. Варенков В.В., Первичко В.А., Попков А.Г., Чуданов В.В. DBV-подсистема для работы с базой данных по переменным. Препринт ИБРАЭ N ,1997.