ИБРАЭ
РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
Институт проблем безопасного развития атомной энергетики

Труды ИБРАЭ

РАЗРАБОТКА И ПРИМЕНЕНИЕ ИНТЕГРАЛЬНЫХ КОДОВ ДЛЯ АНАЛИЗА БЕЗОПАСНОСТИ АЭС

НАУКА

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики

ТРУДЫ ИБРАЭ

Под общей редакцией члена-корреспондента РАН
Л. А. Большова

Выпуск 12

РАЗРАБОТКА И ПРИМЕНЕНИЕ ИНТЕГРАЛЬНЫХ КОДОВ ДЛЯ АНАЛИЗА БЕЗОПАСНОСТИ АЭС

Научный редактор
профессор, доктор физико-математических наук *Р. В. Арутюнян*

Москва Наука 2011

УДК 621.31
ББК 31.4
Т78

Рецензенты:
доктор физико-математических наук *О. И. Мелихов*,
доктор технических наук *А. Е. Киселев*

Труды ИБРАЭ РАН / под общ. ред. чл.-кор. РАН Л. А. Большова ; Ин-т проблем безопасного развития атомной энергетики РАН. — М. : Наука, 2007— .
Вып. 12 : Разработка и применение интегральных кодов для анализа безопасности АЭС / науч. ред. Р. В. Арутюнян. — 2011. — 304 с. : ил. —
ISBN 978-5-02-037971-8 (в пер.).

В сборнике публикуются работы, посвященные моделированию различных аспектов аварийных процессов при тяжелых авариях с использованием интегральных расчетных кодов. Представлены базовые модели, входящие в состав интегрального расчетного кода СОКРАТ и описывающие процессы, происходящие при тяжелых повреждениях активной зоны реакторной установки. Приведены примеры практического использования интегральных расчетных кодов для анализа безопасности АЭС с реакторными установками ВВЭР.

Для специалистов, студентов и аспирантов в области моделирования аварийных процессов.

Proceedings of IBRAE RAS / Ed. by L. A. Bolshov ; Nuclear Safety Institute (IBRAE) RAS. — Moscow : Nauka, 2007— .
Issue 12 : Integral Codes Development and Application for NPP Safety Analisis [in Russian] / Ed. by R. V. Arutyunyan. — 2011. — 304 p. : ill. —
ISBN 978-5-02-037971-8 (bound).

This collection of papers includes materials dealing with simulation of various aspects of off-normal processes in the course of severe accidents using integral computational codes. Basic models being elements of the SOCRAT integral code are provided which describe the processes occurring at severe damages of reactor core. Examples of practical application of integral computational codes for safety analysis at nuclear power plants with VVER are cited.

The assumed target for the issue are students and specialists in simulation radioecology of off-normal processes.

ISBN 978-5-02-037971-8

© Продолжающееся издание «Труды ИБРАЭ РАН», 2007 (год основания), 2011
© Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН, 2011
© Коллектив авторов, 2011
© Редакционно-издательское оформление. Издательство «Наука», 2011

Содержание

Предисловие 5

I. Разработка пакета программ СВЕЧА
для моделирования внутрикорпусной фазы запроектной аварии
реакторов водо-водяного типа
М. С. Вещунов, А. Е. Киселев, В. Ф. Стрижов 8

II. Моделирование физико-химических процессов,
протекающих в твэлах водо-водяных реакторов
при запроектных авариях (модули PROF и LIQF)
А. А. Бердышев, М. С. Вещунов, А. Е. Киселев, М. Ю. Коржов, Т. А. Юдина 33

III. HEFEST: численное моделирование процессов в нижней части
реактора ВВЭР при тяжелой аварии
А. В. Игнатьев, А. Е. Киселев, В. Н. Семенов, В. Ф. Стрижов, А. С. Филиппов 96

IV. HEFEST: модели теплообмена с паром
и перемещения материалов в НКС реактора ВВЭР
при тяжелой аварии
А. Е. Киселев, В. Н. Семенов, В. Ф. Стрижов, А. С. Филиппов, А. Л. Фокин 144

V. Численное моделирование поведения расплава
в корпусе реактора ВВЭР-1000
А. Е. Киселев, М. Ю. Коржов, В. Ф. Стрижов, А. С. Филиппов 181

VI. Применение интегральных кодов для моделирования
аварийных режимов реакторов типа ВВЭР
А. Е. Киселев, Н. А. Мосунова, В. Н. Носатов, А. Е. Стрижов, Д. Ю. Томащик 204

VII. Моделирование тяжелого аварийного режима
реакторной установки ВВЭР-440 (В-230)
с использованием кода MELCOR-1.8.5
А. Е. Киселев, Н. А. Мосунова, В. Н. Носатов, А. Е. Стрижов, Д. Ю. Томащик 219

VIII. Развитие моделей переноса и трансформации аэрозолей в коде ПРОФИТ. Осаждение аэрозольных частиц
В. М. Алипченков, Л. И. Зайчик, А. Е. Киселев, В. Ф. Стрижов, А . С. Филиппов, А. Л. Фокин, С. В. Цаун 229

IX. Развитие моделей переноса и трансформации аэрозолей в коде ПРОФИТ. Коагуляция аэрозольных частиц
В. М. Алипченков, Л. И. Зайчик, А. Е. Киселев, В. Ф. Стрижов, А. С. Филиппов, С. В. Цаун 251

X. Неравновесная модель истечения теплоносителя через трещины в трубах для обоснования концепции «Течь перед разрушением»
В. Н. Семенов, Л. П. Стародубцева, Л. М. Соков 277

Предисловие

В сборнике публикуются выполненные в ИБРАЭ РАН работы, посвященные моделированию различных аспектов аварийных процессов при тяжелых авариях. Описанные в статьях модели реализованы в виде расчетного кода СОКРАТ, позволяющего моделировать процессы при развитии аварии от исходного события до разрушения корпуса реактора. Необходимость разработки такого расчетного кода определяется новыми потребностями обоснования безопасности при проектировании атомных электростанций с улучшенными экономическими показателями, модернизацией существующих АЭС, разработкой инструкций по управлению запроектными и тяжелыми авариями и аварийного планирования. Рассматриваемый комплекс обеспечивает самосогласованный расчет внутриреакторных процессов и процессов, протекающих под защитной оболочкой, включая устройство локализации расплава. Разработанные программы использовались при обосновании безопасности АЭС с водо-водяными энергетическими реакторами (ВВЭР) нового поколения, таких как Тяньваньская в Китае и Кудамкулам в Индии. В частности, с использованием этого программного комплекса было проведено обоснование системы водородной безопасности, проанализированы сценарии разрушения активной зоны и выхода расплава в устройство локализации, гарантированно предотвращающее внекорпусное развитие аварийного процесса.

В статье I представлены описание и результаты верификации пакета программ СВЕЧА, предназначенного для использования в составе кодов улучшенной оценки для анализа безопасности реакторных установок водо-водяного типа (ВВЭР, РБМК, PWR) и описывающего процессы физико-химических взаимодействий в активной зоне реактора — окисление оболочек твэлов, плавление, стекание расплавленных материалов. Для верификации расчетного кода использовались результаты экспериментов по отдельным явлениям и данные интегральных экспериментов. Область практических приложений моделей пакета СВЕЧА включает анализ безопасности таких реакторных установок, как ВВЭР-1000, РБМК-1000, ВВЭР-440, ВПБЭР-600, PWR, BWR, реакторы малой энергетики.

Модели физико-химического взаимодействия оболочек твэлов с теплоносителем, в также модель растворения топлива расплавленным материалом оболочки, реализованные в виде программ PROF и LIQF, представлены в работе II. Описанные в данной статье версии модулей PROF и LIQF были специально разработаны для практических приложений в составе кодов «улучшенной» оценки, предназначенных для моделирования запроектных аварий.

При изучении гипотетических сценариев тяжелых аварий с расплавлением активной зоны ВВЭР одним из основных объектов исследования является расплав материалов активной зоны, переместившийся на днище корпуса реактора. Исследованию процессов теплопередачи в расплаве, механизмов разрушения корпуса реактора, возможности его охлаждения посвящено большое количество работ, как экспериментальных, так и теоретических. В работе III рассмотрена реализация моделей в расчетном коде СОКРАТ, которая представлена двумя независимыми модулями, предназначенными для расчета теплофизических и термомеханических процессов, включающих перемещение, разогрев, теплопередачу, деформирование и разрушение материалов активной зоны и корпуса.

Особенности реализации моделей взаимодействия расплава с внутрикорпусными устройствами изложены в статье IV. Приведена расчетная область нижней части корпуса ВВЭР и внутрикорпусных конструкций, описана общая организация процесса расчета, рассмотрены вопросы взаимодействия расчетных модулей с расчетным кодом РАТЕГ, описывающим теплогидравлические процессы, и модулем СВЕЧА, определяющих скорость перемещения материалов.

В статье V описан сценарий событий, физические процессы и модели кода СОКРАТ, относящиеся к стадии нахождения расплава в корпусе реактора типа ВВЭР-1000 при тяжелой аварии. Приведены результаты тестовых расчетов и расчетов теплового взаимодействия расплава с корпусом реактора для сценария «большая течь». Проведена кросс-верификация расчетного кода для моделирования конвективной теплоотдачи и распространения области плавления, для которой использовался коммерческий код Fluent 6.3. Достигнуто хорошее соответствие результатов, полученных по гидродинамическому коду Fluent 6.3 и по коду СОКРАТ.

Статьи VI и VII посвящены формированию расчетных схем для интегральных расчетных кодов и результатам расчетов аварийного режима с гильотинным разрывом главного циркуляционного трубопровода на холодной нитке первой петли контура циркуляции на неизолируемом участке реакторной установки с ВВЭР-440 (В-230) с использованием кода MELCOR-1.8.5. Выполнено исследование чувствительности интегральных результатов к возможности блокировки каналов активной зоны.

Работы VIII и IX посвящены вопросам моделирования распространения аэрозольных частиц в первом контуре реакторной установки. Их цель — разработка модуля ПРОФИТ, являющегося частью сквозного кода СОКРАТ. Для моделирования поведения аэрозольных частиц в реакторной установке необходимо рассмотреть три основные задачи: 1) транспорт аэрозолей в циркуляционном контуре; 2) осаждение частиц на стенках трубопроводов

контуров или поверхностях помещений; 3) изменение размера и композитного состава аэрозолей. Используемая в расчетном коде модель предполагает, что перенос аэрозольных частиц происходит со скоростью газовой фазы, расчет которой осуществляется теплогидравлическим модулем. В модуле ПРОФИТ рассматривается решение второй и третьей задач. Наибольшие теоретические трудности связаны с описанием процессов осаждения и коагуляции аэрозольных частиц, в особенности при турбулентном режиме движения. В статье VIII рассмотрены вопросы осаждения аэрозольных частиц. Построены обобщающие зависимости для скорости осаждения аэрозольных частиц в результате броуновской и турбулентной диффузии, турбулентной миграции (турбофореза) и механизмов осаждения конвективного типа (гравитационной седиментации, центробежной силы, термофореза, стефановского потока при конденсации пара, диффузиофореза и т. д.). Статья IX посвящена моделированию процесса агломерации частиц под действием различных механизмов коагуляции. Построены корреляционные зависимости для ядер столкновений и коагуляции аэрозольных частиц под действием броуновского, турбулентного, градиентного и гравитационного механизмов с учетом эффекта аккумулирования. Полученные зависимости учитывают взаимное влияние различных механизмов коагуляции.

В работе X описана гомогенная неравновесная модель двухфазной среды для расчета критического истечения вскипающей воды через узкие каналы с большим отношением длины к гидравлическому диаметру (трещины). Модель включает уравнение кинетики фазового перехода с использованием дополнительного параметра — времени установления фазового равновесия в системе. В работе время установления равновесия основывается на анализе обширного экспериментального материала по критическому истечению вскипающих потоков. Модель использовалась для расчетов расхода теплоносителя через трещины в трубах в рамках концепции «течь перед разрушением».

I. Разработка пакета программ СВЕЧА для моделирования внутрикорпусной фазы запроектной аварии реакторов водо-водяного типа

М. С. Вещунов, А. Е. Киселев, В. Ф. Стрижов

1. Назначение и структура пакета СВЕЧА

Обоснование безопасности действующих и проектируемых АЭС требует хорошо обоснованного анализа поведения объекта при запроектных авариях. В отечественной и мировой практике такой анализ осуществляется с использованием кодов улучшенной оценки. При этом на современном уровне учитывается большой спектр физических явлений, обеспечивается взаимосогласованное моделирование теплогидравлических и физико-химических процессов в рамках сквозного моделирования всех стадий аварии. В качестве предмета численного моделирования кодом улучшенной оценки можно выделить следующие задачи:

- моделирование теплогидравлических контуров реакторов водо-водяного типа (в номинальном и аварийном режимах), включая работу систем обеспечения безопасности реакторной установки (РУ);
- моделирования процессов разрушения активной зоны (АЗ) и внутрикорпусных устройств (ВКУ) на различных стадиях тяжелой аварии с учетом взаимосвязи физико-химических процессов в АЗ, взаимодействия материалов и сред, перемещения стекающих жидких компонентов, термомеханики оболочек, выхода и поведения радионуклидов.

Для выполнения численного моделирования процессов разрушения, протекающих в АЗ и ВКУ, в ИБРАЭ РАН с 1990 г. разрабатывается пакет программ СВЕЧА [1; 2]. Пакет развивается как самостоятельный объединенный модуль, подключаемый к теплогидравлическим кодам различного уровня сложности.

Основные модели и программные модули пакета построены на принципах физического моделирования явлений, протекающих в активной зоне реактора в аварийных режимах. В настоящее время набор модулей пакета СВЕЧА позволяет моделировать большинство физических процессов, адекватность учета которых в значительной мере влияет на достоверность результатов анализа запроектной аварии РУ ВВЭР [3]:

- внешнее, внутреннее, двустороннее окисление циркониевой оболочки паром;

- выделение водорода в результате реакций окисления циркония;
- влияние растрескивания оксидного слоя на скорость окисления циркония;
- прекращение роста оксидных пленок в циркониевой оболочке в условиях кислородного голодания и уменьшение их толщины вплоть до полного исчезновения;
- взаимодействие UO_2 топлива с циркониевой оболочкой «в твердой фазе» (при температурах ниже точки плавления циркония);
- растворение UO_2 топлива и внешнего оксида ZrO_2 расплавленным цирконием;
- окисление жидкой $U\text{-}Zr\text{-}O$ смеси и образование керамического $(U, Zr)O_{2-x}$ кориума в процессе окисления;
- изменение конфигурации активной зоны вследствие перемещения расплава;
- наступление блокировки каналов теплоносителя в результате стекания расплава;
- разрушение твэлов при тяжелой аварии, включая разгерметизацию с выходом продуктов деления и вытекание расплава из-под окислившейся оболочки;
- перенос значительного количества тепла со стекающим расплавом вниз;
- интенсивное окисление расплава в паровой атмосфере в процессе его стекания;
- окисление стальных конструкций АЗ и ВКУ, формирование оксидов железа, хрома и никеля в процессе окисления нержавеющей стали; двустороннее окисление труб блока защитных труб в ходе аварии; окисление в условиях «кислородного голодания»;
- выделение водорода в результате реакций окисления стали;
- тепловой эффект реакций окисления;
- теплообмен в твэлах через газовый зазор, включая расчет свойств газового зазора с учетом конструктивных особенностей твэлов;
- теплопередачу между различными областями внутри корпуса реактора, включая перенос энергии излучением;
- доокисление материалов, поступивших в нижнюю камеру смешения (НКС) в ходе деградации АЗ.

Пакет программ СВЕЧА (специально адаптированный для интегрирования в тепло-гидравлический код) представляет собой систему модулей сложной структуры, включающую:

- модули, описывающие отдельные физические явления;
- интерфейсы к внутренним и внешним базам данных кода по свойствам материалов;

- интерфейсы к численным, теплогидравлическим блокам, блокам переноса излучением, нейтронной кинетики, моделям выброса и переноса радионуклидов, поведения расплава на днище корпуса реактора;

Кроме того, в пакете реализованы расширения области применимости моделей для описания разрушения различных элементов конструкции АЗ: твэлов, обечаек кассет, поглотительных и регулирующих элементов, дистанционирующих решеток.

Основные модели и модули пакета СВЕЧА могут быть разбиты на следующие большие группы:

- модель процессов окисления защитных оболочек твэлов и их эвтектического взаимодействия с топливными таблетками (модель основывается на численном решении диффузионной задачи по многослойной структуре окисляющегося твэла);
- модель процессов разрушения твэлов, вызванных растворением таблетки UO_2 жидким циркалоем (на основе решения конвективного уравнения массопереноса для жидкой фазы и диффузионного уравнения для твердой фазы; модель описывает стадию насыщения раствора (saturation) и стадию выделения из раствора (precipitation), а также учитывает влияние оксидного слоя оболочки при одновременном растворении UO_2 и ZrO_2);
- модель механического поведения оболочек твэлов, описывающая деформацию многослойной структуры с учетом зависимости физико-химических свойств оболочки от температуры, концентрации кислорода, скорости деформации и др.;
- модель перемещения расплавленных материалов активной зоны (основана на численном решении усредненных гидродинамических уравнений, учитывающих граничные условия «расплав—твердая структура», «расплав—теплоноситель», капиллярные эффекты и др.; анализ процессов разрушения твэлов с учетом различных типов течения расплава: капля, струя, пленка);
- модель окисления нержавеющей стали ВКУ, выделения водорода и разрушения стальных конструкций в ходе тяжелой аварии;
- модель радиационного теплообмена между тепловыми структурами АЗ и ВКУ с учетом изменения геометрии тепловых структур при деградации АЗ;
- модель, описывающая теплоперенос через газовый зазор под оболочкой твэлов (определение давления под оболочкой, конвекционный, конвективный и радиационный теплоперенос);
- модули, позволяющие выполнять расчет теплофизических свойств материалов АЗ и ВКУ и их смесей (связь с базой данных свойств материалов), включая моделирование теплового расширения материалов (как чистых веществ, так и смесей);

- модуль, предназначенный для описания обрушения участков АЗ и ВКУ в случае потери точек крепления;
- модуль, предназначенный для описания плавления материалов (учет энергетики фазового перехода, анализ изменения геометрии);
- модуль описания блокирования движения теплоносителя в областях со значительными разрушениями элементов конструкций РУ;
- модуль пересчета источников тепловыделения в условиях разрушения и перемещения UO_2 топлива;
- модель электрических нагревателей имитаторов твэлов для выполнения верификации пакета СВЕЧА на данных, полученных в экспериментах с электрически обогреваемыми сборками.

В целом совокупность моделей и модулей, входящих в пакет СВЕЧА, позволяет описать поведение элементов конструкции РУ от номинального состояния до полного обрушения АЗ и ВКУ.

Отметим, что большинство программ пакета СВЕЧА в том или ином виде было реализовано и прошло комплексное тестирование в составе таких кодов, как ICARE2 (Франция), SCDAP/RELAP (США), тренажерный комплекс КИТ (Росиия), код SVECHA/QUENCH (Россия—Германия). В настоящее время пакет СВЕЧА вошел в состав разрабатываемого отечественного кода РАТЕГ-СВЕЧА-HEFEST. Этот код предназначен для моделирования переходных и запроектных режимов на АЭС с РУ водо-водяного типа (ВВЭР-1000, малой энергетики). Разрабатываемый код РАТЕГ-СВЕЧА-HEFEST позволяет на современном уровне численно описывать полный комплекс процессов и явлений, протекающих в РУ, начиная от поведения реактора в нормальных условиях и заканчивая полным разрушением активной зоны, корпуса реакторной установки и выбросом продуктов деления в атмосферу. Начаты работы по реализации ряда моделей пакета СВЕЧА в коде КОРСАР (перспективном отраслевом теплогидравлическом коде Минатома России).

В рамках реализации проекта СВЕЧА была проведена большая работа по тестированию моделей и кодов на базе:

- экспериментов по изучению отдельных физических явлений — окисление, механическое поведение оболочек, эвтектические взаимодействия, выход продуктов деления;
- интегральных экспериментов — CORA-ВВЭР1, CORA-ВВЭР2, CORA-5, CORA-15, CORA-13, CORA-17, CORA-31, PHEBUS-B9+, PBF-1.4 и др.

В составе различных теплогидравлических кодов модули и модели пакета СВЕЧА использовались для моделирования аварийных режимов на АЭС с РУ ВВЭР-640, PWR, BWR, РБМК-1000, ВПБЭР-600, РУ малой энергетики, РУ ВВЭР-1000/В-320, ВВЭР-1000/В-428 и ВВЭР-1000/В-412.

2. Валидация моделей отдельных процессов

Каждая модель, входящая в пакет СВЕЧА, тестировалась с привлечением данных, полученных в экспериментах разного уровня сложности. Работоспособность моделей проверялась прежде всего на совокупности экспериментов, направленных на изучение отдельных физических явлений. Пример матрицы верификации пакета СВЕЧА приведен в табл. 1.

Таблица 1. Матрица верификации моделей пакета СВЕЧА

Эксперименты	Краткое описание
Изотермические эксперименты [4; 5,]	Исследование наружного окисления циркалоя паром и взаимодействия UO_2/Zry при избыточном внешнем давлении 4 МПа $dT/dt = 0$ K/c (1532 K, 1606 K, 1695 K)
Неизотермические эксперименты [4; 5]	Исследование наружного окисления циркалоя паром и взаимодействия UO_2/Zry при избыточном внешнем давлении 4 МПа $dT/dt = \pm 0,25$ K/c (1253 K, 1376 K, 1473 K, 1573 K, 1673 K, 1773 K, 1873 K)
	Исследование наружного окисления циркалоя паром и взаимодействия UO_2/Zry при избыточном внешнем давлении 4 МПа $dT/dt = \pm 1$ K/c (1278 K, 1376 K, 1473 K, 1573 K, 1673 K, 1873 K, 1973 K)
	Исследование наружного окисления циркалоя паром и взаимодействия UO_2/Zry при избыточном внешнем давлении 4 МПа $dT/dt = \pm 5$ K/c (1276 K, 1376 K, 1473 K, 1576 K, 1678 K, 1781 K, 1873 K, 1980 K, 2073 K, 2183 K)
	Исследование наружного окисления циркалоя паром и взаимодействия UO_2/Zry при избыточном внешнем давлении 4 МПа $dT/dt = \pm 10$ K/c (1276 K, 1370 K, 1479 K, 1578 K, 1678 K, 1773 K, 1808 K, 1883 K, 1978 K, 2068 K, 2173 K)
Изотермические эксперименты [6]	Исследование окисления циркалоя паром на ранних стадиях процесса (1323 K, 1526 K, 1677 K, 1777 K)
Изотермические эксперименты [7]	Исследование окисления циркалоя потоком пара (со скоростью 1 м/с) при постоянной температуре и атмосферном давлении (1273 K, 1373 K, 1473 K, 1573 K)

Табл. 1 (продолжение)

Эксперименты	Краткое описание
Неизотермические эксперименты [8]	Исследование окисления циркалоя паром при программно изменяемой температуре для различных значений максимальной температуры и скорости охлаждения образцов ($T = 1473$ K и $dT/dt = -171$ K/c , $T = 1373$ K и $dT/dt = -151$ K/c , $T = 1273$ K и $dT/dt = -131$ K/c , $T = 1573$ K и $dT/dt = -191$ K/c , –25 К/с, –10 К/с, –2 К/с)
Неизотермические эксперименты S. Sagat et al. по деформированию оболочек твэлов при разогреве в нейтральной среде и в присутствии пара [9]	Деформирование оболочек твэлов при разогреве в присутствии пара под действием избыточного внутреннего давления P (0,34, 0,48, 0,69 МПа)
	Деформирование оболочек твэлов при разогреве в нейтральной среде под действием избыточного внутреннего давления P (0,34, 0,48, 0,69 МПа)
Эксперименты по двустороннему окислению облученных оболочек сплава Zr — 1% Nb, выполненных в Научно-исследовательском институте атомных реакторов (НИИАР), Димитровград [10; 11; 12]	Начальная температура 600°С, максимальная — 1000°С и 1100°С (сплав Э-110)
Неизотермические эксперименты по деформированию и разрушению оболочек твэлов при разогреве в присутствии пара (эксперименты REBEKA) [13]	Деформирование и разрушение оболочек твэлов в присутствии пара при разогреве их со скоростью 1 К/с в зависимости от избыточного внутреннего давления *P* (1, 2, 4, 6, 8, 10, 12, 14 МПа)
	Деформирование и разрушение оболочек твэлов в присутствии пара при разогреве их со скоростью 10 К/с в зависимости от избыточного внутреннего давления *P* (1, 2, 4, 6, 8, 10, 12, 14 МПа)
	Деформирование и разрушение оболочек твэлов в присутствии пара при разогреве их со скоростью 30 К/с в зависимости от избыточного внутреннего давления *P* (1, 2, 4, 6, 8, 10, 12, 14 МПа)

Табл. 1 (окончание)

Эксперименты	Краткое описание
Изотермические тигельные эксперименты по растворению диоксида урана расплавом циркалоя [14; 15; 16]	Циркалой плавился в тиглях из топливных таблеток UO_2, достигалась стадия насыщения урана в расплаве. Основной геометрический параметр установки — отношение площади контактной поверхности к объему циркалоевого наполнителя $A = S / V_{Zr}$ (*A=10 см*$^{-1}$ и $T = 2273$ K, *A=3,5 см*$^{-1}$ и $T = 2273$ K, *A=7,3 см*$^{-1}$ и $T = 2273$ K, 2373 K, 2473 K)
Изотермические эксперименты Российского научного центра «Курчатовский институт» (РНЦ КИ) по окислению нержавеющей стали паром [17]	Эксперименты по окислению (отжигу) образцов нержавеющей стали 06Х18Н10Т в паровой среде в диапазоне температур 800—1200°С ($T = 1073$ K — 30 мин, $T = 1273$ K — 5, 10, 30 мин, $T = 1473$ K — 5, 10, 30 мин)

Ниже более подробно рассматриваются некоторые результаты тестирования пакета СВЕЧА на базе экспериментов, использовавшихся при обосновании физических моделей, составляющих комплекс. Этот этап преследует несколько целей. Необходимо:

- убедиться, что численная реализация модели и разработка комплекса в целом произведена правильно;
- показать путем сравнения с известными моделями изменение качества в части моделирования данного конкретного явления;
- опираясь на хорошо физически обоснованную и протестированную модель, рассмотреть отклик функционально с ней связанных других моделей пакета СВЕЧА.

2.1. Окисление оболочек твэлов в режиме нагрев — охлаждение

На рис. 1 представлены результаты моделирования неизотермических экспериментов (P. Hofmann) с использованием параболических корреляций. Скорость нагрева образцов в рассматриваемых тестах варьировалась от 0,25 до 10 К/с. На рис. 1*а* приведено отношение измеренной толщины двуокиси циркония D_{exp} к вычисленной D_{calc} (ось y). По оси x отложена максимальная температура, достигавшаяся в каждом из моделируемых тестов. Для сравнения на рис. 1*б* представлены результаты моделирования тех же неизотермических экспериментов с использованием модели окисления из пакета СВЕЧА. Кроме того, на этот же график нанесены результаты расчетов

ряда других экспериментов по окислению оболочек твэлов, выполненных как в нашей стране, так и за рубежом.

Из анализа рис. 1*а* следует, что параболическая модель окисления обеспечивает приемлемое согласие данных расчета и эксперимента только при относительно низких температурах (менее 1800 К). При увеличении температуры и скорости разогрева образцов твэл различия между результатами расчета и экспериментальными данными возрастают (до четырех раз). Диффузионная же модель из пакета СВЕЧА (см. рис. 1*б*), с одной стороны, обеспечивает приемлемую точность моделирования при температурах менее 1800 К, с другой — демонстрирует лучшие предсказательные возможности в области высоких температур (больше 1800 К) и высоких скоростей нагрева (более 1 К/с) по сравнению с традиционными параболическими методиками.

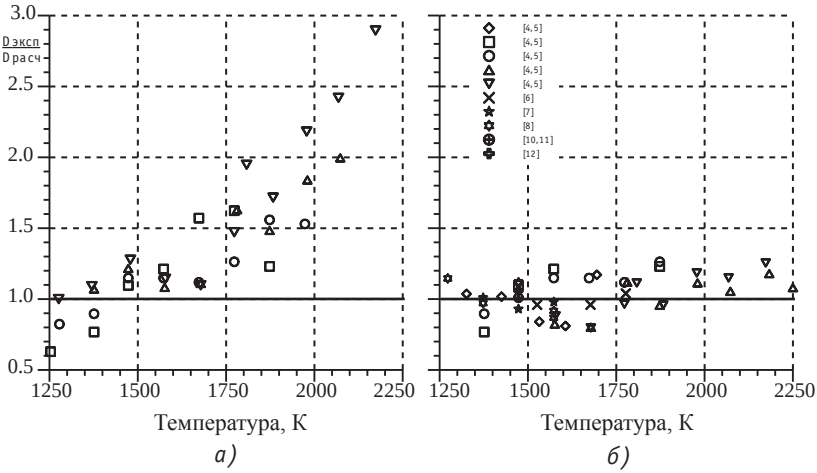


Рис. 1. Моделирование изотермических и неизотермических экспериментов по окислению образцов циркониевых оболочек твэлов. Отношение измеренной толщины двуокиси циркония D_{exp} к вычисленной на базе параболической корреляции D_{calc} : *а* — параболическая модель, *б* — диффузионная модель из пакета СВЕЧА

2.2. Деформация оболочек твэлов при разогреве в нейтральной среде (модуль CROX) и в присутствии водяного пара (модули CROX + PROF)

Физические модели и компьютерные модули пакета СВЕЧА по анализу деформации защитных оболочек твэлов в процессе нагрева тестированы на большом количестве экспериментов по разрушению оболочек твэлов [18].

Пример такого тестирования приведен ниже (эксперимент по разрушению оболочек твэлов в вакууме и паре).

На рис. 2 приведены результаты экспериментов по радиальной деформации оболочек твэлов (Zircaloy-4) в вакууме и окислительной среде (диаметр 15,25 мм, толщина 0,45 мм). Окисление оболочек приводит к их значительному упрочнению из-за образования слоя α-циркония, насыщенного кислородом. В расчете по пакету СВЕЧА, самосогласованным образом описывающем окисление и механическое поведение оболочки (CROX + PROF), удается адекватно описать эксперименты как в вакууме, так и в окислительной среде.

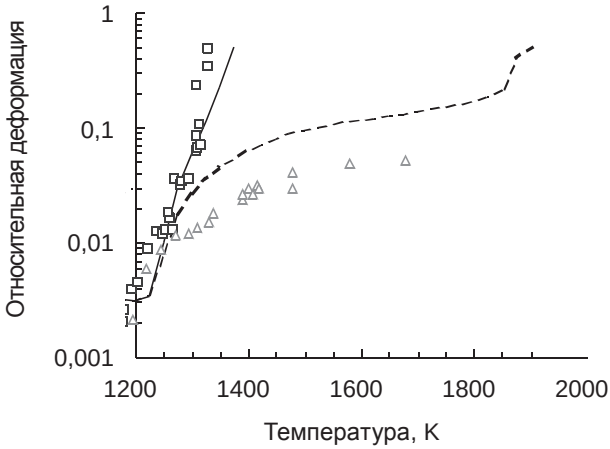


Рис. 2. Упрочнение оболочки твэлов из-за окисления. Экспериментальные данные, полученные в инертной и окислительной средах, сравниваются с расчетами с использованием пакета СВЕЧА. Эксперименты [9], $dT/dt = 5$ К/с, $dP = 0,34$ МПа: □ — инертная среда, △ — [9] окислительная среда; сплошная линия — расчет без окисления; пунктир — расчет с окислением

2.3. Растворение UO_2 топливной таблетки расплавленным Zr

На рис. 3 результаты трех тестов, проведенных в разных лабораториях мира, на стадии насыщения при 2273 К, а также при температурах 2373 и 2473 К сравниваются с численными расчетами по пакету СВЕЧА.

Из анализа кривых на рис. 3 можно сделать вывод, что в достаточно широком диапазоне температур физическая модель пакета СВЕЧА [19; 20] удовлетворительно описывает процесс растворения топливной таблетки UO_2 расплавом циркония.

Модель была расширена для учета влияния оксидного слоя оболочки при одновременном растворении UO_2 и ZrO_2. Новая модель обеспечила ана-

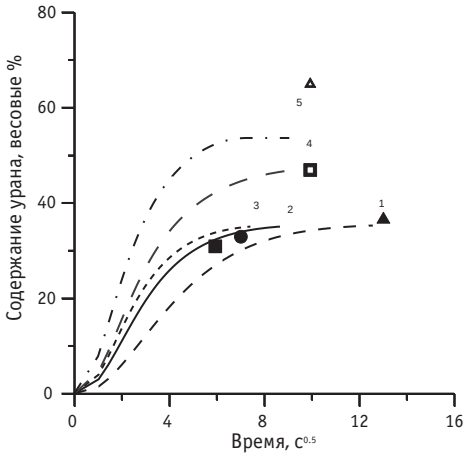
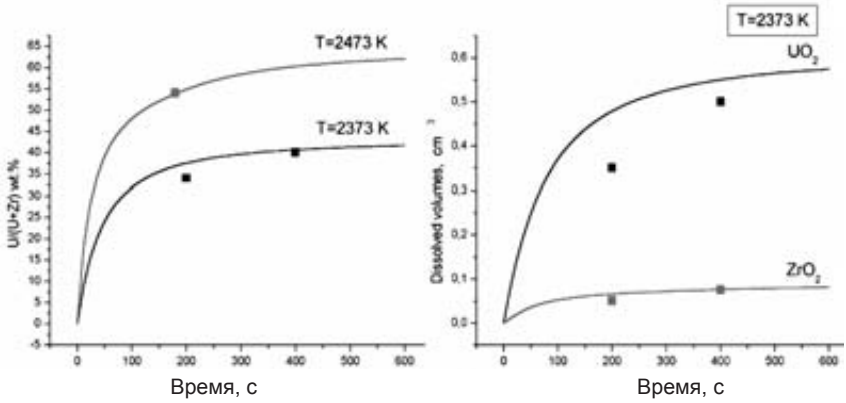


Рис. 3. Сравнение экспериментальных данных с результатами расчетов по пакету СВЕЧА: ▲ — эксперимент при T = 2273 К (расчет — кривая *1*), ● — эксперимент при T = 2273 К (расчет — кривая *2*), ■ — эксперимент при T = 2273 К (расчет — кривая *3*), □ — эксперимент при T = 2373 К (расчет — кривая *4*), Δ — эксперимент при T = 2473 К (расчет — кривая *5*)

литическую поддержку новой экспериментальной программы Научно-исследовательского института атомных реакторов (НИИАР), проводимой в рамках европейского проекта COLOSS [21], и позволила правильно описать результаты новых экспериментов по растворению (рис. 4).



а) *б)*

Рис. 4. Сравнение экспериментальных данных НИИАР по кинетике одновременного растворения UO_2 и ZrO_2 расплавленным Zr с результатами расчетов по пакету СВЕЧА

Будучи имплементирована в код СВЕЧА, модель позволила правильно описать мелкомасштабные эксперименты Forschungszentrum Karlsruhe (FZK) по разрушению оксидной оболочки твэлов в процессе эскалации температуры в паре выше точки плавления циркония. Анализ этих экспериментов позволил выработать механистический критерий разрыва оксидной оболочки и начала стекания жидкой смеси [22].

2.4. Окисление стали

На рис. 5 представлены результаты расчета по коду РАТЕГ-СВЕЧА-HEFEST ряда экспериментов по окислению образца нержавеющей стали.

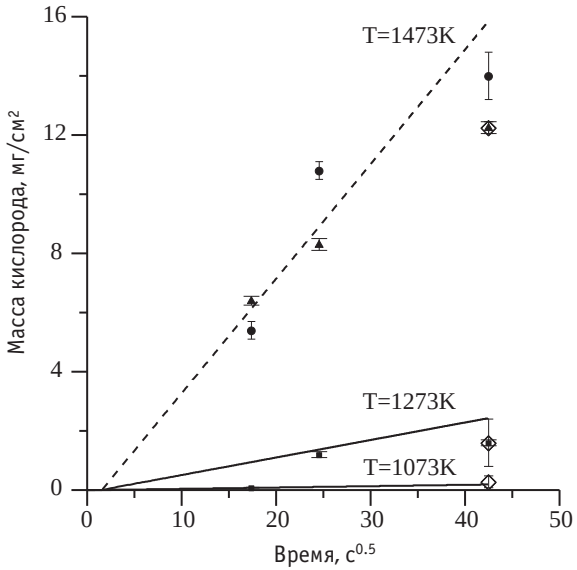


Рис. 5. Привес кислорода на единицу площади поверхности для нержавеющей стали 06Х18Н10Т: линии — результаты расчета пакетом СВЕЧА для различных температур, ● и ▲ — две различные серии экспериментов при T = 1200°C, ■ — эксперимент при T = 1000°C, ◊ — серия экспериментов при разных температурах (800°C, 1000°C и 1200°C) и фиксированном времени окислительного эксперимента

Результаты расчета неплохо согласуются с экспериментальными данными, полученными в различных сериях экспериментов.

2.5. Интегральный модуль SVECHA/QUENCH

В тесном сотрудничестве с немецкими экспериментаторами из FZK разработана комплексная модель поведения реакторных стержней после разогрева до температур 1200—1600°С [23—25]. Модель включает самосогласованное описание различных физических явлений: теплогидравлическое описание охлаждения стержней парожидкостной смесью, образованной в результате повторного залива; описание теплопроводности в многослойной структуре оболочки, образованной в результате окисления циркония паром; описание сложного механического поведения окисляющихся оболочек, связанного с растрескиванием, разрывом и отслаиванием окисного слоя и приводящего к резкому повышению интенсивности окисления металлического циркония и образованию водорода.

С использованием разработанного модуля проведено исследование напряженного состояния и мод разрушения окисленной циркониевой защитной оболочки твэла при резком охлаждении, вызванным повторным заливом реактора водой. Учитывается, что предокисление оболочки в экспериментах FZK имело место при температуре выше фазового перехода оксида из моноклинной (низкотемпературной) в тетрагональную фазу — 1478 К.

Валидация модуля SVECHA/QUENCH по результатам заливки горячего стержня водой снизу в экспериментах FZK представлена на рис. 6.

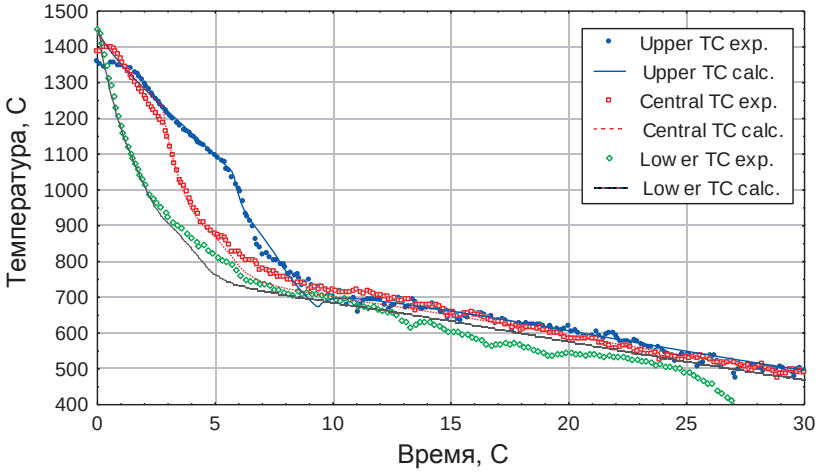


Рис. 6. Изменение температуры в трех точках на поверхности стержня (2,5 см снизу, в центре и 2,5 см сверху) со временем. Начальная температура стержня 1400°С, длина 15 см, температура воды 95°С, скорость заливки 1,5 см/с, внешний оксидный слой отсутствует: • — верхняя термопара, □ — центральная термопара, ◇ — нижняя термопара; результаты расчета представлены линиями

3. Верификация на интегральных тестах

3.1. Верификационная матрица

Верификационная матрица пакета СВЕЧА относительно данных, полученных в интегральных тестах, приведена в табл. 2.

Таблица 2. Матрица интегральных тестов

Эксперимент	Экспериментальные данные — количество водорода, г	Результаты расчета по кодам с усовершенствованными моделями из пакета СВЕЧА — количество водорода, г
CORA-ВВЭР2	67	51,0
CORA-5	100	92,0
CORA7	114	164,0
CORA13	210	159,0
CORA15	180	171,0
CORA17	150	155,0
CORA31	205	237,0
PHEBUS B9 +	39±8	44,8
PBF SFD 1-4	86±12	94,6
PBF SFD 1-1	64	86,0

Ниже коротко обсуждаются результаты расчетов отечественным кодом РАТЕГ-СВЕЧА-HEFEST интегральных экспериментов по разрушению сборок РУ ВВЭР и PWR: CORA-W2 (ISP 36), PHEBUS B9+ (ISP 28), QUENCH-06 (ISP-45) и PBF SFD 1-4.

3.2. Результаты тестирования моделей пакета СВЕЧА: эксперимент CORA-W2

CORA-W2 — тест со сборкой ВВЭР. Нагрев сборки твэлов осуществлялся электрическим током. Характерной особенностью эксперимента было наличие в экспериментальной сборке имитатора поглотительного стержня РУ ВВЭР. Поэтому помимо обычных исследований температурного поведения сборки, пароциркониевой и эвтектических реакций, формирования и перемещения материалов в данном эксперименте была проведена оценка сте-

пени влияния на динамику разрушения сборки материалов поглотительных стержней.

Результаты соответствующих расчетов с использованием моделей пакета СВЕЧА, объединенных с теплогидравлическим кодом РАТЕГ, представлены на рис. 7—9.

На рис. 7 приведена зависимость температуры оболочек твэлов от времени на уровне 850 мм (верхняя часть сборки). Сплошная тонкая линия — результат расчетов с использованием кода РАТЕГ-СВЕЧА-HEFEST, пунктирная линия — экспериментальные данные. Из представленных данных следует, что набор моделей СВЕЧА с достаточной точностью моделирует целый комплекс физических процессов:

- нагрев сборки электрическим током;
- обмен энергии излучением;
- окисление сборки, эскалацию температур, связанную с окислением;
- температурный режим сборки на фазе плавления и перемещения материалов конструкции.

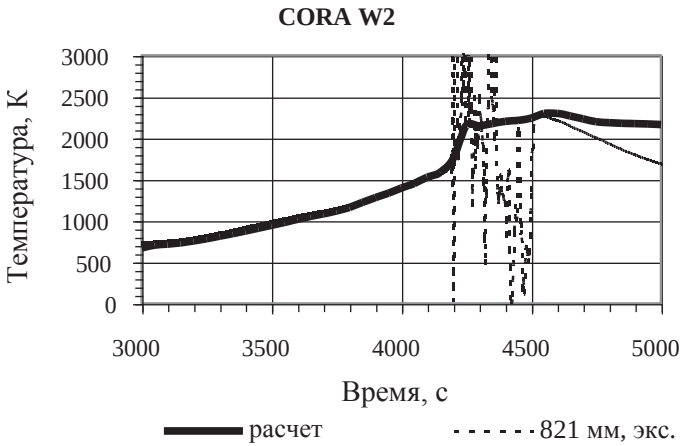


Рис. 7. Эксперимент CORA-W2. Температура оболочек ненагреваемых стержней на уровне 850 мм. Внутреннее кольцо.
Сравнение расчетных и экспериментальных данных

На рис. 8 приведена зависимость интегральной наработки водорода от времени. Расчетные кривые сравниваются с экспериментальными данными. Из представленных данных следует, что в целом на всем протяжении эксперимента удается с достаточной степенью точности описать экспериментально наблюдавшийся выход водорода. Отметим, что этот расчет также подтверждает работоспособность моделей пакета СВЕЧА в части описания генерации водорода на фазе окисления стекающего расплава (время более 4100 с).

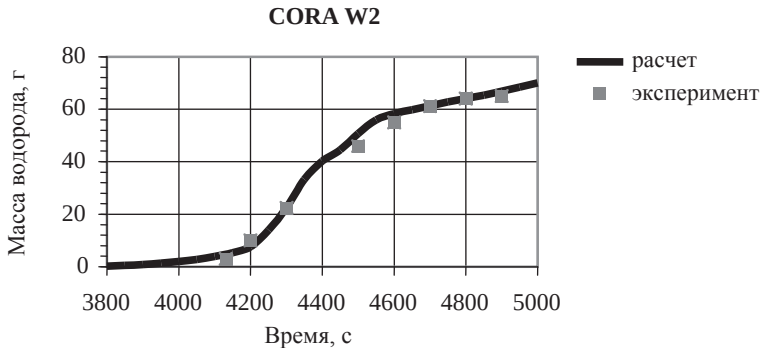


Рис. 8. Эксперимент CORA-W2. Интегральный выход водорода. Сравнение расчетных и экспериментальных данных. Маркеры — результат измерений, жирная линия — расчеты с использованием пакета СВЕЧА

На рис. 9 результаты пост-тест-анализа сборки в части оценки степени разрушения материалов поглотительного стержня сравниваются с соответствующими экспериментальными данными. Сплошная линия — расчет по коду РАТЕГ-СВЕЧА-HEFEST. Маркеры — результаты анализа разрушенной сборки. Видно достаточно приемлемое согласование расчетных и экспериментальных данных.

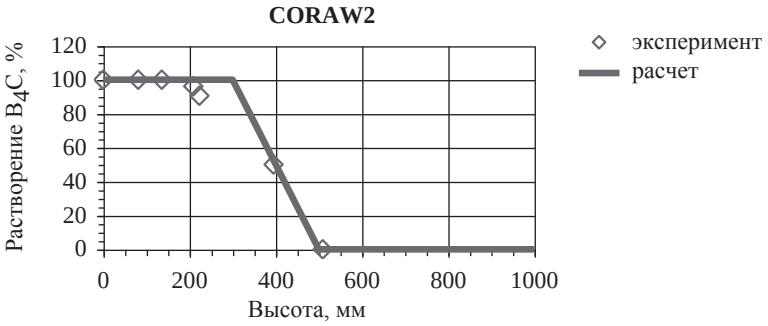


Рис. 9. Эксперимент CORA-W2. Растворение материала контрольного стержня B_4C на момент окончания эксперимента.
Сравнение расчетных и экспериментальных данных

3.3. Результаты тестирования: PHEBUS B9+

В интегральном тесте PHEBUS B9+ (ISP 28) исследовались такие явления, происходящие в начальной стадии аварии на АЭС, как выход водорода, окисление оболочек, растворение двуокиси урана цирконием и др. Отметим, что этот эксперимент достаточно сложен для моделирования.

1. В отличие от эксперимента CORA-W2 эксперимент PHEBUS B9+ более продолжителен — 18 000 с (в CORA-W2 длительность активной фазы эксперимента составляла всего 2000 с). Поэтому для корректного описания данного теста важна высокая точность моделирования отдельных процессов, численная стабильность и согласованность работы различных модулей пакета СВЕЧА.

2. PHEBUS B9+ — внутриреакторный эксперимент. Нагрев сборки в нем обеспечен работой исследовательского реактора PHEBUS. Поэтому на данных этого эксперимента верифицировалась работа модулей пакета СВЕЧА, отвечающих за моделирование нагрева в условиях, приближенных к задачам моделирования запроектных аварий на реальных реакторных установках (моделирование аксиальных и радиальных профилей энерговыделения, их временной и пространственной эволюции).

На рис. 10 представлены экспериментальная зависимость температуры на уровне 600 мм от времени и результаты расчетов по коду РАТЕГ-СВЕЧА-HEFEST. Результаты расчетов хорошо соответствуют экспериментальным данным. В эксперименте начало значительного ускорения роста (эскалации) температуры наблюдалось именно на этом уровне. Отметим, что размер и форма температурного пика (8340°С) в донном тесте определяются количеством металлического циркония, который еще не успел окислиться к данному времени. Совпадение расчета и эксперимента по этому параметру является подтверждением достаточной точности работы соответствующих модулей пакета СВЕЧА в условиях расчета длительного окисления оболочек твэлов при сравнительно невысоких температурах (менее 1800 К).

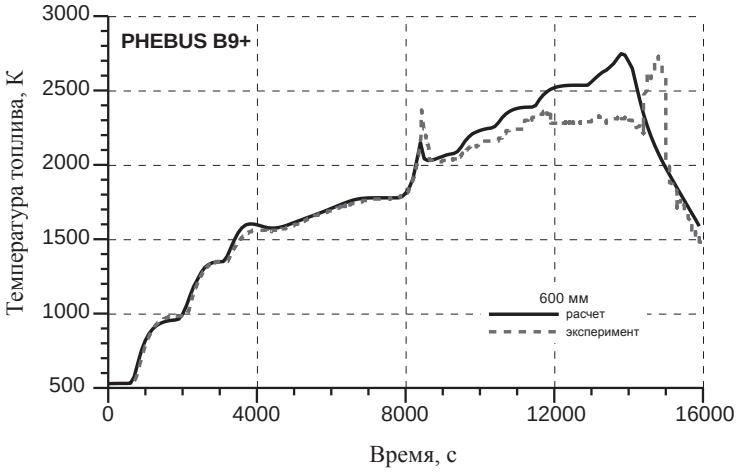


Рис. 10. Тест PHEBUS B9 +. Сравнение показаний термопары в топливе на уровне 600 мм с результатами расчетов с использованием кода РАТЕГ-СВЕЧА-ГЕФЕСТ

На рис. 11 приведена зависимость интегрального выхода водорода от времени. Хорошее совпадение расчетных и экспериментальных данных также свидетельствует о высокой точности моделирования кодом РАТЕГ-СВЕЧА-HEFEST всех существенных фаз этого эксперимента.

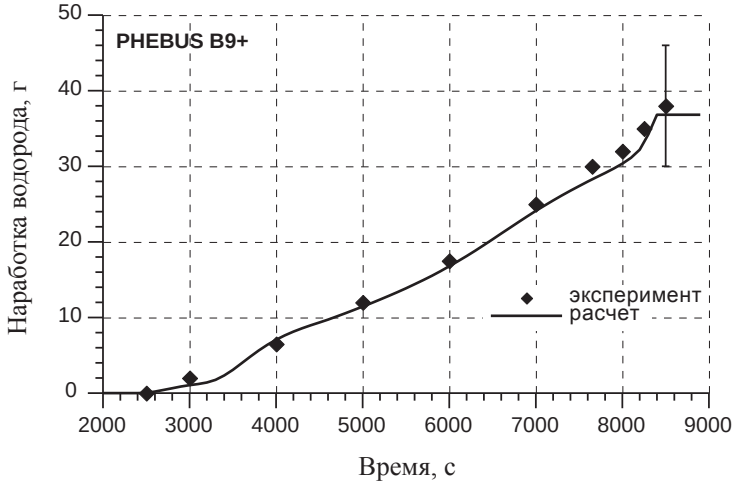


Рис. 11. Тест PHEBUS B9 +. Зависимость интегрального выхода водорода от времени. Сравнение экспериментальных данных с результатами расчетов с использованием кода СВЕЧА

3.4. Расчетное моделирование эксперимента QUENCH-06

Эксперимент QUENCH-06 был проведен 13 декабря 2000 г. в исследовательском центре Карлсруэ в рамках QUENCH-программы. Как известно, при охлаждении частично разрушенной ТВС водой при определенных условиях могут происходить интенсивное окисление циркониевых оболочек стержней, их разрушение и резкое увеличение выхода водорода. В целом QUENCH-программа была нацелена на исследование источников водорода, механического и физико-химического поведения оболочек топливных стержней при их интенсивном охлаждении (повторном заливе).

На рис. 12 результаты моделирования эксперимента QUENCH-06 кодом РАТЕГ-СВЕЧА-HEFEST сравниваются с экспериментальными данными. Можно сделать вывод об удовлетворительной работе объединенного кода РАТЕГ-СВЕЧА-HEFEST на различных фазах эксперимента: стадии разогрева, эскалации и повторного залива. При этом в пределах всего эксперимента обеспечивается приемлемая точность расчета источника водорода.

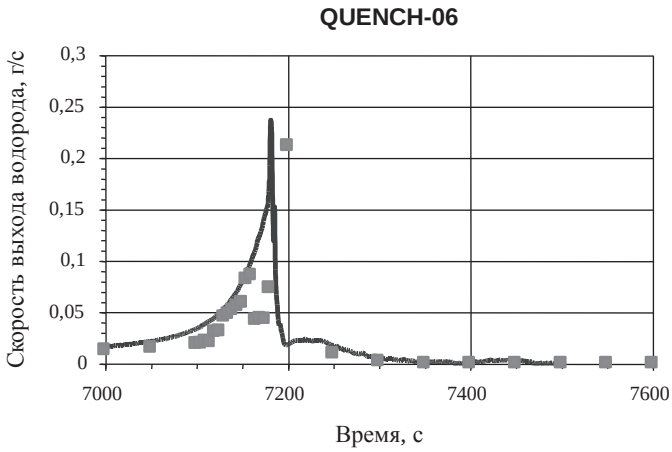


Рис. 12. Тест QUENCH-06. Скорость выхода водорода. Сравнение расчетных и экспериментальных данных. Маркеры — результаты измерений, сплошная линия — расчет

3.5. Результаты тестирования: PBF 1.4

Результаты расчетов внутриреакторного эксперимента PBF-1.4, полученные по коду РАТЕГ-СВЕЧА-HEFEST, сравнивались с экспериментальными данными. Целью эксперимента PBF-1.4 было наполнение базы знаний по процессам разрушения топлива, а также получение информации для уточнения и тестирования моделей:

- поведения при тяжелых авариях твэлов, поглотителей и дистанционирующих решеток;
- скорости выделения водорода в результате взаимодействия пара с элементами конструкции;
- скорости выделения, количества и химического состава летучих продуктов деления и аэрозолей.

Экспериментальная сборка представляла собой фрагмент ТВС реактора типа PWR. Динамика контролируемых параметров в эксперименте также соответствовала типичному сценарию аварии с малой течью на реакторе PWR. В результате медленно поднимаемой мощности тепловыделения в сборке наблюдались процессы:

- выкипания теплоносителя, полного осушения сборки;
- разогрева элементов сборки;

- плавления поглощающих стержней;
- разрушения оболочек твэлов;
- окисления материалов.

Отличительная особенность этого эксперимента заключалась в том, что экспериментальная сборка состояла главным образом из отработанных твэлов. Это обстоятельство позволило проверить работоспособность пакета СВЕЧА в части описания динамики разогрева, окисления и разрушения сборок с выгоревшим топливом.

На рис. 13 приведены результаты расчета температуры связки на уровне 750 мм, на рис. 14 — степень разрушения облученного UO_2 -топлива по высоте сборки, на рис. 15 — скорость выхода водорода.

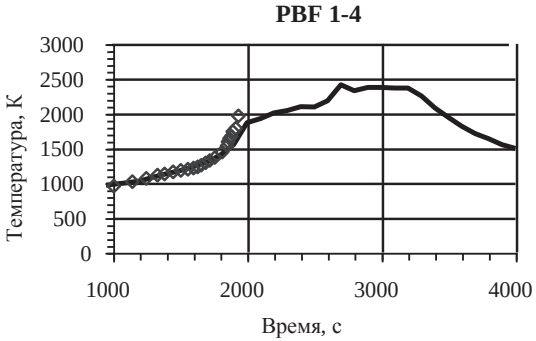


Рис. 13. Тест PBF SFD 1-4. Температура оболочек топливных стержней на уровне 54 см. Сравнение расчетных и экспериментальных данных. Маркеры — результаты измерений, сплошная линия — расчет

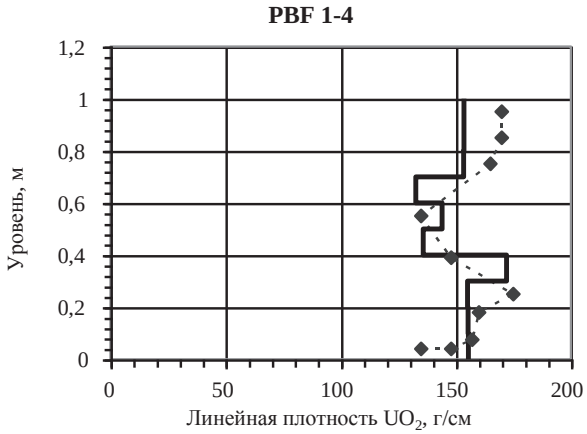


Рис. 14. Тест PBF SFD 1-4. Распределение топлива по высоте на конец эксперимента, t = 4000 с. Сравнение расчетных и экспериментальных данных. Маркеры — результаты измерений, сплошная линия — расчет

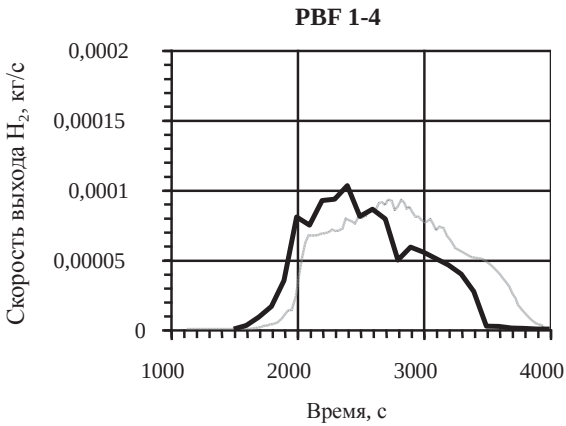


Рис. 15. Тест PBF SFD 1-4. Скорость выхода водорода. Сравнение расчетных и экспериментальных данных. Маркеры — результаты измерений, сплошная линия — расчет

Прежде всего отметим, что расчетные значения температур неплохо совпадают с экспериментальными данными. Полученное в расчете максимальное значение выхода водорода составляет 94,6 г. Экспериментальная оценка максимальной величины водорода — 98 г. Из рис. 14 можно сделать вывод о приемлемой точности работы моделей пакета СВЕЧА, ответственных за описание растворения топливной таблетки расплавленным цирконием, формирования расплава и его стекания.

Расчетная скорость генерации водорода (см. рис. 15) соответствует экспериментальной кривой, хотя наблюдается некоторая переоценка скорости водорода на стадии эскалации и недооценка скорости выхода водорода на стадии стекания (см. эксперимент CORA-13).

По результатам тестирования модифицированного кода на базе интегральных тестов можно сделать вывод, что усовершенствованные модули пакета СВЕЧА позволили с приемлемой точностью описать физические процессы, происходящие при разрушении АЗ реактора, улучшить адекватность численных расчетов экспериментальным данным.

Верификация моделей и компьютерных модулей по анализу физических процессов, происходящих при разрушении активной зоны реактора, показала работоспособность моделей пакета СВЕЧА, их более высокую точность в описании ряда физических процессов, возможность адекватного численного анализа широкого спектра явлений, влияющих на развитие аварии.

4. Приложения пакета СВЕЧА к анализу аварийных режимов РУ АЭС

Важной составной частью разработки моделей пакета СВЕЧА является их применение при анализе запроектных режимов различных типов АЭС. Так, базовые программы комплекса СВЕЧА широко использовались в качестве базовых при проведении расчетов в следующих проектах:

- применение моделей пакета СВЕЧА на аварийных режимах РУ PWR (Surry) и BWR (Browns Ferry) в рамках проекта по усовершенствованию кода SCDAP/RELAP5 (Комиссия по ядерному регулированию США — NRC) [26];
- приложения моделей пакета СВЕЧА в составе кода ICARE2 к анализу аварии РБМК [27];
- развитие моделей тяжелых аварий на АЭС, улучшение программ (ICARE2), их оценка и верификация (Институт ядерной безопасности и защиты, Франция — IPSN) [28—30];
- развитие моделей тяжелых аварий на АЭС для улучшения различных европейских кодов (CIT and COBE Projects of 4th Framework Programme of EU, COLOSS Project of 5th Framework Programme of EU) [31—34];
- анализ безопасности реактора ВПБЭР, реакторов малой энергетики (ОКБМ (Россия);
- разработка объединенного кода улучшенной оценки РАТЕГ-СВЕЧА-HEFEST для практического использования при обосновании безопасности проектов ВВЭР-1000/В-428 — Тяньванская АЭС в КНР (совместно с Всероссийским научно-исследовательским институтом экспериментальной физики, Санкт-Петербургским научно-исследовательским и проектно-конструкторским институтом «Атомэнергопроект» (СПбАЭП), РНЦ КИ) [34], ВВЭР-1000/В-412 в Индии («Атомэнергопроект» (Москва), РНЦ КИ).

5. Заключение

На базе современных теоретических разработок получены:

- детальные модели для описания поведения при запроектных авариях различных элементов конструкции АЗ и ВКУ (включая модели окисления, разрушения и плавления, образования и распространения расплава в АЗ и НКС, выхода продуктов деления);
- усовершенствованные библиотеки свойств материалов;

Эти модели успешно протестированы на основе экспериментальных данных по отдельным процессам, а также полученных на интегральных установках (CORA, PBF, CORA-ВВЭР, PHEBUS, QUENCH).

Современный подход, положенный в основу построения усовершенствованных кодов, в том числе использование физических моделей, позволил получить достаточно гибкую систему кодов. Она легко адаптируется для описания реакторных установок различного типа.

На базе разработанного в ИБРАЭ пакета программ СВЕЧА проведен анализ процессов при тяжелых авариях на АЭС с водо-водяными реакторами. Пакет СВЕЧА прилагался к исследованию тяжелых аварий на АЭС с РУ PWR (Surry) и BWR (Browns Ferry), для анализа аварийных процессов на АЭС с РУ ВВЭР-640 и РБМК-1000, реакторов малой мощности типа КЛТ-40С, в проектах с РУ ВВЭР-1000/В-320, ВВЭР-1000/В-428 и ВВЭР-1000/В-412.

Работа по дальнейшему совершенствованию физических моделей, предназначенных для моделирования процессов разрушения АЗ и ВКУ реакторов при запроектных авариях на АЭС, их адаптации и включению в интегральные коды, в настоящее время продолжается.

Литература

1. *Veshchunov M. S., Kiselev A. Ye.* et al. ‘SVECHA’ Code Package, Modeling of Core Degradation Phenomena at Severe Accidents // Proceedings of NUREG-7. — 1995. — Vol. 3. — P. 1914—1929.
2. *Вещунов М. С., Киселев А. Е., Стрижов В. Ф.* Пакет программ СВЕЧА — моделирование процессов разрушения элементов конструкций РУ ВВЭР-1000 на внутрикорпусной фазе запроектной аварии // Сборник трудов научно-практического семинара «Вопросы безопасности АЭС с ВВЭР». — Т. 1: Исследования процессов при запроектных авариях с разрушением активной зоны. — СПб., 2000. — С. 67—86.
3. Сравнительные результаты расчетного моделирования источников водорода, массы и энергии при тяжелой аварии на АЭС ВВЭР-1000 по кодам SCDAP/RELAP и MELCOR: Отчет ИПБ ЯЭ РНЦ КИ №80-12/1-2-00.
4. *Hofmann P., Neitzel H. J., Garcia E. A.* Chemical Interactions of Zircaloy-4 Tubing with UO_2 Fuel at Temperatures between 900°C and 2000°C (Experiments and PECLOX code) / Kernforschungszentrum. — Karlsruhe, 1988. — (KfK 4422).
5. *Hofmann P., Neitzel H. J.* Experimental and Theoretical Results of Cladding Oxidation under Severe Fuel-Damage Conditions // Zirconium in the Nuclear Industry: Seventh International Symposium, ASTM STP 939 / R. B. Adamson and L. F. P. Van Swam (eds.); American Society for Testing and Materials. — Philadelphia, 1987. — P. 504—538.

6. *Pawel R. E., Cathcart J. V., McKee R. A.* et al. The kinetics of oxidation of Zircaloy-4 in steam at high temperatures // J. Electrochem. Soc. — 1979. — Vol. 126, № 7. — P. 1105—1111.
7. *Leistikow S., Shanz G., von Berg H.* Kinetics and Morphology of Isothermal Steam Oxidation of Zircaloy 4 at 700—1300°C. — Karlsruhe, March 1987. — (KfK 2587).
8. *Leistikow S., Shanz G.* The Oxidation Behavior of Zircaloy-4 in Steam between 600 and 1600°C // Werkstoffe and Korrosion. — 1985. — Vol. 36. — P. 105—116.
9. Sagat S., Sills H. E., Wolsworth J. A. Deformation and Failure of Zircaloy Fuel Sheaths Under LOCA Condition Zirconium in the nuclear Industry // Sixth International Symposium, ASTM STP 824 / D. G. Franklin and R. B. Adamson (eds.); American Society for Testing and Materials. — [S. l.], 1984. — P. 709—733. — (Research engineers, Fuel Engineering Branch, Atomic Energy of Canada Ltd., Chalk River Nuclear Laboratories, Chalk River, Ont., Canada KOJ IJO).
10. *Кунгурцев И. А., Смирнов В. П., Жителев В. А.* и др. Исследование кинетики окисления при температуре 1000°C в паро-аргоновой среде образцов оболочки твэла ВВЭР-440, отработавшего до выгорания 42,2 МВт·сут/кг U: Отчет ГНЦ РФ НИИАР О-4652. — Димитровград, 1997.
11. *Кунгурцев И. А., Смирнов В. П., Ступина Л. Н.* и др. Исследование кинетики окисления при температуре 1100°C в паро-аргоновой среде образцов оболочки твэла ВВЭР-440, отработавшего до выгорания 42,2 МВт·сут/кг U: Отчет ГНЦ РФ НИИАР О-4694. — Димитровград, 1997.
12. *Кунгурцев И. А., Чесанов В. В., Кузьмин И. В., Лебедюк И. В.* Исследование окисления образцов оболочки отработавшего твэла ВВЭР-1000 и необлученной оболочки из сплава Э-110 при температуре 1200°C: Отчет ГНЦ РФ НИИАР. — Димитровград, 1999.
13. *Erbacher F. J., Neitzl H. J., Rosinger H.* et al. Burst Criterion of Zircaloy Fuel Claddings in Loss-of-Coolant Accident // Zirconium in the Nuclear Industry: Fifth Conference, ASTM STP 754 / D. G. Franklin (ed.); American Society for Testing and Materials. — [S. l.], 1982. — P. 271—283.
14. *Kim K. T., Olander D. R.* Dissolution of UO_2 by Molten Zyrcaloy // J. Nucl. Mater. — 1988. — Vol. 154. —P. 102.
15. *Hofmann P.* et al. Dissolution of Solid UO_2 by Molten Zircaloy and Its Modelling // Proc. Int. Symp. on Severe Accidents in Nuclear Power

Plants, Sorrento, Italy, March 21—25, 1988. — [S. l.], 1988. — P. 3. — (IEAE-SM-296/1).

16. *Hayward P. J., George I. M.* Dissolution of UO_2 in Molten Zircaloy-4. — Pt. 1: Solubility from 2000 to 2200°C // J. Nucl. Mater. — 1994. — Vol. 208, № 35. — P. 43.
17. *Малышев Е. К., Романцов Г. Е., Чечуров А. М.* Экспериментальное исследование высокотемпературного окисления в паровой среде сплавов Э-110, Э-635, ЭП-630У, ЭИ-435 и нержавеющих сталей 06Х18Н10Т и 316L: Отчет ИЯР РНЦ КИ № 31/1-370-98. — М., 1998.
18. *Veshchunov M. S.,Palagin A. V.*et al. Code package SVECHA: Modeling of core degradation phenomena at severe accidents // Transactions of SMiRT-13 Conference, 1995. — Vol. 1. — [S. l.], 1995. — P. 159—163.
19. *Veshchunov M. S., Hofmann P.* Modelling of the Zircaloy dissolution by molten (Ag, In, Cd) absorber alloy // J. Nucl. Mater. — 1996. — Vol. 228. — P. 318—329.
20. *Veshchunov M. S., Hofmann P., Berdyshev A. V.* Critical evaluation of UO_2 dissolution by molten Zircaloy in different crucible tests // J. Nucl. Mater. — 1996. — Vol. 231. — P. 1—19.
21. *Adroguer B., Chatelard P., Van Dorsselaere J. P.* et al. Core loss during a severe accident (COLOSS) // Nucl. Eng. & Des. — 2003. — Vol. 221. — P. 55—76.
22. *Hofmann P., Stuckert J., Miassoedov A.* et al. ZrO_2 Dissolution by Molten Zircaloy and Cladding Oxide Shell Failure. New Experimental Results and Modelling. — Karlsruhe, Germany, 1999. — (Report FZKA 6383, INV-CIT(98)-P026).
23. *Hofmann P., Noack V.,Veshchunov M. S.* et al. Physico-Chemical Behavior of Zircaloy Fuel Rod Cladding Tubes During LWR Severe Accident Reflood. — Karlsruhe, Germany, 1997. — (Report FZKA 5846).
24. *Hofmann P., Miassoedov A., Steinbock L.* et al. Quench Behavior of Zircaloy Fuel Rod Cladding Tubes. Small-Scale Experiments and Modeling of the Quench Phenomena. — Karlsruhe, Germany, 1999. — (Report FZKA 6208, INV-COBE(98)-D018).
25. *Berdyshev A. V., Boldyrev A. V., Palagin A. V.* et al. Development of SVECHA/QUENCH Code for Modeling Fuel Cladding Degradation in QUENCH tests. — Washington DC, Aug. 2001. — (Paper № 2028 Transactions SMiRT 16).
26. *Виноградова Т. Б., Дерюгин А. А., Киселев А. Е.* и др. Развитие и применение интегральных кодов по анализу тяжелых аварий на ядерных

энергетических установках // Изв. Рос. акад. наук. Энергетика. — 1999. — № 1. — С. 26—41.

27. *Киселев А. Е., Лемеха А. В., Стрижов В. Ф.* и др. Моделирование аварий со снижением подачи теплоносителя для канала реактора РБМК-1000 // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика ядерных реакторов. Вып. Динамика и безопасность ядерных энергетических установок. 1998. — № 1. — С. 48—65.
28. *Kiselev A. Ye., Voltchek A.M.* On the Modeling of the Pellet/Cladding/Steam Interactions in the Framework of the Oxygen Diffusion Theory // Proceedings of ARS'94 International Topical Meeting on Advanced Reactors Safety, Pittsburgh, Pa, 1994, April 17—21. — [S. l.], 1994. — P. 583—590.
29. *Kiselev A. Ye., Strizhov V. F., Porracchia A.* et al. Assessment of the Modified ICARE2 Code Oxygen Diffusion Model for UO_2/Zr(solid)/H_2O Interactions / IAEA Technical Committee on Behavior of LWR Core Materials under Accident Conditions. — Dimitrovograd, Russia, Oct. 9—13, 1995.
30. *Gonzalez R.* et al. ICARE2 Version 2 Mod1, Description of physical models / Inst. de Protection et de Surete Nucleare, CEA — France. — [S. l.], [s. a.]. — (Note technique DRS|SEMAR 92/43).
31. *Shepherd I., Haste T., Kourti N.* et al. Investigation of core degradation (COBE) // Nucl. Eng. & Des. — 2001. — Vol. 209. — P. 107—116.
32. *Hayward P. J., Hofmann P., Stuckert J.* et al. UO_2 Dissolution by Molten Zircaloy: New Experimental Results and Modelling. — Karlsruhe, Germany, 1999. — (Report FZKA 6379, INV-CIT(99)-P029).
33. *Veshchunov M. S., Stuckert J., Berdyshev A.V.* Modelling of Zr-O and U-Zr-O Melts Oxidation and New Crucible tests. — Karlsruhe, Germany, Dec. 2002. — (Report FZKA 6792, SAM-COLOSS-P040).
34. *Онуфриенко С. В., Кухтевич И. В., Безлепкин В. В.* и др. Анализ процессов в активной зоне реактора ВВЭР-1000 при тяжелых авариях с применением отечественного интегрального кода РАТЕГ/СВЕЧА/ГЕФЕСТ // Атом. энергомашиностроение: Труды ЦКТИ. — 2002. — Вып. 282. — С. 89—100.

II. Моделирование физико-химических процессов, протекающих в твэлах водо-водяных реакторов при запроектных авариях (модули PROF и LIQF)

А. А. Бердышев, М. С. Вещунов, А. Е. Киселев, М. Ю. Коржов, Т. А. Юдина

1. Введение

Возможные сценарии развития тяжёлой аварии реакторных установок водо-водяного типа (ВВЭР, PWR, BWR), инициированные потерей теплоносителя из первого контура, зависят от многих факторов, таких как размер течи, работоспособность систем безопасности, действия оператора, наложение дополнительных отказов и т.д. Тем не менее, все эти аварии имеют общие закономерности. Наиболее важной, из них является разогрев и последующее разрушение активной зоны реактора, сопровождающееся выделением большого количества водорода и радиоактивных продуктов деления. При этом в области температур ниже 1200°C скорость разогрева активной зоны определяется уровнем остаточного тепловыделения и существенно зависит от динамики уровня теплоносителя в активной зоне. При повышении температуры а.з. выше 1200°C определяющий вклад в разогрев и разрушение элементов конструкции реакторной установки вносит реакция окисления циркония паром. Для численного моделирования физико-химических процессов окисления оболочек твэл в ИБРАЭ РАН разработаны специальные физические модели и соответствующие программные модули PROF и LIQF. Программные модули PROF и LIQF адаптированы для приложений в составе интегральных кодов и в настоящее время активно используются при выполнении численного моделирования тяжелых аварий, в частности, расчетных оценок источников водорода для решения задач обеспечения пожаровзрывобезопасности АЭС с ВВЭР.

- реалистичная оценка источников водорода и пара для задач по обеспечению пожаровзрывобезопасности защитной оболочки реакторной установки (РУ);
- реалистичная оценка динамики разогрева и разрушения АЗ и ВКУ реактора, анализ отклика на возможные меры по управлению аварией;
- реалистичная оценка массы и энергии расплава, выходящего из корпуса реактора в случае разрушения его днища.

Выполнение таких оценок требует детального рассмотрения физико-химических процессов окисления и эвтектических взаимодействий в со-

держащих цирконий элементах конструкции АЗ, находящихся как в неразрушенном состоянии (модуль PROF), так и на стадии разрушения, включая плавление (модуль LIQF). Именно эти физико-химические процессы, определяющие динамику генерации водорода, физико-химическую структуру элементов АЗ, степень их прочности, существенно влияющие на разогрев АЗ, и являются предметом моделирования модулями PROF и LIQF.

Использование в составе расчетных кодов улучшенной оценки модулей PROF и LIQF накладывает на них ряд требований и ограничений. В качестве приоритетных выделим следующие:

- современный уровень моделирования физических явлений, соответствующий известным достижениям в области теоретических и экспериментальных исследований;
- высокое быстродействие и стабильность работы модуля в составе расчетного кода;
- универсальность модуля, подразумевающая возможность приложения его как к различным типам элементов конструкции, так и к отдельным элементам, находящимся в различных условиях (одностороннее, двустороннее окисление, кислородное голодание, окисление частично разрушенных конструкций, окисление расплава и т. д.).

2. Модуль PROF — окисление и процессы эвтектических взаимодействий в циркониевых элементах конструкции АЗ РУ при температуре выше 2250 К

Модуль PROF построен на основе современной физической модели, в которой предполагается, что диффузия кислорода контролирует кинетику взаимодействия слоев. Модуль предназначен для самосогласованного описания физико-химических процессов, протекающих в условиях ЗПА в АЗ РУ при температурах ниже температуры плавления α-фазы циркония:

- внешнего, внутреннего и двустороннего окисления циркониевых оболочек твэлов и других содержащих цирконий элементов конструкции АЗ;
- эвтектическое взаимодействие оболочки твэла с таблеткой UO_2;
- окисление в условиях кислородного голодания;
- окисление с учетом растрескивания оксидных слоев;
- внешнее, внутреннее и двустороннее окисление застывшего расплава элементов АЗ и ВКУ РУ.

Поскольку модуль PROF специально создавался для приложений в интегральных кодах, то при его разработке, с одной стороны, сохранена детальность моделирования физических явлений, с другой — достигнута

максимально возможная универсальность, подразумевающая возможность приложения его как к разным типам элементов конструкции, так и к элементам, находящимся в разных условиях (одностороннее, двустороннее окисление, кислородное голодание, окисление частично разрушенных конструкций, окисление расплава и т. д.). Кроме того, направленность на практическое использование потребовало обеспечить высокое быстродействие и стабильность работы модуля. Естественно, удовлетворение этих противоречивых условий потребовало введения некоторых упрощающих предположений в физической модели и ряда других ограничений и допущений.

2.1. Описание области применимости модуля PROF и основных допущений

Область применимости данной версии модуля PROF обусловлена прежде всего его целевым назначением: использование в качестве подпрограммы в составе программных комплексов улучшенной оценки, предназначенных для моделирования аварий со значительным повреждением АЗ. Соответственно:

1. Модуль PROF разработан, верифицирован и применим в температурном диапазоне от 1250 до 2250 К. Выбор нижней температурной границы основан на результатах анализа экспериментов [1—5; 7; 16], показывающих, что процессы химического взаимодействия в системе топливо—оболочка—пар существенно ускоряются при температурах выше 1250 К. Начиная с этой температуры, их вклад существенен как с точки зрения формирования источника водорода, так и с точки зрения влияния экзотермической реакции окисления на динамику разогрева АЗ. Таким образом, в обсуждаемой версии модуля PROF не моделируются процессы низкотемпературного окисления (T < 1250 К). Описание низкотемпературного окисления может быть существенным для анализа поведения твэла в проектных режимах, однако выходит за рамки данной работы. Тем не менее в модуле PROF можно задавать любую начальную степень предокисления поверхности при задании исходного состояния зоны (на начало аварийного процесса), что позволяет в случае необходимости учитывать возможное низкотемпературное окисление.

2. При температурах выше 2250 К процессы окисления являются предметом моделирования модулем LIQF.

3. В модуле PROF производится только анализ физико-химических процессов при заданном пространственном температурном распределении в моделируемом элементе. При этом модуль PROF производит оценку изменения физико-химических свойств вещества (связанных с процессами окисления и формирования эвтектик) и количества тепла, выделяемого в материалах АЗ из-за химических превращений. Тепловая же задача является предме-

том численного моделирования внешним кодом, где содержится вся необходимая для этого информация (включая информацию из модуля PROF). Такой подход вполне оправдан. Действительно, температурное состояние элемента конструкции в каждый момент времени определяется не только физико-химическими процессами, но главным образом такими видами обмена энергией, как радиальный и аксиальный перенос тепла теплопроводностью, перенос энергии излучением, конвекцией, стекающим расплавом, энерговкладом продуктов деления с учетом их возможного выхода в первый контур и т. д. В связи с этим модуль PROF вызывается на каждом временном шаге внешнего кода для пересчета состояния окисляемых элементов конструкции в соответствии с текущим температурным состоянием и изменениями в граничных условиях (поток пара, наличие стекающих материалов и т. д.).

4. Данная версия модуля PROF применима для описания процессов окисления только в цилиндрической геометрии. Это ограничение оправдывается тем, что большинство элементов конструкции АЗ РУ (твэлы, элементы органов системы управления и защиты, трубы, обечайки и т. д.) либо имеют цилиндрическую структуру, либо с достаточной степенью точности могут быть описаны с помощью цилиндрических структур. Кроме того, известно, что результаты большинства экспериментов, включая эксперименты на интегральных стендах с модельными сборками твэлов, можно удовлетворительно интерпретировать в цилиндрической симметрии. Тем самым модуль PROF позволяет достаточно подробно описывать радиальную неоднородность материалов, возникающую в результате окисления или эвтектических взаимодействий элементов конструкций, пренебрегая при этом угловой неоднородностью рассматриваемых элементов.

5. Предметом моделирования модулем PROF является аксиальная ячейка. Как и в вызывающем модуль PROF коде, здесь предполагается, что существуют заданное аксиальное разбиение моделируемых элементов конструкции на ячейки (аксиальная нодализация). В пределах одной аксиальной ячейки высотой dz параметры моделируемого элемента конструкции не зависят от z. Соответственно модуль PROF вызывается и производит оценку физико-химического состояния для каждой аксиальной ячейки независимо.

Поскольку физико-химические процессы в данной версии PROF рассматриваются независимо для каждой аксиальной ячейки в приближении цилиндрической симметрии, то для обозначения исходных материалов и материалов, возникающих в ходе химических взаимодействий, включая газовые зазоры, удобно пользоваться понятием «материальный слой» (в дальнейшем просто «слой»). Понятия «материальный слой», «система слоев» будут широко применяться при дальнейшем изложении, поэтому остановимся на них несколько подробнее.

В качестве примера на рис. 1 представлено схематическое изображение отрезка топливного стержня, состоящего из четырех материальных слоев (центральное отверстие, топливо, газовый зазор и циркониевая оболочка) на заданном аксиальном уровне высотой dz.

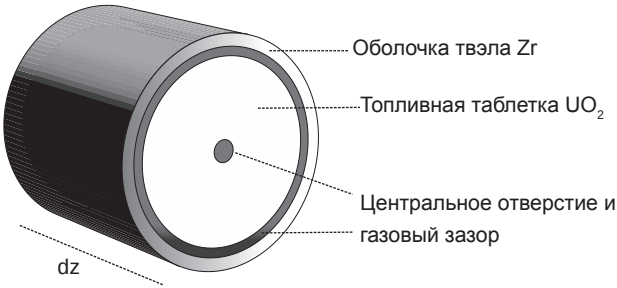


Рис. 1. Схематическое изображение отрезка топливного стержня в виде материальных слоев

Далее в описании модуля PROF мы будем пользоваться упрощенной формой обозначения соответствующих материальных слоев для каждого аксиального уровня dz. Так, система четырех слоев топливного стержня, изображенная на рис. 1, будет обозначаться следующим образом:

gap1	UO_2	gap2	β-Zr

Здесь использованы следующие обозначения: gap1 предназначено для описания параметров газовой среды в центральном компенсационном отверстии, UO_2 обозначает слой, соответствующий топливной таблетке, gap2 предназначено для описания параметров газовой среды в зазоре между топливным элементом и оболочкой твэла, β-Zr обозначает неокисленный материал оболочки твэла (в случае твэла реактора ВВЭР — соответствующий конкретному сплаву циркония и ниобия).

Ниже приведен пример описания процесса окисления твэла с помощью системы введенных обозначений. Прежде всего предположим, что по каким-то причинам газовый зазор и центральное компенсационное отверстие в твэле закрылись. Кроме того, будем считать, что существует хороший контакт между топливным стержнем и оболочкой и имеется достаточное количество пара на внешней стороне оболочки твэла. В этом случае, как показывают эксперименты, начнется процесс одновременного внешнего окисления оболочки и эвтектического взаимодействия оболочки с топливным элементом. При этом из исходного материала оболочки β-Zr образуются следующие материальные слои:

- Со стороны топливной таблетки должны появиться три слоя:
  - ♦ слой обогащенного кислородом циркония (альфа-циркония) с включениями жидкой фазы смеси металлического урана и циркония; обозначим такую композицию как $\alpha\text{-Zr}(\text{O})+(\text{U, Zr})$;
  - ♦ слой, содержащий жидкую фазу смеси металлического урана и циркония; обозначим такую композицию как (U, Zr);
  - ♦ слой обогащенного кислородом циркония (альфа-циркония) $\alpha\text{-Zr}(\text{O})$.
- На внешней стороне оболочки дополнительно появятся два слоя:
  - ♦ слой обогащенного кислородом циркония (альфа-циркония) $\alpha\text{-Zr}(\text{O})$;
  - ♦ слой диоксида циркония ZrO_2.

Соответствующая конфигурация материальных слоев с использованием принятых выше обозначений представлена на рис. 2.

UO_2	$\alpha\text{-Zr}(\text{O})+(\text{U, Zr})$	(U, Zr)	$\alpha\text{-Zr}(\text{O})$	$\beta\text{-Zr}$	$\alpha\text{-Zr}(\text{O})$	ZrO_2

Рис. 2. Конфигурация слоев, возникающая при окислении внешней поверхности твэла и наличии эвтектического взаимодействия между топливом и оболочкой

По мере насыщения кислородом системы «топливо—оболочка» общая конфигурация, показанная на рис. 2, меняется. Сначала по мере обогащения оболочки кислородом, поступающим как из окружающей среды, так и из топливной таблетки, начинает быстро уменьшаться, а затем и полностью исчезает слой исходного материала оболочки (за счет роста оксида и слоев циркония, обогащенных кислородом). Далее продолжающееся окисление приводит к постепенному превращению обогащенных кислородом альфа-слоев циркония в оксид. На завершающей стадии происходит полное доокисление возникших в ходе взаимодействия между топливом и оболочкой эвтектических слоев. Характерная последовательность изменений представлена на рис. 3.

UO_2	$\alpha\text{-Zr}(\text{O})+(\text{U, Zr})$	(U, Zr)	$\alpha\text{-Zr}(\text{O})$	$\beta\text{-Zr}$	$\alpha\text{-Zr}(\text{O})$	ZrO_2

UO_2	$\alpha\text{-Zr}(\text{O})+(\text{U, Zr})$	(U, Zr)	$\alpha\text{-Zr}(\text{O})$	$\alpha\text{-Zr}(\text{O})$	ZrO_2

UO_2	$\alpha\text{-Zr}(\text{O})+(\text{U, Zr})$	(U, Zr)	ZrO_2

UO_2	$\alpha\text{-Zr}(\text{O})+(\text{U, Zr})$	$(\text{U, Zr})\text{O}_2$

UO_2	$(\text{U, Zr})\text{O}_2$

Рис. 3. Эволюция слоев в системе «топливо—оболочка» в ходе окисления твэла

Конечным результатом такого взаимодействия является образование вокруг частично растворенной таблетки полностью окисленной керамической оболочки смешанного состава. Эта керамическая оболочка определяет дополнительный слой $(U, Zr)O_2$.

2.2. Диффузионное приближение для описания процессов окисления и эвтектического взаимодействия

В основу модуля PROF положена физическая модель, которая позволяет с достаточной степенью детальности описывать процессы окисления и эвтектического взаимодействия в содержащих цирконий элементах конструкции АЗ. Эта модель опирается на следующие основные предположения:

- основным механизмом переноса кислорода является диффузия;
- концентрация кислорода на границах между слоями меняется скачком;
- концентрация кислорода на границах между слоями со стороны соответствующих слоев принимает равновесное значение и выбирается из бинарной Zr-O или U-O фазовых диаграмм;
- описание движения границ между слоями пренебрегает механическим поведением оболочки и топлива.

Для примера на рис. 4 приведен качественный вид распределения концентраций кислорода для трех слоев, как правило, возникающих в условиях внешнего окисления оболочек твэла.

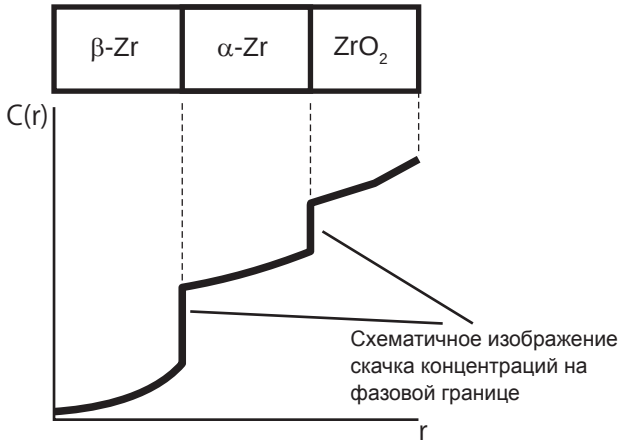


Рис. 4. Схематическое изображение профиля распределения концентрации кислорода внутри слоев и соответствующих скачков на границах между слоями

Тогда в цилиндрической геометрии внутри каждого слоя будут справедливы следующие уравнения:

$$\frac{\partial C_j}{\partial t} = -\frac{\partial\left(f_{\mathrm{O}}^j r\right)}{r\partial r}, \tag{1}$$

$$\frac{\partial\left(r v_j\right)}{\partial r} = 0, \tag{2}$$

где $f_{\mathrm{O}}^j\left(r,t,T\right)$ — полный поток кислорода в j-м слое; $C_j\left(r,t\right)$ — концентрация кислорода в j-м слое; T — температура; $v_j\left(r,t\right)$ — скорость смещения несжимаемой решетки циркония j-го слоя.

Уравнение (1) — классическое уравнение непрерывности для кислорода (закон Фика). Уравнение (2) — прямое следствие уравнения непрерывности для циркония, отражающее несжимаемость его кристаллической решетки.

Заметим, что перенос кислорода в слое происходит как за счет диффузии атомов кислорода по кристаллической решетке циркония, так и за счет движения слоя как целого. Это движение возникает из-за того, что на границах между слоями, где происходят фазовые превращения, имеет место объемное расширение или сжатие вследствие различий в плотностях кристаллических решеток соприкасающихся фаз циркония. Тем самым полный поток кислорода в слое складывается из двух составляющих — диффузионного потока и потока, связанного с движением слоя как целого:

$$f_{\mathrm{O}}^j(r,t,T) = F_j + v_j C_j, \tag{3}$$

где F_j представляет собой диффузионный поток:

$$F_j = -D_{\mathrm{O}}^j\left(T\right)\frac{\partial C_j}{\partial r},$$

где $D_{\mathrm{O}}^j(T)$ — коэффициент диффузии кислорода в j-м слое.

Для полноты системе уравнений (1)—(3) требуется задать условия сшивки потоков (на внешней и внутренней границах системы слоев и на границах между слоями). Введем для обозначения положения границ между слоями дополнительную переменную ξ (радиус соответствующей границы). Тогда в неподвижной системе координат условия сшивки на границе раздела ξ, полученные при условии постоянства молярной плотности урана u и цир-

кония ρ и концентрации кислорода C в приграничном слое, можно записать следующим образом:

$$\left(C_j - C_{j-1}\right)\frac{\partial \xi}{\partial t} = F_j + v_j C_j - F_{j-1} - v_{j-1} C_{j-1}, \tag{4}$$

$$\left(\rho_j - \rho_{j-1}\right)\frac{\partial \xi}{\partial t} = v_j \rho_j - v_{j-1} \rho_{j-1}, \tag{5}$$

$$\left(u_j - u_{j-1}\right)\frac{\partial \xi}{\partial t} = v_j u_j - v_{j-1} u_{j-1}, \tag{6}$$

где j-й слой располагается справа от поверхности раздела ξ, $(j-1)$-й слой — слева от поверхности раздела ξ. На рис. 5 схематически изображены два слоя, имеющие границу раздела ξ, потоки кислорода в них, молярные плотности урана и циркония и концентрации кислорода.

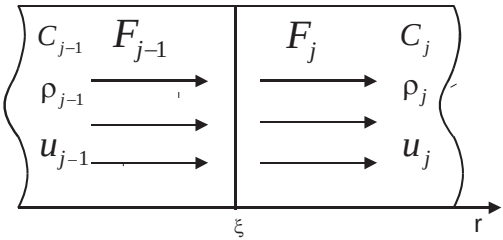


Рис. 5. Схематическое изображение потоков кислорода F, молярных плотностей урана u, циркония ρ и концентрации кислорода C вблизи поверхности раздела двух сред ξ. Индекс j относится к слою, находящемуся справа от границы, индекс $(j-1)$ — к слою, находящемуся слева от границы ξ

Граничные условия на наружной поверхности, контактирующей с окружающей атмосферой, могут быть двух видов:

- при условии достаточного доступа кислорода из окисляющей атмосферы концентрации выбираются в соответствии с фазовой диаграммой;
- в случае кислородного голодания концентрация определяется из закона сохранения массы кислорода в слое и из условия непрерывности потока кислорода (см. подраздел 2.6).

Точное решение системы уравнений (1)—(6) позволяет найти профили концентраций кислорода, потоки кислорода и соответствующее движение границ между слоями. Однако такое решение требует существенных вычислительных мощностей, так как предполагает решение системы из трех

уравнений в частных производных для каждого слоя с учетом граничных условий (4)—(6).

Поэтому при реализации описанной диффузионной модели в модуль PROF дополнительно был введен ряд упрощающих предположений. Эти упрощения, с одной стороны, позволили сохранить требуемую детальность моделирования, а с другой — позволили обеспечить достаточную простоту и быстродействие, требуемые для практических приложений модуля в составе кодов улучшенной оценки.

Прежде всего отметим, что в большинстве приложений, и в частности при анализе запроектных аварий, достаточно иметь подробную информацию только о положении границ между слоями (для оценки степени растворения топливной таблетки, окисления оболочки, количества и скорости генерации выделившегося водорода). Движение границ определяется уравнениями (4)—(6). Это уравнения в обыкновенных производных, и их численное решение не представляло бы серьезной проблемы, если бы были известны потоки кислорода справа и слева от границы. В полной постановке диффузионной задачи граничные потоки могут быть рассчитаны после решения системы уравнений (1)—(3) и восстановления профиля концентрации кислорода внутри каждого слоя. Однако именно решение этих уравнений в частных производных существенно осложняет задачу.

В [7] показано, что для большинства практических приложений точное решение системы уравнений (1)—(3) можно без особой потери точности заменить приближенными оценками профиля кислорода внутри слоя и, соответственно, приближенными оценками величины потоков кислорода на границах слоев. Такая оценка позволяет существенно упростить постановку: решение системы уравнений (1)—(6) в частных производных сводится к решению системы уравнений (4)—(6) в обыкновенных производных, в которых величины потоков на границах между слоями оцениваются с использованием дополнительных упрощающих предположений.

В подразделе 2.3 детально рассмотрена математическая постановка задачи для описания движения границ между слоями с помощью уравнений (4)—(6). В подразделах 2.4 и 2.5 подробно обсуждена методика приближенного описания профиля кислорода в материальных слоях и соответствующая методика оценки величин граничных потоков.

2.3. Уравнения движения границ между слоями

Предположим, что потоки кислорода на границах между слоями известны. Тогда движение границ в ходе окисления или эвтектического взаимодействия полностью определяется уравнениями (2), (4) и (5).

Уравнение (4) определяет движение границы, уравнение (5) определяет скорость смещения кристаллической решетки циркония у границы, уравнение (2) связывает скорость смещения кристаллической решетки циркония у правой и левой границ слоя.

Для численного решения системы (2), (4), (5) удобно перейти к системе координат, в которой скорость переноса слоя с минимумом концентрации кислорода равна нулю (обозначим его как слой *M*).

Тогда из уравнений (4) и (5) следуют простые рекуррентные уравнения, описывающие движение границ слоев:

- внешних к слою *M*:

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} = \frac{F_{j-1} - F_j}{C_{j-1} - C_j\left(\rho_{j-1} / \rho_j\right)} + v_{j-1}, \tag{7}$$

скорости всех внешних слоев v_j определяются по ранее определенной скорости предыдущего слоя v_{j-1} рекурсивной формулой

$$v_j = v_{j-1}\frac{\rho_{j-1}}{\rho_j} + \left(1 - \frac{\rho_{j-1}}{\rho_j}\right)\frac{\partial \xi}{\partial t}; \tag{8}$$

- внутренних к слою *M*:

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} = \frac{F_{j-1} - F_j}{C_{j-1}\dfrac{\rho_j}{\rho_{j-1}} - C_j} + v_j, \tag{9}$$

скорость всех внутренних слоев v_{j-1} будет определяться по ранее определенной скорости правого соседнего слоя v_j:

$$v_{j-1} = v_j\frac{\rho_j}{\rho_{j-1}} + \left(1 - \frac{\rho_j}{\rho_{j-1}}\right)\frac{\partial \xi}{\partial t}. \tag{10}$$

2.4. Оценка потоков кислорода на границах между слоями

Полученные в подразделе 2.3 рекуррентные уравнения (7)—(10), определяющие движение границ между слоями, необходимо дополнить явными выражениями для соответствующих потоков кислорода F_j.

В подразделе 2.2 обсуждалось, что наиболее точно значения потоков можно вычислить, решив внутри каждого слоя систему уравнений в частных производных для концентраций кислорода. Такое решение достаточно трудоемко, особенно в случае необходимости использования диффузионной модели в составе внешнего кода (наличие движущихся границ, нестационарность температуры и соответственно граничных концентраций, тепловое расширение и т. д.).

Для большинства практических приложений точное решение системы уравнений (1)—(3) можно без особой потери точности заменить приближенными оценками профиля кислорода внутри слоя и соответственно приближенными оценками величины потоков кислорода на границах слоев. В модуле PROF потоки оцениваются, исходя из квазилинейного приближения распределения кислорода в слое.

Основанием для такого подхода является допущение малости диффузионных времен по сравнению с характерными временами движения границ, что позволяет считать внутри каждого слоя диффузионный процесс практически установившимся.

Покажем это. Оценим скорость движения границы между слоями $\partial\xi/\partial t$ сверху. В соответствии с (4) ее можно оценить следующим образом:

$$\frac{\partial\xi}{\partial t} \sim \frac{D_O^j}{L_j}\frac{\Delta C_j^{\mathrm{ph}}}{\Delta C_{\mathrm{bnd}}},$$

где L_j — ширина слоя; ΔC_j^{ph} — перепад концентрации кислорода в одной фазе; ΔC_{bnd} — скачок концентраций кислорода на границе.

Тогда характерное время перемещения границы на величину порядка толщины слоя L_j

$$\tau_b \sim \frac{L_j}{\frac{\partial\xi}{\partial t}} \sim \frac{L_j^2}{D_O^j}\frac{\Delta C_{\mathrm{bnd}}}{\Delta C_j^{\mathrm{ph}}}.$$

С другой стороны, характерное диффузионное время в слое толщиной L_j

$$\tau_D^j \sim \frac{L_j^2}{D_O^j}.$$

В результате условие квазистационарности $\frac{\tau_D^j}{\tau_b} \ll 1$ принимает вид

$$\frac{\tau_D^j}{\tau_b} \sim \frac{\Delta C_j^{\text{ph}}}{\Delta C_{\text{bnd}}} \ll 1.$$

Соотношение $\frac{\Delta C_j^{\text{ph}}}{\Delta C_{\text{bnd}}} \ll 1$ хорошо выполняется для слоя ZrO_2. В других слоях оно выполняется лишь приближенно. Соответственно квазистационарное решение в этих слоях должно модифицироваться (как описано ниже).

Стационарное решение диффузионного уравнения с заданными граничными концентрациями и неподвижными границами имеет линейную форму. Для медленно движущихся границ это обстоятельство позволяет внутри каждого слоя применять для описания соответствующих профилей распределения кислорода квазилинейное приближение.

Концентрации на границах слоя предполагаются заданными из соответствующей фазовой диаграммы, а внутри i -го слоя вводят одну или две дополнительные точки $\tilde{C}_i$ (одна точка, как правило, выбирается для достаточно тонких слоев, две точки — для слоев с минимумом концентрации).

Рассмотрим квазилинейную аппроксимацию профиля распределения концентрации кислорода с одной дополнительной точкой $\tilde{C}_i$.

Правый FR_i и левый FL_i диффузионные потоки рассчитываются следующим образом:

$$FR_i = -2\frac{D_O^i\left(CR_i - \tilde{C}_i\right)}{r_{i+1} - r_i}, \tag{11}$$

$$FL_i = -2\frac{D_O^i\left(\tilde{C}_i - CL_i\right)}{r_{i+1} - r_i}. \tag{12}$$

Для оценки концентрации кислорода в точке $\tilde{C}_i$ используется масса кислорода в слое.

Конкретная численная реализация квазилинейной аппроксимации профиля кислорода с одной дополнительной точкой заключалась во введении параметра α для каждого слоя. Указанный параметр выбирается из соображений, описанных ниже. Рассмотрим в квазистационарном приближении возможные профили кислорода. Для иллюстрации несколько таких профилей схематично представлены на рис. 6.

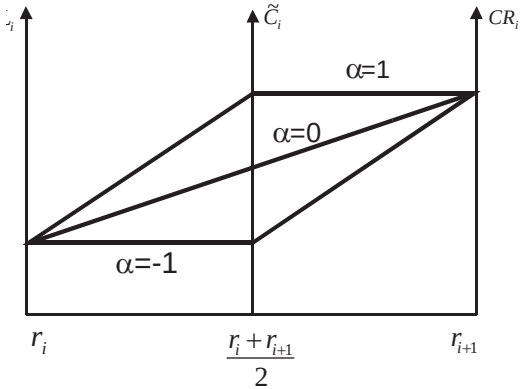


Рис. 6. Возможные профили распределения концентрации кислорода в квазилинейном приближении с одной дополнительной точкой $\tilde{C}_i$. CL_i, CR_i — концентрации кислорода на левой и правой границах слоя соответственно, $\tilde{C}_i$ — концентрация кислорода в середине слоя

Отметим, что построенные таким образом профили зависят от одного параметра α:

$$\alpha = 2\frac{\tilde{C}_i - CL_i}{CR_i - CL_i} - 1, \tag{13}$$

где $\tilde{C}_i$ — концентрация кислорода внутри i-го слоя.

С учетом этого выражения потоки кислорода оцениваются следующим образом:

$$FR_i = -\frac{D_O^i\left(CR_i - CL_i\right)}{r_{i+1} - r_i}\left(1 - \alpha\right), \tag{14}$$

$$FL_i = -\frac{D_O^i\left(CR_i - CL_i\right)}{r_{i+1} - r_i}\left(1+\alpha\right). \qquad (15)$$

Характерные случаи, представленные на рис. 6:

$\alpha = 0$ — линейный профиль; для профиля, близкого к линейному, $|\alpha| \ll 1$;

$\alpha = 1,\ \tilde{C}_i = CR_i$ — диффузионный поток на правой границе i-го слоя равен нулю;

$\alpha = -1,\ \tilde{C}_i = CL_i$ — диффузионный поток на левой границе i-го слоя равен нулю.

Профиль кислорода в i-м слое однозначно определяет массу кислорода в слое:

$$OM_i = \int_{r_i}^{r_{i+1}} C(r) r\, dr. \qquad (16)$$

Для слоев с квазилинейным распределением концентрации кислорода из (16) следует, что величина α связана с массой кислорода OM в i-м слое согласно формуле

$$OM_i = OM_i^0 + \frac{\pi}{4}\alpha\left(r_{i+1}^2 - r_i^2\right)\left(CR_i - CL_i\right), \qquad (17)$$

где OM_i^0 — масса кислорода для линейного профиля:

$$OM_i^0 = \frac{\pi}{3}\left(r_{i+1} - r_i\right)\left[CR_i\left(2r_{i+1} + r_i\right) + CL_i\left(r_{i+1} + 2r_i\right)\right]. \qquad (18)$$

Уравнение (17) однозначно определяет параметр α по массе кислорода. Приращение массы кислорода в слое на каждом шаге вычислений определяется по формуле, которая является следствием уравнения (1):

$$\frac{\partial\left(OM_i\right)}{\partial t} = 2\pi dz\left[r_{i+1}\frac{\partial r_{i+1}}{\partial t}CR_i - r_i\frac{\partial r_i}{\partial t}CL_i + \left(FL_i + v_i CL_i\right)r_i - \left(FR_i + v_i CR_i\right)r_{i+1}\right]. \qquad (19)$$

Таким образом, общая логика вычислений в модуле PROF построена по следующей схеме:

1. По известным параметрам $\left(OM_i, CR_i, CL_i, r_{i+1}, r_i\right)$ в каждом i-м слое определяется параметр α.

2. По параметру α вычисляются потоки кислорода FR_i и FL_i.

3. По потокам кислорода FR_i и FL_i определяются перемещения границ — уравнения (7)—(10).

4. После оценки перемещения границ вновь оценивается величина массы кислорода OM_i в слое и происходит переход к пункту 1.

Отметим, что в ходе разработки модуля PROF проводилось сравнение точного решения диффузионного решения с приближенным. Было показано, что точность решения в квазилинейном приближении достаточна для решения задач окисления твэла при запроектной аварии.

2.5. Оценка потоков кислорода в слое с минимумом концентрации кислорода

Описанное выше «квазилинейное» приближение для описания профиля кислорода оказывается недостаточным в двух важных случаях:

- когда в некотором слое процесс диффузии кислорода не успел установиться; этот случай, как правило, имеет место в исходном неокисленном слое β-Zr, размер которого в начале окисления может в десятки раз превышать соответствующие толщины оксидных слоев;
- когда кислород в слой поступает с двух сторон (что характерно, например, при двустороннем окислении слоя β-Zr или при эвтектическом взаимодействии оболочки с топливной таблеткой в условиях внешнего окисления).

В практических приложениях модуля PROF к задачам окисления оболочек твэлов и других элементов конструкций и первый, и второй случай, как правило, имеют место именно в слоях, в которых концентрация кислорода достигает минимального значения по отношению концентрации кислорода в соседних слоях (для β-Zr на начальном этапе окисления или для α-Zr после соответствующего доокисления β-фазы циркония). Для корректной оценки потоков кислорода в слоях с минимумом концентрации в модуле PROF описанное выше квазилинейное приближение для описания профиля кислорода было модифицировано. Суть модификации сводится к детализации описания динамики переноса кислорода в этих слоях:

1. Предполагается, что в таком слое существуют некоторые характерные области, обогащенные кислородом. Таких областей в слое с минимумом концентрации может быть одна или две в зависимости от наличия источников кислорода на правой и (или) левой границах.
2. Характерные размеры этих областей используются для оценки потоков кислорода на правой и левой границах. Соответствующие размеры мо-

гут быть много меньше размеров слоя (для остальных слоев за характерный размер при оценке потока кислорода принималась толщина всего слоя).

3. Если в слой с минимумом концентрации кислород поступает с двух сторон, то предполагается, что профиль состоит из трех линейных частей. В этом случае вводится дополнительный расчетный параметр, который позволяет рассчитать количество кислорода, поступившего с левой и правой границ.
4. Оценка характерных размеров обогащенных кислородом областей производится путем сравнения количества кислорода, поступившего с каждой из сторон, с максимально возможной величиной (для слоя данного химического состава).

На рис. 7 показано распределение концентрации кислорода в слое для случая, когда ее минимальное значение достигается внутри слоя m в области с границами r'_m и r'_{m+1}. На этом рисунке приняты следующие обозначения: CL_m, CR_m — концентрации кислорода на левой и правой границах слоя; OXL_m — минимальное значение концентрации кислорода внутри слоя; $DELR_m$ — характерный размер обогащенной кислородом области у правой границы слоя; $DELL_m$ — характерный размер обогащенной кислородом области у левой границы слоя. Заметим, что такой тип распределения концентрации кислорода возникает в начале окисления β-Zr с двух сторон. На границах слоя градиент концентрации кислорода становится отличным от нуля, в то время как в остальной части слоя концентрация кислорода практически не возмущена. В течение некоторого времени области, обогащенные кислородом, распространяются внутрь слоя, что приводит к выравниванию распределения концентрации кислорода.

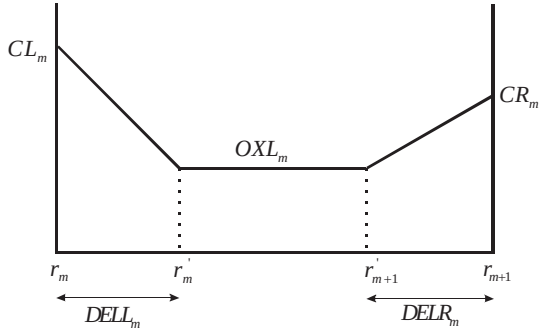


Рис. 7. Профиль распределения концентрации кислорода в слое m, когда минимальное значение концентрации кислорода OXL_m достигается внутри этого слоя при поступлении кислорода с двух сторон

Приведем основные уравнения, используемые для описания таких слоев с минимумом концентрации. Допустим, что концентрация кислорода в середине m-го слоя равна минимальному значению OXL_m.

На границах слоя концентрация кислорода равна:

- либо максимальной величине, соответствующей фазовой диаграмме;
- либо величине OXL_m в случае кислородного голодания, если эта граница является наружной и окружающая среда инертна или если m-й слой граничит со слоем, в котором можно пренебречь переносом кислорода.

Для первого случая диффузионные потоки на границах можно оценить следующим образом:

- левая граница:

$$FL_m = -\frac{D_O^m \left(OXL_m - CL_m\right)}{DELL_m}, \tag{20}$$

где $DELL_m$ — характерный размер области, обогащенной кислородом, у левой границы m-го слоя;

- правая граница:

$$FR_m = -\frac{D_O^m \left(CR_m - OXL_m\right)}{DELR_m}, \tag{21}$$

где $DELR_m$ — характерный размер области, обогащенной кислородом, у правой границы слоя. Значение параметра $DELR_m \le 0,5\left(r_m + r_{m+1}\right)$.

При численной реализации в программе дополнительно был введен параметр $OPAR_m$, предназначенный для оценки массы кислорода, находящейся в левой и правой частях m-го слоя. Именно этот параметр сохраняется в памяти после каждого глобального временного шага Δt_{glob} и по нему всякий раз пересчитываются значения $DELL_m$ и $DELR_m$, позволяющие оценивать потоки кислорода на левой и правой границах слоя по (20) и (21).

$$\Delta OM_m^{\text{right}} = \frac{1 + OPAR_m}{2} \Delta OM_m, \tag{22}$$

$$\Delta OM_m^{\text{left}} = \frac{1 - OPAR_m}{2} \Delta OM_m, \tag{23}$$

где ΔOM_m — масса кислорода в левой или правой частях слоя ($\Delta OM_m = OM_m - OML_m$); OM_m — масса кислорода в m-м слое; OML_m — масса кислорода в части слоя с минимальной концентрацией ($OML_m = OXL_m S_m$); S_m — объем области с минимумом концентрации.

Параметр $OPAR_m$ удовлетворяет обыкновенному дифференциальному уравнению, вытекающему из (22) для $\Delta OM_m^{\text{right}}$.

В случае, когда кислорода в слое мало,

$$\frac{d}{dt} OPAR_m = 2\frac{d}{dt}\left(\frac{\Delta OM_m^{\text{right}}}{\Delta OM_m}\right), \tag{24}$$

$\Delta OM_m^{\text{right}}$ определяется по (19) (это уравнение применяют к правой части слоя m, при этом полагают, что на границе r'_{m+1} кислородный поток равен нулю).

В случае, когда кислорода в слое много, параметр $OPAR_m$ не рассчитывается.

$$\frac{d}{dt} OPAR_m = 0. \tag{25}$$

2.6. Оценка потока кислорода для внешних слоев в условиях кислородного голодания

Наружный слой оболочки, контактирующий с окружающей атмосферой, может оказаться в условиях ограниченного доступа кислорода из окружающей атмосферы, когда величина внешнего потока кислорода к наружной или внутренней поверхности оболочки меньше, чем величина потока, определяемого формулами (14) и (15) или (20) и (21).

В существующем варианте модуля PROF потоки FR_i и FL_i явно зависят от потока кислорода на поверхности, который задается теплогидравликой внешнего кода.

Если поток кислорода на поверхности равен нулю, граничная концентрация кислорода не является равновесной и должна быть рассчитана через массу кислорода в слое.

Для случая с квазилинейным профилем:

- если кислородное голодание происходит на наружной поверхности (случай $\alpha = 1$ на рис. 6), концентрация кислорода на правой границе

слоя $CR_i = \tilde{C}_i = \tilde{C}R_i$ в соответствии с (17) определяется следующим образом:

$$\tilde{C}R_i = \frac{\dfrac{6OM_i}{\pi(r_{i+1} - r_i)} - CL_i\left(2r_i + r_{i+0,5}\right)}{r_i + 5r_{i+0,5} + 3r_{i+1}}; \qquad (26)$$

- если кислородное голодание происходит на внутренней поверхности (случай $\alpha = -1$ на рис. 6), концентрация кислорода на левой границе слоя $CL_i = \tilde{C}_i = \tilde{C}L_i$ в соответствии с (17) вычисляется по формуле

$$\tilde{C}L_i = \frac{\dfrac{6OM_i}{\pi\left(r_{i+1} - r_i\right)} - CR_i\left(r_{i+0,5} + 2r_{i+1}\right)}{3r_i + 5r_{i+0,5} + r_{i+1}}, \qquad (27)$$

где $r_{i+0,5} = 0,5\left(r_i + r_{i+1}\right)$.

Внутренние кислородные потоки рассчитываются согласно (14) и (15) с соответствующей концентрацией кислорода на границе.

2.7. Моделирование эвтектического UO_2 взаимодействия с оболочкой

В ходе взаимодействия топлива и β-Zr оболочки в твердой фазе образуются три новых слоя: $\left(\alpha\text{-Zr(O)}, (\text{U, Zr})\right)$, (U, Zr), и $\left(\alpha\text{-Zr(O)}\right)$. Характерной особенностью такого взаимодействия является образование эвтектической смеси (U, Zr), которая является жидкостью при данных температурах. На рис. 8 представлена система слоев, образующихся в результате взаимодействия β-Zr оболочки с топливной таблеткой, и профиль распределения концентрации кислорода в этих слоях.

Слой $\left(\alpha\text{-Zr(O)}, (\text{U, Zr})\right)$ — двухфазная область, состоящая главным образом из твердой фазы α-Zr (объемная доля $1 - \beta = 0,7$) и каналов с жидкостью (U, Zr) (объемная доля $\beta = 0,3$). Массовые доли U и Zr в жидкой фазе такие же, как в слое (U, Zr) ($CL_{\alpha\text{UZr}}$ и $CR_{\alpha\text{UZr}}$ обозначают концентрацию кислорода в α-фазе этого слоя на левой и правой границах).

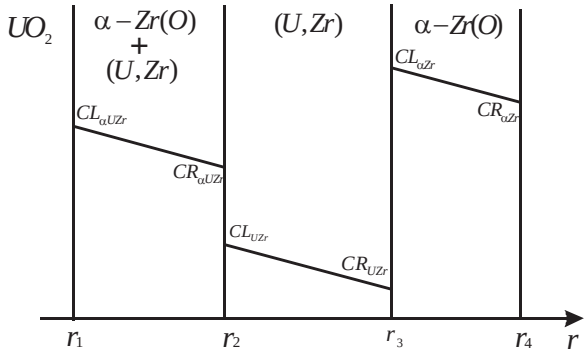


Рис. 8. Распределение концентрации кислорода в слоях, образующихся в процессе эвтектического взаимодействия UO_2 с оболочкой β-Zr

Слой (U, Zr) — жидкий сплав U и Zr с малым содержанием кислорода между CL_{UZr} и CR_{UZr} на левой и правой границах. Поскольку концентрации CL_{UZr} и CR_{UZr} очень малы, они для простоты приравниваются к нулю, в то время как кислородный поток через этот слой достаточно велик. Предполагается, что в этом слое массовые доли U (0,97) и Zr (0,03) известны из эксперимента [16].

Слой $(\alpha\text{-Zr(O)})$ — обычная α-фаза циркония с концентрацией кислорода $CL_{\alpha Zr}$ на левой и $CR_{\alpha Zr}$ на правой границах слоя. Экспериментально наблюдалось отсутствие урана в этом слое, поэтому предполагается, что он туда не проникает.

Движение границ эвтектических слоев, формирующихся при наличии контакта между топливом и оболочкой, определяется системой обыкновенных дифференциальных уравнений (4). Здесь они принимают частную форму:

$$\frac{\partial r_1}{\partial t} = \frac{FL_{\alpha UZr}}{\left(1 - \frac{V_{UZr}}{V_{\alpha UZr}}\right) CL_{\alpha UZr} - CR_{UO_2}}, \tag{28}$$

$$\frac{\partial r_2}{\partial t} = \frac{FL_{UZr} - FR_{\alpha UZr}}{CL_{UZr} - \left(1 - \frac{V_{UZr}}{V_{\alpha UZr}}\right) CR_{\alpha UZr}}, \tag{29}$$

$$\frac{\partial r_3}{\partial t} = \frac{FL_{\alpha Zr} - FR_{UZr}}{CL_{\alpha Zr} - CR_{UZr}}, \tag{30}$$

где $F_{\alpha UZr}$ — поток кислорода в слое $(\alpha\text{-Zr(O)}, (\text{U, Zr}))$; F_{UZr} — поток кислорода в слое (U, Zr); $F_{\alpha Zr}$ — поток кислорода в слое $(\alpha\text{-Zr(O)})$; V_{UZr} — объем, занимаемый (U, Zr) расплавом в слое $(\alpha\text{-Zr(O)}, (\text{U, Zr}))$; $V_{\alpha UZr}$ — объем, занимаемый слоем $(\alpha\text{-Zr(O)}, (\text{U, Zr}))$.

Чтобы получить эту систему, были сделаны следующие предположения:

- молярная плотность урана в UO_2 не отличается от молярной плотности катионов в смеси U, Zr (что определяется общей логикой внешнего кода, в базе данных веществ которого металлический уран не определен как отдельное вещество);
- концентрация кислорода в слое $(\alpha\text{-Zr(O)}, (\text{U, Zr}))$ отличается от концентрации кислорода в $(\alpha\text{-Zr(O)})$-фазе, содержащейся в этом слое, так как расплав (U, Zr) занимает часть объема слоя $(\alpha\text{-Zr(O)}, (\text{U, Zr}))$;
- поток кислорода по слою UO_2 и концентрация кислорода в слое (U, Zr) считались пренебрежимо малыми.

В принципе система (28)—(30) позволяет описать движение границ слоев, если известны потоки кислорода. Но в отличие от описанных выше процессов окисления здесь имеется некоторая специфика.

1. Оценка потока кислорода по жидкому слою (U, Zr).

Для количественной оценки величины потока кислорода недостаточно данных о граничных концентрациях и коэффициентах массопереноса в слое. Однако анализ экспериментальных результатов показал, что одним из основных свойств эвтектического слоя (U, Zr) являлось постоянство массовых долей урана и циркония (массовая доля урана составляла 0,97, циркония — 0,03 и слабо зависела от продолжительности теста и температуры образца). Тогда можно оценить величину потока кислорода (FL_{UZr} и FR_{UZr}) по слою (U, Zr) таким образом, чтобы при движении его правой и левой границ массовая доля урана и циркония оставалась постоянной. Кроме того, в этом слое наблюдалась пренебрежимо малая концентрация кислорода, что указывало на то, что весь входящий в слой кислород без потерь переносился в направлении слоя $(\alpha\text{-Zr(O)})$. Последнее обстоятельство позволяет связать потоки соотношением $FR_{UZr} = \frac{r_2}{r_3} \times FL_{UZr}$. Предположение же о постоянстве массовой доли урана и циркония и использование закона сохранения массы урана в ураносодержащих слоях

$$\frac{d\left(\sum UM_i\right)}{dt} = 0, \qquad (31)$$

где UM_i — масса урана в слое с номером i, определяет простую связь между скоростями движения границ r_1, r_2, r_3:

$$r_3 \frac{\partial r_3}{\partial t} = -A r_1 \frac{\partial r_1}{\partial t} + B r_2 \frac{\partial r_2}{\partial t}, \qquad (32)$$

где

$$A = \frac{V_{\mathrm{UZr}}}{V_{\mathrm{UZr}}^{\mathrm{U}}} - \frac{V_{\mathrm{UZr}}}{V_{\alpha\mathrm{UZr}}},$$

$$B = 1 - \frac{V_{\mathrm{UZr}}}{V_{\alpha\mathrm{UZr}}},$$

$V_{\mathrm{UZr}}^{\mathrm{U}}$ — объем, занимаемый ураном в слое $(\mathrm{U, Zr})$.

Уравнение (32) совместно с (29) и (30) и позволило оценить поток кислорода по слою $(\mathrm{U, Zr})$.

2. В ходе численной реализации модели было установлено, что задание потока $F_{\alpha\mathrm{UZr}}$ для ближайшего к диоксиду урана эвтектического слоя в форме

$$\mathrm{F}_{\alpha\mathrm{UZr}} = -\mathrm{D}_{\mathrm{O}}^{\alpha\mathrm{UZr}} \frac{\mathrm{CR}_{\alpha\mathrm{UZr}} - \mathrm{CL}_{\alpha\mathrm{UZr}}}{\mathrm{r}_2 - \mathrm{r}_1} \text{ (линейное приближение)} \qquad (33)$$

ведет к нестабильности решения системы уравнений для границ r_2 и r_3. В [16] авторы также указывают на нестабильный характер движения этих границ. Физическая причина данной нестабильности, по-видимому, связана с неустойчивостью движения плоского фронта r_3, проанализированной в [5]. Проблема численной неустойчивости решения была устранена в модуле PROF путем согласования величин кислородных потоков по слою $(\alpha\text{-Zr(O)}, (\mathrm{U, Zr}))$ и по слою $(\alpha\text{-Zr(O)})$. Форма связи между $F_{\alpha\mathrm{UZr}}$ и $F_{\pm\mathrm{Zr}}$ имеет вид

$$FL_{\alpha\mathrm{UZr}} = \frac{r_3}{r_1} FL_{\alpha\mathrm{Zr}} \frac{CR_{\mathrm{UO_2}} - BCL_{\alpha\mathrm{UZr}}}{CR_{\mathrm{UO_2}} + ACL_{\alpha\mathrm{Zr}} - BCL_{\alpha\mathrm{UZr}}} k, \qquad (34)$$

где параметр k выбирался из условия наилучшего совпадения с экспериментальными результатами (равен приблизительно 1,04).

Окончательно, учитывая вышесказанное, в модуле численно решается следующая система уравнений для скоростей движения границ r_1, r_2, r_3:

$$\frac{\partial r_1}{\partial t} = \frac{FL_{\alpha\mathrm{UZr}}}{BCL_{\alpha\mathrm{UZr}} - CR_{\mathrm{UO}_2}}, \tag{35}$$

$$B\left(CR_{\alpha\mathrm{UZr}} - CL_{\alpha\mathrm{Zr}}\right)r_2' = -\frac{r_3}{r_2}FL_{\alpha\mathrm{Zr}} + \frac{r_1}{r_2}FL_{\alpha\mathrm{UZr}}\left[1 + \frac{ACL_{\alpha\mathrm{Zr}}}{CR_{\mathrm{UO}_2} - BCL_{\alpha\mathrm{UZr}}}\right], \tag{36}$$

$$r_3\frac{\partial r_3}{\partial t} = -Ar_1\frac{\partial r_1}{\partial t} + Br_2\frac{\partial r_2}{\partial t}. \tag{37}$$

Решение этой системы стабильно и позволяет с достаточной степенью точности описать известные экспериментальные данные.

Процесс эвтектического взаимодействия UO_2 с оболочкой прекращается в двух случаях:

- на поздней стадии окисления оболочки, когда слой $(\alpha\text{-Zr(O)})$ насыщается кислородом или полностью доокисляется до ZrO_2;
- в случае потери контакта между топливом и оболочкой (если в возникшем зазоре между таблеткой и оболочкой появится пар, модуль PROF позволит продолжить моделирование внутреннего окисления оболочки твэла).

2.8. Окисление смеси

Окисление смесей, состоящих из двух или более материалов, один из которых преобразовывается в новую фазу, представляет собой сложный процесс. Сложность заключается в том, что объемная доля примесей, переходящих из одного слоя в другой по мере окисления циркония, является неопределенной величиной. Так как экспериментов по окислению смесей не существует, модель, описывающая окисление чистых материалов, обобщена на случай окисления смеси. При этом дополнительно предполагается постоянство объемной доли примеси утончающегося слоя. Тогда из системы (4)—(6) следуют формулы, описывающие движение границ между слоями:

- для слоев, внешних по отношению к слою с минимальным содержанием кислорода:

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} = \frac{\left(F_{j-1} - F_j\right)}{C_{j-1} - C_j\mathrm{fac}} + v_{j-1}, \tag{38}$$

$$v_j = v_{j-1}\mathrm{fac} + \left(1-\mathrm{fac}\right)\frac{\partial\xi}{\partial t}, \tag{39}$$

где $\mathrm{fac} = x_{j-1} + \frac{\rho_{j-1}}{\rho_j}(1-x_{j-1})$, если граница движется в сторону слоя, находящегося слева от границы; $\mathrm{fac} = \frac{1}{x_j + \frac{\rho_j}{\rho_{j-1}}(1-x_j)}$, если граница движется в сторону слоя, находящегося справа от границы; x_j, x_{j-1} — объемные доли примесей в слое, находящемуся справа и слева от границы соответственно;

- для слоев, внутренних по отношению к слою с минимальным содержанием кислорода:

$$\frac{\partial\xi}{\partial t} = \frac{\left(F_{j-1} - F_j\right)}{C_{j-1}\mathrm{fac} - C_j} + v_j, \tag{40}$$

$$v_{j-1} = v_j\mathrm{fac} + \left(1-\mathrm{fac}\right)\frac{\partial\xi}{\partial t}, \tag{41}$$

где $\mathrm{fac} = x_j + \frac{\rho_j}{\rho_{j-1}}\left(1-x_j\right)$, если граница движется в сторону слоя, находящегося справа от границы, $\mathrm{fac} = \frac{1}{x_{j-1} + \frac{\rho_{j-1}}{\rho_j}\left(1-x_{j-1}\right)}$, если граница движется в сторону слоя, находящегося слева от границы.

Физический смысл приведенных формул для движения границ между слоями очевиден. Представим пояснения к этим формулам на следующем примере.

Рассмотрим слой $\mathrm{Zr{+}UO_2}$, находящийся слева от границы ξ. В нем объемная доля Zr равна $\left(1-x_{j-1}\right)$, объемная доля $\mathrm{UO_2}$ составляет x_{j-1}. Этот слой преобразуется к слою $\mathrm{ZrO_2{+}UO_2}$ (объемная доля $\mathrm{UO_2}$ на момент преобразования равна x_j'). Очевидно, что в ходе окисления циркония между этими двумя слоями образуется переходный третий слой, в котором объемные доли $\mathrm{ZrO_2}$ $\left(1-x_j\right)$ и $\mathrm{UO_2}$ (x_j) будут диктоваться законами сохранения массы циркония и урана. На рис. 9 представлено схематическое изображение этого преобразования.

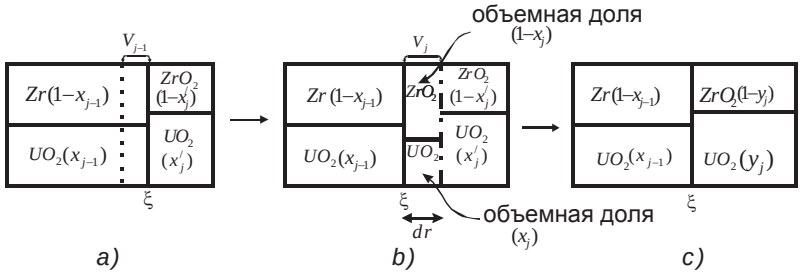


Рис. 9. Схематическое изображение окисления смеси $\mathrm{Zr{+}UO_2}$ за локальный временной шаг Δt_{loc}: а — исходная конфигурация слоев; пунктирная линия выделяет объем V_{j-1} в $\mathrm{Zr{+}UO_2}$ слое (x_{j-1} — объемная доля $\mathrm{UO_2}$), который будет окислен за Δt_{loc}; б — конфигурация слоев после окисления за Δt_{loc}; штрих-пунктирная линия выделяет промежуточный слой объемом V_j, образованный в результате окисления объема V_{j-1} (в промежуточном слое x_j — объемная доля $\mathrm{UO_2}$); в — конфигурация слоев после смешения слоев с одинаковыми фазами циркония и усреднения примесей (y_j — объемная доля примесей)

Объемная доля Zr после преобразования к $\mathrm{ZrO_2}$ изменится из-за различия в плотностях Zr и $\mathrm{ZrO_2}$. Изменится и объемная доля $\mathrm{UO_2}$ в соответствии с законом сохранения массы урана. Справа от границы в результате окисления Zr образуется слой $\mathrm{Zr{+}UO_2}$ (объемная доля оксида урана x_j).

Баланс массы всех материалов в рассматриваемой преобразующейся смеси

$$\frac{V_j}{V_{j-1}} = x_{j-1} + \left(1 - x_{j-1}\right)\frac{\rho_{j-1}}{\rho_j}, \tag{42}$$

$$\frac{x_j}{x_{j-1}} = \frac{1}{x_{j-1} + \left(1 - x_{j-1}\right)\dfrac{\rho_{j-1}}{\rho_j}}. \tag{43}$$

Соответственно в формуле (7) для данного случая окисления смеси вместо отношения $\dfrac{\rho_{j-1}}{\rho_j}$ следует применять более общее выражение $x_{j-1} + \left(1 - x_{j-1}\right)\dfrac{\rho_{j-1}}{\rho_j}$, учитывающее наличие примеси в окисляющемся слое.

Таким образом, в ходе окисления смеси между двумя слоями, один из которых преобразуется в другой, реально возникает третий слой с определен-

ными объемными долями. Но при численной реализации окисления смеси формально этот слой рожден не будет, так как в коде не выделяются слои с одинаковыми фазами циркония, но разными примесями (промежуточный слой ZrO_2 с объемной долей урана x_j и слой ZrO_2 с объемной долей урана x'_j будут иметь одинаковые имена). Этот слой будет смешан с соседним, имеющим ту же фазу циркония, а примеси будут усреднены по слою после каждого временного шага Δt_{loc}.

2.9. Окисление с учетом возможного разрушения оксидной пленки (растрескивания)

Дополнительно к описанным выше физическим процессам в программе реализована возможность учета влияния разрушения внешнего слоя ZrO_2 на скорость окисления [19; 20]. Как хорошо известно, внешняя оксидная пленка испытывает механические напряжения вследствие разности между внутренним и внешним давлениями, приложенными к оболочке, и фазового перехода металлического циркония в оксид.

Если эти механические напряжения достигают некоторой критической величины (см. описание модуля CROX [22]), то в оксидной пленке появляются трещины. Предполагается, что в общем случае влияние растрескивания на процесс окисления определяется двумя параметрами: d — длиной трещин в радиальном направлении; L — расстоянием между трещинами в азимутальном направлении.

Реальный двумерный процесс окисления упрощенно моделируется в рамках одномерной задачи. Это схематически показано на рис. 10.

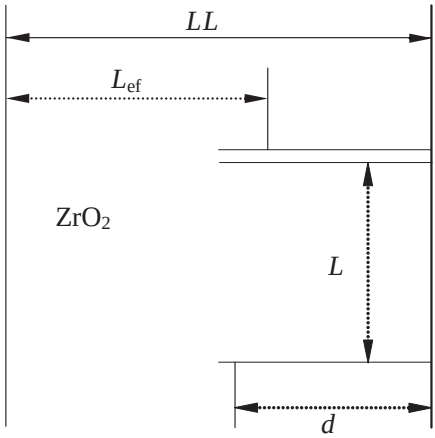


Рис. 10. Моделирование диффузии кислорода в ZrO_2 слое при растрескивании

Для учета растрескавшейся части слоя ZrO_2 в модуле окисления PROF введен параметр dlef — эффективное отношение «глубины к длине» (глубины трещин к расстоянию между трещинами). Предполагается, что ввиду растрескивания некоторая часть слоя ZrO_2 не препятствует движению кислорода. Толщина такого эффективного прозрачного подслоя d_{tr} может быть оценена следующим образом:

$$d_{tr} = d\left(1 - \exp\left(-\mathrm{dlef}\right)\right), \tag{44}$$

где d — глубина трещин внешнего слоя ZrO_2, рассчитанная модулем CROX. Предполагается, что диффузия кислорода происходит только в подслое оксида с шириной $L_{\mathrm{ef}} = LL - d_{\mathrm{tr}}$, где LL — полная толщина оксидной пленки (см. рис. 10).

Растрескивание приводит к ускорению окисления вследствие ускорения диффузии кислорода вдоль трещин. Это явление учитывается введением эффективной ширины оксидного слоя.

dlef — переменный параметр, позволяющий учесть любые предельные случаи.

Величина L_{ef} может быть прямо определена в двух противоположных ситуациях:

$$\mathrm{dlef} \to 0 \Rightarrow d_{\mathrm{tr}} \to 0 \Rightarrow L_{\mathrm{ef}} \to LL,$$

$$\mathrm{dlef} \to \infty \Rightarrow d_{\mathrm{tr}} \to d \Rightarrow L_{\mathrm{ef}} \to LL - d.$$

Анализ различных экспериментальных исследований растрескивания оболочек при окислении показывает, что параметр dlef приблизительно равен 0,5.

3. Модуль LIQF — окисление и процессы взаимодействия с оксидами урана и циркония расплава U-Zr-O при T > 2250 K

Взаимодействие расплава $\mathrm{U\text{-}Zr\text{-}O}$ с топливом и оксидом циркония является важным процессом, определяющим динамику разрушения АЗ РУ в условиях тяжелых аварий. С одной стороны, интенсивное взаимодействие расплава $\mathrm{U\text{-}Zr\text{-}O}$ с топливом приводит к тому, что уже при температурах

примерно на 1000°С ниже температуры плавления UO_2 (примерно 2850°С) значительная часть топливной таблетки может перейти в расплав. Следствием этого будет более ранний интенсивный выход продуктов деления и формирование значительного количества энерговыделяющего расплава в АЗ. С другой стороны, интенсивное взаимодействие расплава $U\text{-}Zr\text{-}O$ с оксидом циркония может привести к разрушению стержня. Это взаимодействие включает в себя два конкурирующих процесса: растворение оксида циркония и окисление металлического расплава $U\text{-}Zr\text{-}O$. В зависимости от того, какой из этих процессов протекает более интенсивно, происходит увеличение или уменьшение толщины слоя ZrO_2. В условиях избытка кислорода при определенных параметрах расплава и в зависимости от начальной толщины окисного слоя может наблюдаться рост оксидной пленки. В условиях недостатка кислорода на внешней поверхности твэла окисная оболочка растворяется. Уменьшение толщины ZrO_2 слоя существенно сказывается на прочностных свойствах оболочки и может привести к ее разрушению и стеканию расплавленных материалов твэла.

Механизм переноса кислорода по слою $U\text{-}Zr\text{-}O$, очевидно, отличается от переноса кислорода по твердому слою, следовательно, для описания химического взаимодействия топлива и оксида циркония с расплавом $U\text{-}Zr\text{-}O$ описанная выше модель окисления модуля PROF не применима. Отметим, что жидкие слои в оболочке образовывались и при более низких температурах. Так, при эвтектическом взаимодействии топлива с оболочкой жидкий слой (U, Zr) образуется уже при температурах порядка 1000 К. Однако такие эвтектические слои являлись достаточно тонкими и их моделирование оказалось возможно выполнить в рамках модуля PROF. Для этого применялась специальная методика, описанная выше в подразделе 2.7 и основанная на дополнительных экспериментальных данных. Принципиально иная ситуация возникает в системе «топливо—оболочка» при температуре выше 2250 К, когда происходит плавление практически всех металлических слоев. Разность температур между топливом и внешними слоями твэла, различие в весах атомов циркония, урана и кислорода, возможное стекание расплавленного вещества создают условия для конвективного перемешивания. В этих условиях все жидкие слои внутри оболочки перемешиваются, в результате чего, как правило, образуется более или менее однородный слой из жидкой смеси урана, кислорода и циркония, в котором основным механизмом переноса является конвекция. Для адекватного описания окисления таких расплавленных слоев и их взаимодействия с керамическими слоями был разработан модуль LIQF.

Как и модуль PROF, модуль LIQF разрабатывался специально для практического использования в составе кодов улучшенной оценки для моделирования запроектных аварий РУ ВВЭР. В связи с этим реализованные в модуле

методики описания окисления расплава и взаимодействия расплава с керамическими слоями достаточно универсальны и позволяют согласованным образом описать:

- внешнее, внутреннее и двустороннее окисление паром (с учетом возможного кислородного голодания) циркониевых оболочек твэлов и других элементов конструкции АЗ, содержащих цирконий, в диапазоне от начала плавления внутренних металлических слоев (выше 2250 К) и до момента разрушения керамических слоев и начала стекания расплава;
- взаимодействие расплава $\mathrm{U\text{-}Zr\text{-}O}$ с таблеткой $\mathrm{UO_2}$ и/или окисленной частью циркониевой оболочки до момента разрушения керамических слоев и начала стекания расплава;
- внешнее, внутреннее и двустороннее окисление стекающего расплава $\mathrm{U\text{-}Zr\text{-}O}$ как в окислительной среде, так и в условиях кислородного голодания;
- взаимодействие стекающего расплава $\mathrm{U\text{-}Zr\text{-}O}$ с таблеткой $\mathrm{UO_2}$ и частью оболочки $\mathrm{ZrO_2}$ как в окислительной среде, так и в условиях кислородного голодания.

Однако выполнение требований, налагаемых на LIQF как на модуль в составе программных комплексов (в частности, универсальности модуля), потребовало введения некоторых упрощающих предположений в физической модели и ряда других ограничений и допущений.

Ниже приводятся детали физической модели и соответствующих упрощений в ней, методики моделирования, области применимости и численной реализации модуля.

3.1. Описание области применимости модуля LIQF и основных допущений

Допущения, принятые при разработке модуля LIQF, близки к допущениям модуля PROF, поскольку обусловлены аналогичным целевым назначением: использования в качестве подпрограммы в составе программных комплексов улучшенной оценки, предназначенных для моделирования аварий со значительным повреждением АЗ.

Соответственно выделим следующее:

1. Модуль LIQF разработан, верифицирован и применим при температурах выше 2250 К. Нижняя граница диапазона определяется температурой плавления α-фазы металлического циркония.
2. Как и модуль PROF, данная версия модуля LIQF предназначена для моделирования физико-химических процессов при заданном простран-

ственном температурном распределении, определяемом внешним кодом. Влияние экзотермической реакции окисления расплава на пространственное температурное распределение обеспечивается вызовом модуля LIQF на каждом временном шаге внешнего кода для пересчета количества выделившегося тепла и изменения состава окисляемых элементов конструкции. Модуль LIQF применим для описания процессов окисления расплава и его взаимодействия с оксидами урана и циркония только в цилиндрической геометрии для заданной аксиальной ячейки. Соответственно модуль LIQF вызывается и производит оценку физико-химического состояния для каждой аксиальной ячейки независимо.

Для обозначения исходных материалов и материалов, возникающих в ходе химических взаимодействий, включая газовые зазоры, в дальнейшем будем пользоваться понятием слоя, введенным в описании модуля PROF.

Рассмотрим несколько возможных конфигураций системы слоев.

Внутренняя структура топливного стержня на момент плавления α-фазы циркония может быть представлена системой трех слоев:

UO_2	$U\ Zr\ O$ расплав	ZrO_2

Однако такая конфигурация взаимодействующих слоев не является единственно возможной. В ряде ситуаций слева и справа от расплава может находиться только оксид циркония (например, при стекании перемещенного расплава в промежутке между окисленными циркониевыми трубами):

ZrO_2	$U\ Zr\ O$ расплав	ZrO_2

В других случаях левая или правая граница может оказаться свободной от керамического слоя (при разрушении оксидной пленки оболочки или в случае стекания перемещенного расплава по окисленной оболочке):

UO_2	$U\ Zr\ O$ расплав

$U\ Zr\ O$ расплав	ZrO_2

Большое количество возможных конфигураций, представленных выше, определяет необходимость создания обобщенной модели, позволяющей описывать взаимодействие жидкого расплава с отдельными элементами

стержня как в условиях окисляющей атмосферы, так и в условиях ограниченного доступа кислорода.

Рассмотренные выше возможные конфигурации обобщим на рис. 11. Здесь предполагается, что слева от расплава могут находиться керамические слои UO_2 или ZrO_2, справа — только керамика ZrO_2. Также допускается отсутствие керамических слоев на одной из границ или на обеих границах одновременно.

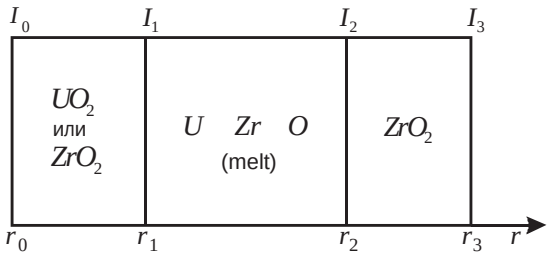


Рис. 11. Схематическое изображение системы UO_2 (ZrO_2)/расплав/ ZrO_2

Для удобства последующего изложения модели растворения введем следующие обозначения:

$c_U(I_{1,2})$, $c_{Zr}(I_{1,2})$, $c_O(I_{1,2})$ — молярные плотности урана, циркония и концентрация кислорода в расплаве на правой (I_2) и левой (I_1) границах расплава соответственно;

$c_U(B)$, $c_{Zr}(B)$, $c_O(B)$ — молярные плотности урана, циркония и концентрация кислорода в объеме (B);

$\rho_U(I_1)$, $\rho_{Zr}(I_1)$, $\rho_O(I_1)$ — молярные плотности урана, циркония и концентрация кислорода в слое UO_2 (ZrO_2), находящемся слева от расплава на границе (I_1);

$\varphi_U(I_2)$, $\varphi_{Zr}(I_2)$, $\varphi_O(I_2)$ — молярные плотности урана, циркония и концентрация кислорода в слое ZrO_2, находящемся справа от расплава на границе (I_2);

$D_O^{(Cer)}$ — коэффициенты диффузии кислорода в твердых фазах ($Cer = UO_2$ и $Cer = ZrO_2$).

Еще раз подчеркнем, что в модуле LIQF для оценки потоков кислорода по керамическим слоям используются те же приближения и допущения, что и в модуле PROF: основным механизмом переноса кислорода в слоях в твердой фазе является диффузия, а для упрощения вычислений профиль распределения концентрации кислорода принимается близким к линейному (квазилинейный профиль). Значение концентрации кислорода в керамиче-

ском слое на границе с расплавом выбирается из бинарной $\mathrm{Zr\text{-}O}$ или тройной $\mathrm{Zr\text{-}U\text{-}O}$ равновесной фазовой диаграммы при температуре слоев (равновесные значения).

Для оценки потоков различных компонентов в расплаве предполагается, что основным механизмом переноса кислорода, урана и циркония по расплаву является конвекция. Соответственно предполагается следующее:

- в расплаве по всему объему кислород распределен равномерно; концентрация кислорода в расплаве на границе с керамикой $c_{\mathrm{O}}\left(I_{1,2}\right)$ отличается от концентрации в объеме расплава $c_{\mathrm{O}}\left(B\right)$ и выбирается из тройной $\mathrm{U\text{-}Zr\text{-}O}$ фазовой диаграммы при температуре расплава (равновесные значения); у границ расплава существует тонкая приграничная область δ (усредненная по высоте границы), где концентрация меняется от $c_{\mathrm{O}}\left(B\right)$ до $c_{\mathrm{O}}\left(I_{1,2}\right)$;
- на границах слоев $I_{1,2}$ концентрация кислорода меняется скачкообразно от $\rho_{\mathrm{O}}\left(I_1\right)$ до $c_{\mathrm{O}}\left(I_1\right)$ на границе I_1 и от $\varphi_{\mathrm{O}}\left(I_2\right)$ до $c_{\mathrm{O}}\left(I_2\right)$ на границе I_2.

В качестве примера на рис. 12 представлено схематическое изображение упрощенных профилей концентрации кислорода при описании взаимодействия расплава с топливом и оксидом циркония.

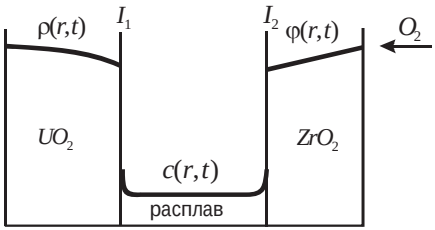


Рис. 12. Профиль распределения концентрации кислорода в керамических слоях и в расплаве

Как и в модуле PROF, в модуле LIQF предполагается, что химическое взаимодействие слоев приводит к их расширению (сжатию), обусловленному разностью плотностей преобразующихся фаз. При этом механическим сопротивлением соседних слоев при расширении (сжатии) слоя можно пренебречь.

Кроме того, в модуле LIQF принимается, что скорости расширения (сжатия) слоев определяются относительно левого слоя в системе взаимодействующих слоев. Так, если слева от расплава находится слой $\mathrm{UO_2}$, скорость этого слоя полагается равной нулю. Если слева от расплава находится слой $\mathrm{ZrO_2}$,

скорость этого слоя равна нулю. Если слева от расплава слоев нет (граница свободна), неподвижным считается расплав.

Особенностью модели является зависимость процессов окисления расплавленного циркония и его взаимодействия с керамическими слоями от концентрации кислорода в расплаве. Модель согласованным образом учитывает две стадии взаимодействия. Они достаточно хорошо описаны в большом количестве экспериментальных и теоретических работ [8—10; 21]. В течение первой стадии (стадии насыщения) расплавленный цирконий интенсивно растворяет керамические слои, расположенные на левой и/или правой границе и расплав достаточно быстро насыщается кислородом. После достижения расплавом области насыщения кислородом начинается вторая стадия взаимодействия — выпадение керамических частиц. В расплаве образуются керамические частицы, и растворение слоя UO_2 (если он есть на левой границе) подавляется. Выпадение керамических частиц в расплаве поддерживается потоком кислорода в расплав из UO_2 и ZrO_2 и окисляющей атмосферой (через внешний слой ZrO_2).

Схематично эти стадии процесса взаимодействия расплава с керамикой показаны на рис. 13. На рис. 13*а* условно представлена система слоев на первой стадии взаимодействия (растворения) с учетом окисляющей атмосферы, на рис. 13*б* — система слоев на стадии образования керамических частиц в расплаве.

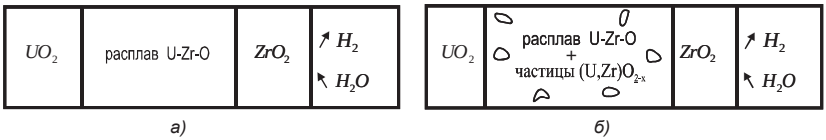


Рис. 13. Схематическое изображение двух стадий взаимодействия расплава с оксидами циркония и урана в условиях наличия пара на внешней поверхности оболочки

Упомянутая выше последовательность двух стадий, заключающаяся в переходе насыщения к выпадению твердых частиц в расплаве, основана на результатах анализа известных экспериментальных данных. Соответствующие эксперименты проводились при постоянной температуре в тигельной конфигурации (тигель из UO_2, заполненный расплавом Zr с возможными вставками из ZrO_2). Однако при запроектной аварии расплав в АЗ может находиться в гораздо более сложных условиях. Последнее обстоятельство потребовало при численной реализации модели окисления расплава и его взаимодействия с керамикой ввести ряд обобщений.

Прежде всего отметим, что в случае запроектной аварии может быть более сложный порядок следования стадий. В частности, в ходе окисления смеси

и растворения оболочки может меняться температура (неизотермический режим). Тогда изменение количества керамических частиц будет происходить не только за счет окисления и растворения, но и за счет нагрева или охлаждения расплава. Окисление и взаимодействие расплава с таблеткой может идти в условиях перемещения расплава (в результате в ходе взаимодействия химический состав расплава может резко измениться).

Дополнительно к возможности численно моделировать взаимодействие расплава с оксидами урана и циркония в различных конфигурациях с учетом возможности изменения характерных параметров расплава (температуры, химического состава) в модуле LIQF была реализована возможность учета достаточно сложных граничных условий. В частности, он может быть применен для численного моделирования:

- одностороннего и двустороннего окисления расплава как в условиях неразрушенной структуры стержня, так и в случае его разрушения и перемещения расплава; причем модуль LIQF позволяет автоматически отслеживать соответствующие граничные условия, исходя из текущих параметров расплава и наличия теплоносителя на внешней и внутренней поверхностях;
- взаимодействия расплава с керамикой в условиях кислородного голодания.

Текущая версия модуля была успешно протестирована и верифицирована на базе интегральных экспериментов и экспериментов, направленных на изучение явления взаимодействия расплава с UO_2 и ZrO_2.

Ниже приведены системы обобщенных уравнений для двух стадий взаимодействия расплава с оксидами урана и циркония, численно реализованные в модуле LIQF.

3.2. Основные уравнения на стадии насыщения (до начала выпадения керамических частиц в расплаве)

На обеих стадиях взаимодействия расплава с керамическими слоями движение границ между слоями определяется уравнениями (4)—(6), представляющими собой сшивки потоков на границах. Как и в модуле PROF, эти уравнения позволяют полностью описать движение границ, если известны соответствующие потоки. Для оценок потоков будем далее исходить из следующих предположений:

1. Перенос кислорода по керамическим слоям, как и в модуле PROF, определяется механизмом диффузии, а для оценки потоков кислорода профиль распределения концентрации кислорода принимается близким к линейному.

2. На стадии насыщения процессы растворения UO_2 и ZrO_2 протекают особенно быстро и расплав интенсивно насыщается атомами урана и кислорода. В результате из-за большой разности весов атомов урана, циркония и кислорода в расплаве выполнены условия для конвективного перемешивания жидкой фазы [6]. Потоки кислорода, урана и циркония запишем следующим образом:

- вблизи границы I_1:

$$f_{\mathrm{O}}^{\mathrm{melt}} = -k_{\mathrm{O}}\left[c_{\mathrm{O}}(B) - c_{\mathrm{O}}(I_1)\right] + v_{\mathrm{melt}}(I_1)c_{\mathrm{O}}(I_1), \tag{45}$$

$$f_{\mathrm{U}}^{\mathrm{melt}} = -k_{\mathrm{U}}\left[c_{\mathrm{U}}(B) - c_{\mathrm{U}}(I_1)\right] + v_{\mathrm{melt}}(I_1)c_{\mathrm{U}}(I_1), \tag{46}$$

$$f_{\mathrm{Zr}}^{\mathrm{melt}} = -k_{\mathrm{Zr}}\left[c_{\mathrm{Zr}}(B) - c_{\mathrm{Zr}}(I_1)\right] + v_{\mathrm{melt}}(I_1)c_{\mathrm{Zr}}(I_1); \tag{47}$$

- вблизи границы I_2:

$$f_{\mathrm{O}}^{\mathrm{melt}} = -k_{\mathrm{O}}\left[c_{\mathrm{O}}(B) - c_{\mathrm{O}}(I_2)\right] + v_{\mathrm{melt}}(I_2)c_{\mathrm{O}}(I_2), \tag{48}$$

$$f_{\mathrm{U}}^{\mathrm{melt}} = -k_{\mathrm{U}}\left[c_{\mathrm{U}}(B) - c_{\mathrm{U}}(I_2)\right] + v_{\mathrm{melt}}(I_2)c_{\mathrm{U}}(I_2), \tag{49}$$

$$f_{\mathrm{Zr}}^{\mathrm{melt}} = -k_{\mathrm{Zr}}\left[c_{\mathrm{Zr}}(B) - c_{\mathrm{Zr}}(I_2)\right] + v_{\mathrm{melt}}(I_1)c_{\mathrm{Zr}}(I_2), \tag{50}$$

где v_{melt} — скорость движения расплава как слоя; $k_{\mathrm{O}}, k_{\mathrm{U}}, k_{\mathrm{Zr}}$ — коэффициенты конвективного массопереноса атомов кислорода, урана и циркония в расплаве.

На основании того, что молярные плотности жидких Zr и U близки, предполагается, что молярная плотность расплава, обозначаемая далее как c_M, является некоторой заданной величиной, не зависящей от количества растворенного кислорода [18]:

$$c_M = c_{\mathrm{U}} + c_{\mathrm{Zr}} = \mathrm{const} \approx 0{,}068 <>; \mathrm{L/c}<^3. \tag{51}$$

Тогда из уравнений непрерывности для урана ($i = \mathrm{U}$) и циркония ($i = \mathrm{Zr}$) в расплаве

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = -\frac{\partial\left(f_i^{\mathrm{melt}} r\right)}{\left(r\partial r\right)} \tag{52}$$

следует уравнение несжимаемости расплава

$$\frac{\partial\left(rv_{\text{melt}}\right)}{\partial r}=0. \tag{53}$$

Кроме того, предполагается, что:

- при расчете баланса масс в жидком слое можно пренебречь толщиной приграничной области δ в расплаве, где молярные плотности урана и циркония и концентрация кислорода изменяются от $c_i\left(B\right)$ до $c_i\left(I\right)$;
- на границе с керамикой расплав находится в состоянии термодинамического равновесия; соответственно зависимость граничной концентрации кислорода от граничной концентрации урана может быть представлена упрощенной [9] формой уравнения ликвидуса:

$$c_{\text{O}}(I)=\gamma_1 c_M-\gamma c_{\text{U}}(I). \tag{54}$$

Эти дополнительные предположения (уравнения (51) и (54)) позволяют оценить потоки кислорода, урана и циркония (45)—(50) самосогласованным образом в ходе решения системы уравнений (4)—(6) для каждой границы. Приведем соответствующие уравнения движения для левой и правой границ расплава в зависимости от конфигурации взаимодействующих слоев:

1. Левая граница расплава r_1:

- если на левой границе нет пара и нет керамического слоя (например, для конфигурации $(\text{U-Zr-O})\text{-ZrO}_2$), эта граница неподвижна:

$$\frac{\partial r_1}{\partial t}=0; \tag{55}$$

- если на левой границе есть керамический слой, ее движение будет определяться системой уравнений

$$-\rho_{\text{O}}(I)_1\frac{\partial r_1}{\partial t}-D_{\text{O}}^{\text{Cer}}\frac{\partial\rho_O}{\partial r}\Big|_{I_1}=k_{\text{O}}\left[c_{\text{O}}(I_1)-c_{\text{O}}(B)\right]+c_{\text{O}}(B)\left[v_{\text{melt}}(I_1)-\frac{\partial r_1}{\partial t}\right], \tag{56}$$

$$-\rho_{\text{Cer}}\frac{\partial r_1}{\partial t}=k_{\text{Cer}}\left[c_{\text{Cer}}(I_1)-c_{\text{Cer}}(B)\right]+c_{\text{Cer}}(B)\left[v_{\text{melt}}(I_1)-\frac{\partial r_1}{\partial t}\right], \tag{57}$$

$$-\rho_{\mathrm{Cer}}\frac{\partial r_1}{\partial t}=c_M\left[v_{\mathrm{melt}}(I_1)-\frac{\partial r_1}{\partial t}\right], \qquad (58)$$

где индекс $\mathrm{Cer}=\mathrm{U}$, если на левой стороне расплава находится таблетка $\mathrm{UO_2}$, или $\mathrm{Cer}=\mathrm{Zr}$, если оболочка $\mathrm{ZrO_2}$.

Температурная зависимость параметров γ, γ_1 выбирается из условия наилучшего согласия с экспериментальными данными [6; 13; 14; 15] и определяется следующим образом:

$$\gamma_1=0{,}5-0{,}0075x+0{,}1975x^2, \qquad (59)$$

$$\gamma=0{,}5-0{,}478x+0{,}333x^2, \qquad (60)$$

где $x=(t-2273\ \mathrm{K})/100.$

Эта система имеет аналитическое решение:

если на левой стороне расплава находится таблетка $\mathrm{UO_2}$, то

$$\frac{\partial r_1}{\partial t}=-\left\{\frac{k_{\mathrm{O}}\left[c_{\mathrm{O}}^{\max}(B)-c_{\mathrm{O}}(B)\right]+D_{\mathrm{O}}^{\mathrm{UO_2}}\left.\frac{\partial\rho_{\mathrm{O}}}{\partial x}\right|_{I_1}}{\dfrac{\rho_{\mathrm{O}}(I_1)}{\rho_{\mathrm{U}}}+\dfrac{\gamma\dfrac{k_{\mathrm{O}}}{k_{\mathrm{U}}}c_{\mathrm{Zr}}(B)-c_{\mathrm{O}}(B)}{c_M(B)}}\right\}\frac{1}{\rho_{\mathrm{U}}}; \qquad (61)$$

если на левой стороне расплава находится оболочка $\mathrm{ZrO_2}$, то

$$\frac{\partial r_1}{\partial t}=-\left\{\frac{k_O\left[c_{\mathrm{O}}^{\max}(B)-c_{\mathrm{O}}(B)\right]+D_{\mathrm{O}}^{\mathrm{ZrO_2}}\left.\frac{\partial\rho_{\mathrm{O}}}{\partial x}\right|_{I_1}}{\dfrac{\rho_{\mathrm{O}}(I_1)}{\rho_{\mathrm{Zr}}}-\dfrac{\gamma\dfrac{k_{\mathrm{O}}}{k_{\mathrm{U}}}c_{\mathrm{U}}(B)+c_{\mathrm{O}}(B)}{c_M(B)}}\right\}\frac{1}{\rho_{\mathrm{Zr}}}, \qquad (62)$$

где $c_{\mathrm{O}}^{\max}=\gamma_1 c_M-\gamma c_{\mathrm{U}}(B).$

2. Правая граница расплава r_2:

- если на правой границе расплава отсутствует взаимодействующий керамический слой и нет пара (например, для конфигурации $\mathrm{UO_2}$-(U-Zr-O)), движение границы будет определяться формулой

$$\frac{\partial r_2}{\partial t} = v_{\text{melt}}(I_1)\frac{r_1}{r_2}, \qquad (63);$$

являющейся следствием уравнения (53);

- если на правой стороне есть керамический слой, движение границы определяется следующей системой уравнений (в текущей версии UZRO/LIQF модуля предполагается, что на правой стороне расплава может находиться только слой ZrO_2):

$$\phi_{\text{O}}\left[v_{\text{ZrO}_2}(I_2) - \frac{\partial r_2}{\partial t}\right] - D_{\text{O}}^{\text{ZrO}_2}\left.\frac{\partial \phi_{\text{O}}(B)}{\partial r}\right|_{I_2} =$$

$$= -k_{\text{O}}\left[c_{\text{O}}(I_2) - c_{\text{O}}(B)\right] + c_{\text{O}}(B)\left[v_{\text{melt}}(I_2) - \frac{\partial r_2}{\partial t}\right], \qquad (64)$$

$$\phi_{\text{Zr}}\left[v_{\text{ZrO}_2}(I_2) - \frac{\partial r_2}{\partial t}\right] = c_M\left[v_{\text{melt}}(I_2) - \frac{\partial r_2}{\partial t}\right], \qquad (65)$$

$$\phi_{\text{Zr}}\left[v_{\text{ZrO}_2}(I_2) - \frac{\partial r_2}{\partial t}\right] = -k_{\text{Zr}}\left[c_{\text{Zr}}(I_2) - c_{\text{Zr}}(B)\right] + c_{\text{Zr}}(B)\left[v_{\text{melt}}(I_2) - \frac{\partial r_2}{\partial t}\right]. \qquad (66)$$

Эта система уравнений также имеет аналитическое решение:

$$\frac{\partial r_2}{\partial t} = v_{\text{melt}}(I_2) + \frac{k_{\text{O}}\left[c_{\text{O}}^{\max}(B) - c_{\text{O}}(B)\right] - D_{\text{O}}^{\text{ZrO}_2}\left.\frac{\partial \phi_{\text{O}}}{\partial x}\right|_{I_2}}{\dfrac{\phi_{\text{O}}(I_2)}{\phi_{\text{Zr}}} - \dfrac{\dfrac{k_{\text{O}}\gamma}{k_{\text{U}}}c_{\text{U}}(B) + c_{\text{O}}(B)}{c_M}}\frac{1}{c_M}, \qquad (67)$$

где согласно уравнениям (53) и (58)

$$v_{\text{melt}}(I_2) = \frac{r_1}{r_2}\frac{\partial r_1}{\partial t}\left(1 - \frac{\rho_{\text{Cer}}}{c_M}\right). \qquad (68)$$

3. Дополнительное уравнение для движения внешней границы r_3

$$\frac{dr_3}{dt} = v_{\mathrm{ZrO_2}}(I_2)\frac{r_2}{r_3} \tag{69}$$

есть следствие уравнения (53).

Анализ аналитических решений (61), (62), (67) показывает, что при химическом составе расплава, близком к насыщенному, при $k_{\mathrm{O}} < k_{\mathrm{U}}, k_{\mathrm{Zr}}$ уравнения являются неопределенными. Поэтому во избежание численной нестабильности модуля LIQF параметр k_{O} полагается большим, чем $k_{\mathrm{U}}, k_{\mathrm{Zr}}$.

Полученные системы (56)—(58) для левой границы и (64)—(66) для правой границы позволяют достаточно точно описать движение границ расплава на стадии насыщения.

3.3. Основные уравнения на стадии образования и роста керамических твердых частиц в расплаве

По мере поступления кислорода из керамических слоев жидкости расплав насыщается им, и при достижении полного насыщения, определяемого ликвидусом (54), в расплаве начинают выделяться частицы твердой керамической фазы $(\mathrm{U, Zr})\mathrm{O}_{2-x}$ [9; 10]. Керамические частицы образуются вследствие поступления кислорода в насыщенный расплав из керамических слоев. Одновременно с выпадением керамических частиц продолжается растворение $\mathrm{UO_2}$, однако его скорость существенно снижается. Обобщенная модель учитывает особенности взаимодействия расплава с разными видами оксидов на стадии образования и роста керамических частиц следующим образом:

- Если на левой стороне расплава находится $\mathrm{UO_2}$-слой, растворением таблетки можно пренебречь, хотя из нее в расплав продолжает поступать кислород (поток кислорода в расплаве у левой границы равен диффузионному потоку кислорода из $\mathrm{UO_2}$). В этом случае

$$\frac{\partial r_1}{\partial t} = 0\,. \tag{70}$$

- Если на левой стороне находится $\mathrm{ZrO_2}$-слой, взаимодействие расплава со слоем $\mathrm{ZrO_2}$ описывается следующими уравнениями:

$$\left[c_{\mathrm{O}}(I_1) - \rho_{\mathrm{O}}(I_1)\right]\frac{\partial r_1}{\partial t} = v_{\mathrm{melt}}(I_1)c_{\mathrm{O}}(I_1) + D_{\mathrm{O}}^{\mathrm{ZrO_2}}\left.\frac{\partial \rho_{\mathrm{O}}}{\partial r}\right|_{I_1}, \tag{71}$$

$$\left(c_M - \rho_{\mathrm{Zr}}\right)\frac{\partial r_1}{\partial t} = v_{\mathrm{melt}}(I_1)c_M\,, \tag{72}$$

где граничная концентрация кислорода определяется из уравнения ликвидуса (54).

В этом случае, поскольку расплав в объеме и на этой границе является насыщенным, весь поступающий из слоя $\mathrm{ZrO_2}$ кислород идет на образование керамических частиц у этой границы.

Аналитическое решение системы (71)—(72) имеет вид

$$\frac{\partial r_1}{\partial t} = \frac{D_{\mathrm{O}}^{\mathrm{ZrO_2}}\left.\dfrac{\partial \rho_{\mathrm{O}}}{\partial r}\right|_{I_1}}{\dfrac{c_{\mathrm{O}}(I_1)}{c_M} - \dfrac{\rho_{\mathrm{O}}(I_1)}{\rho_{Zr}}}\frac{1}{\rho_{Zr}}. \tag{73}$$

- На правой границе расплава также продолжается растворение $\mathrm{ZrO_2}$, и ее движение определяется системой аналогичных уравнений:

$$\left[\phi_{\mathrm{O}}(I_2) - c_{\mathrm{O}}(I_2)\right]\frac{\partial r_2}{\partial t} = -D_{\mathrm{O}}^{\mathrm{ZrO_2}}\left.\frac{\partial \phi_{\mathrm{O}}}{\partial r}\right|_{I_2} + v_{\mathrm{ZrO_2}}(I_2)\phi_{\mathrm{O}}(I_2) - v_{\mathrm{melt}}(I_2)c_{\mathrm{O}}(I_2), \tag{74}$$

$$\left(\phi_{\mathrm{Zr}} - c_M\right)\frac{\partial r_2}{\partial t} = v_{\mathrm{ZrO_2}}(I_2)\phi_{\mathrm{Zr}} - v_{\mathrm{melt}}(I_2)c_M\,, \tag{75}$$

где граничная концентрация кислорода определяется из уравнения ликвидуса (54).

Система (74)—(75) имеет аналитическое решение:

$$\frac{\partial r_2}{\partial t} = v_{\mathrm{melt}}(I_2) + \frac{-D_{\mathrm{O}}^{\mathrm{ZrO_2}}\left.\dfrac{\partial \phi_{\mathrm{O}}}{\partial x}\right|_{I_2}}{\dfrac{\phi_{\mathrm{O}}(I_2)}{\phi_{\mathrm{Zr}}} - \dfrac{c_{\mathrm{O}}(I_2)}{c_M}}\frac{1}{c_M}, \tag{76}$$

где $v_{\mathrm{melt}}(I_2)$ определяется уравнением (68).

Полученная система уравнений позволяет достаточно просто описать движение границ расплава на стадии образования и роста керамических твердых частиц.

3.4. Общий алгоритм моделирования

Общий алгоритм моделирования (для каждого глобального временного шага внешнего кода) состоит из четырех этапов.

1. Анализируется химический состав расплава. Эта информация позволяет по упрощенной фазовой диаграмме определить его текущее состояние:

- стадия насыщения или стадия образования и роста керамических твердых частиц в расплаве (особенно для случаев изменения температуры в течение глобального временного шага внешнего кода или для случаев перемешивания расплава с другими смесями при его стекании).
- Если расплав содержит обломки ZrO_2 (например, при стекании расплава в условиях разрушающего стержня), соответствующей подпрограммой будет создана конфигурация $(U\text{-}Zr\text{-}O)\text{-}ZrO_2$.

2. Определение граничных условий. Эта процедура включает в себя определение соседних керамических слоев на левой и правой сторонах расплава. При наличии пара на свободной поверхности расплава может возникнуть тонкий слой ZrO_2.

3. Расчет движения границ между слоями. На каждом PROF/LIQF внутреннем временном шаге:

- проводится анализ:
  - ♦ содержания кислорода, циркония и урана в расплаве; соответственно на каждом PROF/LIQF внутреннем временном шаге оценивается «фазовый статус» расплава (чтобы осуществить плавный переход от стадии насыщения к стадии образования и роста керамических твердых частиц, который может произойти в пределах глобального временного шага внешнего кода);
  - ♦ условий для возможного уничтожения или рождения соседних керамических слоев (что, в свою очередь, ведет к резкому изменению граничных условий);
- оцениваются потоки кислорода по керамическим слоям;
- рассчитываются скорости движения границ; при этом потоки кислорода, урана и циркония по расплаву оцениваются в ходе вычисления скорости движения границ;
- рассчитываются приращения масс кислорода и урана в расплаве и соседних слоях (так же, как это делалось в модели окисления PROF).

Приращение массы кислорода в расплаве на каждом шаге вычислений определяется уравнением (19), которое с учетом принятых обозначений имеет форму

$$\frac{\partial OM}{\partial t} = 2\pi\left[r_2 \frac{\partial r_2}{\partial t} c_{\mathrm{O}}(B) - r_1 \frac{\partial r_1}{\partial t} c_{\mathrm{O}}(B)\right] +$$
$$+2\pi\left\{r_1\left(v_{\mathrm{melt}}(I_1)c_{\mathrm{O}}(B) + FL\right) - r_2\left[v_{\mathrm{melt}}(I_2)c_{\mathrm{O}}(B) + FR\right]\right\}, \qquad (77)$$

где кислородные потоки FL и FR оцениваются по результатам решения соответствующей системы уравнений.

На стадии насыщения:

$$FL = -k_{\mathrm{O}}\left[c_{\mathrm{O}}(B) - c_{\mathrm{O}}(I_1)\right], \qquad (78)$$

$$FR = k_{\mathrm{O}}\left[c_{\mathrm{O}}(B) - c_{\mathrm{O}}(I_2)\right]. \qquad (79)$$

На стадии образования керамических частиц в расплаве:

- если слева от расплава находится $\mathrm{UO_2}$, общий поток кислорода на левой границе расплава равен потоку кислорода из $\mathrm{UO_2}$ $\left(\frac{\partial r_1}{\partial t} = 0\right)$:

$$FL + v_{\mathrm{melt}}(I_1)c_{\mathrm{O}}(B) = -D_{\mathrm{O}}^{\mathrm{UO_2}}(T)\left.\frac{\partial \rho_{\mathrm{O}}}{\partial r}\right|_{I_1}; \qquad (80)$$

- если слева от расплава находится $\mathrm{ZrO_2}$,

$$FL = 0; \qquad (81)$$

- если $\mathrm{ZrO_2}$ на правой границе расплава,

$$FR = 0. \qquad (82)$$

Увеличение массы урана в расплаве происходит только за счет растворения таблетки.

Если на левой стороне расплава находится таблетка $\mathrm{UO_2}$,

$$\frac{\partial UM}{\partial t} = -2\pi r_1 \frac{\partial r_1}{\partial t}\mu\rho_{\mathrm{U}}, \qquad (83)$$

где μ — молярная масса $\mathrm{UO_2}$.

Если на левой стороне таблетки нет,

$$\frac{\partial UM}{\partial t} = 0. \qquad (84)$$

Обновленные значения UM и OM будут использоваться на следующем локальном шаге PROF для оценки концентрации кислорода $c_{\mathrm{O}}(B)$ и урана $c_{\mathrm{U}}(B)$ с целью:

- анализа текущего состояния расплава для применения упрощенной фазовой диаграммы;
- вычисления производных как начальных значений в правых частях уравнений (см. представленные выше системы обыкновенных дифференциальных уравнений).

4. Восстановление химического состава расплава. После завершения расчета новых координат границ слоев происходит восстановление химического состава расплава (добавление в смесь $\mathrm{U\text{-}Zr\text{-}O}$ первоначально присутствующих в расплаве невзаимодействующих материалов) и обмен обновленной информацией с внешним кодом.

Такая логика PROF/LIQF-моделирования позволяет применять модуль LIQF для произвольного расплава $\mathrm{U\text{-}Zr\text{-}O}$ при произвольных граничных условиях:

- $\mathrm{UO_2}$ —расплав— $\mathrm{ZrO_2}$ —пар;
- $\mathrm{UO_2}$ —расплав— $\mathrm{ZrO_2}$;
- $\mathrm{UO_2}$ —расплав;
- $\mathrm{UO_2}$ —расплав—пар (в этому случае рождается слой $\mathrm{ZrO_2}$, однако в ходе расчетов он может расти или исчезать);
- расплав— $\mathrm{ZrO_2}$ —пар;
- расплав— $\mathrm{ZrO_2}$;
- $\mathrm{ZrO_2}$ —расплав— $\mathrm{ZrO_2}$ —пар;
- $\mathrm{ZrO_2}$ —расплав— $\mathrm{ZrO_2}$;
- $\mathrm{ZrO_2}$ —расплав;
- пар— $\mathrm{ZrO_2}$ —расплав.

4. Структура данных и описание некоторых алгоритмов модулей PROF и LIQV

4.1. Основные положения

Задача определения границ взаимодействующих между собой слоев сведена к решению системы обыкновенных дифференциальных уравнений. Для числа слоев NMATR система уравнений в общем случае состоит из:

- (NMATR+1) уравнений для границ;
- NMATR уравнений для масс кислорода;
- четырех уравнений для масс урана (находящегося в топливной таблетке, в металлической части оболочки, внутреннем и внешнем окисных слоях);
- двух уравнений для массы кислорода, доступной на внутренней и внешней поверхностях оболочки;
- одного дополнительного уравнения для параметра OPAR (рассмотренного ниже и предназначенного для описания профиля кислорода в достаточно толстых слоях).

Эта система уравнений решается методом Рунге—Кутта четвертого порядка. Подробности реализации численного метода обсуждены в [7].

Обратим внимание, что метод Рунге—Кутта предполагает решение системы с фиксированным числом уравнений. А в ходе химического взаимодействия слоев их количество NMATR изменяется в соответствии с текущим состоянием твэла; следовательно меняется число уравнений, описывающих состояние системы. Возникающие в связи с этим логические и численные проблемы решены в модуле через определенным образом организованную структуру данных как для конфигурации слоев, так и для отдельного слоя, логические схемы оценки условий генерации и уничтожения слоев, алгоритмы рождения и уничтожения слоев. Ниже эти особенности обсуждаются более детально.

4.2. Структура данных для системы слоев

Система слоев описывается следующими основными величинами:
- NMATE — общее количество слоев;
- NBEG — номер первого слоя;
- NEND — номер последнего слоя;
- MINIM — номер слоя M с минимумом концентрации кислорода.

Общее количество слоев NMATE $\geq$ NEND – NBEG + 1.

В ходе окисления циркония и его взаимодействия с топливом могут возникать различные конфигурации системы слоев. Все они будут приведены модулем к типичным конфигурациям. С этой целью проводится анализ конфигураций и при необходимости деление ее на подсистемы.

Схема анализа конфигурации.

1. Анализ системы на наличие зазоров (их появление может быть связано, например, с быстрым охлаждением). Если в системе образуется зазор толщиной менее 10^{-6} м, во избежание численных проблем он игнорируется.

В противном случае он учитывается в расчетах как слой. Общее количество слоев в конфигурации обозначается NMATE. Каждый слой нумеруется последовательно слева направо.

2. Разбивка системы слоев на подсистемы:

- если в системе слоев есть зазор, она будет разбита на невзаимодействующие системы справа и слева от зазора;
- если в системе слоев присутствует несколько слоев, в которых существуют локальные минимумы концентрации кислорода, система слоев также делится на подсистемы, на границах или внутри которых допускается только один слой с минимумом концентрации кислорода OXL;
- если два соседних слоя в системе представляют собой отличную друг от друга керамику, система также будет разделена на подсистемы. Определяется число подсистем IC.

3. Для каждой подсистемы, характеризующейся своим порядковым номером (нумерация подсистем ведется последовательно слева направо), **определяется NBEG, NEND, MINIM.**

Рассмотрим в качестве примера несколько конфигураций.

В условиях внешнего окисления оболочки в твердой фазе при наличии зазора между топливом и оболочкой, в котором пара нет, возникает следующая конфигурация:

UO_2	gap	β-Zr	α-Zr	ZrO_2

Для нее NMATE = 5.

Система будет разбита на две невзаимодействующие подсистемы (здесь условием разбивки является появление слоя, препятствующего диффузии):

IC = 2.

Для первой подсистемы, состоящей из слоя UO_2:

NBEG(1) = 1;

NEND(1) = 1;

MINIM = 1.

Для второй подсистемы, состоящей из β-Zr, α-Zr и ZrO_2:

NBEG(2) = 3;

NEND(2) = 5;

MINIM = 3.

Так как левая подсистема представляет собой керамику, для нее расчеты прекращаются (независимо от наличия пара в зазоре).

Если в зазоре появится пар, β-Zr будет окисляться еще и изнутри. В ходе такого окисления правая подсистема будет иметь следующий вид:

ZrO_2	ZrO	β-Zr	ZrO	ZrO_2

Для нее:

NBEG(2) = 3;

NEND(2) = 7;

MINIM = 5.

Если зазор внезапно исчезнет, конфигурация будет следующей:

UO_2	ZrO_2	ZrO	β-Zr	ZrO	ZrO_2

Эта система также будет разбита на две невзаимодействующие подсистемы: (UO_2) и (ZrO_2 , ZrO , β-Zr , ZrO , ZrO_2). Для нее:

NMATE = 6;

IC = 2;

NBEG(2) = 2;

NEND(2) = 6;

MINIM(2) = 4.

Для правой подсистемы процесс окисления будет продолжаться, пока весь цирконий не превратится в керамику. Окончательно в ходе внешнего окисления конфигурация будет состоять из двух керамических слоев

UO_2	ZrO_2

и процесс расчета закончится.

Приведем еще один пример для следующей системы слоев:

UO_2	gap1	Zr	gap2	Zr

Она находится в условиях внешнего окисления и при наличии кислорода в зазорах (такая конфигурация может возникнуть в реальных ситуациях, когда топливо содержится в двойных циркониевых трубах с зазором между ними; между топливом и оболочкой также образуется зазор с паром, и окружающая атмосфера способна окислять).

Такая система (NMATE = 5) будет разбита на три подсистемы (IC = 3): UO_2, β-Zr в условиях двустороннего окисления, β-Zr в условиях двустороннего окисления. В ходе окисления конфигурация станет следующей:

UO_2	gap	ZrO_2	ZrO	β-Zr	ZrO	ZrO_2	gap	ZrO_2	ZrO	β-Zr	ZrO	ZrO_2

Эта конфигурация будет разбита также на три подсистемы:

		UO_2		
ZrO_2	ZrO	β-Zr	ZrO	ZrO_2
ZrO_2	ZrO	β-Zr	ZrO	ZrO_2

В случае, если зазор между циркониевыми трубами исчезнет, два соседних слоя оксида циркония ZrO_2 будут объединены в один (как слои с одинаковыми именами), и конфигурация примет вид

UO_2	gap	ZrO_2	ZrO	β-Zr	ZrO	ZrO_2	ZrO	β-Zr	ZrO	ZrO_2

Система слоев также будет разбита на три подсистемы (так как есть зазор и два слоя β-Zr с минимумом концентрации кислорода):

		UO_2		
ZrO_2	ZrO	β-Zr	ZrO	ZrO_2
	ZrO	β-Zr	ZrO	ZrO_2

В дальнейшем весь цирконий окислится (окисление второй подсистемы будет идти за счет пара в зазоре между таблеткой и оболочкой, окисление третьей подсистемы — за счет пара в окружающей атмосфере) и окончательная конфигурация примет вид

UO_2	gap	ZrO_2

В качестве особого случая следует рассмотреть конфигурацию слоев полностью окисленной оболочки твэла (рис. 14). Здесь между топливом и оболочкой появился газовый зазор. В ходе расчета система слоев в этом случае

будет разбита на две, а не на три подсистемы, так как слой (U, Zr) с минимальной концентрацией кислорода не поглощает кислород (заметим, что условием свободного прохождения кислорода по слою (U, Zr) будет наличие соседнего слоя (α-Zr), в противном случае система будет разбита на три подсистемы и слой (U, Zr) будет окислен как смесь).

IC = 2 — число подсистем.

Для первой подсистемы (слева от зазора):

NBEGT(1) = 1;

NBEGT(1) = 1;

MINIM = 1.

Для второй подсистемы (справа от зазора):

NBEGT(2) = 3;

NENDT(2) = 9;

MINIM = 6.

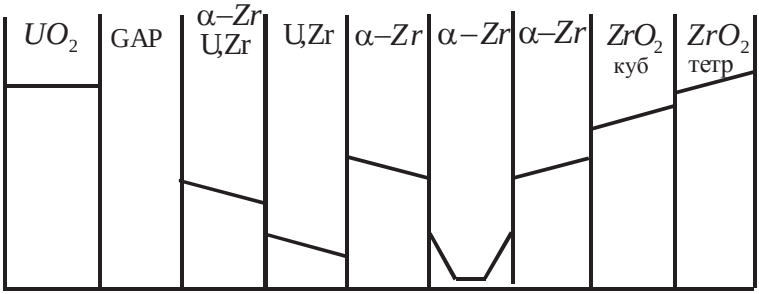


Рис. 14. Профиль концентраций кислорода в общей конфигурации слоев в условиях внешнего окисления и взаимодействия с топливной оболочкой

4.3. Структура данных для отдельного слоя

Слой с индексом I описывается следующими основными величинами:

- CNAME обозначает основной материал слоя, например CNAME(I) = “CZRA” означает I слой, представляющий собой $\alpha\text{-Zr}(\text{O})$.
- OMAS — масса кислорода в слоях.
- ROMOL — молярная плотность.
- UMAS — масса урана в слое.
- R(I) — координата левой границы, R(I + 1) — координата правой границы слоя с индексом I.
- QVFA — дополнительная величина, которая содержит информацию о направлении потока кислорода. Знаки «–» и «+» указывают на наклон

концентрации кислорода. В обычном случае абсолютная величина QVFA равна 2, для слоя M -1 < QVFA[MINIM] < 1. Так как QVFA(I) изменяется по мере эволюции слоев, этот параметр рассчитывается как одна из неизвестных величин в системе обыкновенных дифференциальных уравнений (параметр OPAR = QVFA[MINIM]).

- VPRC характеризует объем керамических частиц для жидких слоев.
- Дополнительная переменная IPRIOR в программе соответствует названиям слоев (именам) числа и используется для быстрого анализа системы слоев.

IPRIOR = 1: β-Zr , CNAME = «CZRB»;

IPRIOR = 2: α-Zr , CNAME = «CZRA»;

IPRIOR = 3: расплав U-Zr-O при T > 2248 К, CNAME = «CMUZO»;

IPRIOR = 4: не используется в текущей версии;

IPRIOR = 5: (U, Zr) эвтектическая смесь при T < 2248 К, CNAME = «CMUZ»;

IPRIOR = 6: α-Zr + эвтектическая смесь (U, Zr) при T < 2248 К, CNAME = «CMUZA»;

IPRIOR = 7: смесь после перемещения или охлаждения при T < 2248 К, CNAME = «CMREL»;

IPRIOR = 8: кубическая фаза Zr, CNAME = «CZRC»;

IPRIOR = 9: смесь UO_2 + ZrO_2 (куб.), CNAME = «CMUC2»;

IPRIOR = 10: тетрагональная фаза ZrO_2 , CNAME = «CZRD»;

IPRIOR = 11: смесь UO_2 + ZrO_2 (тетр.), CNAME = «CMUT2»;

IPRIOR = 12: урановая таблетка, CNAME = «CUO2».

Параметры слоев в типичной конфигурации в твердой фазе, возникающей в результате окисления оболочки окружающей атмосферой и взаимодействия оболочки с таблеткой, представлены на рис. 15.

UO_2	gap	CMUZA	CMUZ	CZRA	CZRB	CZRA	CZRC	CZRD	CNAME
0	—	–2	–2	+2	+0,1	+2	+2	+2	QVFA
71	0	67	67	67	67	67	48	48	ROMOL
1	0	0,28	0,95	0	0	0	0	0	UVFRA
12	0	6	5	2	1	2	8	9	IPRIOR

Рис. 15. Параметры слоев из общей конфигурации в твердой фазе, используемые в расчетах

4.4. Оценка условий генерации слоев

4.4.1. Генерация слоя при окислении

Генерация новых слоев зависит от массы кислорода, доступной на внешней M_{ext} и/или внутренней M_{int} поверхности, и возможного контакта с таблеткой.

Начальная ширина слоя равна $epslib$ (по умолчанию 10^{-6} м); профиль кислорода предполагается близким к линейному ($OM = OM_0$).

Рассмотрим для примера окисление оболочки ($\beta\text{-Zr}$). На первом этапе оценивается масса кислорода на внешней и/или внутренней поверхности (данные передаются из внешнего кода), возможный контакт с таблеткой.

Если выполнены условия для двустороннего окисления, слева и справа от слоя $\beta\text{-Zr}$ будут рождены слои $\alpha\text{-Zr}(\text{O})$ и ZrO_2 (в зависимости от температурных условий в кубической и/или тетрагональной фазе) толщиной 10^{-6} м. Масса циркония в слое $\beta\text{-Zr}$ уменьшится на суммарную массу циркония, содержащегося в рожденных слоях; соответственно уменьшится его толщина.

ZrO_2 tet	ZrO_2 cub	$\alpha\text{-Zr}$	$\beta\text{-Zr}$	$\alpha\text{-Zr}$	ZrO_2 cub	ZrO_2 tet

Далее решается обычная диффузионная задача для такой конфигурации, определяющая движение границ между слоями. В ходе окисления толщина $\beta\text{-Zr}$ слоя будет уменьшаться за счет роста слоя $\alpha\text{-Zr}$. Когда она достигнет порядка 10^{-6} м, слой будет уничтожен (поглощен соседним слоем). Масса циркония и кислорода, содержащегося в уничтожаемом слое, добавляется к соответствующей массе его приемника. Толщина слоя-приемника также будет увеличена на толщину поглощаемого слоя с учетом изменения плотности при преобразовании одной фазы ($\beta\text{-Zr}$) к другой ($\alpha\text{-Zr}(\text{O})$). В результате конфигурация станет следующей:

ZrO_2 tet	ZrO_2 cub	$\alpha\text{-Zr}$	$\alpha\text{-Zr}$	ZrO_2 cub	ZrO_2 tet

Два соседних слоя $\alpha\text{-Zr}(\text{O})$ будут объединены как два слоя с одинаковыми именами:

ZrO_2 tet	ZrO_2 cub	$\alpha\text{-Zr}$	ZrO_2 cub	ZrO_2 tet

Аналогично будет окислен слой $\alpha\text{-Zr}(\text{O})$. Два соседних слоя ZrO_2 (cub) будут объединены. Финальная стадия окисления

ZrO_2 tet	ZrO_2 cub	ZrO_2 cub	ZrO_2 tet

4.4.2. Моделирование фазовых превращений оксида циркония

Выше уже отмечалось, что ZrO_2 может претерпевать фазовые превращения. В частности, согласно фазовой диаграмме:

ниже температуры 1823 К существует только тетрагональная фаза;

в интервале температур между 1823 и 2523 К сосуществуют кубическая и тетрагональная фазы;

выше температуры 2523 К существует только кубическая фаза.

Этот процесс преобразования ZrO_2 учтен в модуле PROF.

В качестве примера рассмотрим алгоритм эволюции ZrO_2 -слоя по мере роста температуры.

При T < 1823 К оксид циркония находится в тетрагональной фазе ZrO_2 (tet).

При T > 1823 К будет рожден слой кубической фазы оксида циркония ZrO_2 (cub) толщиной $epslib$. Толщина слоя ZrO_2 (tet) будет уменьшена на величину $epslib$ с учетом разницы плотностей тетрагональной и кубической фаз.

В диапазоне температур 1823 К < T < 2523 К слои кубического и тетрагонального оксидов циркония существуют одновременно, при этом движение границы между ними будет определяться уравнениями (4) и (5).

При T > 2523 К остатки слоя ZrO_2 (tet) будут преобразованы в фазу ZrO_2 (cub). Два соседних слоя ZrO_2 (cub) будут объединены, как имеющие одинаковые имена.

Отметим, что такие же превращения могут испытывать и смеси ZrO_2 с другими веществами, в частности с UO_2 .

4.5. Алгоритм рождения нового слоя

Как уже отмечалось, в ходе процессов химического взаимодействия отдельные слои материалов могут рождаться или исчезать. Обсудим более детально логику рождения нового слоя. Предположим, что слой должен

быть создан слева или справа от уже существующего слоя с индексом $ipos$. В общем случае молярная плотность «родительского» слоя ROOLD может отличаться от молярной плотности нового слоя RONEW. Поскольку при рождении слоя должен выполняться закон сохранения числа молей, то сначала проводится оценка объема V_n, занимаемого двумя слоями в соответствии с сохранением числа молей:

$$V_1 + V_2 = V_n = V_0 + V_1\left(1 - \frac{\mathrm{RONEW}}{\mathrm{ROOLD}}\right), \tag{85}$$

где $V_0 = \pi\left(r_{ipos+1}^2 - r_{ipos}^2\right)$ — объем родительского слоя до рождения нового слоя; $V_1 = \pi\left(2r_{ipos} + epslb\right)epslb$ — объем нового слоя, если слой рождается на левой границе старого слоя; $V_1 = \pi\left(2r_{ipos+1} - epslb\right)epslb$ — объем нового слоя, если слой рождается на правой границе старого слоя; $epslb$ — толщина рожденного слоя.

Далее вычисляется новый радиус $ipos+1$:

$$r_{ipos+1}^{\mathrm{new}} = \sqrt{r_{ipos}^2 + \frac{V_n}{\pi}}. \tag{86}$$

Затем все слои с $i \geq ipos+1$, $i < nend$ смещаются с сохранением объема каждого слоя:

$$r_{i+1}^{\mathrm{new}} = \sqrt{\left(r_i^{\mathrm{new}}\right)^2 + \left(r_{i+1}^{\mathrm{old}}\right)^2 - \left(r_i^{\mathrm{old}}\right)^2}. \tag{87}$$

В заключение процедуры рождения все индексы в массивах, характеризующих систему слоев, сдвигаются: $i \to i+1$.

4.6. Оценка условий уничтожения слоев

Уничтожение слоя осуществляется при условии, что его ширина положительна и меньше, чем $epsld$. Величина $epsld$ выбрана в два раза меньше, чем минимальная возможная ширина вновь генерируемого слоя (чтобы избежать процедуры уничтожения вновь рожденных слоев).

Отметим, что если локальный шаг в процедуре Рунге—Кутта слишком велик (так что ширина исчезающего слоя становится отрицательной), происходит

возврат программы в главный модуль PROF2 для корректировки временного шага и уточнения момента уничтожения слоя.

После успешного завершения каждого локального временного шага в программе организован последовательный просмотр всех слоев, позволяющий определить их статус и выбрать подлежащие уничтожению. Для иллюстрации на рис. 16 приведен пример системы слоев, в котором предполагается исчезновение слоев с номерами 3, 6 и 7.

BAD	OKEY	OKEY	BAD	BAD	OKEY	OKEY	status
3	4	5	6	7	8	9	

Рис. 16. Графическое представление анализа системы слоев и определение их статусов

Статус «BAD» означает, что 0 < ширина < $epsld$ — слой тонкий.

В частности, в программе реализованы следующие логические правила:

- уничтожение тонких слоев выполняется поочередно;
- слой тетрагонального ZrO_2 при температурах выше 2423 К перемешивается с кубическим;
- слой кубического ZrO_2 при температурах ниже 1823 К перемешивается с тетрагональным.

4.7. Алгоритм уничтожения слоя

Уничтожение слоя (даже тонкого) требует аккуратного проведения этой процедуры с условием сохранении массы веществ. Поэтому при уничтожении слоя остатки масс приписываются к соседним слоям. При исчезновении слоя возможны два случая:

- соседние слои отличаются молярными плотностями; в этом случае должна меняться плотность соседнего слоя;
- слои имеют одинаковую плотность; в этом случае они просто смешиваются.

Слой может иметь «наследника» справа или слева. На рис. 17 графически представлены эти случаи (слой, занимающий объем V_2, «поглощает» слой, занимающий объем V_1).

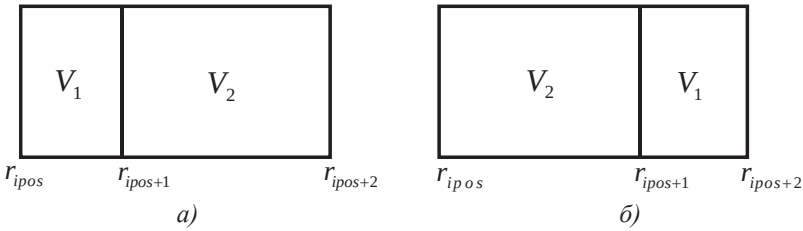


Рис. 17. Система слоев перед объединением (V_2 поглощает V_1)

Опишем процедуру уничтожения слоя объемом V_1 (плотность циркония ROMOL1) слоем V_2 (плотность циркония ROMOL2). Прежде всего к массе кислорода в объеме V_2 добавляется масса кислорода из объема V_1. Затем находится объем V_0 для нового слоя, который остается в результате слияния слоев с индексами $ipos$ и вычисляется его правая граница:

$$V_0 = V_1 \frac{\mathrm{ROMOL1}}{\mathrm{ROMOL2}} + V_2, \tag{88}$$

$$r_{ipos+1}^{\mathrm{new}} = \sqrt{r_{ipos}^2 + \frac{V_0}{\pi}}. \tag{89}$$

Для случая, показанного на рис. 17*а*, дополнительно должны быть изменены левая граница и индекс слоя-приемника.

Соответственно координаты границ всех слоев с $i > ipos + 2$ смещаются с сохранением объемов слоев (см. (87)). Далее для всех параметров, характеризующих слои с номерами $i \geq ipos + 2$, изменяются индексы: $i \to i - 1$.

5. Валидация объединенного модуля химического взаимодействия

Представленный в данной работе модуль PROF был протестирован с привлечением данных, полученных в экспериментах различного уровня сложности. Работоспособность моделей проверялась прежде всего на совокупности экспериментов, направленных на изучение окисления оболочек твэлов.

Верификационные матрицы модулей PROF и LIQF по отдельным явлениям, связанным с процессами разрушения АЗ, приведены в табл. 1 и 2 (соответственно окисление Zr оболочки твэла и растворение топлива).

Таблица 1. Окисление оболочки твэла

Диапазон температур, °C	Температурный режим	Скорость нагрева / охлаждения, °C/с	Наличие топливных таблеток	Авторы	Число тестов
900—1500	Изотермический	—	Нет	[23]	4
900—1300	Изотермический	—	Нет	[26]	4
	Неизотермический	(–2)—(–25)		[27]	7
900—1400	Изотермический	—	Да	[16]	3
980—2003	Неизотермический	±0,25, ±1, ±5, ±10		[16]	79
1000—1100	Неизотермический	±3,33, ±4,17	Нет	[24; 25]	4

Таблица 2. Растворение двуокиси урана жидким цирконием

Диапазон температур, °C	Температурный режим	Авторы	Число тестов
2000	Изотермический	[6]	1
2000	Изотермический	[21]	1
2000—2200	Изотермический	[13; 14]	3

Кроме того, выполнялось тестирование модуля PROF на экспериментах по одновременному окислению и механическому поведению оболочек (совместно с модулем CROX, описанным в [22]). Верификационная матрица приведена в табл. 3.

Таблица 3. Деформация оболочки твэла

Диапазон избыточного давления, МПа	Температура, (°C) либо скорость нагрева, (°C/с)	Температурный режим	Среда	Авторы	Число тестов
1—2,3	900°C	Изотермический	Аргон либо пар	[28]	
1—14 0,34—0,69	1—30 °C/с 5 °C/с	Неизотермический Неизотермический	Пар Вакуум либо пар	[29] [30]	48 12
3,75, 4,5	0,3 °C/с	Неизотермический	Пар	[24; 25]	

Результаты моделирования ряда изотермических и нестационарных окислительных экспериментов в широком диапазоне температур, а также тигельных экспериментов по моделированию растворения твердой двуокиси урана расплавом Zr при постоянной температуре и экспериментов по нагреванию материалов в паровой среде приведены в [22]. Рассмотрим некоторые из них.

На рис. 18 представлены результаты моделирования неизотермических и изотермических экспериментов [16] с использованием модели окисления из кода РАТЕГ/СВЕЧА. В области высоких температур (более 1400 К) код удовлетворительно описывает экспериментальные данные (в отличие от результатов моделирования этих же экспериментов с использованием параболических корреляций).

На рис. 19 результаты трех тестов по растворению UO_2 жидким Zr (эксперименты [6; 16; 13; 14] в стадии насыщения при 2273 К, а также результаты экспериментов [13; 14] при температурах 2373 К и 2473 К сравниваются с численными расчетами.

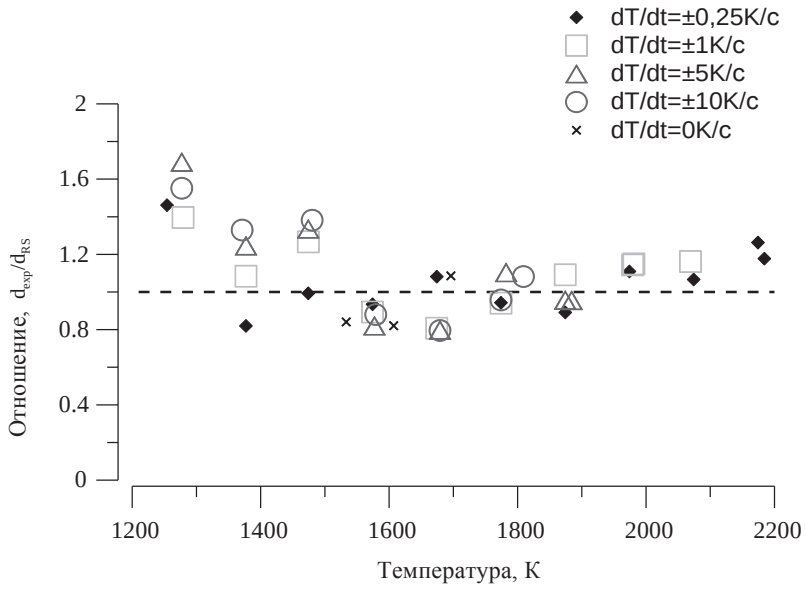


Рис. 18. Отношение измеренной толщины внешнего слоя ZrO_2 к рассчитанной по коду РАТЕГ/СВЕЧА для изотермических и неизотермических экспериментов [16]

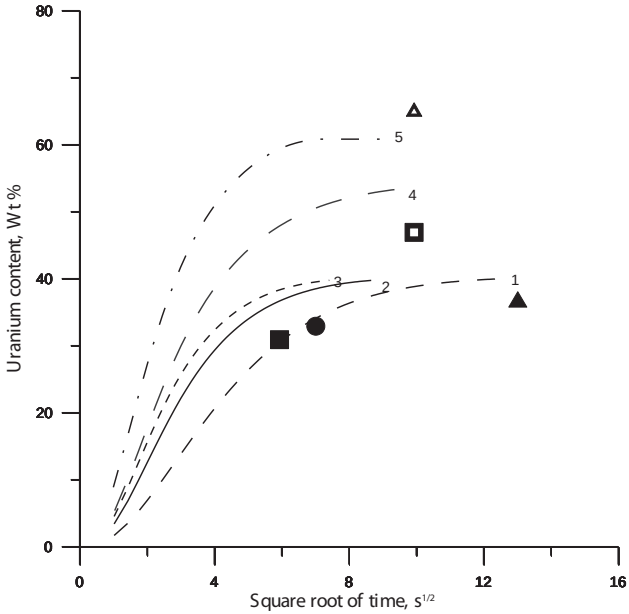


Рис. 19. Сравнение экспериментальных данных с результатами расчетов по коду РАТЕГ/СВЕЧА: ▲ — эксперимент [16] при 2273 К (расчет — кривая *1*); ● — эксперимент [13; 14] при 2273 К (расчет — кривая *2*); ■ — эксперимент [6] при 2273 К (расчет — кривая *3*); □ — эксперимент [13; 14] при 2373 К (расчет — кривая *4*); △ — эксперимент[13; 14] при 2473 К (расчет — кривая *5*)

Из анализа кривых видны незначительные отклонения расчетных данных по содержанию урана от экспериментальных. В целом модель адекватно описывает процесс растворения топлива жидким цирконием.

Кроме того, проверялась работоспособность модуля в составе интегральных кодов. Такая верификация крайне важна с точки зрения оценки возможности кода самосогласованным образом моделировать совокупность явлений и процессов, характерных для запроектных аварий. В частности, модули PROF и LIQF проверялись в составе ICARE2/CATARE (IRSN, Франция), SCDAP/MELCOR (NRC, США) и в отечественном коде РАТЕГ/СВЕЧА.

При построении верификационной матрицы для тестирования объединенного кода РАТЕГ/СВЕЧА в диапазоне параметров, характерных для тяжелых аварий, были использованы экспериментальные данные интегральных стендов, на которых исследовались следующие основные явления:

- окисление материалов активной зоны в присутствии среды «пар—водород»;

- плавление и перемещение материалов А3;
- физико-химические взаимодействия материалов, образование эвтектик;
- образование блокировки проходного сечения и т. д.

К настоящему времени выполнены расчеты нескольких интегральных экспериментов – PHEBUS B9+, CORA-13, CORA-W2, CORA-5, CORA-33, PBF 1.4, QUENCH 06.

В качестве иллюстрации ниже приведены результаты моделирования внутриреакторного эксперимента PHEBUS B9+.

На рис. 20 измеренная в эксперименте интегральная наработка водорода сравнивается с результатами расчета по коду РАТЕГ/СВЕЧА. Видно, что на всех этапах эксперимента наблюдается хорошее согласие расчета и измерений. Также хорошее согласие получено в части описания эволюции температуры на всех этапах эксперимента: разогрев, бурное окисление, фаза растворения топлива оболочкой, разрушения сборки, стекания, формирования блокад (рис. 21).

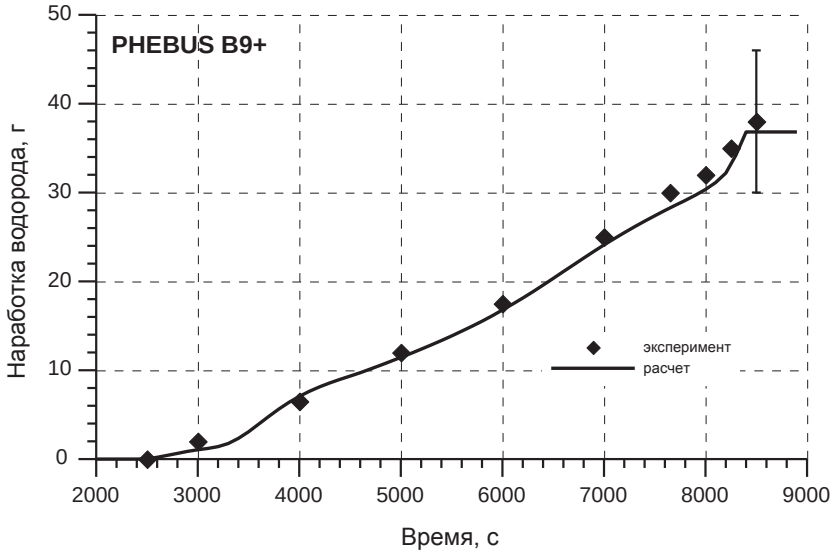


Рис. 20. Интегральный эксперимент PHEBUS B9+. Зависимость интегральной наработки водорода от времени. Сравнение результатов расчетов по коду РАТЕГ/СВЕЧА с результатами измерений

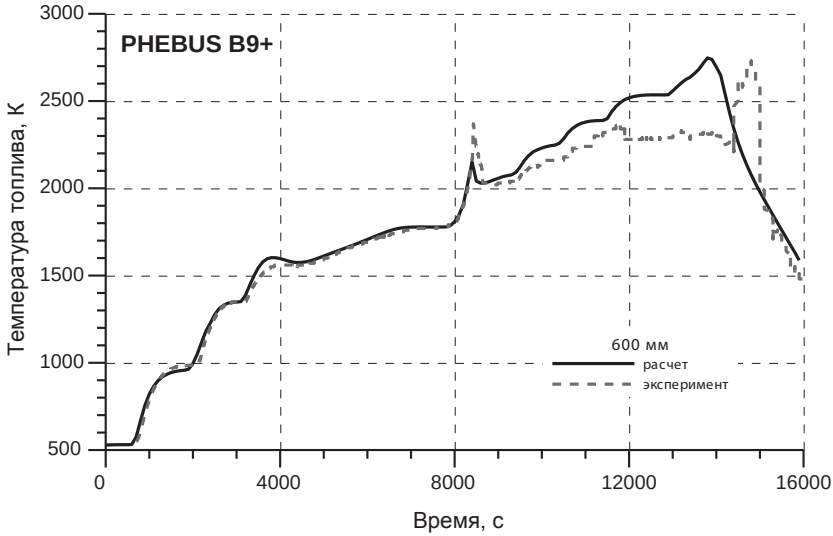


Рис. 21. Интегральный эксперимент PHEBUS B9+. Зависимость температуры топлива на отметке 600 мм от времени. Сравнение результатов расчетов по коду РАТЕГ/СВЕЧА с результатами измерений

По результатам тестирования кода на базе интегральных экспериментов можно утверждать, что модуль PROF с высокой точностью описывает окисление содержащих цирконий элементов конструкций АЗ и ВКУ, а в составе объединенного кода является работоспособным и необходимым модулем для учета влияния процесса окисления на развитие аварии.

6. Заключение

На базе современных теоретических разработок создан объединенный модуль химических взаимодействий. Он позволяет самосогласованным образом описывать окисление содержащих цирконий элементов конструкций АЗ и ВКУ на основе детального рассмотрения физико-химических процессов. В основу этого модуля были положены:

- модель окисления циркония до момента его плавления;
- модель эвтектического взаимодействия топлива с оболочкой;
- модель растворения топлива жидким цирконием.

Модуль успешно протестирован на основе экспериментальных данных как по отдельным процессам, так и полученных на интегральных установках (PHEBUS B9+, CORA-13, CORA W2, CORA-5, CORA-33, PBF 1.4, QUENCH 06).

Модули PROF и LIQF в составе объединенного кода РАТЕГ/СВЕЧА позволяют адекватно оценивать динамику выхода водорода, разогрева и деградации активной зоны при ЗПА, что крайне важно для обоснования безопасности как уже действующих, так и проектируемых АЭС.

Литература

1. *Hofmann P., Kerwin-Peck D. K.* UO/Zircaloy-4 Chemical Interactions and Reaction Kinetics from 1000 to 1700° C under Isothermal and Transient Temperature Conditions // J. Nucl. Mat. — 1984. — Vol. 124. — P. 80—105.

2. *Denis A., Garcia E. A.* Simulation with HITO Code of the Interaction of Zircaloloy with uranium Dioxide and Steam at High Temperatures // J. Nucl. Mat. — 1984. — Vol. 185. — P. 96—113.

3. *Uetsuka H., Otomo T., Kawasaki S.* Oxidation of Zrircaloy-4 Under Limited Supply from 1000 to 1400°C // J. Nucl. Sci. Technol. — 1984. — Vol. 23. — P. 928—934.

4. *Urbanic V. F., Heidrick T. R.* High-Temperature Oxidation of Zircaloy-2 and Zircaloy-4 in Steam // J. Nucl. Mat. — 1978. — Vol. 75. — P. 251—261.

5. *Veshchunov M. S.* On the kinetics of UO_2 interaction with Zircaloy at high temperatures // J. Nucl. Mat. — 1990. — Vol. 174. — P. 72—81.

6. *Kim K. T., Olander D. R.* Dissolution of Uranium Dioxide by Molten Zircaloy // J. Nucl. Mat. — 1988. — Vol. 154. — P. 80—105.

7. *Volchek A. M., Kisselev A. E., Veshchunov M. S.* Modelling of the Pellet/Cladding/Steam Interactions in the framework of the Oxygen Diffusion Theory ($T < 2273$ K). — Moscow, 1994. — (Preprint NSI-SAAR-03-94).

8. *Veshchunov M. S., Hofmann P.* Dissolution of UO2 by molten Zircaloy // J. Nucl. Mat. — 1994. — Vol. 209. — P. 27.

9. *Veshchunov M. S., Hofmann P., Berdyshev A.V.* Critical evaluation of UO_2 dissolution by molten Zircaloy in different crucible tests // J. Nucl. Mat. — 1996. — Vol. 231. — P. 1.

10. *Veshchunov M. S., Berdyshev A.V.* Modeling of chemical interactions of fuel rod materials at high temperatures. — P. 1: Simultaneous dissolution of UO_2 and ZrO_2 by molten Zircaloy in an oxidizing atmosphere // J. Nucl. Mat. — 1997. — Vol. 252. — P. 98.

11. Berdyshev A. V., Matveev L. V., Veshchunov M. S. Development of the Data Base for the Kinetic Model of the Zircaloy-4/Steam Oxidation at High Temperatures (1000°C ≤ *T* ≤ 1825°C), NCI-SARR-29-96, Final Report. — [S. l.], Dec. 1996.

12. Palagin A. V., Shestak V. E., Veshchunov M. S. et al. SCDAP/RELAP5 Mod3.1e Development. Study of mutual physical dependencies of newly implemented modules, NCI-SAAR-50-97. — [S. l.], Apr. 1996.

13. Hayward P. J., George I. M. Dissolution of UO2 in Molten Zircaloy-4. — Pt. 1: Solubility from 2000 to 2200°C // J. Nucl. Mater. — 1994. — Vol. 208. — P. 35.

14. Hayward P. J., George I. M. Dissolution of UO2 in Molten Zircaloy-4. Part1: Solubility from 2000 to 2200°C // J. Nucl. Mater. — 1994. — Vol. 208. — P. 43.

15. Hofmann P., Hagen S., Schanz G., Skokan A. Reactor Core Materials Interactions at Very High Temperatures // Nucl. Safety. — 1989. — Vol. 87. — P. 146.

16. Hofmann P., Neitzel H. J., Garcia E. A. Chemical Interactions of Zircaloy-4 Tubing with UO2 Fuel and Oxygen at Temperatures between 900 and 2000°C (Experiments and PECLOX code), KfK 4422, CNEA NT-36/87. — [S. l.], Oct. 1988.

17. Veshchunov M. S., Berdyshev A.V., Palagin A. V. Theory of Simultaneous Dissolution of UO2 and ZrO2 by Molten Zry in Oxidizing Atmosphere and Its Application for Description of Chemical Interactions of Relocating Melt. — Moscow, Oct. 1996. — (Preprint IBRAE RAS).

18. Olander D. R. Material chemistry and transport modeling for severe accident analyses in light water reactors. — I: External cladding oxidation // Nucl. Eng. Des. — 1994. — Vol. 148. — P. 253.

19. Yamshchicov N., Boldirev A., Komarov O. The Modelling of Fuel Cladding Deformation Behavior under Severe Accident / Nuclear Safety Institute, Russian Academy of Sciences. — Moscow, 1993. — (Preprint NSI-2-93).

20. Hofmann P., Noack V. Phisico-Chemical Behavior of Zircaloy Fuel Rod Cladding Tubes During LWR Severe Accident Reflooding. — P. 1: Experimental results of single rod quench experiments / Forschungszentrum Karlsruhe, Technik und Umwelt, FZKA 5846. — [S. l.], May 1997.

21. Hayward P. J., Hofmann P., Stuckert J. et al. UO_2 Dissolution by Molten Zircaloy. New Experimental Results and Modelling: Report FZKA 6379, INV-CIT(99)-P029. — Karlsruhe, Germany, Vol. 1999.

22. *Вещунов М. С., Киселев А. Е., Романовский В. И.* и др. Интегральный код улучшенной оценки РАТЕГ/СВЕЧА/00. — Т. 3: Детальное описание пакета программ по моделированию начальной фазы разрушения АЗ РУ — СВЕЧА: Отчет ИБРАЭ РАН №105/00. — М., 2000.

23. *Pawel R. E., Cathcart J. V., McKee R. A.* The Kinetics of Oxidation of Zircaloy-4 insteam at High Temperatures // J. Electrochem. Soc. — 1979. — Vol. 126. — P. 1105.

24. *Кунгурцев И. А., Смирнов В. П., Жителев В. А.* и др. Исследование кинетики окисления при температуре 1000°С в паро-аргоновой среде образцов оболочки твэла ВВЭР-440, отработавшего до выгорания 42,2 МВт·сут/кг U: Отчет ГНЦ РФ НИИАР О-4652. — Димитровград, 1997.

25. *Кунгурцев И. А., Смирнов В. П., Жителев В. А. Ступина Л. Н.* и др. Исследование кинетики окисления при температуре 1100°С в паро-аргоновой среде образцов оболочки твэла ВВЭР-440, отработавшего до выгорания 42.2 МВт·сут/кг U: Отчет ГНЦ РФ НИИАР О-4694. — Димитровград, 1997.

26. *Leistikow S., Shanz G., van Berg H.* Kinetics and Morphology of Isothermal Steam Oxidation of Zircaloy 4 at 700—1300°C. — Karlsruhe, March 1987. — (KfK 2587).

27. *Leistikow S., Shanz G.* The Oxidation Behavior of Zircaloy-4 in Steam between 600 and 1600°C // Werkstoffe and Korrosion — 1985. — Vol. 36. — P. 105—116.

28. *Leistikow S., Kraft R.* Creep-Rupture Testing of Zircaloy Tubing under Superimposed High Temperature Steam Oxidation at 900°C // EUROCOR'77 6th European Congress on Metallic Corrosion, London 12—13 September 1977, Society of Chemical Industry. — [S. l.], 1977. — P. 577—584.

29. *Erbacher F. J., Neitzel H. J., Rosinger H., Wiehr K.* Burst Criterion of Zircaloy Fuel Claddings in a Loss-of-Coolant Accident // Zirconium in the Nuclear Industry; Fifth Conference, ASTM STP 754 / D. G. Franklin, ed.; American Society for Testing and Materials. — [S. l.], 1982. — P. 271—283.

30. *Sagat S., Sills H. E., Wolsworth J. A.* Deformation and Failure of Zircaloy Fuel Sheaths Under LOCA Condition // Zirconium in the Nuclear Industry: Sixth International Symposium, ASTM STP 824 / D. G. Franklin and R. B. Adamson, eds., American Society for Testing and Materials. — [S. l.], 1984. — P. 709—733.

31. *Горячев А. В., Звир Е. А., Святкин А. М., Ступина Л. Н.* Исследование окисления оболочек модельной ЭТВС БТ-2 после испытаний в режиме, имитирующем вторую стадию проектной аварии с потерей теплоносителя: Отчет ГНЦ НИИАР 0-5476. — Димитровград, 2003.

III. HEFEST: численное моделирование процессов в нижней части реактора ВВЭР при тяжелой аварии

А. В. Игнатьев, А. Е. Киселев, В. Н. Семенов, В. Ф. Стрижов, А. С. Филиппов

1. Введение

При изучении гипотетических сценариев тяжелых аварий (ТА) с расплавлением активной зоны (АЗ) реактора типа ВВЭР одним из основных объектов исследования служит расплав материала активной зоны реактора, переместившегося в нижнюю часть корпуса, далее именуемую «корпус». Разработанный в последние годы в ИБРАЭ РАН системный код СОКРАТ предназначен для численного моделирования внутрикорпусных процессов при ТА, начиная от аварийного останова вплоть до разрушения корпуса и вытекания расплава. Расчет деградации активной зоны и образования расплава входит в функцию модуля РАТЕГ-СВЕЧА, а моделирование корпуса с находящимся в нем расплавом представляет собой основную функцию модуля HEFEST. Он представлен двумя независимыми модулями, предназначенными соответственно для расчета теплофизических и термомеханических процессов, включающих перемещение, разогрев, теплопередачу, деформирование и разрушение материалов АЗ и корпуса.

Эти программные модули HEFEST и NKD, вместе составляющие пакет HEFEST, изначально разрабатывались как независимые универсальные алгоритмы, предназначенные для решения своего круга задач — теплофизики и механики деформируемого тела. Структура и методы построения алгоритмов, используемые вычислительные процедуры и формат данных в обеих программах близки, поэтому, когда возникла необходимость решения термомеханических задач, их согласование не составило затруднений. С другой стороны, было принято нецелесообразным «обобществлять» рабочие процедуры обоих кодов (такие как решение нелинейных уравнений, сборка глобальной матрицы жесткости, ввод-вывод и др.), поскольку, с одной стороны, это не увеличивает заметно эффективности процесса решения, а с другой — усложняет структуру, затрудняя дальнейшую модернизацию и специализацию кодов для решения конкретных технических проблем. При этом не исключена возможность объединения программ в одну структуру посредством написания управляющей оболочки, как сделано при включении их в интегральный код моделирования тяжелых аварий.

В настоящей работе описывается методика моделирования основных теплофизических процессов в нижней камере смешения (НКС), включающих помимо теплопередачи плавление и перемешивание дебриса и тепловую эрозию корпуса. Изложена постановка задачи, метод численного решения, модель конвективного теплопереноса и модель распространения границы плавления, на которой расплав переменного состава плавит корпус реактора. Приведены результаты тестовых расчетов экспериментов с расплавами солей.

Сначала изложен численный метод решения задачи теплопроводности, затем — модели теплофизических явлений, позволяющие расширить рамки диффузионной модели теплопроводности. Описаны модель плавления с перемешиванием (распространение границы расплава) и модель конвективного теплопереноса. Не описаны модели поступления, перемещения и перераспределения материалов в НКС, модель постепенного удаления расплава из разрушенного корпуса, взаимодействие конструкций НКС с АЗ и водой первого контура, анализ термомеханики корпуса.

Основные требования к моделям и алгоритмам. При расчете теплообмена динамика движения вещества не рассматривается. Для моделирования процессов перемещения, плавления и перемешивания материалов АЗ и конструкций нижней части реактора был разработан ряд специфических моделей и алгоритмов. При этом неизбежны существенные упрощения. Рамки упрощений ставятся, с одной стороны, требованием соответствия численной модели существу процессов, идущих при развитии ТА, а с другой — неопределенностями параметров этих процессов. Кроме того, принимались во внимание следующие общие требования:

- модель должна отвечать определенному сценарию — принимаемой последовательности событий развития аварии и допускать достаточно широкий спектр вариаций сценария;
- погрешность учета физических факторов в модели должна находиться в пределах неопределенностей анализа ТА в целом;
- точность вычислений численных методов и дискретных моделей конструкций должна быть по возможности высокой, чтобы не вносить дополнительных погрешностей;
- программа должна быстро считать, чтобы была возможность проведения многовариантных расчетов;
- в расчетах следует следить за соблюдением сохранения массы и энергии, поскольку энергетика моделируемого процесса и распределение мощности остаточного тепловыделения служат основным фактором, определяющим темп развития аварии.

Общие свойства алгоритмов и моделей процессов. Геометрия решаемой задачи теплопереноса двумерная — плоская или осесимметричная. Инте-

грирование по времени проводится по неявной схеме, допускающей большой шаг по времени. Это позволяет использовать конечный элемент (КЭ) разбиения с большим количеством элементов для получения при необходимости высокого пространственного разрешения для областей сложной формы.

Новые структуры (подконструкции) вводятся на построенном КЭ-разбиении простыми средствами, входящими в состав штатных средств подготовки данных.

Теплообмен с внешними по отношению к КЭ-модели HEFEST'а объектами (теплоносителем, полостью АЗ) осуществляется введением граничных условий разных типов, поставленных в нужном месте сетки.

Конвективный теплообмен в расплаве учитывается введением эффективной теплопроводности расплава, разной по двум осям координат.

Поступление, перемещение и перераспределение материалов в НКС учитывается посредством перезадания свойств КЭ в расчетных подобластях: при перемещении области плавления — в соответствии с темпом продвижения границы плавления, при поступлении материала извне — в соответствии с порядком поступления.

В расчетах механической прочности определяется напряженно-деформированное состояние конструкции (корпуса) в реалистической конфигурации, рассматриваемой как тело вращения (двумерная геометрия). Учитывается геометрическая нелинейность (большие деформации). Применяемые критерии разрушения — это критерии длительной прочности в условиях переменной температуры и нагрузки, вычисляемые локально в каждом элементе. В расчетах используются материалы с термозависимыми свойствами, учитывается пластичность и высокотемпературная ползучесть.

2. Обозначения

АЗ — активная зона

КТР — коэффициент теплового расширения

КЭ — конечный элемент

МКЭ — метод конечных элементов

НДС — напряженно-деформированное состояние

НКС — нижняя камера смешения

ОТ — ортотропная теплопроводность

ПКШ — подвесная корзина шахты

ПП — плавление с перемешиванием

ТА — тяжелая авария

ТЖ — тепловыделяющая жидкость

NKD — модуль прочностных расчетов пакета HEFEST

3. Постановка задачи теплопроводности и численный метод решения

Двумерные задачи решаются в плоской и осесимметричной постановке. Процессы теплопроводности описываются дифференциальным уравнением, которое запишем в декартовых координатах:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \lambda_x \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \lambda_y \frac{\partial T}{\partial y} + Q(x, y), \quad x \in \Omega, \tag{3.1}$$

где Ω — расчетная область.

Граничные условия — первого или третьего рода:

$$T(x, y, t) = T_b(x, y), \quad x \in \Gamma_1, \tag{3.2}$$

$$\lambda_x \frac{\partial T}{\partial n_x} + \lambda_y \frac{\partial T}{\partial n_y} + a(x, y, t)T = b(x, y, t), \quad x \in \Gamma_3, \tag{3.3}$$

где Γ_1 — граница граничных условий первого рода; Γ_3 — граница граничных условий третьего рода.

Начальные условия при $t = 0$:

$$T(x, y, 0) = T_0(x, y), \quad x \in \Omega. \tag{3.4}$$

Здесь n_x, n_y — компоненты единичного вектора внешней нормали к границе; ρ — плотность; c — теплоемкость; λ_x, λ_y — коэффициенты теплопроводности по направлениям осей координат для ортотропного материала; $Q(x, y)$ — мощность тепловыделения; a, b — параметры. Теплофизические коэффициенты могут зависеть от температуры и (ограниченно) от координат и времени. Если на данной граничной площадке не поставлены условия типа (3.2) или (3.3), на ней автоматически выполняют-

ся адиабатические граничные условия, соответствующие (3.3), в котором $a = b = 0$. Приведем частные случаи граничных условий вида (3.3):

- условие по потоку (второго рода):

$$F_n = \lambda \frac{\partial T}{\partial n} \equiv \lambda_x \frac{\partial T}{\partial n_x} + \lambda_y \frac{\partial T}{\partial n_y} = F(t, x, y, T); \qquad (3.5)$$

- условие конвективного теплообмена с внешней средой с температурой $T_b\ (t, x, y, T)$:

$$F_n = H_b (T - T_b), \qquad (3.6)$$

где $H_b = H_b(t, x, y, T)$ — коэффициент теплообмена;

- условие радиационного теплообмена со средой температуры $T_b\ (t, x, y, T)$:

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial n} = \varepsilon \sigma_0 \left(T^4 - T_b^4\right) = \varepsilon \sigma_0 \left[\left(T + T_b\right)\left(T^2 + T_b^2\right)\right]\left(T - T_b\right) \equiv H_r(T)\left(T - T_b\right), \qquad (3.7)$$

где ε — излучательная способность; σ_0 — постоянная Стефана—Больцмана.

3.1. Пространственная дискретизация решения уравнения

Численное решение задачи (3.1)—(3.4) проводится методом конечных элементов (МКЭ). Для конечно-элементной дискретизации используется обобщенная формулировка краевой задачи. Обобщенное (слабое) решение [1; 2] удовлетворяет уравнению вида

$$\left(Au, \omega\right) = \left(F, \omega\right), \ \left(u = u\left(x\right), \ x \in R^2\right)$$

для любой функции $\omega \in X$ из некоторого пространства допустимых функций, которые обращаются в нуль на границе области Ω задания искомого решения. Здесь скалярное произведение — это интеграл по области Ω:

$$\int \omega A u \, dv = \int F \omega \, dv.$$

Обобщенным решением уравнения (3.1) будет функция $T(x, y)$ такая, что для любой функции $\omega \in X$ выполнено равенство

$$\int_{\Omega} \rho c \frac{\partial T}{\partial t} \omega dx = \int_{\Omega} \left(\frac{\partial \omega}{\partial x} \lambda_x \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{\partial \omega}{\partial y} \lambda_y \frac{\partial T}{\partial y} + Q(x, y) \right) \omega dx. \qquad (3.8)$$

Функции $\omega = 0$ на границах, где поставлены граничные условия по температуре. Они удовлетворяют определенным требованиям гладкости и не зависят от времени. На тех границах, где не заданы никакие условия, принимается, что поток тепла равен нулю.

Приближенное решение задачи (3.1)—(3.4) ищется как разложение $T(x, y)$ по конечному набору функций $N_i = N_i(x, y)$ из некоторого пространства базисных функций $\{N_i\}$, $i = 1, ..., n$, заданных в окрестности конечного множества n точек — узлов разбиения, так что носители функций покрывают расчетную область. Условие (3.8) на численное решение в общем случае должно выполняться с некоторой заданной точностью аппроксимации.

Функции $\{N_i\}$ строятся таким образом, что коэффициенты разложения равны температурам в узлах конечно-элементного разбиения в данный момент времени:

$$T(x, y) = \sum_{i=1}^{n} N_i(x, y) T_i(t) \equiv [\mathrm{N}]\{\mathrm{T}\}, \qquad (3.9)$$

где введены векторы (матрицы $1 \times n$) базисных функций $[\mathrm{N}]$ и температур в узлах $\{\mathrm{T}\}$:

$$[\mathrm{N}] = \{N_i(x, y)\}, \ \{\mathrm{T}\} = \{T_i(t)\}.$$

Базисные функции N_k строятся как пирамидальные [1]: для k-го узла сужение $N_k(x, y)$ на элемент, включающий узел, дает функцию формы φ элемента, которая берется билинейной. Если ввести в каждом элементе локальные координаты $\varsigma = \varsigma(x, y)$, $\eta = \eta(x, y)$, то четыре функции формы в элементе имеют вид

$$\varphi_1(\varsigma, \eta) = 1/4(1-\varsigma)(1-\eta), \ \varphi_2(\varsigma, \eta) = 1/4(1+\varsigma)(1-\eta),$$
$$\varphi_3(\varsigma, \eta) = 1/4(1+\varsigma)(1+\eta), \ \varphi_4(\varsigma, \eta) = 1/4(1-\varsigma)(1+\eta), \ -1 \le \varsigma, \ \eta \le 1 \quad (3.10)$$

Отображение $(x, y) \to (\varsigma, \eta)$ задает преобразование четырехугольного элемента в квадрат размером 2×2 (рис. 1). В любой точке двумерного конечного элемента значение некоторой функции $U(x, y)$ находится интерполяцией по четырем функциям формы элемента (изопараметрическая аппроксимация [2]):

$$U(x, y) = \bar{U}(\xi, \eta) = \sum_{i=1}^{4} \varphi_i(\varsigma, \eta) U_i.$$

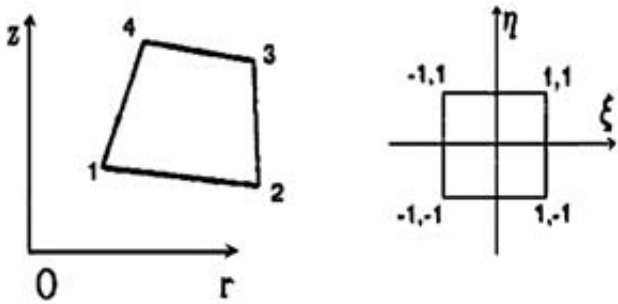


Рис. 1. Четырехугольный конечный элемент

3.2. Матрица системы линейных уравнений

Численный метод основан на так называемой галеркинской форме задачи [1; 2], которая возникает из (3.8) после интегрирования по частям. Коэффициенты теплопроводности считаем независимыми от температуры: $\lambda = \lambda(T) = \text{const}$. В случае зависимости от температуры используется итерационная процедура.

Соответственно уравнение (3.8) примет вид

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \rho c \frac{\partial T}{\partial t} \omega \, dv = -\int_{\Omega} \left(\frac{\partial \omega}{\partial x} \lambda_x \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{\partial \omega}{\partial y} \lambda_y \frac{\partial T}{\partial y} \right) \omega \, dv + \\ + \int_{\Omega} Q(x, y, z) \omega \, dv + \int_{\Gamma} \left(\lambda_x \frac{\partial T}{\partial n_x} + \lambda_y \frac{\partial T}{\partial n_y} \right) \omega \, ds. \end{aligned} \tag{3.11}$$

При интегрировании по поверхности принимаем во внимание граничные условия (3.6):

$$\int_{\Gamma}\left(\lambda_x \frac{\partial T}{\partial n_x}+\lambda_y \frac{\partial T}{\partial n_y}\right)\omega\, ds=\int_{\partial\Omega_F} H\left(T-T_b\right)\omega\, ds+\int_{\partial\Omega_F} F_b\omega\, ds.$$

Здесь ds обозначает элемент поверхности, а поверхность задания граничных условий разбита на две части (возможно, пересекающиеся), задаваемые соответственно на участках границ $\partial\Omega_C$ и $\partial\Omega_F$, отвечающих потоковым и конвективным граничным условиям:

$$\partial\Omega=\partial\Omega_C\cup\partial\Omega_F.$$

В методе Галеркина в качестве пробных функций $\omega\in X$ в функционале (3.11) берутся базисные функции N_i, по которым производится разложение решения. Эти функции линейно независимы и образуют базис, т. е. любая другая функция может быть разложена по этому базису с погрешностью порядка ошибки аппроксимации, которая может быть оценена. Условие (3.11), сформулированное для любой функции из пространства пробных функций X_n, эквивалентно n таким условиям, записанным для каждой функции базиса. Подставив температуру в виде разложения (3.9), записанную с помощью введенных векторов узловых температур, в равенство (3.11), получим n уравнений, соответствующих базисным функциям N_k, $k=1,\ldots,n$:

$$\int_{\Omega} N_k\rho c\left\{\mathrm{N}\right\}\frac{\partial\left\{\mathrm{T}\right\}}{\partial t}\omega dx=-\left\{\int_{\Omega}\left(\frac{\partial N_k}{\partial x}\lambda_x\frac{\partial\left\{\mathrm{N}\right\}}{\partial x}+\frac{\partial N_k}{\partial y}\lambda_y\frac{\partial\left\{\mathrm{N}\right\}}{\partial y}\right)dx\right\}\left\{\mathrm{T}\right\}+$$

$$+\int_{\Omega} N_k Q dx-\int_{\Gamma_2} N_k f_n ds-\int_{\Gamma_3} N_k H T_b ds-\left\{\int_{\Gamma_3} N_k H\left\{\mathrm{N}\right\}ds\right\}\left\{\mathrm{T}\right\}, \qquad (3.12)$$

где f_n — проекция потока тепла на нормаль к элементу границы Γ_3 потоковых граничных условий.

Введем матрицы проводимости $\left[\mathrm{H}\right]$, теплоемкости $\left[\mathrm{C}\right]$ и вектор тепловых нагрузок $\left\{\mathrm{F}\right\}$:

$$\left[\mathrm{H}\right]\equiv\left[H_{ki}\left(x,y\right)\right]\equiv\left[\int_{\Omega}\left(\frac{\partial N_k}{\partial x}\lambda_x\frac{\partial N_i}{\partial x}+\frac{\partial N_k}{\partial y}\lambda_y\frac{\partial N_i}{\partial y}\right)dx-\int_{\Gamma_3} N_k H_b N_i ds\right],$$

$$\left[\mathrm{C}\right]\equiv\left[C_{ki}\left(x,y\right)\right]\equiv\left[\int_{\Omega} N_k\rho c N_i dx\right],$$

$$\{\mathrm{F}\} \equiv \{F_k\} \equiv \left\{ \int_{\Omega} N_k Q dx - \int_{\Gamma_2} N_k f_n ds - \int_{\Gamma_3} N_k H_b T_b ds \right\}. \qquad (3.13)$$

Приходим к системе n обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка для вектора $\{\mathrm{T}\} = \{T(t, x, y)\}$ температур в узлах расчетной сетки, которую мы запишем в виде

$$[\mathrm{C}]\frac{d\{\mathrm{T}\}}{dt} + [\mathrm{H}]\{\mathrm{T}\} = \{\mathrm{F}\}. \qquad (3.14)$$

Матрицы и объемные интегралы (3.13), как и в описанных ранее процедурах, строятся и вычисляются сперва для каждого элемента с помощью элементных формул вида (3.13), а затем суммируются. Интегрирование по элементам производится с помощью квадратурных формул Гаусса [1] по четырем точкам 2×2 в двумерном случае. Температурные зависимости свойств берутся по интерполированному в гауссовых точках интегрирования значению температуры, т. е. в формулы интерполяции (3.9) подставляются значения координат (преобразованных к локальным), отвечающие точкам интегрирования. Различие между плоским и осесимметричным случаями сводится к использованию разных представлений дифференциала объема — $dxdy$ и $rdrdz$ соответственно.

3.3. Интегрирование по времени

При расчете нестационарной температуры матричное дифференциальное уравнение (3.14) численно интегрируется по времени с некоторым шагом. Приращение температуры в узлах на $(n+1)$-м шаге находится по двухслойной однопараметрической разностной схеме с весом α, являющейся безусловно устойчивой при $\alpha > 0,5$:

$$[\mathrm{C}]_{n+\alpha} \frac{\{\mathrm{T}\}_{n+1} - \{\mathrm{T}\}_n}{\Delta t} + [\mathrm{H}]_{n+\alpha} \{\mathrm{T}\}_{n+\alpha} = \{\mathrm{F}\}_{n+\alpha}, \qquad (3.15)$$

где для некоторого α из интервала [0, 1]

$$t_{n+\alpha} = t_n + \alpha\Delta t, \ \{\mathrm{T}\}_{n+\alpha} = (1-\alpha)\{\mathrm{T}\}_n + \alpha\{\mathrm{T}\}_{n+1},$$

$$[\mathrm{C}]_{n+\alpha} = \left[C\left(\{\mathrm{T}\}_{n+\alpha}, t_{n+\alpha}\right)\right]_{n+\alpha}, \ [\mathrm{H}]_{n+\alpha} = [\mathrm{H}]_{n+\alpha}\left(\{\mathrm{T}\}_{n+\alpha}, t_{n+\alpha}\right).$$

На практике обычно берется чисто неявная схема, соответствующая $\alpha = 1$, безусловно устойчивая. Система уравнений (3.15) решается итерационным методом BFGS [4].

3.4. Теплофизические коэффициенты материалов

Свойства материалов, т. е. численная модель для их представления и набор вводимых параметров, задаются типом материала, который отображается целым числом, принимающим значения от 1 до 5:
1 — изотропный, не температурно-зависимый;
2 — ортотропный, не температурно-зависимый;
3 — изотропный, температурно-зависимый;
4 — ортотропный, температурно-зависимый;
5 — материал — смесь.

Для ортотропных материалов задаются значения $\{\lambda_k\}$ теплопроводности вдоль взаимно-перпендикулярных собственных направлений. В каждом элементе может быть задано свое положение собственных осей тензора теплопроводности в системе координат задачи. Если направления этих осей не совпадают с направлением глобальной системы координат, производится преобразование тензора. Симметричный тензор теплопроводности $\{\lambda_{ik}\}$ для четырехугольного элемента с узлами (1-2-3-4), у которого главные оси теплопроводности (r, z) образуют угол φ с осями (R, Z) глобальной системы (рис. 2), можно записать через главные значения $\{\lambda_1, \lambda_2\}$ как

$$\begin{pmatrix} \lambda_{11} & \lambda_{12} \\ \lambda_{21} & \lambda_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 \cos^2\phi + \lambda_2 \sin^2\phi & (\lambda_1 - \lambda_2)\sin\phi\cos\phi \\ (\lambda_1 - \lambda_2)\sin\phi\cos\phi & \lambda_1 \sin^2\phi + \lambda_2 \cos^2\phi \end{pmatrix}.$$

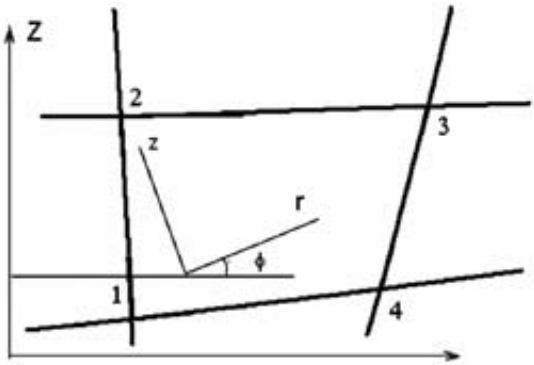


Рис. 2. Главные оси теплопроводности элемента в глобальной системе координат

Выражение для компонент теплового потока имеет вид

$$F_j = \lambda_{j1} \frac{\partial T}{\partial x_1} + \lambda_{j2} \frac{\partial T}{\partial x_2}, \quad j = 1, 2. \tag{3.16}$$

Данные для материалов вводятся в едином формате. Температурные зависимости в POLYFEM задаются таблицей, и значения в промежуточных точках находятся линейной интерполяцией. При использовании программы POLYFEM в структуре более общей вызывающей программы свойства могут браться из общей базы данных, а затем пересчитываться в таблицы. Для каждого материала, участвующего в расчете, должны быть введены коэффициенты теплоемкости и теплопроводности, плотность, температура и удельная теплота плавления.

При вычислении средних значений для смесей или эффективных значений в численных моделях POLYFEM используются специальные процедуры, описываемые ниже.

3.5. Вычисление потока тепла

Значения компонент потока тепла сами по себе не используются в основном цикле МКЭ-процедуры HEFEST (определение температур в узлах), и поток вычисляется для представления результатов, а также для подсчета вкладов в баланс тепла теплоотдачи с границ.

Вычисление потока на границах задания граничных условий второго и третьего рода (в том числе радиационных) производится интегрированием по времени заданного граничными условиями потока на каждой площадке $S_k \in \partial\Omega$ с граничным условием. Пусть средняя температура на площадке $T(S_k)$. Для конвективных граничных условий (3.6) с параметрами $\{H_k(t), T_k(t)\}$ переток тепла на шаге по времени δt через заданные площадки $\{S_k\}$ конвективных граничных условий

$$Q(t) = H_k(t)\left[T(S_k) - T_k(t)\right] S_k \delta t$$

и поток тепла $F_k = Q_k / (S_k \delta t)$. Аналогично вычисляется полный переток через выделенные площадки задания потоковых граничных условий (3.5).

Рассмотрим вычисление потока в произвольном узле расчетной области для двумерного случая. Поток во внутренней точке вычисляется по (3.16). Температура в точке элемента выражается через базисные функции, и частные производные — через производные от базисных функций. В любой точке КЭ имеем для компонент градиента температуры

$$\frac{\partial T}{\partial r} = \sum_k T_k \frac{\partial N_k}{\partial r} = \sum_k T_k \left(\frac{\partial N_k}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial r} + \frac{\partial N_k}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial r} \right),$$

$$\frac{\partial T}{\partial z} = \sum_k T_k \frac{\partial N_k}{\partial z} = \sum_k T_k \left(\frac{\partial N_k}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial z} + \frac{\partial N_k}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial z} \right).$$

Входящие сюда производные от базисных функций по глобальным координатам можно записать в виде

$$\begin{pmatrix} \dfrac{\partial N_k}{\partial r} \\ \dfrac{\partial N_k}{\partial z} \end{pmatrix} = \boldsymbol{J}^{-1} \begin{pmatrix} \dfrac{\partial N_k}{\partial \xi} \\ \dfrac{\partial N_k}{\partial \eta} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{J} = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial r}{\partial \xi} & \dfrac{\partial r}{\partial \eta} \\ \dfrac{\partial z}{\partial \xi} & \dfrac{\partial z}{\partial \eta} \end{pmatrix}. \tag{3.17}$$

Выражения для производных в якобиане J следуют из соотношений (3.10).

Для определения компонент потока в узлах производные (3.17) сперва вычисляются в четырех точках интегрирования КЭ, в них же вычисляются коэффициенты теплопроводности. Затем интерполяцией вычисляются значения в узлах, и для каждого узла производится осреднение по элементам, включающим данный узел.

3.6. Температурные граничные условия

Граничные условия по температуре (3.2) учитываются при решении квазилинейной алгебраической системы (3.15) следующим образом [3]. Пусть надо получить в k-м узле граничную температуру $T_k = T_b(k)$. Уравнения (3.15) получены из уравнений (3.11), и каждое из них отвечает выражению теплового баланса в данный момент времени в окрестности одного из N узлов. После того как построена матрица жесткости системы уравнений (3.15) $\left[K_{kj}\right]$, в правую часть k-го уравнения добавляется член $B\left(T_b - T_k^{(-1)}\right)$, где B — очень большое число (например, 10^{20}), а в левой части число B прибавляется к k-му диагональному члену матрицы жесткости. Индекс (–1) обозначает температуру, полученную на предыдущем шаге по времени или итерации. Фактически мы заменяем k-е уравнение уравнением $T_k - T_k^{(-1)} = T_b(k) - T_k^{(-1)}$ и автоматически получаем для k-го узла температуру $T_b(k)$.

3.7. Внутренние граничные условия

Температурные граничные условия можно вводить описанным выше способом для любого узла — внутреннего или граничного. То же относится к конвективным и потоковым граничным условиям. Однако если в качестве внешней температуры T_b в этом граничном условии фигурирует неизвестная температура другого узла, это необходимо учитывать: вводятся внутренние граничные условия для потока между элементами. Например, при рассмотрении теплообмена излучением в узкой щели ставится граничное условие для потока тепла между соответственными плоскопараллельными площадками 1 и 2:

$$F_{1-2} = \lambda_1 \frac{\partial T_1}{\partial n} = \lambda_2 \frac{\partial T_2}{\partial n} = \sigma_0 \varepsilon_e \left(T_1^n - T_2^n \right), \tag{3.18}$$

где ε_e — эффективный коэффициент теплообмена двух площадок, зависящий от температуры или от времени; $n = 4$. Площадки должны иметь приблизительно одинаковые размеры и расположение граничных узлов. Условие (3.18) приводится к некоторому конвективному граничному условию вида (3.6) и при построении конечно-элементной модели учитывается аналогичным образом: вместо производной $\lambda \partial T / \partial n$ в уравнение (3.5) подставляется некоторое выражение $f(t, T)(T - T_b)$, и затем член $f(t, T)T$ оказывается в правой части уравнения (2.9), а член $f(t, T)T_b$ — в левой. Например, пусть узлы m и k находятся на сторонах 1 и 2 соответственно. При построении m-й строки матрицы проводимости (3.13) аппроксимация правой части уравнения (3.18) берется в виде

$$F_{1-2} = \sigma_0 \varepsilon_e \frac{\left(T_m^\alpha\right)^m - \left(T_k^\alpha\right)^m}{|T_m^\alpha - T_k^\alpha|} \left(T_m^i - T_k^\alpha \right),$$

где α обозначает экстраполированную температуру с предыдущего шага $T_k^\alpha = T_k + \alpha \Delta T_k$; T_m^i — искомая температура i-го шага или итерации.

3.8. Задание тепловыделения

Объемное тепловыделение, т. е. источниковый член $Q(x, y, t, T)$ в уравнении (3.1), может быть задано таблицей в каждом элементе в зависимости от его местоположения или однородным в материале данного номера. Пространственное распределение не зависит от температуры и времени:

$$Q(x, y, t, T) = q(x, y)\, f(*), \tag{3.19}$$

где $f(*)$ — зависимость от температуры либо от времени.

Зависимость тепловыделения в элементе или материале от времени $f(t)$ или от температуры $g(T)$ — кривая нагрузки — задается таблицей при вводе. Кривые нагрузки различаются номерами.

При моделировании проплавления тепловыделяющей жидкостью источники тепла перераспределяются по области расплава.

Тепловыделение в НКС пропорционально массе поступающего UO_2 и, возможно, других материалов, и задается в некотором объеме в соответствии с количеством этих материалов. Зависимость удельной мощности от времени определяется кривой остаточного тепловыделения, которая предполагается функцией только времени: $Q \sim f(t)$.

При расчете процессов в НКС кривая нагрузки во входных данных HEFEST'а не задается (точнее, в формуле (3.19) $f(t) \equiv 1$), а зависимость тепловыделения от времени в каждый момент определена величиной $Q(t)$ полного тепловыделения в НКС, вычисляемой в программе СВЕЧА и передаваемой в HEFEST на каждом шаге. При расчете в автономном режиме эта величина берется из заранее сформированного файла. Величина $q(x, y)$ в каждом элементе на шаге по времени рассчитывается в соответствии с процессами поступления и перемещения и нормируется на текущее значение $Q(t)$.

3.9. Перенос излучения в полости

В наиболее общей форме расчет лучистого теплообмена в неоднородно нагретой полости учитывается в программе с помощью так называемого зонального метода путем задания матрицы угловых коэффициентов излучения для элементарных площадок, образующих внутреннюю поверхность полости [5]. Поверхность полости разбита на треугольные или четырехугольные элементы (площадки), вершины которых должны быть узлами конечно-элементного разбиения. Для каждой пары площадок 1 и 2 вводится угловой коэффициент излучения, учитывающий их размер и взаиморасположение:

$$\varphi_{1-2} = \frac{Q_{1-2}}{Q_1}, \quad \varphi_{2-1} = \frac{Q_{2-1}}{Q_2},$$

где Q_{2-1} — энергия излучения, попадающая с площадки 2 на площадку 1; Q_2 — энергия, излучаемая площадкой 2.

Предполагается, что каждая площадка излучает в пространство диффузно, а испускательная способность (степень черноты) всех материалов обычно берется постоянной, не зависящей от длины волны и температуры. В расчетной методике теплообмен излучением в полости может быть сведен к конвективным граничным условиям вида (3.6), нелинейно зависящим от температуры. Эта процедура описывается в приложении. Матрица угловых коэффициентов излучения произвольной трехмерной или двумерной аксиально-симметричной полости строится отдельной программой и вводится в начале расчетов.

Такая модель переизлучения требует работы по подготовке исходных данных, что увеличивает объем вычислений. Поэтому для случая, когда излучающие поверхности расположены близко и перепад температуры между ними невелик, можно применять упрощенные модели. Одна из них состоит во введении соответствующих внутренних граничных условий, как описано выше. Часто удобной оказывается линеаризованная модель, в которой поток лучистой энергии через щель, образуемую поверхностями, передается слоем материала, теплопроводность которого нелинейно зависит от температуры. Эта зависимость определяется равенством потока тепла через этот слой и потока теплового излучения:

$$\lambda_{\text{ef}} \frac{T_1 - T_2}{\Delta x} = \sigma_0 \varepsilon_e \left(T_1^4 - T_2^4\right) = 4\sigma_0 \varepsilon_e T_m^3 \left(T_1 - T_2\right) \rightarrow \lambda_{\text{ef}} = 4\sigma_0 \varepsilon_e T_m^3 \Delta x, \qquad (3.20)$$

где T_1, T_2 — температуры поверхностей 1 и 2; Δx — толщина слоя; T_m — средняя температура по толщине слоя; λ_{ef} — эффективная теплопроводность слоя; ε_e — эффективная испускательная способность системы двух параллельных площадок.

3.10. Теплоотдача излучением с границ расчетной области

Теплоотдача излучением снаружи корпуса идет на поверхность сухой защиты шахты реактора, а внутри корпуса — с поверхности расплава на корпус и вышележащие части. Учет теплообмена излучением с вышележащими поверхностями полости А3 в общем случае производится средствами модуля СВЕЧА. Для HEFEST'а эта процедура сводится к организации обмена данными по температурам и потокам на граничной поверхности.

При задании потока теплового излучения через поверхность расплава, которая изменяется в пространстве, по мере поступления материала и передвижения излучающей границы автоматически перезадается положение площадок радиационных граничных условий, вводимых во входном файле.

При расчете радиационной теплоотдачи с границ конструкций НКС и корпуса используются модели HEFEST'а, описанные выше. Поскольку геометрия полостей АЗ и НКС, как и распределение температуры ее стенок, могут быть исчислены лишь с ограниченной точностью, используются упрощенные модели теплообмена излучением. В простейшем случае, если можно задать температуру «на бесконечности» $T_b = T_b(t)$, достаточно ограничиться постановкой граничных условий излучения для потока тепла с поверхности расплава:

$$F = \sigma\varepsilon_{\text{eff}}\left(T^4 - T_b^4\right).$$

В расчетах, где полость образуется после разрушения АЗ, берется $T_b = 1800\ \text{K}$, что примерно на $100\ \text{K}$ выше температуры плавления нержавеющей стали (конструкции БЗТ).

Другой способ учета температуры окружающей среды при моделировании излучения с граничной поверхности состоит в задании внутренних граничных условий надлежащего вида (см. выше). В частности, так поступают для задания в расчете радиационного теплообмена между наружной границей корпуса и поверхностью сухой защиты. Между элементами на границе 1 корпуса и лежащими напротив элементами на границе 2 материала сухой защиты поток с единицы площади внутренней поверхности 1 на внешнюю 2 записывается следующим образом:

$$\frac{Q_1}{S_1} = F_1 = \sigma\varepsilon_{\text{eff}}\left(T_1^4 - T_2^4\right),\ \ \varepsilon_{\text{eff}} = \left(\frac{1}{\varepsilon_1} + \frac{1}{\varepsilon_2} - 1\right)^{-1}.$$

Относительный вклад в общий теплообмен переизлучения между стенкой корпуса и сухой защитой обычно невелик, и для задания процесса используется подобная упрощенная модель с внутренними граничными условиями, не учитывающая подробно геометрию полости. Бетон, воспринимающий излучение с корпуса, в данном случае играет роль распределенной теплоемкости, позволяющей самосогласованным образом учесть рост температуры окружающего материала при задании граничных условий излучения. Форма границы окружения корпуса реактора для удобства задания граничных условий берется поэтому близкой к форме корпуса.

4. Моделирование плавления и теплопереноса в неоднородном материале

Если моделирование теплообмена излучением между границами удается осуществить «прямым» образом, непосредственно вычисляя распределение теплового потока на границах по уравнениям баланса потока тепла на площадках границ, то при моделировании распространения области плавления и особенно конвективного теплопереноса в рамках используемого подхода неподвижной среды с диффузионным теплопереносом приходится вводить модельные среды с эффективными теплофизическими коэффициентами. Ниже описаны используемые подходы.

4.1. Фазовые превращения

При плавлении (затвердевании) в материале поглощается (выделяется) скрытая теплота перехода и могут изменяться теплофизические коэффициенты. Для определенности будем рассматривать плавление. В численном расчете без явного выделения геометрической границы фазового перехода скрытая теплота плавления может учитываться двумя способами. В балансной методике [6] вводятся источники (стоки) тепла в узлы, где выполняются условия наличия фазового перехода, компенсирующие изменение температуры на шаге по времени так, чтобы температура оставалась постоянной до тех пор, пока не выделится количество тепла, равное скрытой теплоте перехода. Другой способ учета скрытой теплоты состоит во введении эффективной теплоемкости A_{ef} [7] согласно соотношению для теплоты перехода ΔH :

$$\Delta H = \int_{T_{\text{sol}}}^{T_{\text{liq}}} \tilde{C}_{\text{ef}}\left(T\right) dT. \tag{4.1}$$

В интервале температур $\left[T_{\text{liq}}, T_{\text{sol}}\right]$, содержащем в себе температуру плавления T_m, к основной теплоемкости добавляется составляющая c_{ef}, которая в интервале плавления зависит от температуры по заданному закону так, чтобы интеграл (4.1) всегда равнялся ΔH . Интервал плавления задается отдельно при вводе свойств либо учитывается в температурной зависимости теплоемкости. В расчетах обычно применяется метод эффективной теплоемкости, поскольку он дает лучшую сходимость, в ряде случаев более точен, а плавление обычно происходит в интервале температур. При зада-

нии теплоты плавления через эффективную теплоемкость в интервале плавления она зависит от температуры по заданной кривой.

4.2. Задание теплофизических свойств материалов и их смесей

Задание теплофизических и термомеханических свойств в точке — конечном элементе во всем комплексе HEFEST — осуществляется, как уже указывалось, через понятие материала. Материал имеет номер и тип. Все элементы, обладающие одним номером материала, имеют свойства, которые постоянны или вычисляются единым образом по температуре либо другим условиям. Тип материала отвечает модели, согласно которой определяются свойства и вводятся исходные данные для данного материала. В задачах, где конфигурация и состав фиксированы, все свойства элемента задаются одним целочисленным параметром номера материала.

В задачах моделирования ТА, где перераспределяется материал, происходят перенос и изменение свойств. Поэтому при активизации соответствующих моделей некоторые параметры материала задаются и вычисляются поэлементно как переменная в пространстве и во времени функция $\xi(r, z)$. Поэлементное задание используется для объемного тепловыделения, энтальпии, а также плотности и состава, если задействованы опции поступления и перемещения материала. В такой более общей ситуации номер материала используется для того, чтобы ввести начальные данные, а затем в процессе расчета — для указания на способ вычисления физических величин в элементе.

Если состав материала в элементе не меняется и его термомеханические свойства известны, они вычисляются при разных температурах через известные зависимости, находящиеся в общей базе данных или вводимые в начале расчета. Если происходит перераспределение материала, приходится использовать дополнительные предположения о характере перераспределения и о свойствах смеси. Описания процедур вычисления параметров вещества при наличии перераспределения для разных типов материала приведены в соответствующих местах.

Выбор способов оценки параметров материала, переместившегося в НКС, существенно ограничен точностью исходных физических данных и вычислительными возможностями. Ниже излагается мотивация выбора процедуры осреднения.

4.2.1. Требования к упрощенной модели задания свойств смеси реакторных материалов

Если на входе в НКС материалы АЗ можно еще рассматривать по отдельности и использовать для них известные табличные зависимости, то после расплавления имеется многокомпонентный раствор, свойства которого известны весьма приблизительно и могут только оцениваться по заданному составу. Пределы точности определения свойств смеси ограничиваются рядом обстоятельств, в частности неопределенностью состава в разных местах и фазового состава компонентов. Это дает основания для введения упрощений. Свойства материала в данном элементе определены в общих чертах следующим:

- задан вероятный ход событий при деградации АЗ и порядок перемещения материалов в рамках исходного сценария;
- определен состав — пространственное распределение исходных материалов, отвечающее принимаемым механизмам перемещения, и их состояние, и определяются теплофизические коэффициенты смеси данного состава.

Если предположения о сценарии развития аварии и перемещении материалов фиксированы, то неопределенность возникает на этапе задания состава многокомпонентной и многофазной смеси. Здесь надо принимать в расчет не только теплофизические свойства, но и диаграммы состояния двойных (и более) систем. Для моделирования тепловой циркуляции и расслоения расплава на легкий и тяжелый необходимо знать плотности образующихся соединений, изменение свойств при перемешивании, растворении, разогреве.

Таким образом, само наличие смеси материалов, даже однородной, уже существенно ограничивает точность задания теплофизических свойств в элементе, что дает основания при расчете свойств применять довольно грубые модели. Требования к процедурам осреднения в программе следующие:

- погрешность при определении свойств смеси по возможности должна быть в пределах погрешностей, появляющихся за счет других допущений модели;
- в материале должно сохраняться теплосодержание, т. е. запасенная за счет тепловыделения Q энергия должна при остывании выделяться в объеме Q за вычетом потерь на остывание.

Более 98% поступающего материала:

- диоксид урана;
- диоксид циркония;
- металлический цирконий;

- нержавеющая сталь внутренних конструкций и сталь корпуса.

Принимается, что дебрис представляет собой смесь этих веществ, а остальные материалы (в основном это окислы железа) причисляются к диоксиду циркония.

Простейшая и часто единственно возможная процедура оценки свойств смеси состоит в вычислении взвешенного среднего. При ее применении различается состояние смеси: нерасплавленное и расплавленное. До определенного момента образования расплава агрегатное состояние каждого компонента отвечает состоянию чистого вещества при данной температуре. После этого момента материал в элементе переходит в расплав и описывается несколько иным образом (см. ниже).

Свойства нерасплавленной смеси. Начиная с момента заполнения элемента поступившим материалом, имеющим неоднородный состав, свойства материала этого элемента вычисляются путем усреднения по парциальным массам:

$$c_{\text{mean}}(T) = \frac{\sum_i \rho_i c_i(T) \xi_i}{\sum_i \rho_i}, \tag{4.2}$$

где $c(T)$ — свойство, теплоемкость или теплопроводность; ρ_i — парциальная плотность компонентов; ξ_i — вес, приписываемый компоненту. $\xi_i = 1$ для всех случаев, кроме определения парциального вклада в теплопроводность металлических компонентов. Если суммировать пропорционально, то относительно малые вклады металла существенно увеличивают теплопроводность смеси, что не отвечает экспериментальным данным. Поэтому для них ξ_i берется зависимым от концентрации.

4.3. Распространение границы плавления в неоднородном материале, находящемся в контакте с тепловыделяющей жидкостью

В численной модели плавления с перемешиванием (ПП) рассматривается контакт горячего расплава с нерасплавленным материалом другого вида. Близкое физическое явление — *абляция*, приповерхностный нагрев твердого материала до размягчения, плавления или испарения с последующим удалением. Расплав, циркулирующий около стальной стенки, плавит, возможно, частично растворяет сталь и уносит ее с собой, передавая тепло в стенку. Численно весь процесс моделируется как продвижение границы

расплава с изменением свойств за границей плавления, т. е. как вариант задачи Стефана. Теплоперенос и поглощение скрытой теплоты перехода в приграничных элементах рассчитывается стандартными средствами пакета (см. подраздел 4.1). Постоянство условий на границе плавления обеспечивается за счет высокой эффективной теплопроводности расплава (см. подраздел 4.4). Влияние гравитации, могущее привести к перемещению больших масс нерасплавленного материала, не учитывается. Основной критерий перехода данного КЭ в расплав — температурный, $T(r,z) > T_{\text{bn}}$ (где T_{bn} — некоторая критериальная температура) , плюс некоторые дополнительные условия. Предполагается, что вновь расплавленный материал быстро и однородно распределяется («растворяется») в объеме всего расплава либо в случае расслоения на сталь и кориум сталь мгновенно перемещается из приграничной области в область стального слоя.

Свойства в элементах, содержащих расплав, определяются как средние по всему расплаву. Усреднение производится на каждом шаге по времени. Усреднение по объему расплава производится при сохранении пространственного распределения температуры, полученного на текущем шаге. Температура выравнивается за счет эффективной теплопроводности конвекции, а состав выравнивается при принятых предположениях мгновенно. Такие допущения оправданы тем, что при тех значениях массовых скоростей конвекции, которые предполагаются в расплаве материалов АЗ (порядка 5 см/с и выше), фактическое время перемешивания составляет порядка сотен секунд, что мало в масштабе времени разрушения корпуса (порядка тысяч и более секунд). С другой стороны, относительно небольшая постоянная неоднородность состава расплава слабо влияет на конвективный теплообмен в целом. Основное требование при усреднении — это сохранение суммарного тепловыделения и энтальпии в области расплава (и всей расчетной области).

Таким образом, в смысле плотности и состава (но не температуры и потока) расплав образует нульмерный объект с переменными характеристиками, с которым взаимодействуют граничащие с ним элементы расчетной сетки. Свойства расплава изменяются по мере изменения состава. Опишем последовательные шаги процедуры ПП.

4.3.1. Анализ и изменение конфигурации расплава

В начале расчета при первом вызове процедуры происходит задание вспомогательных массивов. На каждом шаге расчета определяется максимальная температура $T_{\max}$ в расчетной области. При выполнении условия

$T_{\max} > T_{bn0}$, начиная с определенного шага расчета, регулярно с заданной частотой вызывается процедура ПП.

При последующих вызовах процедуры анализируются положение и температура каждого элемента подобласти расчетной сетки, выделенного при вводе, как потенциально переходящего в расплав. Область расплава отличается от области твердой фазы номером материала, и граница между областями в общем случае ступенчатая, по границам КЭ (рис. 3). Перезадание свойств во вновь расплавленном элементе производится присвоением ему номера материала расплава. На каждом шаге по времени уравнение теплопроводности в расчетной области решается на текущем распределении свойств материалов.

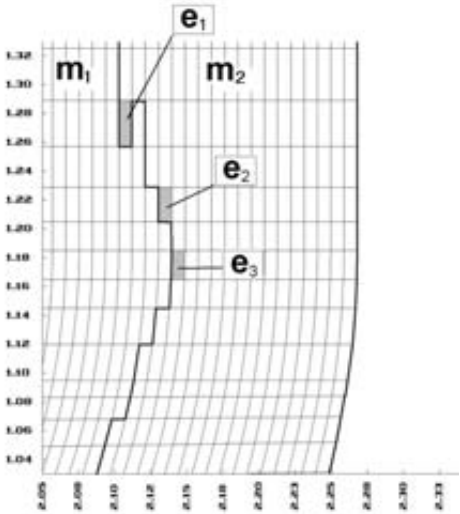


Рис. 3. Граница плавления. m_1 — расплав, m_2 — сталь корпуса

Пусть в нерасплавленном элементе e_1 с номером материала m_2, граничащем с расплавом, имеющим номер материала m_1, средняя температура (в центре элемента) повысилась до некоторой величины $T(e_n)$. При перегреве выше заданной температуры образования расплава элемент считается расплавленным — номер его материала меняется: $m_2 \to m_1$, если выполняется ряд условий перехода элемента в расплав. Соответствующие параметры должны быть введены вместе с данными по материалу m_1.

Элемент e_1 должен находиться в контакте с расплавом, т. е. иметь не менее двух общих узлов с материалом расплава; при этом номера материалов, при контакте с которыми возможен переход в расплав, вводятся с данными по материалам.

Температура $T(e_i)$, вычисляемая как средняя по узлам, должна превышать некоторую температуру перехода $T_c(m_1)$, задаваемую во входных данных или вычисляемую в расчете для данного материала: $T(e_i) > T_c(m_1)$. Кроме того, элемент e_i переходит в расплав в случаях:

— если элемент в течение заданного времени t_{hold} непрерывно находился в контакте с расплавом, имея близкую температуру $T_c(m_1) - \delta T_c$, где принято $\delta T_c = 200\ \text{K}$ (условие выдержки);

— если элемент e_n имеет не менее трех границ с материалом расплава m_L и температуру не ниже $T_c(m_1) - \delta T_c$ (условие «выдержки»; пример — элемент e_1 на рис. 3).

Если расплава в системе еще нет (нет материала m_1), то при выполнении двух предыдущих условий элемент может перейти в расплав. Максимально допустимое количество таких очагов расплавления задано в тексте программы.

В расчете может создаться конфигурация, когда у стальной стенки корпуса, граничащей с расплавом, между расплавом и корпусом находится нерасплавленный тонкий слой поступившей из АЗ смеси материалов (оксидов), способный пропустить поток тепла в стальную стенку, не расплавляясь. Теплоотвод излучением от стенки наружу относительно мал, и сталь при этом нагревается до плавления, а возникшая корка не плавится. Сколько-нибудь длительное существование такой тонкой прослойки между расплавами стали и оксидов считается физически маловероятным, и элементы корки при возникновении подобной конфигурации также считаются расплавленными.

4.3.2. Перезадание тепловыделения

После проверки всех элементов на критерий расплавления и принадлежность к области расплава происходит перераспределение тепловыделения на всю расширившуюся область расплава. Пусть объем Ω области тепловыделения на шаге по времени увеличился: $\Omega \to \Omega + \Delta\Omega$, тогда пространственное тепловыделение изменилось: $w(r, z) \to w'(r, z)$. Новое значение объемной мощности задается, исходя из нормировочного соотношения

$$\int_{\Omega} w(r, z)\, d\Omega = \int_{\Omega+\Delta\Omega} w'(r, z)\, d\Omega. \qquad (4.3)$$

Пространственное распределение в каждый момент считается пропорциональным распределению концентрации топлива, и поскольку, последняя однородна, однородным полагается и тепловыделение в расплаве (но не во всей области). При изменении объема области расплава на шаге плотность мощности тепловыделения изменяется обратно пропорционально объему области расплава. Полное тепловыделение в последующие моменты определяется, исходя из данных по остаточному тепловыделению материала, переместившегося в НКС, передаваемых из программы РАТЕГ-СВЕЧА.

4.3.3. Задание свойств расплава и расплавленной смеси материалов

Свойства вновь возникшего объекта — расплава в каждой точке — конечном элементе вычисляются по температуре одинаковым образом, т. е. расплав считается однородным. При вызове процедуры ПП в случае перехода новых элементов в расплав происходит перезадание этих свойств. При этом сохраняются следующие условия:

- распределение температуры, т. е. температуры в узлах, остается неизменным;
- суммарная энтальпия и тепловыделение в элементах, образующих расплав и перешедших в расплав, остается неизменной.

Свойства, подлежащие переопределению при включении в расплав новых элементов:

- состав и плотность;
- тепловыделение (см. выше);
- температура плавления и интервал плавления;
- энтальпия плавления;
- теплоемкость (зависит от температуры);
- теплопроводность (молекулярная, зависит от температуры).

Состав и плотность определяются усреднением по массе расплава. Соотношения усреднения для температуры плавления $\breve{T}_{\mathrm{LAT}}$ и энтальпии перехода $\breve{H}_{\mathrm{LAT}}$ усредненного материала имеют вид

$$\breve{T}_{\mathrm{LAT}} = \frac{\sum_{k=1}^{m} M_k H_{\mathrm{LAT}}^k}{\sum_{k=1}^{m} M_k H_{LAT}^k / T_{\mathrm{LAT}}^k}, \quad \breve{H}_{LAT} = \frac{\sum_{k=1}^{m} M_k H_{\mathrm{LAT}}^k}{\sum_{k=1}^{m} M_k}. \qquad (4.4)$$

Здесь температура плавления $\breve{T}^k_{\mathrm{LAT}}$ и скрытая теплота перехода $\breve{H}^k_{\mathrm{LAT}}$ — это вводимые величины для k-го компонента смеси; общее количество компонентов равно m.

Для того чтобы ввести усреднение для температурозависимых теплопроводности и теплоемкости неоднородно нагретого расплава, они представляются кусочно-линейными функциями (рис. 4).

$$c(T) = c_0, \text{ если } T = T_{\mathrm{ref}} = 300\ \mathrm{K},$$

$$c(T) = c_0 + k\left(T - T_{\mathrm{ref}}\right), \text{ если } T_{\mathrm{ref}} < T < T_L, \tag{4.5}$$

$$c(T) = c_L, \text{ если } T_L < T,$$

где свойство $c(T)$ — коэффициент теплоемкости или теплопроводности; k — вычисляемый коэффициент.

Рассмотрим вычисление усредненной теплоемкости. Скрытая теплота плавления для всех материалов задается некоторой отдельно вычисляемой функцией $\breve{C}(T)$, заданной в пределах интервала плавления, так что полная теплоемкость складывается из нормальной и эффективной: $c(T) + \breve{C}(T)$ — см. (4.1), где $\breve{C}(T)$ учитывает энтальпию плавления материала.

Для вычисления коэффициентов c_0 и k имеем уравнение — условие постоянства энтальпии в расплаве при исходных и преобразованных коэффициентах:

$$\begin{aligned} H(\Omega) &= \sum_{i=1}^{N_e} M_i \int_{T_{\mathrm{REF}}}^{T_i} \left[c(T) + \breve{C}(T)\right] dT = \\ &= \sum_{i=1}^{N_e} M_i \left\{ \int_{T_{\mathrm{REF}}}^{T_{LAT}} \left[c(T) + \breve{C}(T)\right] dT + \int_{T_{LAT}}^{T_i} \left[c(T) + \breve{C}(T)\right] dT \right\} = \\ &= c_0 \sum_{i=1}^{N_e} M_i \Theta_i^2 + \frac{k}{2} \sum_{i=1}^{N_e} M_i \Theta_i^2 + \sum_{i=1}^{N_e} M_i c_L \left(T_i - \breve{T}_{LAT}\right) \theta\left(T_i - \breve{T}_{LAT}\right) + \\ &+ \sum_{i=1}^{N_e} M_i H_{LAT}(T_i) \equiv A c_0 + B \frac{k}{2} + P_L + Q_L, \end{aligned} \tag{4.6}$$

где Ω — область расплава; N_e — количество КЭ в этой области, по элементам которой производится суммирование; M_i — масса элемента; $t_i = T_i - T_{\mathrm{REF}}$ — приведенные температуры в элементе (берутся в центрах); $H_{LAT}(T)$ — проинтегрированные до текущей температуры вклады «дельта-

функций» $\breve{C}(T)$ эффективной теплоемкости в каждом элементе; $\theta(T)$ — функция Хевисайда; $\Theta_i^2 = \left(\min\left(T_i, \breve{T}_{LAT}\right)\right)^2$. Появление элементов с температурой $T_i < \breve{T}_{LAT}$ в «расплаве» возможно вследствие принимаемого условия «выдержки» (см. выше). Величины A, B, Q_L вычисляются суммированием по области расплава.

Для определения c_0 задаемся величиной k. В качестве исходного задаваемого значения берется величина c_1 — значение теплоемкости в нижней окрестности усредненной температуры плавления расплава $\breve{T}_{L-0}$:

$$c_1 = c_0 + k\left(\breve{T}_L - T_{\mathrm{REF}}\right).$$

Для каждого исходного материала смеси (UO_2, ZrO_2, Zr, сталь и т. д.) значение так определенного коэффициента c_1 вычисляется с использованием линейного представления $c(T)$ вида (4.5). Коэффициенты таких линейных соотношений определяются из условия, чтобы при температуре плавления энтальпия «линеаризованного» материала равнялась энтальпии исходного:

$$\int_{T_{\mathrm{REF}}}^{T_{LAT}} c(T)\,dT = \int_{T_{\mathrm{REF}}}^{T_{LAT}} \left(c_0 + k\left(T - T_{\mathrm{REF}}\right)\right)dT.$$

Сравнение температурных зависимостей теплоемкости для линеаризованного и натурального материалов приведены на рис. 4. Напомним, что линеаризованные зависимости используются только для задания усредненных свойств расплава. Полная энтальпия вычисляется из балансных соотношений.

Эффективное значение $c_1 = \breve{c}_1$ для расплава определяется усреднением по массе компонентов аналогично (4.4). При этом нужное значение при температуре плавления смеси $\breve{T}_L$ вычисляется для каждого «линеаризованного» материала по формуле (4.5).

Задавшись величиной c_1, находим k и далее из (4.6) находим c_0. Средний коэффициент в расплаве $\breve{c}_L$ для задания теплоемкости или теплопроводности при температуре выше уровня плавления определяется аналогично (4.4) из соотношения

$$\breve{c}_L = \frac{\sum_{k=1}^{m} M_k c_L^k}{\sum_{k=1}^{m} M_k}.$$

Аппроксимация коэффициентов теплопроводности расплава проводится аналогично, но с очевидными упрощениями, поскольку здесь нет закона сохранения — условия вида (4.6). Линеаризованные зависимости свойств от температуры (4.5) с вычисленными значениями коэффициентов используются далее на следующем шаге по времени при вычислении усредненных свойств материала расплава в процессе сборки матрицы проводимости, вычислении потока и др.

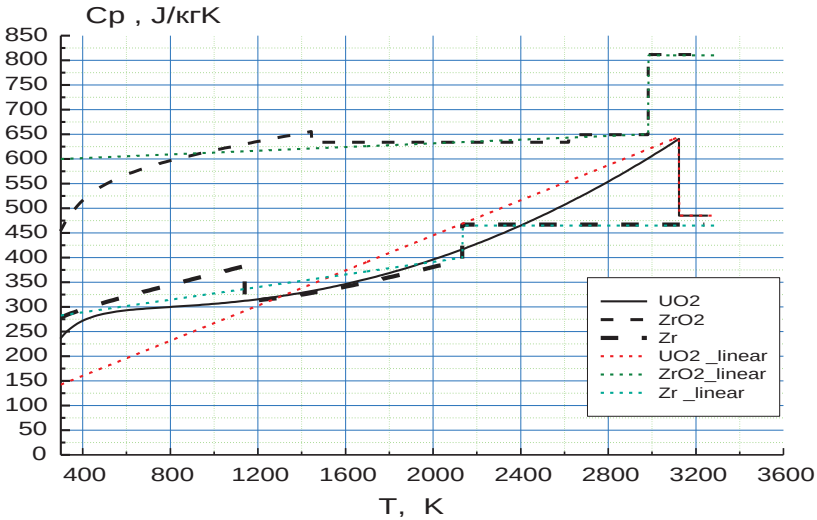


Рис. 4. Линейная аппроксимация теплоемкости компонентов расплава

После «перехода в расплав» при текущем вызове процедуры ПП конечный элемент «принадлежит расплаву», т. е. участвует в описываемых ниже процедурах усреднения. Если при последующих вызовах процедуры ПП окажется, что температура в КЭ понизилась ниже граничной, то в этом элементе сохраняется значение тепловыделения с предыдущего шага и нормировка мощности в остальном расплаве происходит без его участия. При этом теплопроводность в элементе падает до номинального значения, т. е. конвективная составляющая в нем отсутствует. Чтобы не хранить набор текущих теплофизических свойств для каждого элемента, свойства в данном остывшем КЭ вычисляются на каждом вызове процедуры как средние по расплаву. Поскольку при температуре плавления объемные теплоемкости оксидов и стали относительно близки, возникающая неточность находится в пределах погрешности всей процедуры.

Температура перехода в расплав для данного материала, если она не задана при вводе, равна температуре ликвидуса материала:

$$T_{\text{bn}}(m) = T_{\text{LAT}}(m).$$

Для элементов с фиктивным материалом, заполняемых поступающим «кориумом» — смесью материалов А3, температуру $T_{\text{LAT}}(m)$ можно положить равной (в основном файле ввода) температуре плавления кориума С-32, $T_{\text{LAT}}(m) = 2650\ \text{K}$.

Определяющее значение для установившейся температуры расплава имеет эффективная температура перехода в режим конвекции T_{CN} (см. ниже), которая связывается с эффективной температурой плавления усредненного материала расплава соотношением

$$T_{\text{CN}} = \breve{T}_L + \delta.$$

Эта величина принимается по умолчанию для всех материалов, в которых возможен режим конвекции. Величина δ по умолчанию принимается равной нулю.

При наличии большого количества стали, сравнительно легкоплавкого компонента по сравнению с другими материалами А3, температура плавления смеси заметно понижается и, если при вводе данных для расплава принимаются значения T_{CN} по умолчанию, это приводит к заметному ускорению плавления и разрушения корпуса в целом. Физически ускорение плавления может иметь место, например, при образовании некоторого количества растворов U-Fe и Fe-Zr. Пониженная температура плавления смеси в расчете может рассматриваться как простая физическая модель одного из возможных поворотов событий. На нынешнем уровне знаний о процессах высокотемпературного взаимодействия в системе материалов А3 нельзя с уверенностью исключить или установить наличие большого объема легкоплавкой эвтектики в расплаве, поэтому более сложные формулы, чем (4.4), для определения температуры плавления смеси в программе пока не применяются.

4.4. Модель конвективного теплообмена в расплаве

4.4.1. Характеристики режима конвекции однородного расплава в корпусе

Расплав кориума и стали является тепловыделяющей жидкостью (ТЖ), и в ней имеет место свободная конвекция. Теплопередача конвекцией в расплаве на порядки превосходит диффузионную теплопередачу. Поток тепла

из расплава в стенку корпуса определяется величиной теплового сопротивления пограничного слоя, которое характеризуется местным числом Нуссельта, а теплоотдача от расплава в целом — средним числом Нуссельта (далее — «число Нуссельта»), которое для разных режимов может быть выражено через параметры течения с помощью безразмерных корреляций типа приведенных ниже. Эти корреляции справедливы при условии установившегося режима течения.

Когда расплав кориума находится внутри корпуса реактора, наружная граница корпуса может быть охлаждаемой или неохлаждаемой. В случае охлаждаемой стенки ее материал (сталь) будет плавиться до тех пор, пока толщина стенки в данном месте не уменьшится настолько, что она сможет пропускать поток тепла из расплава к (водо)охлаждаемой границе. В этом случае может установиться стационарное состояние, когда все тепло, генерируемое в расплаве, переходит в теплоноситель (в воду). Если охлаждение снаружи корпуса отсутствует, также возможна ситуация, когда кориум в течение некоторого времени будет пребывать в стационарном состоянии за счет того, что его тепловыделение будет тратиться на нагрев и плавление стальной стенки до ее разрушения.

Для целей представления разогрева и разрушения корпуса модель конвекции должна обеспечить следующее:

- сохранение энергии в расчетной области;
- выход на квазистационарное состояние, если оно достижимо;
- адекватное распределение температуры в расплаве;
- адекватное распределение потока тепла по границе «расплав—корпус»;

Критерии адекватности можно обеспечить только в пределах некоторой погрешности. Критерии в упрощенной модели HEFEST'а задаются на основе данных, полученных в расчетах по более точным специализированным алгоритмам. Таковыми служат численные расчеты по двух- и трехмерным гидродинамическим моделям, а также аналитические корреляции, проверенные экспериментально. Упрощенная модель теплопередачи конвекции в расплаве использует ортотропные эффективные коэффициенты теплопроводности, подстраивая эти коэффициенты для получения требуемых характеристик температуры расплава и распределения потока на границе.

Расплав в корпусе реактора в общем случае может расслаиваться на две несмешивающиеся жидкости: оксидную составляющую, содержащую неокисленный цирконий — кориум и жидкую сталь, которая также может частично растворить цирконий. До настоящего времени считается, что кориум более тяжелый, чем сталь. В области расплава выделяют следующие зоны [8]:

- нижний слой кориума, граничащий с эллиптической частью днища;
- плоский слой кориума над эллиптической зоной, находящийся в состоянии конвекции Рэлея—Бенара;

- верхний плоский слой стали, также находящийся в состоянии бенаровской конвекции.

В численной модели область расплава кориума моделируется единым образом, а для слоя стали берутся свои коэффициенты.

Как показывают эксперименты, число Нуссельта в стационарном режиме зависит в основном от числа Релея, характеризующего режим течения:

$$\mathrm{Ra} = \Delta T g \beta R^3 / (k \nu) \tag{4.7}$$

или от модифицированного числа Рэлея:

$$\mathrm{Ra}' = Q g \beta R^5 / (\lambda k \nu), \tag{4.8}$$

где ΔT — характерная разность температур; Q — мощность объемного тепловыделения; g — ускорение свободного падения; β — объемный КТР; R — внутренний радиус сферической стенки; λ — теплопроводность; k — температуропроводность; ν — кинематическая вязкость.

В качестве исходных корреляционных зависимостей $\mathrm{Nu} = \mathrm{Nu}(\mathrm{Ra})$, как правило, используется степенной закон. В случае ТЖ в полусферическом сосуде граничная поверхность разделяется на боковую стенку и верхнюю границу и интегральная теплоотдача расплава характеризуется двумя числами:

$$\mathrm{Nu}_{\mathrm{dn}} = C_1 \mathrm{Ra}'^{\gamma 1}, \ \ \mathrm{Nu}_{\mathrm{up}} = C_2 \mathrm{Ra}'^{\gamma 2}. \tag{4.9}$$

Здесь показатели степени в численной модели [8]

$$\gamma 1 = 0,25, \ \ \gamma 2 = 0,21, \tag{4.10}$$

коэффициенты

$$C_1 = 0,084, \ \ C_2 = 0,345, \tag{4.11}$$

а значения множителей степенных зависимостей взяты из [9]. Коэффициенты корреляций зависят от режима течения, и для разных диапазонов величины Ra' различны. Расплав материалов АЗ в корпусе реактора характеризуется значениями модифицированного числа Рэлея в пределах 10^{13}—10^{17}.

При конвекции ТЖ в области с криволинейной границей следует учитывать специфику распределения потока на границе. К настоящему времени установлен вид стационарного распределения потока тепла вдоль всей грани-

цы ТЖ в целом для цилиндрической и полусферической границ. Эти результаты берутся в качестве основы для построения модели и сравнения. Если расплавленный кориум находится в корпусе, нижняя граница области расплава будет приблизительно эллиптической, а плотность теплового потока будет зависеть от угла наклона поверхности. В распределении потока тепла вдоль криволинейной поверхности, близкой к полусферической, поток монотонно возрастает с увеличением угла наклона нормали относительно вертикали $Q - z$. Эта зависимость достаточно универсальна и воспроизводилась в ряде экспериментов [8]. Она схематически представлена на рис. 5. Ниже мы будем ссылаться на нее как на «каноническую». Для нас в этой зависимости существенно, что поток тепла в нижнем положении примерно в 10 раз меньше, чем поток тепла при углах порядка 90°.

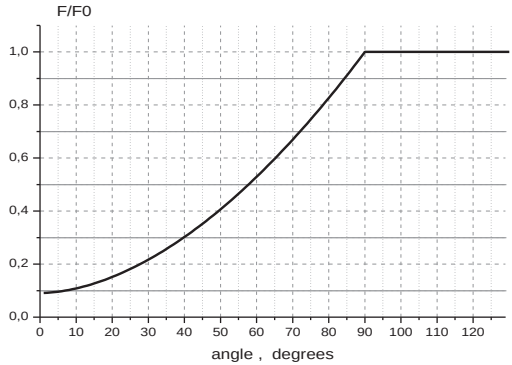


Рис. 5. Схематизированная зависимость относительной величины потока тепла в стенку от угла нормали к вертикали в данной точке

В случае расслоения расплава подогреваемый снизу слой стали, не имеющий внутреннего тепловыделения, пребывает в состоянии, которое можно описать как наложение двух режимов: бенаровской конвекции и течения у вертикальной холодной стенки. Рассматривается теплопередача от нижней границы стали к верхней и теплопередача к вертикальной стенке, которая характеризуется соответствующими числами Нуссельта и степенными корреляциями:

$$\mathrm{Nu}_{R,Z} = C_{R,Z}\mathrm{Ra}^{\gamma}, \tag{4.12}$$

где показатель степени в обоих случаях один и тот же [10], $\gamma = 0{,}333$, а множители

$$C_R = 0{,}13,\ \ C_Z = 0{,}076. \tag{4.13}$$

Поскольку в расплаве стальной слой имеет как верхнюю и нижнюю, так и боковую границы, указанные режимы конвекции в нем в чистом виде не реализуются, поэтому коэффициенты в указанных корреляциях могут быть иными. В программе они корректируются, как описано ниже.

4.4.2. Эффективная теплопроводность при конвекции в однородной ТЖ

Подход с анизотропным эффективным коэффициентом теплопроводности уже довольно давно применяется для моделирования конвективного теплопереноса в тепловыделяющей жидкости [11—13]. Физические основания для введения анизотропной теплопроводности просты. Чтобы направить тепло из расплава в нужном направлении, следует облегчить ему путь в этом направлении — увеличить теплопроводность расплава. Теплоотдача расплава в вертикальном направлении часто в несколько раз меньше суммарной. В соответствии с этим вводится эффективный ортотропный коэффициент теплопроводности с коэффициентами вдоль двух главных взаимно перпендикулярных собственных осей Or и Oz: (λ_r, λ_z). Коэффициент λ_r в радиальном направлении превышает номинальное значение и при этом больше по величине, чем коэффициент теплопроводности λ_z по вертикали. Величина λ_r подбирается из условия близости расчетной величины перегрева ТЖ относительно ликвидуса к той величине, что имеет место при конвекции.

Исходя из этих требований, нетрудно получить численные значения (λ_r, λ_z). Пусть R — характерный размер области расплава, λ — его теплопроводность, ΔT — перегрев расплава — перепад температуры от максимума к границе. Если взять теплопроводность ТЖ равной ее номинальному значению $\lambda = \lambda_H$, то перепад температуры будет большим, поскольку не учитывается теплоперенос за счет естественной конвекции. Чтобы уменьшить перегрев, вводится более высокий эффективный коэффициент теплопроводности $\lambda = \lambda_c$. Его величина связана с числом Нуссельта режима. По определению число Нуссельта при теплоотдаче от жидкости в состоянии конвекции есть отношение фактического коэффициента теплоотдачи H_c через границу (через пограничный слой d) к тому коэффициенту, что был бы при чисто диффузионной теплопроводности:

$$\mathrm{Nu} = H_c / H_H . \tag{4.14}$$

В случае введения эффективной теплопроводности конвекции эффективный коэффициент теплоотдачи к границе должен быть таким, как при на-

личии конвекции, а характерный размер — это габарит области расплава: $d \sim R$. Мы можем написать оценку для эффективного коэффициента теплоотдачи и коэффициента при диффузионной теплопроводности:

$$H_c \sim \lambda_c / R, \;\; H_H \sim \lambda_H / R,$$

откуда получаем условие для эффективной теплопроводности конвекции:

$$\mathrm{Nu} = \lambda_c / \lambda_H \text{, или } \lambda_c = \mathrm{Nu}\lambda_H. \qquad (4.15)$$

Если известно, что тепловой поток на границе ТЖ в вертикальном направлении примерно в n раз меньше, чем в радиальном, то теплопроводность по вертикали берется уменьшенной: $\lambda_z = \lambda_c / n$. Распределение потока тепла в стенку задается не параметрами течения, а величиной и распределением эффективного коэффициента теплопроводности в объеме ТЖ. В случае расслоения полный поток в вертикальном направлении с верхней границы ТЖ в слой стали сравним с общим тепловыделением. При этом канонический вид распределения потока из ТЖ по боковой полусферической стенке сохраняется и сохраняется отношение потоков на боковом и нижнем участках полусферической границы: поток вниз мал относительно потока через полусферическую стенку. Как показывает практика, модель ортотропной теплопроводности для расплава в корпусе и в этом случае дает неплохие результаты по распределению потока, хотя ее возможности в целом ограниченны.

В модели HEFEST'а величина эффективного коэффициента задается для двух главных направлений тензора теплопроводности, которые одни и те же для всех элементов и совпадают с осями координат задачи. Молекулярная теплопроводность расплава $\lambda_H = \lambda_H(T)$ всегда изотропна. Эффективные коэффициенты $\lambda_R(T)$, $\lambda_Z(T)$ для материала в состоянии конвекции получаются из номинального значения $\lambda_H(T)$ умножением на $\zeta = \zeta_{R,Z}$:

$$\lambda_{R,Z}(T) = \zeta_{R,Z}\lambda_H(T).$$

Множитель $\zeta_{R,Z}$ берется независимым от координат, но зависимым от температуры и времени: $\zeta_{R,Z} = \zeta_{R,Z}(T, t)$. Он вводит увеличение теплопроводности при температуре, превышающей температуру плавления, и устанавливает переходной режим от области с номинальной теплопроводностью к области с конвективной теплопроводностью. Величины коэффициентов ζ_R и ζ_Z берутся такими, чтобы теплоотдача в стенку отвечала соответствующим корреляциям $\mathrm{Nu} = \mathrm{Nu}(\mathrm{Ra})$, приведенным выше. В объеме расплава

кориума режим течения предполагается близким к режиму ТЖ в полусферическом сосуде и используется модифицированное число Рэлея (4.8) с характерным размером расплава $X = X_R$ в радиальном направлении. В этом случае множители для эффективной теплопроводности следующие:

$$\zeta_R = \mathrm{Nu}_{dn}, \ \zeta_Z = \zeta_R / n, \tag{4.16}$$

где величина n соответствует «канонической» кривой (см. рис. 5), $n = F_R / F_Z \approx 10$. В практике расчетов полуэллиптическая форма ванны расплава устанавливается довольно быстро и соотношение (4.16) используется без проверки формы, а только габаритов области ТЖ. Оценка чисел $\mathrm{Nu}(\mathrm{Ra})$ в численном расчете делается по формулам (4.9) и (4.12) с фиксированными показателями степени, но с корректируемыми множителями степенных функций.

Корректировка множителей ζ_R, ζ_Z в процессе расчета производится на основе анализа получающегося распределения температуры в ванне расплава. Проверяется перегрев расплава относительно температуры ликвидуса, который должен быть близок к величине, устанавливаемой из соотношения

$$\Delta T \sim \frac{QR}{\lambda S_{\mathrm{dn}} \mathrm{Nu}_{\mathrm{dn}}}, \tag{4.17}$$

где S_{dn} — площадь боковой поверхности корпуса до уровня расплава; $\mathrm{Nu}_{\mathrm{dn}}$ — величина (4.9); Q — полная мощность остаточного тепловыделения в расплаве; R — радиус корпуса; λ — эффективная теплопроводность расплава. Соотношение (4.17) следует из баланса энергии в стационарном состоянии и предположения, что большая часть генерируемого тепла уходит через боковую границу:

$$Q \sim \lambda \Delta T / R \mathrm{Nu}_{\mathrm{dn}} S_{\mathrm{dn}}.$$

Например, положив $S_{\mathrm{dn}} = 20$ м^2, $\lambda = 10$ Вт/мК, $\mathrm{Nu} = 500$, $R = 2$ м, $Q = 20$ МВт, получим $\Delta T = 200\ \mathrm{K}$. При наличии расслоения S_{dn} — площадь всей границы слоя оксидов. Контроль перегрева, отвечающий соотношению (4.17), осуществляется только для оксидного расплава, что при наличии расслоения означает: только для нижней подобласти, содержащей оксиды.

4.4.3. Эффективная теплопроводность при наличии расслоения

При возникновении расслоения каждая из возникших подобластей — область расплава стали (без тепловыделения) и область тепловыделяющих оксидов — описывается своим набором эффективных коэффициентов теплопроводности, вычисляемых, исходя из предполагаемого режима конвекции в подобласти, как указывалось выше. За счет растворения тепловыделяющих веществ мощность источников в стальном слое может оказаться ненулевой. Поскольку, однако, величина этой мощности, по оценкам, не превышает 10% полной мощности в НКС, описанные действия не зависят от наличия тепловыделения в стали. По сути стальной слой представляет собой тепловое сопротивление на пути тепла от тепловыделяющего расплава вверх, имеющее конечные размеры в двух направлениях. В численной модели ставятся цели: во-первых, обеспечить в квазистационарном состоянии прохождение через стальной слой определенной доли мощности ТЖ, находящейся ниже, во-вторых, обеспечить распределение этой мощности по границам стального слоя — верхней и боковой. Первый из названных пунктов контролируется в расчете критерием, а второй — только температурой поверхности стали, отдающей излучение; сам поток излучения при вычислениях не регулируется.

Баланс распределения потока тепла на границе тепловыделяющей подобласти оксидов в стационарном состоянии соответствует притоку через верхнюю границу в расплав стали 30—40% тепла [14]. Полный поток тепла через границу ТЖ — расплава оксидов равен сумме потоков через верхнюю границу и через корпус:

$$Q = Q_{\text{up}} + Q_{\text{down}},$$

где должно быть $Q_{up}/Q < \eta$, $\eta = 0,3 — 0,4$. Если сталь очень горячая, то Q_{up}/Q может быть ниже 30%. В соответствии с этим контроль баланса распределения потока тепла на границе ТЖ осуществляется следующим образом: при $Q_{\text{up}}/Q \le \eta$ ничего не делается, а при $Q_{\text{up}}/Q > \eta$ эффективные коэффициенты теплопроводности в стальном слое уменьшаются, чтобы увеличить тепловое сопротивление. Отметим, что в расчетах ТА доля тепловыделения ТЖ, идущая в сталь, в начале плавления стенки корпуса часто меньше 30%, поскольку при введении расслоения сталь оказывается вверху с высокой температурой и остывает до квазистационарной температуры, отдавая тепло стенке корпуса и расплавляя ее.

В модели с ортотропной теплопроводностью для бенаровской конвекции числа Рэлея и Нуссельта берутся свои для каждого из двух направлений

осей и вычисляются через габарит области расплава стали в этом направлении. При вычислении теплопередачи по вертикали и по горизонтали используемые значения размеров и температур таковы.

А. Теплопередача по вертикали. В качестве характерного размера берется толщина слоя стали Δz. В качестве перепада температуры в вычислениях берется $\Delta T = \max\left(T\left(\text{down}, R\right) - T\left(\text{up}, R\right)\right)$, где $T\left(\text{down}, R\right)$ — температура на нижней границе стали. Величины $T\left(\text{down}, R\right)$ и $T\left(\text{up}, R\right)$ вычисляются отдельно для каждого радиуса R в элементах стали, и определяется максимум вычисленных таким образом разностей для всех радиусов в области стали.

Б. Теплопередача по горизонтали. В качестве характерного размера в численной модели берется размер стального слоя по горизонтали, а не толщина слоя стали, как в аналитических моделях. В качестве перепада температуры в вычислениях берется $\Delta T = T\left(\text{up}\right) - T$, где T — температура стенки (плавления стали), а $T\left(\text{up}\right)$ — максимальная температура на поверхности стали. Такое определение ΔT выбрано потому, что максимальная температура в слое стали имеет порядок температуры расплава кориума и перепад ΔT оказывается всегда очень большим. Если слой стали достаточно толстый, коэффициент в корреляции (4.8) может в численном расчете быть в несколько раз меньше.

4.4.4. Свойства материала расплава

Теплофизические величины вычисляются усреднением, как описано выше. Вязкость и КТР по величине находятся в пределах (0,2—2)·10^{-5} (СИ) и, поскольку входят в формулы (4.8)—(4.9) в степени ~1/3, слабо влияют на теплоперенос. В расчете они берутся постоянными:

$$\nu = 0{,}5 \cdot 10^{-6}\ \text{м/с},\ \beta = 2 \cdot 10^{-5}\ \text{K}^{-1}.$$

При необходимости эти величины несложно сделать температурозависимыми.

4.4.5. Переходный режим, корки и переходные зоны

Инициализация режима конвекции, в котором используется эффективная теплопроводность конвекции, привязана к усредненной температуре плавления $T_{\text{ПЛ}}$ ликвидуса материала расплава — если максимальная температура в области превышает $T_{\text{ПЛ}}$, то вызывается процедура определения эффективной теплопроводности.

Увеличение теплопроводности в элементе до эффективного значения происходит на некотором интервале температуры $\left[T_{CN}, T_{CN} + \mathrm{T}_1\right]$ (рис. 6) и на интервале времени $\left[\tau_{CN}, \tau_{CN} + \tau_1\right]$. Имеются два параметра-декремента τ_1 и T_1, фигурирующие в законе постепенного нарастания эффективной теплопроводности в каждом из двух направлений ζ_k :

$$\varsigma_k^*(T,t) = \varsigma_k^{\frac{T-T_{CN}}{\mathrm{T}_1}} \frac{t - t_{CN}}{\tau_1}, \quad k = R, Z. \tag{4.18}$$

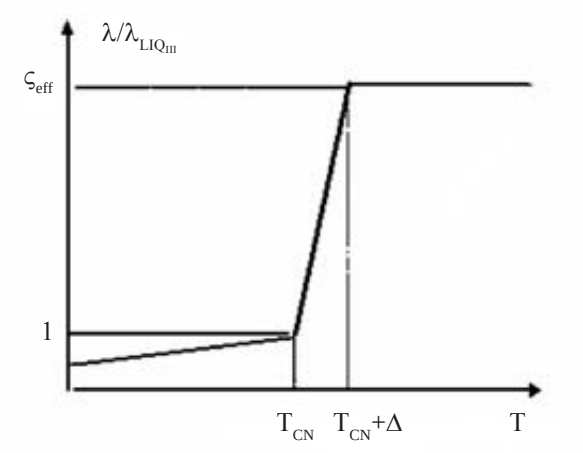


Рис. 6. Эффективный множитель для теплопроводности в зависимости от температуры

Здесь τ_1 и T_1 — константы, вводимые при вводе. По умолчанию принимается $\tau_1 = 20c$, $T_1 = 20^\circ K$. При $\tau_1, T_1 < 100$ их влияние на расчет относительно мало. Граничная температура T_{CN}, начиная с которой эффективная теплопроводность может стать больше молекулярной, равна средней температуре расплава (4.4). Она может быть задана при вводе данных и тогда независимо от соотношения (4.4) будет постоянной. Это же относится к вычисляемым коэффициентам ζ_k (4.16). Время t_{CN}, начиная с которого разрешено введение эффективной теплопроводности, читается из входного файла, а по умолчанию равно времени начала расчета этапа.

При увеличении размеров области расплава теплообмен в нем интенсифицируется, что учитывается возрастанием числа Рэлея. Зона расплава отличается от зоны нерасплавленного материала только теплопроводностью. Если, например, верхняя граница расплава (или граница его контакта со сталью) находится при температуре ниже ликвидуса, теплопроводность там

будет близка к номинальной. Переход к режиму с конвекцией, т. е. с повышенной теплопроводностью, определяется местной температурой. В этом смысле учет образования корок происходит автоматически — как переходной зоны от расплава к твердой границе.

5. Экспериментальная проверка модели конвекции в расплаве

Для проверки модели конвективной теплоотдачи были взяты эксперименты с расплавами солей, проведенные в Российском научном центре «Курчатовский институт» в рамках программы «Расплав». Экспериментальная установка представляет собой охлаждаемую ванну с расплавом соли, имеющую slice-геометрию [15].

5.1. Описание эксперимента

В качестве материала расплава служила бинарная смесь солей NaF и $NaBF_4$. Эта смесь при составе 8% NaF, 92% $NaBF_4$ представляет собой эвтектику с температурой плавления $384\ \mathrm{K}$. Эта же смесь использовалась в экспериментах по исследованию теплопередачи с формированием корки.

Моделирование объемного нагрева в эксперименте осуществлялось двумя способами: пропусканием электрического тока через расплав и подводом тепла через торцевые стенки. В расчетах ввод мощности моделировался равномерно распределенным объемным источником тепла. Расчеты проводились для двух режимов, отличающихся эффективным тепловыделением и температурой наружного охлаждения.

Ванна для расплава имела полуцилиндрическое дно, продолженное вверх параллельными плоскостями (рис. 7). На торцах камера закрыта плоскими параллельными стенками. Через эти стенки осуществлялся подвод тепла к расплаву, а днище, имеющее полуцилиндрическую форму, охлаждалось. Внутренний радиус полуцилиндрического днища составляет 200 мм, его толщина — 20 мм, материал — сталь. Ширина ванны (расстояние между торцевыми стенками) было равно 167 мм в опытах с прямым направлением тока (direct electric heating — DEH) и 124 мм в экспериментах с боковым нагревом (side wall heating — SWH).

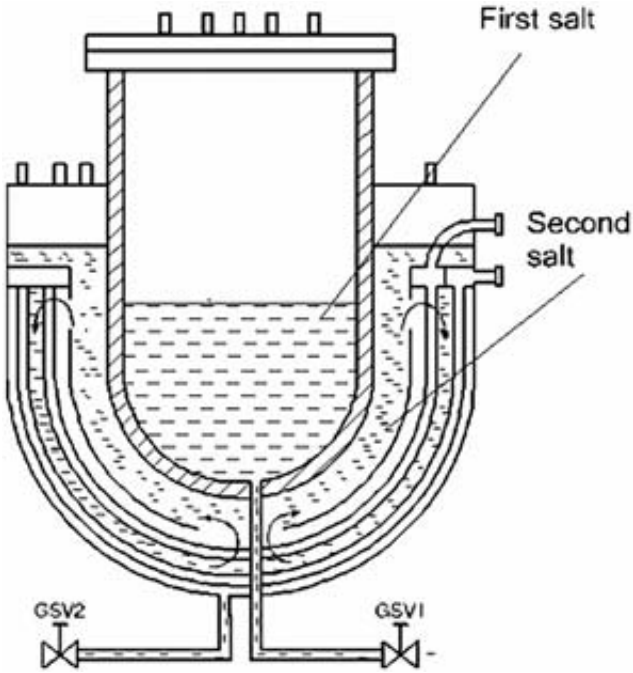


Рис. 7. Схема экспериментальной установки

Охлаждение стальной цилиндрической стенки осуществлялось за счет циркуляции расплавленной соли ($NaNO_2$ — $NaNO_3$ — KNO_3) вдоль внешней поверхности стенки. Верхняя граница расплава находилась практически в адиабатических условиях. Потери энергии через верхнюю границу (включая радиационный поток) в большинстве режимов по оценкам не превышали 15% полной вводимой мощности.

5.2. Численная модель

Расчет проводился в двумерной плоской геометрии: протяженность в направлении, перпендикулярном боковым плоскостям установки, была бесконечной. Расчетная область включает стальной сосуд, расплав соли и слой газа (фонового материала), находящегося над расплавом (рис. 8). Характеристики газа приближенно отвечали условиям теплоотдачи к верхней границе [10]. Свойства материалов и параметры эксперимента приведены в табл. 1 и 2.

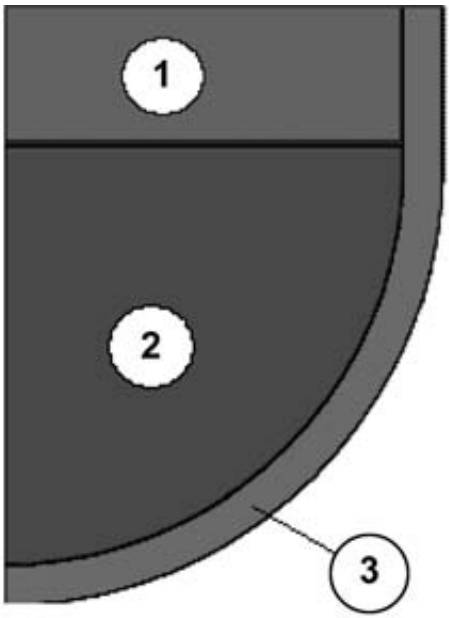


Рис. 8. Расчетная область

Таблица 1. Исходные данные для экспериментов

Режим	Способ нагрева	Hp, мм	Q, Вт/м^3	Tp, °C	Tcool, °C	Ra	Nu	Корка
43	DEH	208,4	$1{,}66 \cdot 10^5$	510,8	383,5	$6{,}73 \cdot 10^{12}$	126,6	Нет
44	DEH	204,7	$1{,}43 \cdot 10^5$	448,9	319,5	$3{,}62 \cdot 10^{12}$	100,5	Да
29	SWH	213,4	$2{,}54 \cdot 10^5$	545,5	395	$1{,}61 \cdot 10^{13}$	163,1	Нет

Таблица 2. Параметры соли в ванне

Параметр	T = 400°C	T = 600°C
Температура плавления Tm, °C	384	
Плотность жидкой фазы ρ, кг/м^3	1968	1825
Теплоемкость Cp, Дж/(кг·K)	1507	1507

Табл. 2 (продолжение)

Параметр	T = 400°C	T = 600°C
Теплопроводность κ, Вт/(м·К)	0,45	0,398
Коэффициент расширения β, $К^{-1}$	$3{,}61\cdot10^{-4}$	$3{,}90\cdot10^{-4}$
Кинематическая вязкость ν, $м^2/с$	$1{,}25\cdot10^{-6}$	$6{,}25\cdot10^{-7}$
Температуропроводность χ, $м^2/с$	$1{,}52\cdot10^{-7}$	$1{,}45\cdot10^{-7}$

Условия на границах расчетной области — конвективного типа (3.6):

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial n} = H(x)\left(T - T_{\text{cool}}\right),$$

где в случае наружной охлаждаемой границы T_{cool} — температура охлаждающей соли (см. табл. 2); $H(x)$ — коэффициент теплоотдачи, который в эксперименте был неоднороден. Угловая зависимость коэффициента теплоотдачи приведена на рис. 9. В случае верхней границы расчетной области (на верхней границе фонового материала) коэффициент теплоотдачи $H(x) = 10$ Вт/($м^2$К) [10], а температура $T_{\text{cool}} = 300\ \text{K}$.

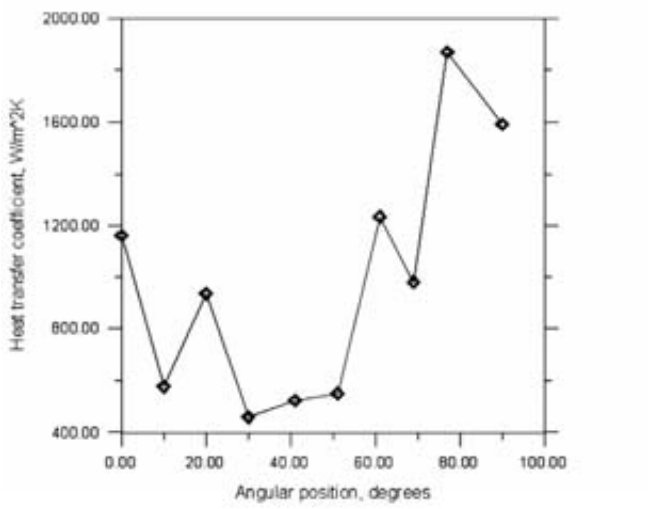


Рис. 9. Коэффициент теплоотдачи на внешней границе сосуда, полученный в эксперименте (режим 43)

Коэффициент теплоотдачи на охлаждаемой границе в эксперименте специально не измерялся, а был получен на основании измеренного перепада

температур по толщине стальной стенки (см. рис. 9). Измеренные значения $H(x)$ обладают большим разбросом, и в расчете использовалось усредненное угловое распределение (рис. 10). По этой причине моделирование охлаждения проводилось двумя способами:

- с использованием экспериментально полученного коэффициента теплоотдачи;
- с использованием экспериментально полученного распределения температуры наружной стенки, а коэффициент теплоотдачи брался «бесконечным».

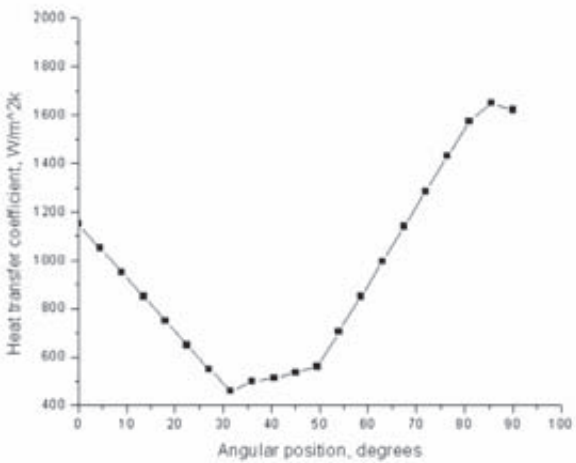


Рис. 10. Коэффициент теплоотдачи на внешней границе, используемый в расчете (режим 43)

Результаты для обоих способов оказались близкими.

Эффективная теплопроводность расплава бралась в соответствии с соотношением (4.16). Число Нуссельта, характеризующее теплоотдачу в стенку, для моделируемых экспериментов приведено в табл. 1. Вычисления прекращались при установлении стационарного режима.

5.3. Результаты расчетов

На рис. 11—13 приведены распределения температуры вдоль границ стальной стенки в зависимости от угла наклона нормали к границе, полученные расчетным путем, и экспериментальные данные. Угол отсчитывается от нижней вертикальной оси. Для режима 29 внешнее охлаждение вводилось только через температуру внешней границы стенки, как указывалось выше.

Во всех вариантах в диапазоне углов 0—85° совпадение расчета и эксперимента хорошее.

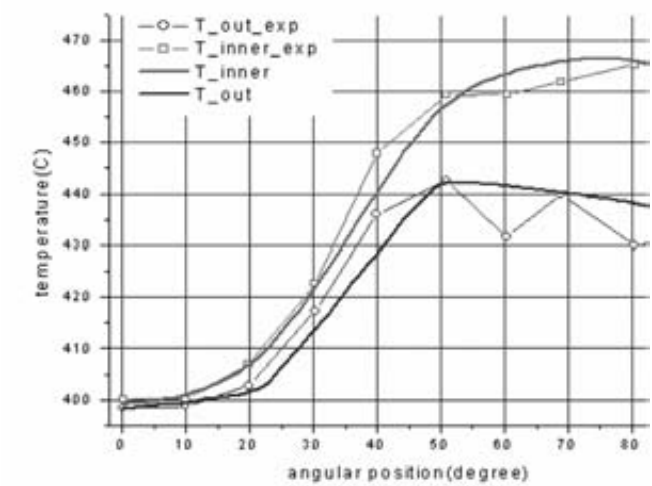


Рис. 11. Температура на границах стали: T_{out}, T_{inner} — на внешней и внутренней — расчетные; T_{out_exp}, T_{inner_exp} — на внешней и внутренней — экспериментальные

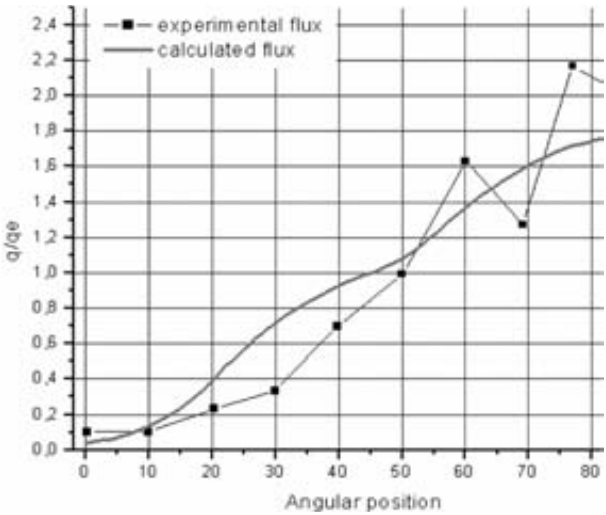


Рис. 12. Распределение потока из расплава в стенку (нормировка на полный интеграл) для режима

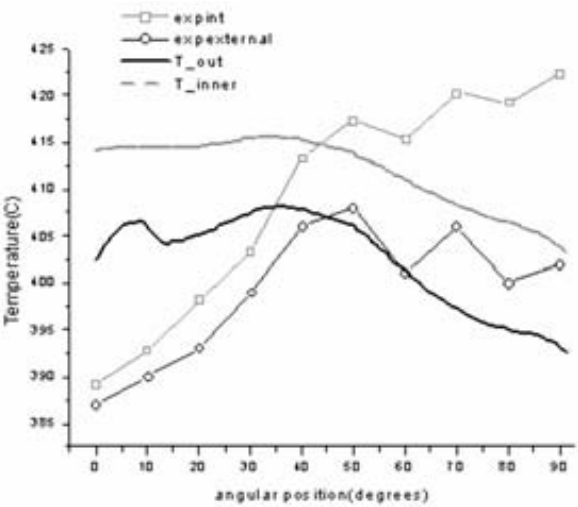


Рис. 13. Расчет с изотропным коэффициентом теплопроводности (режим 43): жирная линия — температура вне корпуса, тонкая — внутри корпуса; сплошные линии — расчет, линии с маркерами — эксперимент

Расхождение, наблюдаемое вблизи угла 90°, вызвано следующей причиной. Теплоотдача из правого верхнего угла расплава выше, чем по боковой стенке, и здесь на малом участке границы расплава образуется корка с низкой теплопроводностью, мешающая прогреву стали в этом месте. Увеличить поток тепла средствами модели с эффективной теплопроводностью не удается. Однако угловой интервал отклонения невелик, а величины максимума температуры и потока тепла отвечают экспериментально измеренным.

Влияние фактора $\lambda_{:}/\lambda_{O}$, т. е. степени анизотропии эффективного коэффициента теплопроводности, можно видеть на рис. 5.7, где приведены результаты расчета, в котором коэффициент был изотропен: отношение $\lambda_{:}/\lambda_{O}$ бралось равным 1 вместо 10.

6. Заключение

Изложены постановка задачи, численный метод решения и основные численные модели методики HEFEST, позволяющей рассчитывать процессы разогрева и теплового разрушения в нижней части реактора при тяжелой аварии, начиная от поступления материала до разрушения корпуса и вытекания расплава.

Проведена проверка модели конвекции в тепловыделяющей жидкости с использованием анизотропного эффективного коэффициента теплопроводности. Для всех рассмотренных экспериментов по конвекции получено хорошее согласие с расчетом по распределению температуры и потока на боковой границе расплава.

К достоинствам представленной модели конвективного теплообмена можно отнести наглядность, простоту реализации, хорошее согласие с экспериментами. Как показывают проведенные тестовые расчеты, модель может быть использована в расчетах распространения фронта плавления в однородном тепловыделяющем материале. Для более точного задания потока тепла на границе расплава разрабатывается новая процедура.

Литература

1. *Hughes T. J. R.* The Finite Element Method. — New Jersey, 1987.

2. *Митчелл Э., Уэйт Р.* Метод конечных элементов для уравнений с частными производными. — М.: Мир, 1981.

3. *Зенкевич О.* Метод конечных элементов в технике. — М.: Мир, 1975.

4. *Дэннис Дж. мл., Шнабель Р.* Численные методы безусловной оптимизации и решения нелинейных систем уравнений. — М.: Мир, 1987.

5. *Мучник Г. Ф., Рубашов И. Б.* Методы теории теплообмена: Тепловое излучение. — М., 1974.

6. *Voller V. R., Swaminathan C. R.* Fixed grid techniques for phase change problems: a review // Intern. J. numer. methods eng. — 1990. — Vol. 20. — P. 875—898.

7. *Самарский А. А. Моисеенко Б. Д.* Экономичная схема сквозного счета для многомерной задачи Стефана // ЖВММФ. — 1965. — Vol. 5, № 5. — С. 816—827.

8. *Большов Л. А., Кондратенко П. С., Стрижов В. Ф.* Свободная конвекция тепловыделяющей жидкости // УФН. — 2001. — Vol. 171, № 10. — С. 1051—1070.

9. *Asmolov V., Abalin S., Surenkov A.* et al. Results of Salt Experiments Performed During Phase I of RASPLAV Project. RP-TR-33 / Russian Research Center “KURCHATOV INSTITUTE”. — Moscow, 1998.

10. *Кутателадзе С. С.* Теплопередача и гидродинамическое сопротивление: Справочное пособие. — М., 1990.

11. Tran C. T., Dinh T. N. Analysis of Melt Pool Heat Transfer in a BWR Lower Head // Transaction, ANS Winter Meeting, Albuquerque, NM, USA, Nov. 12—16, 2006.

12. Dombrovskii L. A., Zaichik L. I., Zeigarnik Yu. A. Numerical Simulation of The Stratified-Corium Temperature Field and Melting of The Reactor Vessel for A Severe Accident in A Nuclear Power Station // *Thermal Engineering.* — 1998. — Vol. 45, № 9. — P. 755—765.

13. SCDAP/RELAP5/MOD3.2 Code Manual. — Vol. 2: Damage Progression Model. Theory. — 7: Two-Dimensional Debris and Surrounding Structures Model. — [S. l.], 1996.

14. Theofanous T. G., Liu C., Additon S. et al. In-Vessel Coolability and Retention of a Core Melt // Nuclear Eng. & Design. — 1997. — Vol. 169. — P. 1—48.

15. Semenov V. N., Kasyanov S. Yu., Kisselev A. E. Results of Assessment of SCDAP/RELAP Mod3.2 against RASPLAV corium and salt tests / Russian Academy of Sciences Nuclear Safety Institute. — Moscow, 1999.

Приложение. Учет граничных условий излучения в полости

Алгоритм модели теплообмена излучением основан на зональном методе [5]. Пусть имеем замкнутую или незамкнутую полость, граничная поверхность которой разбита на N площадок. Для постановки граничных условий теплообмена излучением между ними надо найти выражение для потока лучистой энергии на каждый из N элементов поверхности. Рассматривается непрозрачное серое тело, у которого коэффициент поглощения не зависит от длины волны. Баланс энергии излучения на j -й площадке складывается из испущенного и поглощенного излучения. Поток энергии внутрь j -й площадки

$$q_j = \varepsilon_j \sigma_0 T_j^4 - \alpha_j I_j, \qquad (П.1)$$

где T_j — температура j -й площадки; I_j — суммарный поток излучения от остальных площадок; α_j — коэффициент поглощения; ε_j — испускательная способность. В условиях термодинамического равновесия $\varepsilon_j = \alpha_j$.

Эффективное излучение с единицы площади i -й площадки

$$R_i = \varepsilon_i \sigma_0 T_i^4 + \rho_i I_i, \qquad (П.2)$$

где ρ_i — коэффициент отражения. На j-й элемент попадает от i-го элемента площадью S_i поток $S_i f_{ij} R_i$, где f_{ij} — угловой коэффициент излучения от i-й на j-ю площадку. Из соотношения взаимности $S_i f_{ij} = S_j f_{ji}$ имеем $S_i f_{ij} R_i = S_j f_{ji} R_i$, что на единицу площади j-й поверхности дает $f_{ji} R_i$. Суммарный поток от всех площадок на единицу площади одной площадки номер j

$$I_j = \sum_{i=1}^{N} f_{ji} R_i. \qquad (П.3)$$

Переобозначая индексы $i \leftrightarrow j$ и подставляя это выражение в (П.2) с учетом того, что для непрозрачного тела $\varepsilon_i + \rho_i = 1$, получаем для площадки номер i

$$I_i = \sum_{j=1}^{N} f_{ij} R_j, \quad R_i = \varepsilon_i \sigma_0 T_i^4 + (1-\varepsilon_i) \sum_{j=1}^{N} f_{ij} R_j. \qquad (П.4)$$

В (П.4) имеется N уравнений с N неизвестными R_i. В матричном виде

$$[\mathrm{A}]\{\mathrm{R}\} = \{\Theta\},$$

где

$$[\mathrm{A}] = \|a_{ij}\|, \quad a_{ij} = \frac{\delta_{ij} - (1-\varepsilon_i) f_{ij}}{\varepsilon_i}, \quad \theta_i = \sigma_0 T_i^4.$$

Обращая матрицу $[\mathrm{A}]$, получаем эффективное излучение на каждой площадке, затем вычисляем согласно (П.2) величины I_j и затем из (П.1) — поток лучистой энергии на каждой площадке.

Параметры граничных условий переизлучения берутся независящими от времени и температуры, поэтому коэффициенты матрицы $[\mathrm{A}]$ постоянны, и ее обращение делается один раз в начале решения. В дальнейшем решение системы получается просто умножением на обратную матрицу. Чтобы быть включенным в граничные условия (3.3), выражение для потока (П.1) линеаризуется: член с T^4 раскладывается в ряд около точки $T = T_{0i}$, температуры на предыдущей итерации:

$$T^4 = T_{0i}^4 + 4T_{0i}^3\left(T_i - T_{0i}\right) = 4T_{0i}^3 - 3T_{0i}^4.$$

В результате получаем коэффициенты для граничного условия третьего рода, связывающего поток и температуру, с которым обращаемся так, как описано выше для общей МКЭ-модели:

$$q_j = 4\varepsilon_j \sigma T_{0j}^3 T_j - 3T_{0j}^4 + \varepsilon_j I_j.$$

IV. HEFEST: модели теплообмена с паром и перемещения материалов в НКС реактора ВВЭР при тяжелой аварии

А. Е. Киселев, В. Н. Семенов, В. Ф. Стрижов, А. С. Филиппов, А. Л. Фокин

1. Введение

В настоящей работе заканчивается описание моделей и алгоритмов программы HEFEST — модуля системного кода СОКРАТ [1]. HEFEST предназначен для расчета теплопереноса и специализирован для численного моделирования процессов в нижней части водо-водяного энергетического реактора (ВВЭР) при тяжелой аварии с расплавлением активной зоны [2]. Расчетная область включает в себя нижнюю часть корпуса ВВЭР и внутрикорпусные конструкции, входящие в нижнюю камеру смешения (НКС) и простирающиеся до уровня опорно-дистанционирующей решетки (ОДР) активной зоны (АЗ). Описана общая организация процесса расчета тяжелой аварии (ТА), вопросы обоснования принимаемых предположений и две группы численных моделей:

- модели процессов, связанных с изменением конфигурации материалов: поступление новых материалов из АЗ, пространственное расслоение, тепловая эрозия корпуса после его разрушения и постепенное удаление расплава из разрушенного корпуса;
- модели пограничного теплового взаимодействия с внешними относительно НКС и переменными во времени объектами: теплоносителем и полостью с тепловым излучением.

2. Обозначения

АЗ — активная зона

ВВЭР — водо-водяной энергетический реактор

ДШ — днище подвесной шахты

КЭ — конечный элемент

МКЭ — метод конечных элементов

НДС — напряженно-деформированное состояние

НКС — нижняя камера смешения

ОДР — опорно-дистанционирующая решетка
ПШ — подвесная шахта
ТА — тяжелая авария
ТЖ — тепловыделяющая жидкость

3. Организация расчета процессов в НКС

Моделируемые конструкции представлены на рис. 1. Все последующие рассуждения относятся к системе координат этого рисунка. Процессы, которые моделируются программой HEFEST, отвечают области нижней части реактора до уровня ОДР. Расчетная область простирается выше, поскольку на позднейших стадиях уровень материала, поступающего из АЗ, может оказаться выше ОДР. Область НКС содержит ПШ и стальные конструкции внутри нее (опорные трубы с просверленными отверстиями). После разрушения ПШ под областью, отвечающей НКС, может пониматься вся область нижней части реактора.

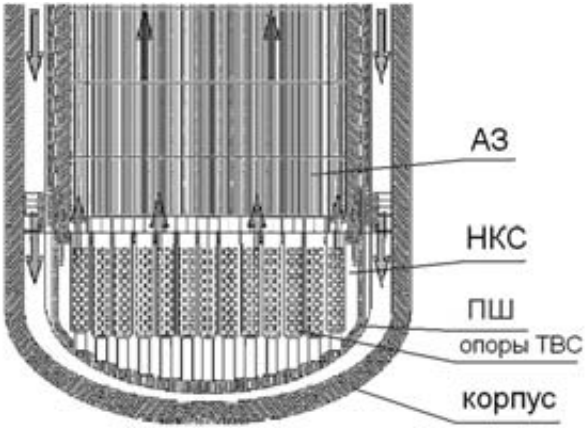


Рис. 1. АЗ, ОДР, НКС и нижняя часть корпуса реактора с днищем (далее — «корпус») в системе координат задачи. Стрелками показано движение теплоносителя при нормальной работе реактора

Последовательность событий в НКС при развитии ТА ВВЭР в соответствии с принятым сценарием [3] отвечает следующим периодам и переходным процессам.

- Период от начального состояния в момент аварийного останова до поступления материала из АЗ. При сбрасывании давления в корпусе темпе-

ратура кипения воды понижается. Корпус, нагретый в рабочем режиме примерно до 600 К, остывает примерно до 400 К, отдавая тепло воде.

- Период от начала поступления материала АЗ в НКС до разрушения стенок ПШ. Поступающий материал выпаривает воду в НКС, разогревается, плавится и плавит стальные конструкции НКС до проплавления стенки корзины шахты. Конфигурация материала в НКС меняется постепенно.
- Процесс разрушения ПШ и перемещения расплава в корпус. В этот момент конфигурация в НКС резко меняется — расплав частично вытекает и заполняет пространство между ПШ и корпусом.
- При плавлении большей части тугоплавких оксидов происходит расслоение расплава на несмешивающиеся жидкости, одна из которых состоит преимущественно из оксидов и свободного циркония, другая — преимущественно из стали, возможно с добавкой циркония. Предполагается, что расплав стали легче и находится вверху. Расслоение возможно как при плавлении внутри ПШ, так и после частичного вытекания расплава в пространство между корпусом и ПШ.
- Период от поступления расплава в корпус до разрушения корпуса — постепенное его проплавление.
- Процесс разрушения корпуса и быстрого удаления расплава, находящегося выше места разрушения.
- Период относительно медленной тепловой эрозии корпуса и вытекание расплава.

Разрушение внутрикорпусных конструкций (и самого корпуса) сопровождается перемещениями массы фрагментов АЗ, в значительной степени расплавленной. При этом предполагается, что процессы разрушения и сопровождающие их перемещения массы должны протекать «катастрофически», т. е. внезапно начинаться и быстро завершаться, что можно охарактеризовать как переход от одной устойчивой конфигурации к другой. Непосредственное моделирование подобных перемещений в HEFEST'е не производится, а изменение геометрии вводится в расчет путем пересчета распределения материалов от предыдущего состояния к новому. Введение нового пространственного распределения материалов в программе осуществляется двумя основными способами — изменением свойств материалов в элементах без изменения КЭ-разбиения и путем ввода нового КЭ-разбиения и остальных данных, т. е. фактически путем перехода к расчету новой задачи. Перерасчет пространственного распределения температуры осуществляется с учетом требования сохранения энтальпии в области перемещения. Рассмотрим организацию сквозного расчета, состоящего из преемственной последовательности отдельных расчетов. Изменение конфигурации путем перезадания свойств материалов рассмотрено ниже.

3.1. Преемственная последовательность задач

При численном моделировании методом конечных элементов увеличение пространственного разрешения улучшает точность представления и (обычно) сходимость приближенного решения. С другой стороны, увеличение числа узлов в n раз приводит к увеличению времени расчета примерно в n^2 раз и при построении сетки более подробное пространственное разрешение имеет смысл применять только для существенных на текущем этапе объектов-подобластей. При расчете на каждом этапе возможно использование своего КЭ-разбиения, построенного под предполагаемую конфигурацию материалов и конструкций НКС. Для проведения расчета сквозным образом предусмотрено автоматическое прекращение очередного вычислительного процесса, когда в задаче физически достигнута определенная конечная стадия и запуск задачи следующего этапа с передачей необходимых данных из предыдущего процесса. При гипотетической аварии без повторного залива эти задачи-этапы, отвечающие перечисленным выше событиям-периодам в нижней части корпуса, таковы:

- тепловое разрушение ПШ;
- разогрев и тепловое разрушение корпуса;
- деформация и механическое разрушение корпуса (при необходимости его учета).

Очередность, результат, читаемые и передаваемые от этапа к этапу данные следующие.

- Расчет процессов в ПШ длится до момента достижения температуры на ее наружной стенке критического значения, что интерпретируется как тепловое разрушение. Входные данные — файл ввода теплофизического модуля HEFEST. Передаваемые на следующий расчетный этап данные предыдущего расчета — температура во всех узлах на момент разрушения.
- Расчет процессов в корпусе с расплавом длится до момента достижения температурой на наружной стенке критического значения, что интерпретируется как тепловое разрушение. Входные данные — файл ввода HEFEST и массив температуры в ПШ в момент ее разрушения, которые служат начальными для части КЭ. Задание перемещения горячего материала производится фиксированным образом, путем некоторого геометрического преобразования (см. ниже). Используемые в дальнейшем расчете данные — температура в узлах корпуса для ряда последовательных моментов времени.
- Расчет НДС в корпусе (при необходимости). Входные данные — файл ввода кода NKD и файл с температурами всех узлов, выдаваемый программой HEFEST с необходимой частотой.

3.2. Порядок следования вычислений в расчетном цикле HEFEST

Такт работы комплекса СОКРАТ с точки зрения HEFEST'а состоит в следующем (рис. 2): из РАТЕГа на каждом его шаге по времени вызывается HEFEST и в зависимости от состояния процесса вычисления в HEFEST'е идут по одному из следующих путей:

- чтение основного файла ввода HEFEST'а (начало очередной стадии) и шаг расчета (с возвратом в РАТЕГ);
- шаг расчета HEFEST'а (с возвратом в РАТЕГ);
- возврат в РАТЕГ без выполнения полного шага расчета;
- шаг расчета HEFEST'а с возвратом в РАТЕГ, и если произошло разрушение и текущая стадия завершилась, то при следующем шаге HEFEST'а — чтение основного файла ввода и начало следующей стадии.

Основным файлом ввода может быть файл программы HEFEST или файл программы NKD в зависимости от моделируемого процесса.

Все основные вычисления и вызовы процедур расчета теплофизических процессов и вывода результатов сосредоточены в подпрограмме POLYRUN. Организация взаимодействия моделей программы привязана к расчетному циклу — последовательности действий на шаге по времени программы HEFEST. Кратко перечислим основные этапы вычисления при работе теплофизического модуля HEFEST, чтобы показать место и очередность работы описываемых процедур — моделей программы.

- При первом вызове POLYRUN на данном этапе расчета процессов в НКС (нулевом или первом согласно текущей номенклатуре) происходит инициализация, т. е. вычисление и присвоение начальных значений ряду переменных задачи. В дальнейшем этот участок обходится вплоть до начала следующего этапа.
- Проверяется поступление материала из А3, передаваемое из пакета СВЕЧА. Поступающие массы и энтальпии $\Delta m_i, \Delta h_i$ суммируются по сортам (для UO_2, ZrO_2, Zr, стали и, возможно, других материалов):
  - ♦ $\Delta m_i \to \Delta m_i + \delta m_i$;

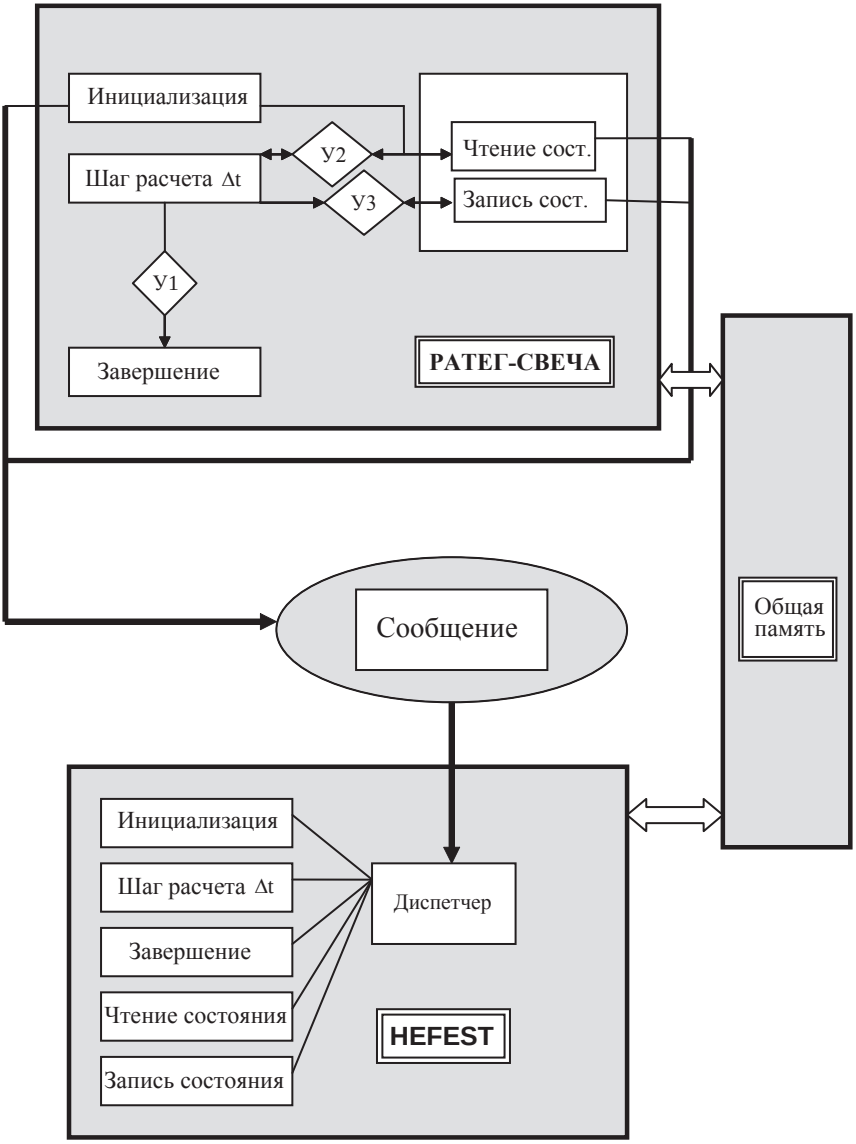


Рис. 2. Цикл вызова HEFEST'а из РАТЕГа

♦ $\Delta h_i \to \Delta h_i + \delta h_i$, $i = 1, 2, 3, 4$ для UO_2, ZrO_2, Zr, стали, где δm_i, δh_i — поступление при очередном вызове HEFEST'а (с шагом РАТЕГ); Δm_i, Δh_i — суммарные массы и энтальпии, поступившие на временном шаге HEFEST'а. Проверяется условие синхронизации с РАТЕГом: если оказывается, что дискретное время РАТЕГа не достигло следующего значения на временной сетке HEFEST'а, т. е. $t_{\mathrm{RAT}} < t_n + \Delta t_n$, где Δt_n — планируемый шаг по времени HEFEST'а, то работа POLYRUN на этом шаге РАТЕГа заканчивается и происходит возврат в вызывающую подпрограмму, если достигло, то задается текущее значение шага по времени HEFEST'а $\Delta t_n = t_{\mathrm{RAT}} - t_n$ и начинается основной цикл вычислений. Типичный шаг РАТЕГа — менее 0,01 с, шаг HEFEST'а — 1 с и более.

- Вызывается процедура INFILL, в которой происходит «усвоение» масс и энтальпий по сортам $\{\Delta m_i\}$, $\{\Delta h_i\}$ из АЗ, накопленных с момента предыдущего расчетного шага HEFEST (см. ниже). Определяются новые значения свойств во вновь заполненных элементах и новые температуры в них. Определяются новые площадки приложения граничных условий, отвечающих за теплообмен с АЗ. Определяются новые значения последних на границах, взаимодействующих с пакетом СВЕЧА. С этими новыми начальными данными переходим к вычислению значения температуры и других величин для следующего момента времени $t_{n+1} = t_n + \Delta t_n$.
- Вычисление температуры включает в себя определение новых значений коэффициентов основной системы уравнений МКЭ и решение этой системы с помощью итерационной процедуры [2]. Если сходимость не достигается, шаг по времени дробится и вычисления воспроизводятся с новым шагом в пределах отрезка $[t_n, t_{n+1}]$. После успешного завершения итераций производится обновление температур в узлах, вычисление энтальпии, потоков в узлах и на границах, балансных величин, критериев и др.
- При достижении максимальной температурой на сетке некоторого критериального значения $T_{\max} > T_{bn}$ вызывается процедура NEWP: «плавление-перемешивание» [2]. В ней происходит проверка элементов на переход в расплав и определяются усредненные характеристики расплава.
- При выполнении условий стратификации $T_{\max} > T_{\mathrm{strat}}$ происходит определение положения границы слоев, перезадание состава, плотности и других величин в образовавшихся слоях (см. ниже).
- При выполнении условий возникновения конвекции $T_{\max} > T_{\mathrm{conv}}$ вызывается процедура, в которой оцениваются размеры области расплава и вычисляются множители эффективной теплопроводности [2].

- При выполнении критерия по времени расчета или температурного критерия разрушения расчет текущего этапа, т. е. этапа с данной конфигурацией, прекращается, и при следующем вызове HEFEST'а расчет идет с новой конфигурацией. Она берется из нового файла ввода (при переходе от расчета ПШ к расчету корпуса) или формируется путем перезадания параметров на текущей расчетной сетке (при расчете эволюции расплава в корпусе после его разрушения).
- При наличии опции расчета НДС на каждом шаге запрашивается значение давления в корпусе и происходит вызов программы HEFEST-M.
- Выход в вызывающую подпрограмму и в РАТЕГ.

4. Тепловое взаимодействие конструкций с теплоносителем

Теплоносителем при разрушении АЗ ВВЭР может быть вода или пар. Состояние теплоносителя определяется в РАТЕГе, и роль HEFEST'а — вычислить, какое количество тепла уходит в теплоноситель на шаге по времени из материала, находящегося в нижней части реактора. Для этого используются два основных способа учета. Один из них состоит в задании на границе с теплоносителем граничных условий третьего рода с коэффициентом теплообмена, вычисляемым в РАТЕГе в соответствии с предполагаемым состоянием теплоносителя в НКС и режимом течения. Второй способ предполагает быстрый (или мгновенный) теплообмен и вычисляет установившуюся температуру по уравнению теплового баланса между выделенным объемом материала в НКС и заданным объемом теплоносителя.

Учет наличия теплоносителя производится для следующих основных ситуаций:

- остывания воды и корпуса после разгерметизации корпуса и падении давления;
- поступления горячих обломков АЗ в НКС с водой;
- контакта горячего пара с поверхностью расплава;
- возможного залива шахты реактора водой снаружи;
- возможного повторного залива нижней части реактора водой.

Рассмотрим некоторые детали процессов теплообмена для каждой ситуации.

4.1. Теплоотдача с границ ПШ, корпуса и поверхности расплава

Теплоотдача материала в воду или его нагрев водой (паром) происходит всегда, когда материал в НКС не находится с ней в тепловом равновесии. На части границ расчетной области HEFEST'а, которые полагаются участвующими в теплообмене, ставится граничное условие конвективного типа для нормальной компоненты вектора потока тепла:

$$F_n = fH\left(T - T_b\right), \tag{4.1}$$

где T_b — температура теплоносителя; H — коэффициент теплообмена; f — фактор, вычисляемый в РАТЕГе. При отсутствии теплоносителя $f = 0$.

Это граничное условие начинает работать с самого начала аварии, когда температура корпуса и конструкций НКС равна рабочей температуре теплоносителя. В случае аварии Ду346 давление довольно быстро (100—200 с) падает до нескольких атмосфер и в течение последующих 1500—2000 с, пока не начинается поступление горячего дебриса, температура в НКС спадает примерно до 400 К. На каждом шаге HEFEST'а вычисляется количество тепла, отданное в теплоноситель, которое передается в РАТЕГ. Коэффициент теплоотдачи H в граничном условии (4.1) обычно составляет величину порядка 10 кВт/(м^{2}К). Это отвечает слою стали толщиной 2—3 мм, т. е. для толстых слоев тепловой контакт с теплоносителем можно считать идеальным.

После разрушения ПШ и формирования ванны расплава в корпусе граничное условие (4.1) ставится не на стенках корпуса, а на поверхности расплава, при этом теплоноситель — пар. Площадки на поверхности расплава при изменении его уровня передвигаются. Для задания теплоотдачи при заливе корпуса водой снаружи применяется эта же модель.

Наряду с конвективными граничными условиями, отвечающими теплообмену с паром, на горизонтальных участках границы материалов в НКС для учета теплообмена излучением с АЗ после разрушения ПШ задаются граничные условия, отвечающие теплообмену излучением с вышележащими поверхностями:

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial n} = \varepsilon_{\text{eff}} \sigma^4 (T^4 - T_b^4), \tag{4.2}$$

где температура T_b задается пакетом СВЕЧА, коэффициент серости ε_{eff} для каждой площадки задан в HEFEST'е. Излучающие площадки — поверхности КЭ включены в полость с тепловым излучением модели пакета СВЕЧА, и поток теплового излучения вычисляется в этой программе, а в HEFEST этот поток из пакета СВЕЧА только передается. Если блок теплового излучения пакета СВЕЧА не подключен, то в модели HEFEST'а непосредственно задаются радиационные граничные условия вида (4.2) с температурой «на бесконечности» $T_b = 1800\ \text{K}$.

Теплоотдача с боковой поверхности ПШ и корпуса зависит от положения уровня воды. Оно может быть вычислено по количеству оставшейся воды и заполненности НКС материалом (см. подраздел 4.4).

4.2. Взаимодействие поступающего из АЗ материала с водой в НКС

В момент начала разрушения ОДР и массированного поступления расплавленного материала АЗ в НКС внизу еще может находиться большое количество воды, поскольку теплового потока с ОДР недостаточно для ее выпаривания, а других источников тепла там нет. Температура воды в НКС полагается почти постоянной, равной температуре кипения при данном давлении, поэтому предполагается, что поглощаемая водой теплота идет только на ее испарение. Поступающий вниз материал, испаряя воду, остывает.

Состав и энтальпия порции материала, поступающего в данный момент из АЗ в НКС, задаются пакетом РАТЕГ-СВЕЧА, и в модуль HEFEST материал попадает остывшим. Процесс остывания осуществляется в соответствии с тепловым балансом: если после остывания порции вода в НКС еще остается, то остывание порции идет до температуры воды, а если материал данной порции успевает выпарить всю воду в НКС, — то до большей температуры. При передаче тепла от материала в теплоноситель учитывается, что теплообмен данной порции материала с водой и генерация пара происходят в течение конечного промежутка времени. Это нужно для того, чтобы избежать нефизических всплесков поступления пара и генерации водорода в АЗ, возникающих в предположении мгновенного испарения и вызванных дискретностью работы алгоритмов и поступления материала. Остывание данной порции материала считается мгновенным.

Энтальпия материала после остывания становится меньше на величину $\Delta H = mL$, где m — масса испаренной воды; L — ее теплота испарения.

Скорость теплоотдачи в воду вновь поступившей порции материала берется экспоненциально спадающей с заданным декрементом:

$$\frac{dH}{dt} \propto e^{-\frac{t-t^*}{\tau_0}},$$

где t^* — момент поступления материала; τ_0 — характерное время, задаваемое во входном файле РАТЕГа. Экспоненциальная зависимость есть следствие закона теплоотдачи, гласящего, что скорость теплоотдачи от массы материала пропорциональна разности температур материала и среды, а эта разность в некотором приближении пропорциональна энтальпии материала с некоторым коэффициентом h^* (при высокой теплопроводности материала и постоянной теплоемкости), что приводит к уравнению

$$\tau_0 \frac{dH}{dt} \sim h^*(T - T_w) \approx -H(T),$$

откуда для шага по времени Δt можно написать

$$\Delta H \sim \Delta t / \tau_0 H .$$

Закон остывания для всех порций материала с разным размером, поступивших в разные времена t^*, предполагается одинаковым с одинаковым декрементом τ_0. В течение интервала времени $\tau^* \sim \tau_0$, задаваемого во входных данных, происходит передача тепла, отданного материалом на испарение, в РАТЕГ.

Программно, средствами РАТЕГа, данный процесс локализован в одном или нескольких элементах гидравлической схемы РАТЕГа — камере, моделирующей НКС, где помещается объемный источник энергии. Процесс происходит в два этапа. Величина ΔH, отнятая на первом этапе от порции материала в соответствии с текущим состоянием воды, прибавляется к полному количеству энергии E_H объемного источника в этой камере НКС. На втором этапе от этой величины фиксированными порциями тепловая энергия передается в РАТЕГ. При выполнении условия $E_H > 0$ на каждом шаге по времени τ (РАТЕГ) из НКС в АЗ передается энергия ΔE :

$$\Delta E = fE_H \left[1 - \exp(-\tau / \tau_0)\right] \approx fE_H \tau / \tau_0,$$

где τ_0 — характерное время теплоотдачи в воду в НКС, задаваемое пользователем; f — параметр теплоотдачи (RATEG).

Шаг по времени в РАТЕГе всегда мал: $\tau \ll \tau_0$.

4.3. Температура материала, поступающего из АЗ в НКС

При поступлении очередной порции горячего материала в НКС проверяется наличие воды, и если она в НКС имеется, материал, остывая, испаряет определенное количество воды и охлаждается до некоторой температуры. Температура, приобретаемая материалом, зависит от того, вся ли вода испарилась при его поступлении, и для всех материалов, поступающих в данной порции, предполагается одинаковой. При поступлении порции горячего материала вода испаряется частично или полностью. Энтальпия поступившего материала уменьшается на величину, потребную для испарения воды, и материал приобретает температуру T_m, которую можно определить из уравнения

$$H_t - H_{\text{vap}} = \sum_{k=1}^{N} H_k(T_m), \tag{4.3}$$

где H_t — суммарная энтальпия поступившей порции из N материалов; функции энтальпии $H_k(T)$ определены и известны для каждого материала; H_{vap} — энтальпия испарившейся воды. Пусть H_w — энтальпия, необходимая для испарения всей оставшейся воды в НКС, которая на каждом шаге известна, а $H_t(T_w)$ — энтальпия поступившей порции материала при температуре воды, также известная. При решении уравнения (4.3) для порции материала на шаге по времени в HEFEST'а возможны три случая:

- $H_t - H_t(T_w) < H_w$. Запаса тепла материала недостаточно для полного испарения воды; тогда его температура известна: $T_m = T_w$. Энтальпия, потраченная на испарение, определяется из (4.1) непосредственным вычислением:

$$H_{\text{vap}} = H_t - H_t(T_{\text{w}}) = H_t - \sum_{k=1}^{N} H_k(T_{\text{w}}).$$

- $H_t - H_t(T_w) > H_w$. Температура определяется уравнением (4.3) с известным $H_{\text{vap}} = H_w$, так как вся оставшаяся вода выпаривается данной порцией.

- В уравнении (4.3) $H_{\text{vap}} = 0$. К моменту поступления материала воды в НКС нет, температура материала не изменяется.

Чтобы согласовать температуру узлов, принадлежащих вновь заполненным элементам, с температурой в прилегающих элементах, необходима добавочная процедура, которая описана в подразделе 5.2.

Процедура задания температуры при поступлении новой порции материала с использованием уравнения (4.3) вызывается после поступления и заполнения фиктивных элементов поступающим материалом и описана ниже. На один шаг расчета HEFEST'а приходится несколько десятков или сотен его вызовов из РАТЕГа, и материал из АЗ может запоминаться во вспомогательном массиве HEFEST'а при каждом его вызове; при этом энтальпия и массы компонентов суммируются, и вычисляемая температура поступившего материала отвечает средней температуре для всего поступившего на данном шаге HEFEST'а материала.

4.4. Учет текущего уровня воды в НКС

Особенности строения ДШ таковы. Оси 1344 отверстий диаметром 40 мм в корзине, через которые вода попадает в НКС и далее в АЗ, направлены по вертикали. Отверстия сосредоточены в нижней части корзины, до высоты $z_0 \approx 0{,}8\text{м}$ (см. рис. 1), считая от нижней точки корпуса, там, где кривизна поверхности позволяет сделать вертикальное отверстие. Если бы на дне ДШ до уровня z_0 материал АЗ — дебрис лежал плотно, не пропуская воду, то вода внутренней части ДШ не сообщалась бы прямо с водой наружной части (опускного участка). Ниже показано, что в реакторной установке В-428 после поступления первых порций расплава в НКС и до разрушения ДШ воды внутри НКС не будет.

4.4.1. Поступление материала в НКС и испарение воды

После разрушения ОДР материал из АЗ, по-видимому, будет поступать в НКС в виде расплава. Уровень воды в НКС в этот момент должен находиться под нижней границей ОДР, а объем воды с учетом испарения и вытеснения при поступлении горячего материала в стаканы опор тепловыделяющих сборок не превышает 7—9 м^3. Для точного задания уровня следует учитывать возможное допоступление воды через опускной участок до момента разрушения ОДР.

Поступающий расплав при взаимодействии с водой дробится на мелкие капли с характерным размером 2—3 мм. В этом случае он должен беспре-

пятственно просыпаться через 1344 отверстия в корзине и скапливаться на днище, пока не забьет отверстия. Заметим, что в КЭ-модели, использованной в настоящей работе для иллюстраций, это не учитывается, но, построив соответствующую расчетную сетку конечных элементов и задав слои заполнения на ней, этот недостаток нетрудно испроавить.

Объем, заключенный между ПШ и корпусом (см. рис. 1), до уровня $z_0 \approx 1$ м не превышает 3 м^3, а объем внутри НКС — не более 1 м^3 (рис. 3). Объем «гранулированного» расплава величиной $V_0 \approx 3$ м^3 может засыпать 1344 отверстия в нижней части ПШ и блокировать прямое поступление воды из опускного участка в ПШ. В зависимости от температуры и состава материала в этом объеме он может при поступлении испарить 5—10 м^3 воды. По результатам расчетов кода СОКРАТ первыми обычно поступают сталь и цирконий, что отвечает испарению примерно 5—6 м^3 воды. Если в первых порциях расплава много оксидов, запас тепла в них может оказаться существенно выше.

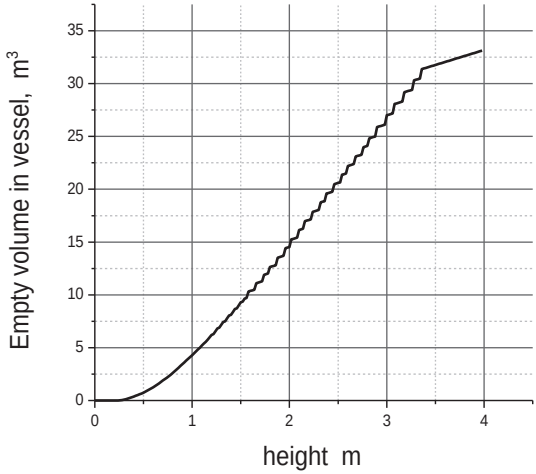


Рис. 3. Зависимость пустого объема между ПШ и корпусом от высоты

Оставшиеся 1—3 м^3 воды частично могут содержаться в порах образовавшейся засыпки из дебриса и в зависимости от мощности удельного тепловыделения либо быстро испарятся (остаточная мощность $P = 400$ Вт/кг на момент приблизительно 3000 с после начала аварии), либо будут медленно испаряться в случае слабого тепловыделения на днище (что более вероятно).

Если к этому моменту в корпус поступает дополнительная вода (через опускной участок), то (при условии, что материал внизу холодный) она, по-видимому, сможет просачиваться через поры и поступать в НКС. Если же дебрис тепловыделяющий, то более вероятно, что испарение воды не прекратится, поскольку в НКС температура должна быть порядка температуры насыщения, и при наличии сравнительно небольшого тепловыделения вода в НКС будет испаряться, пар будет вытеснять воду из дебриса НКС вверх, в направлении АЗ, и «наружу», в опускной участок.

Поскольку температура в НКС по направлению к верху повышается, давление пара над дебрисом будет относительно более высоким и пар из пористой засыпки в НКС скорее всего будет вытеснять воду в опускной участок, в пространство между ПШ и корпусом.

Таким образом, пока ПШ не разрушена, велика вероятность того, что НКС будет осушена при поступлении первых 2—3 м^{3}расплава, а материал в ней не будет допускать воду в НКС, в том числе и при повторном заливе холодной водой через опускной участок. Поступление воды в НКС сверху через разрушенную горячую АЗ также представляется маловероятным. В соответствии с этим при моделировании процессов взаимодействия с паром в НКС можно пойти на ряд упрощений.

Замечание. Если во всем пространстве между шахтой и корпусом находится вода, то ее столб создает внизу избыточное давление порядка 1 атм, под действием которого образующийся пар может просачиваться вверх, охлаждая дебрис. Возможность охлаждения по подобному механизму и мощность охлаждения следует оценивать по закону Дарси, задавая давление и проницаемость в слое дебриса. В программе это не рассматривается.

4.4.2. Численная модель определения уровня воды

Для расчета уровня воды по объему, занимаемому ею в корпусе, в каждый момент известен объем $V_e(z)$ пустого, т. е. не занятого реакторным материалом пространства, имеющегося внутри корпуса на высоте, не превышающей z. Эта функция, а также обратная ей $z_e(V) = V_e^{-1}(V)$ вычисляются на каждом шаге расчета HEFEST'а по распределению плотности в КЭ-разбиении. Соответствие (на начальном этапе и с определенной точностью) этой функции фактическому распределению пустоты в реакторе обеспечивается КЭ-моделью, которая в рамках заданной точности должна отвечать конструкции реактора. Определяемая величина объема есть сумма объема пустоты внутри ПШ $V_{\text{in}}(z)$ и вне ее $V_{\text{out}}(z)$:

$$V_e(z) = V_{\text{in}}(z) + V_{\text{out}}(z). \tag{4.4}$$

Зная объем воды в НКС $V = V_w$, ее уровень z_w в численном расчете определяется как величина обратной функции $z_w = V_e^{-1}(V_w)$. До достижения объемом поступающего сверху материала величины V_0, упомянутой выше и отвечающей максимальному уровню $z = z_0 \approx 0,8$ м, вода считается свободно перемещающейся из ПШ в опускной участок и назад. После того как количество поступившего материала превышает величину V_0, вода считается перемещенной вне НКС и ее охлаждающее влияние распространяется только на наружную границу ПШ и внутреннюю границу корпуса. В этом случае при определении уровня воды после разрушения ОДР первое слагаемое в соотношении (4.4) не учитывается. По этой же причине не учитывается влияние пористости дебриса на функцию объема пустого пространства (влияние пористости обсуждается ниже).

Если в расчете вычисляется уровень z_w воды в НКС, то в расчете взаимодействия стенок с теплоносителем используются два коэффициента теплоотдачи стенок: для пара — над уровнем воды и для воды — под уровнем. Сказанное можно изобразить в виде схемы (рис. 4).

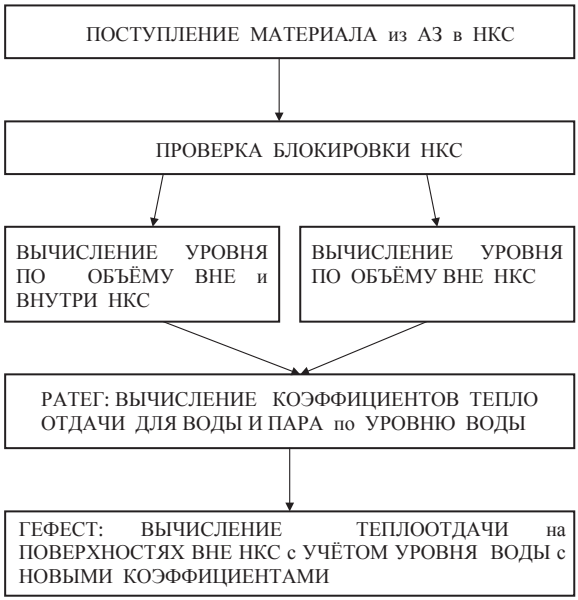


Рис. 4. Схема расчета теплообмена с водой с учетом ее уровня

5. Обновление конфигурации при поступлении материала из АЗ в НКС

Поступление материала в НКС в численной модели интегрального кода СОКРАТ/В1 представляется как передача данных, характеризующих необходимые свойства вещества, которое перестает учитываться в пакете РАТЕГ-СВЕЧА (уходит из АЗ) и начинает учитываться в программе HEFEST (приходит в НКС).

Данные, получаемые из пакета РАТЕГ/СВЕЧА программой HEFEST:

- количество $\{m_k\}$ материала АЗ, поступающего в НКС;
- состав $\{p_k\}$ поступающего в НКС материала;
- энтальпия H поступающего в НКС материала;
- остаточное тепловыделение Q поступившего в НКС материала.

Здесь k нумерует составляющие поступающего материала АЗ.

Эти данные вводятся в расчет HEFEST'а по мере формирования их в пакете РАТЕГ-СВЕЧА. Поступающий в НКС материал распределяется в ее объеме с учетом наличия в ней стальных конструкций. Материалы при поступлении в НКС приобретают температуру, которая вычисляется с учетом наличия или отсутствия воды на днище корпуса, как указывалось выше.

Выход — стекание вещества из АЗ вниз — в модуле СВЕЧА происходит не на каждом его шаге по времени, но достаточно часто, с характерным периодом 0,1 с. Обычно шаг по времени расчета HEFEST'а τ_p гораздо больше, и поступающие массы и энтальпия в нем суммируются по сортам, пока не настанет время сделать шаг расчета. К моменту начала очередного расчетного цикла HEFEST'а накопленный материал распределяется по элементам заполняемых фиктивных слоев в заданном порядке заполнения.

5.1. Расположение материалов и заполнение НКС

Расчетная область, моделирующая конструкции НКС, разбита на достаточно мелкие конечные элементы (КЭ) (рис. 5). При генерации области задаются границы крупных основных деталей, в частности корпуса реактора, ПШ, а дальнейшее разбиение уже построенной сетки КЭ на подобласти производится при подготовке данных для расчета конкретной аварии в соответствии с конструкцией НКС и предполагаемой последовательностью заполнения области материалом АЗ. Для задания зоны, заполняемой поступающим материалом, на сетке КЭ задаются подобласти с нужными границами (рис. 6), которые могут быть прямолинейными или эллиптическими.

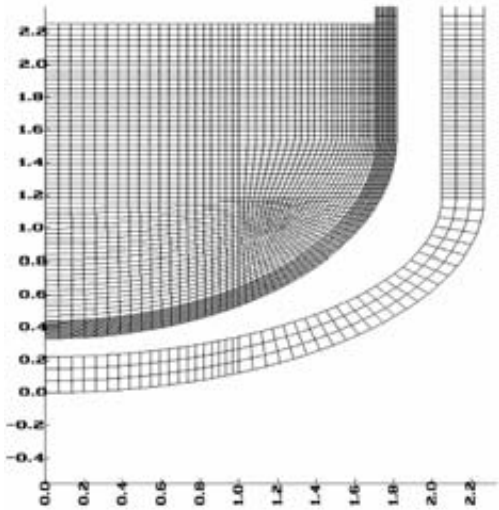


Рис. 5. Сетка для моделирования начальной стадии процессов в НКС. Сетка корпуса на этой стадии грубая, так как теплообмен в нем мал

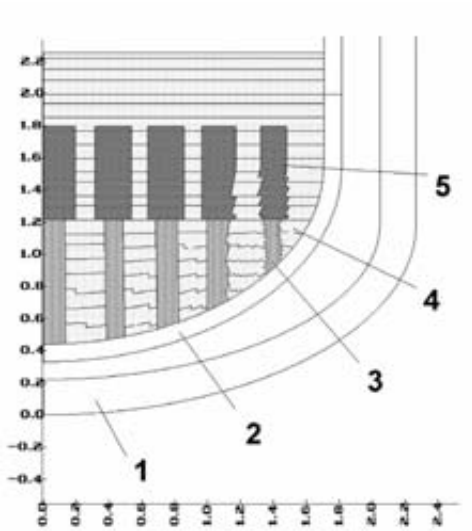


Рис. 6. Разбиение области ПШ на слои приема поступления материалов:
1 — корпус, *2* — стенка ПШ, *3* — стальные опоры, *4* — слои заполнения, *5* — трубчатые опоры тепловыделяющих сборок, заполняемые в первую очередь

Каждой из подобластей отвечает конкретный номер материала, который определяет свойства материала, содержащегося или с течением времени поступающего в эту подобласть, а также порядок заполнения поступающим из АЗ материалом. Этот порядок задается пользователем в основном файле ввода. Максимальная мелкость разбиения на упорядоченные подобласти — один конечный элемент.

5.2. Задание физических свойств при «заполнении» фиктивных слоев

«Заполнение» фиктивного элемента состоит в переопределении свойств этого элемента. Первоначально свойства «пустого» материала заданы близкими к свойствам газа — низкие плотность, объемная теплоемкость и теплопроводность. Объем и количество фиктивных слоев в расчетной области берется «с запасом», чтобы можно было разместить весь поступающий материал. Если все фиктивные слои КЭ-разбиения заполнены, то последующие поступления заносятся в баланс массы, но при вычислениях не учитываются. Если в данной порции материала масса недостаточна для заполнения текущего элемента, эта масса, ее энтальпия и тепловыделение прибавляются к следующей порции.

При «заполнении» фиктивного элемента присваиваются новые значения следующим его характеристикам:

- состав становится многокомпонентным;
- плотность определяется по составу и парциальным плотностям;
- энтальпия суммируется с привходящей энтальпией материала.

Средняя температура T_m во вновь заполненных элементах определяется из энтальпий поступающих материалов с учетом нового состава. В единичной порции материалов, «принимаемой» HEFEST'ом на его шаге по времени τ_p, предполагается установившееся тепловое равновесие.

Температура T_m определяется из уравнения (4.3), в котором уже учтена теплоотдача в теплоноситель:

$$H_t = \sum_{i=1}^{N} H_k(T_m),$$

где H_t — суммарная энтальпия поступившей порции из N материалов за вычетом энтальпии испарившейся воды, вычисленная в СОКРАТе.

Функции энтальпии $H_k(T)$ определены для каждого материала в общей базе данных свойств или в зависимости от входных данных заданы при

инициализации данных в начале расчета программы HEFEST. Но при присвоении новых значений температуры в узлах возникает следующая трудность. При МКЭ-дискретизации температуры заданы в узлах, а энтальпия — внутри элементов, поскольку она привязана к массе (объему). При неоднородном распределении температуры в некоторой подобласти внутри элемента распределение температуры также неоднородно. В любой точке четырехузлового конечного элемента, имеющей внутренние координаты (ζ, η), температура выражается через узловые величины и функции формы элемента интерполяционным соотношением [2]

$$T(\zeta, \eta) = T_1 N_1(\zeta, \eta) + T_2 N_2(\zeta, \eta) + T_3 N_3(\zeta, \eta) + T_4 N_4(\zeta, \eta). \quad (5.1)$$

Если мы присвоим температуру, определенную по энтальпии из соотношения (5.1), всем узлам T_i, принадлежащим элементам вновь заполненной подобласти, энтальпия в элементах, граничащих с этой подобластью, эффективно повысится, что некорректно.

Чтобы согласовать распределение температуры заполненной подобласти и энтальпии, температуры в этой подобласти первоначально приписываются центрам элементов, а затем вычисляются в узлах интерполяцией. Если материал поступает часто, мелкими порциями, описанная несогласованность приводит к погрешности в суммарной энтальпии, достигающей на начальной стадии заполнения нескольких процентов.

Альтернативный способ учета тепла вновь поступившего материала состоит в том, что значения температуры в узлах инициализированных элементов задаются отвечающими температуре в соседних элементах, а избыточная энтальпия вводится как источник тепла в этих элементах, быстро спадающий во времени. Нулевой уровень энтальпии отвечает температуре 300 К, и энтальпия $Q_{\text{in}}(T)$ поступившего в данный КЭ материала с температурой T есть сумма фоновой и активной составляющих:

$$Q_{\text{in}}(T) = Q_{\text{back}}(T) + Q_{\text{act}}(T) = C_e(T_e - 300) + \int W(t)dt,$$

где C_e, T_e — теплоемкость и температура в заполняемом элементе, отвечающие температуре граничащих с ним элементов; $W(t)$ — функция мощности в элементе, спадающая до нуля на одном-двух шагах по времени. Величина фоновой составляющей вычисляется по температурам в точках интегрирования.

Исходные значения плотности ρ в каждый элемент e_k вводятся через номер материала ($m(e_k) \to \rho_m(m)$), заданный для каждого элемента. При вводе данных определяется пространственная функция (массив)

$$\rho(r, z) = \rho\left(r(e_k), z(e_k)\right) = \rho^*(e_k) = \rho_m\left(m(e_k)\right)$$

и текущее значение плотности в элементе используется и переопределяется только через пространственную функцию $\rho^*(e_k)$.

5.2.1. Теплофизические свойства нерасплавленной смеси

Начиная с момента заполнения элемента поступившим материалом, имеющим неоднородный состав, свойства материала этого элемента вычисляются путем усреднения по парциальным массам, как описано в [2]:

$$c_{\text{mean}}(T) = \frac{\sum_i \rho_i c_i(T)\xi_i}{\sum_i \rho_i}, \qquad (3.2)$$

где $c(T)$ — свойство (теплоемкость или теплопроводность); ρ_i — парциальные плотности компонентов; ξ_i — вес, приписываемый компоненту. $\xi_i = 1$ для всех случаев, кроме определения парциального вклада в теплопроводность металлических компонентов. Если суммировать пропорционально, то относительно малые вклады металла существенно увеличивают теплопроводность смеси, что не отвечает экспериментальным данным. Поэтому для них ξ_i берется зависящим от концентрации.

Теплоемкость материала учитывает также теплоту плавления, и плавление каждого компонента материала смеси происходит при своей температуре, если он не контактирует с расплавом или если его температура меньше температуры перехода в расплав. Для взаимодействия с расплавом в элементе с составным материалом определяется эффективная температура плавления смеси так, как это описано в [2], и эта температура используется в процедуре перехода в расплав, описанной там же.

5.2.2. Влияние пористости на теплопроводность дебриса

Параметр пористости при задании свойств дебриса присутствует в интегральных кодах MELCOR, RELAP, IKARE. В программе HEFEST плотности материалов на текущем этапе вычислений фиксированы либо вычисляются исходя из масс материалов, которые сохраняются, и занимаемых ими объемов, которые от шага к шагу также не меняются. Пористость дебриса не учитывается по следующим причинам.

- С точки зрения занимаемого обломками переменного объема учет его сложен и в силу большой неопределенности конфигурации представляется излишним.
- С точки зрения теплопередачи пористость лишь снижает коэффициент теплопроводности (молекулярной). Это снижение, если оно известно, нетрудно ввести в расчет при вычислении коэффициента теплопроводности нерасплавленного дебриса — смеси материалов АЗ. С другой стороны, поскольку процессы теплового разрушения корпуса начинают интенсивно идти только при наличии жидкого расплава, «основное» состояние материала (дебриса) — жидкое или уплотненное расплавом и начальная пористость конфигурации может существенно не влиять на ход процесса и результат.

Влияние пористости может быть заметно там, где существенную роль играют процессы просачивания, смачивания и т. п. В нашем случае одна из таких ситуаций возникает при рассмотрении вопроса о том, где может находиться основная масса воды в НКС. Упрощенная модель изложена выше.

Вторая ситуация возникает при рассмотрении процесса распространения границы плавления в пористой засыпке — дебрисе. Если расплав не смачивает и не растворяет засыпку, то граница плавления—растворения при невысокой температуре расплава может стоять на месте. Для тепловыделяющего расплава замедление распространения, связанное с пористостью, будет преодолено возрастанием градиента температуры на фронте, отвечающем повышению температуры расплава. Если поток тепла из расплава в стенку распределен по стенке неоднородно (как, например, в эллиптическом днище), то экранирование потока, например, пористым дебрисом на дне, возможно, способна приостановить распространение фронта плавления в этом месте. Для рассмотрения влияния смачиваемости на процесс распространения фронта плавления необходимы экспериментальные данные.

5.3. Перемещение границ теплообмена при поступлении или вытекании материала

Поток теплового излучения идет с верхней наружной границы формирующейся в ПШ области дебриса. Организация теплообмена излучением с разрушенной АЗ описана в разделе 4.1. В процессе заполнения НКС материалом из АЗ либо, наоборот, при вытекании материала из корпуса при его разрушении, местоположение площадок задания граничных условий излучения в АЗ изменяется так, чтобы они находились на верхней границе материала.

Процедура перемещения взаимодействующих границ такова: при очередном поступлении или удалении материала новое положение приграничных элементов, контактирующих с фиктивным материалом, ищется по наличию перепада плотности, которая для фиктивного материала берется очень низкой. После этого определяется сторона приграничного элемента, находящаяся «снаружи», на границе контакта с внешним объектом (теплоноситель, или тепловое излучение), и на ней задаются граничные условия с параметрами, отвечающими исходным. При этом обязательно перестраивается матрица системы алгебраических уравнений МКЭ.

6. Перераспределение материалов внутри НКС

Как уже отмечалось, существенные для расчета перемещения материалов представляются в модели HEFEST'а как мгновенный переход от одной конфигурации к другой в рамках принимаемого сценария протекания аварии. Моделируемая конструкции отвечает последовательности отдельных «простых» состояний, доступных для анализа применяемыми численными методами. В случае реакторном установки В-428 такие «простые» состояния, не требующие при моделировании учета динамики перемещения разнородных материалов, следующие.

- ПШ не разрушена, постепенно заполняется дебрисом, плавление (если оно есть) не оказывает влияния на теплообмен. Здесь поступление материала моделируется описанной выше процедурой инициализации фиктивных элементов, в отсутствие расплава нет конвективной теплопередачи.
- Появляется ванна расплава, идут процессы естественной конвекции в однородной области, расслоения нет. Здесь возникает новый объект, расплав, который постепенно вбирает в себя приграничные элементы (процедура «ПП» из [2]).
- Расслоение на две области с однородным тепловыделением в каждой из них и различными свойствами. В частности, при расслоении на «тяжелый кориум» и «легкую сталь» основное тепловыделение сосредотачивается в нижней подобласти. Высота границы расслоения берется в соответствии с формой сосуда, физической плотностью и массами материалов расплава.
- Корпус разрушен и продолжает плавиться, расплав стекает через верхнюю кромку (рис. 7). Здесь имеется конфигурация «расплав в корпусе», а удаление материала моделируется переводом его в фиктивный.

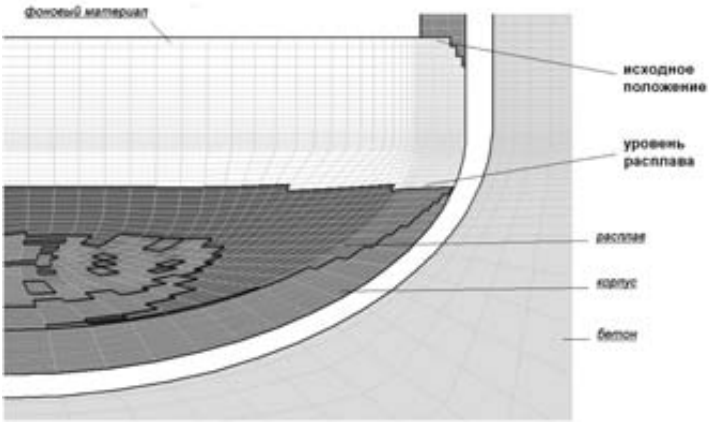


Рис. 7. Новое положение границы взаимодействия при изменении конфигурации. Более интенсивной окраске отвечает большая плотность

Численное решение всей задачи о поступлении материала из АЗ в НКС и вытекании его из корпуса осуществляется путем разбиения расчетной области на подобласти, находящиеся в «простых» состояниях. Конвективный теплоперенос учитывается путем введения эффективного коэффициента теплопроводности. Перемещения материала, которые могут происходить в рамках «простой» конфигурации, не учитываются. Процессы перехода от одной расчетной конфигурации к другой описаны в соответствующих местах.

6.1. Пересчет распределения массы и температуры при разрушении ПШ и переходе материала в корпус

В новой конфигурации, отвечающей переместившемуся после разрушения ПШ материалу, задаются по результатам расчетов предыдущей стадии расположение и распределение температуры и состава расплава. В первую очередь определяется, какой объем из предыдущей конфигурации остался на месте, а какой переместился, а также новое положение, которое этот объем занял.

В той подобласти новой сетки, которая отвечает непереместившемуся материалу, температуры в узлах определяются интерполяцией. Для каждого узла новой сетки ищется элемент предыдущей расчетной конфигурации, содержащий данный узел, находятся внутренние координаты нового узла относительно старой конфигурации и по формуле (5.1) задается новая начальная температура. Если элементы старого разбиения, содержащие данный узел, не находятся, температура в этом узле не меняется.

Процедура перемещения (мгновенного перетекания) основана на предположении о перемещении материала при разрушении ПШ, которое состоит в том, что расплав заполняет пространство между ПШ и корпусом. Геометрию процедуры поясняет рис. 8. Предполагается, что верхняя граница материала, переместившегося в корпус, — плоскость. Для новой расчетной конфигурации следует найти этот уровень и распределение в нем температуры. Это делается в следующей последовательности:

- определяется полный объем материала, который размещается в корпусе, V_{up} — это материал, поступивший из АЗ, и материал металлоконструкций ПШ, учитываемые в расчете;
- исходя из внутренних размеров корпуса, представляющего собой эллипсоид вращения, продолженный круговым цилиндром, определяется высота уровня расплава в корпусе h_{lev}, отвечающая объему V_{up}, вычисляемому по формуле

$$V_{\text{up}} = \frac{\pi}{3}(h_1 R / a)^2 (3a - h_1) + \xi \pi R^2 (h_2 - a),$$

где R — внутренний радиус корпуса; a — вертикальная полуось эллипсоида; первый член соответствует объему эллиптического сегмента, второй — объему цилиндрической части, если высота расплава достаточно велика (в этом случае $\xi = 1$, $h_1 = a$, $h_2 = h_{\text{lev}}$, в противном случае $\xi = 0$, $h_1 = h_{\text{lev}}$);

- область «пустоты», подлежащей заполнению — это область, ограниченная снизу корпусом реактора, а сверху — корпусом ПШ и вычисленной высотой h_{lev} (см. рис. 8); определяется объем и расположение материала, который сюда должен стечь, — это верхняя часть «расплава» в расчете ПШ;
- в объеме этого материала, который может стечь, вычисляется средняя температура T_c, исходя из энтальпии этого материала;
- задание начальной температуры в чаше корпуса может производится двумя способами, управляемыми ключом: 1) температура всего материала, поступившего в объем корпуса, берется равной средней по ПШ; 2) в подобласти между ПШ и корпусом задается температура, равная вычисленной средней T_c по верхней части ПШ, а в остальных узлах, которые оказываются заключенными в элементы сетки предыдущего расчета, температура вычисляется интерполяцией по формуле (5.1)

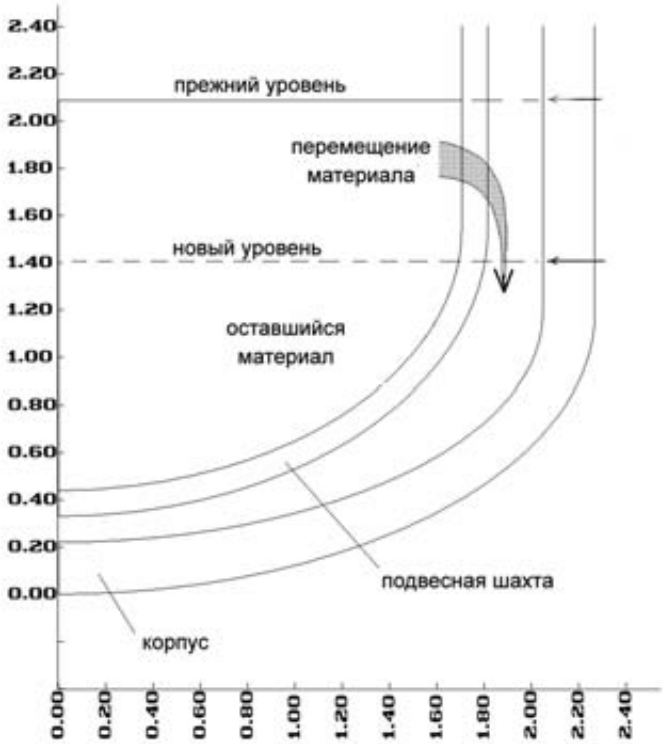


Рис. 8. Задание перемещения материала в корпус

6.2. Перераспределение вещества при гравитационном расслоении

Современный уровень знаний о высокотемпературном взаимодействии реакторных материалов не позволяет дать физически обоснованные критерии необходимого наличия расслоенного состояния и его свойств, пригодные для всех ситуаций. Равным образом процесс возникновения расслоенного состояния в системе, состоящей из тугоплавких оксидов и сравнительно легкоплавких металлов, не вполне понятен. Поэтому появление расслоенного состояния, в особенности при наличии непредельного (с недоокисленным цирконием) кориума, следует рассматривать как одно из допущений сценария ТА. В численной модели наличие расслоения задается двумя критериями перехода, которые должны выполняться совместно.

Первый критерий отвечает времени задачи либо, по выбору пользователя, средней температуре всего поступившего материала. Второй критерий представляет собой относительную долю жидкой фазы. Эти критерии сравниваются с задаваемыми пользователем пороговыми величинами p_{INP} и T_{INP}:

$$p(T > T_{\mathrm{LIQ}}) > p_{\mathrm{INP}}, \quad T_M > T_{\mathrm{INP}}.$$

В качестве критериального T_M фигурирует средняя температура, если введено $T_{\mathrm{INP}} > 0$, либо время от начала расчета стадии, если введено $T_{\mathrm{INP}} < 0$. Начиная с момента выполнения указанных критериев, вместо состояния «однородный расплав» вводится состояние «расслоенный расплав».

При задании расслоенного состояния принимаются следующие допущения:

- переход к расслоенной конфигурации происходит за один шаг по времени (HEFEST);
- конфигурация представляет собой два слоя несмешивающихся жидкостей, преимущественный состав которых отвечает кориуму (оксиды и цирконий) и стали;
- областям над границей слоев и под ней приписываются свойства стали и кориума, при этом в состав стали может перейти из кориума и раствориться некоторое количество свободного циркония;
- распределение температуры в слоях при переходе к расслоенной конфигурации сохраняется неизменным, меняется только состав в элементах;
- если при наличии расслоения слой стали оказывается слишком тонким относительно вертикального размера расчетных ячеек, то расслоение не вводится и материал в корпусе считается гомогенным.

При расслоении перераспределение состава затрагивает только те элементы расчетной области, которые находятся в состоянии расплава. На каждом шаге по времени известен состав расплава, и на основании полного состава и постулируемого состава слоев определяется текущее положение границы слоев. В каждом слое состав однороден и свойства расплава определяются в соответствии с моделью расплава, описанной в [2]. Тепловыделение, как указывалось в [2], пропорционально доле $\mathrm{UO_2}$ в каждом слое, но дополнительно часть тепловыделения может быть отдана в сталь, которая, как предполагается, может частично растворять тепловыделяющие продукты радиоактивного распада.

Теплоперенос в слоях имеет конвективный характер и рассчитывается с использованием эффективных коэффициентов теплопроводности в соответствии с образовавшейся конфигурацией бассейна [2].

7. Тепловое разрушение

Разрушение материалов НКС, т. е. потеря ими несущей способности, приводящая к разъединению конструкции на части или к образованию отверстия, через которое вытекает расплав, считается обусловленным только нагревом до высокой температуры, при которой многократно падает жесткость материала (механическое разрушение), а при дальнейшем повышении происходит плавление (тепловое разрушение). Хрупкое разрушение с образованием и развитием трещин не рассматривается. Характер разрушения — тепловой или механический — зависит от условий наружного охлаждения корпуса, внутреннего давления, весовой нагрузки. Рассмотрим соотношение этих факторов для реакторной установки В-428 Тяньванской АЭС (КНР) [4].

7.1. Выбор критерия разрушения

В проектируемых ныне АЭС с реактором ВВЭР большой мощности предусмотрено устройство локализации расплава. При нагреве корпуса здесь не предполагается залив водой снаружи. Теплоотдача с наружной границы корпуса мала. Под корпусом установки В-428 находятся 12 опор, каждая из которых по профилю приблизительно повторяет контур днища. Под действием нагрузки деформирования корпус удлиняется, достигает опор и садится на опоры, вследствие чего деформация растяжения в стенке корпуса стабилизируется.

Для применения механических критериев разрушения необходим расчет напряженно-деформированного состояния, осуществляемый модулем HEFEST-M. При наличии опор под корпусом реактора он при высокой температуре может деформироваться, не разрушаясь, вплоть до посадки на опоры. В то же время, как показали расчеты, при отсутствии эффективного внешнего охлаждения прогрессирующий разогрев корпуса и его проплавление по толщине при тепловыделении в расплаве порядка 20 МВт даже при отсутствии опор произойдут лишь на 3—5 мин позже, чем механическое разрушение. Поэтому при отсутствии охлаждения корпуса снаружи его разрушение можно считать тепловым и в качестве критерия использовать температуру плавления. При обсуждении модели проплавления рассмотрены следующие случаи:

- центральное проплавление — в окрестности нижней точки корпуса;
- боковое «ножевое» проплавление с образованием отверстия на высоте и его углублением вытекающим расплавом;
- боковое равномерное проплавление с равномерным по азимуту уменьшением высоты «бортика» образовавшейся чаши с расплавом.

7.2. Температурный критерий и предпосылки модели теплового разрушения

Для применения температурного критерия в основном файле ввода должны присутствовать узлы (или элементы), в которых проверяется тот или иной критерий. Для механических критериев проверка производится для всех элементов, а для температурных критериев вводятся узлы на поверхности или в конечном объеме, где ожидается перегрев, чреватый разрушением. В рассматриваемых конфигурациях это узлы наружных поверхностей сосудов ПШ или корпуса. Вводится критическая температура, и на каждом шаге для всех узлов введенных номеров узлов проверяется условие разрушения:

$$T_{\mathrm{MAX}}(n) > T_{\mathrm{INP}}, \quad n = 1, 2, ..., 64, \tag{7.1}$$

где обычно берется $T_{\mathrm{INP}} = 1700\ \mathrm{K}$ и 64 номера узлов могут быть введены. Вместо температуры можно задать время разрушения t, тогда аналогичный критерий будет иметь вид

$$t > T_{\mathrm{INP}}.$$

Поскольку в полусферическом бассейне тепловыделяющей жидкости (ТЖ) максимум потока тепла из расплава в стенку корпуса приходится на верхнюю границу ТЖ, то наиболее вероятное место разрушения находится здесь. Если же отверстие образуется на малой высоте, почти весь тепловыделяющий расплав относительно быстро (время за 100 с) вытекает и разрушение корпуса существенно замедляется или прекращается. Дальнейшее относится к случаю, когда место разрушения находится достаточно высоко. При расслоении кориума максимальный поток тепла в стенку идет из стали, поэтому наиболее вероятное место проплавления находится на этой высоте.

Равномерное проплавление всего корпуса по периметру маловероятно; скорее всего, первоначально образуется сравнительно небольшое отверстие, через которое начнет вытекать расплав. При вытекании следует рассмотреть возможность углубления нижней границы отверстия, в результате чего плавление материала корпуса будет происходить вдоль сравнительно узкого канала меридионального направления, а остальная сталь корпуса останется на месте. Соответствующие оценки приведены в приложении. За счет «прорезания» вытекает большая часть расплава и время вытекания оказывается довольно малым (100—150 с), поэтому, если по сценарию принимается, что происходит «прорезание», расчет заканчивается. Аналогично поступают в случае центрального проплавления, когда расплав вытекает

через отверстие, образовавшееся в окрестности нижней точки корпуса. Ниже предполагается, что место разрушения расположено высоко и после начального разрушения плавление корпуса происходит равномерно по азимуту и применимо осесимметричное приближение.

Деформация корпуса в модели проплавления не учитывается. Для установки В-428 это выполнено с достаточной точностью потому, что близко под корпусом расположены профилированные опоры, снимающие весовую нагрузку на корпус. Перепад давления после проплавления снимается, а тепловые деформации малы.

7.3. Удаление расплава при тепловом разрушении корпуса

Удаление материала начинается после диагностирования в численном расчете разрушения корпуса. После того как в корпусе образовалось отверстие на определенной высоте z_1 (рис. 9), весь материал, перешедший в расплав и находящийся в корпусе выше уровня (нижней границы) отверстия, мгновенно удаляется — процесс вытекания не моделируется. Время вытекания расплава оценивается величиной порядка 100 с, и за это время из корпуса в расплав перейдет не более 0,2 м^3 стали (см. приложение), что находится в пределах общей погрешности.

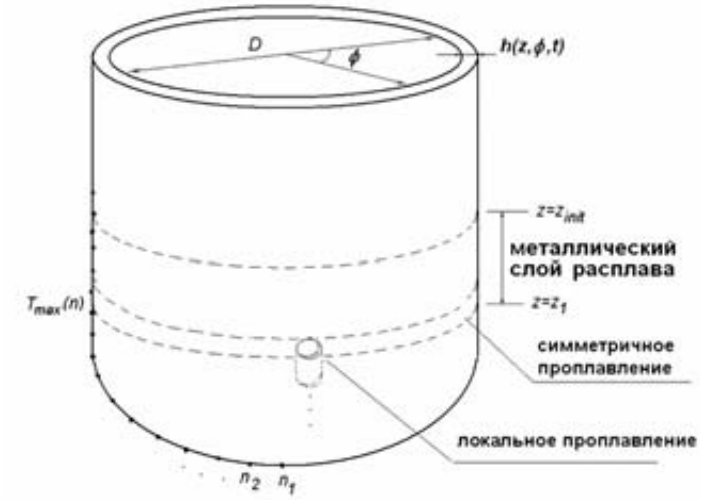


Рис. 9. К описанию модели проплавления корпуса

Материал, поступающий из АЗ после образования отверстия, не участвует в расчете, он не смешивается с тем, что находится в чаше корпуса, а только заносится в балансные данные.

Если ранее поступивший в корпус материал еще не перешел в расплав, он остается в корпусе, не перемещаясь, независимо от положения уровня.

Удаление материала численно означает замену его свойств фиктивными: удаленному элементу присваивается почти нулевое (в 1000 раз меньшее) значение теплопроводности и теплоемкости. При этом температура в элементе не меняется, а его вычисляемая энтальпия автоматически уменьшится примерно в 1000 раз.

После начального разрушения корпуса и удаления всех элементов расплава, лежащих выше края отверстия, производится пересчет излучающей границы («зеркала»). Расчет продолжается с изменившейся конфигурацией. На каждом шаге проверяется выполнение критерия теплового разрушения (7.1) в заданных вершинах границы корпуса. Если в узлах $n_1, ..., n_k$ данный критерий выполнен, то новый уровень зеркала выбирается по самому нижнему из этих узлов. Удаляются элементы с материалом расплава, находящиеся выше нового уровня зеркала, переопределяется излучающая граница и т. д.

Процесс перезадания уровня расплава продолжается до достижения уровня, заданного в расчете. По умолчанию этот минимальный уровень отвечает высоте нижней внутренней границы корпуса.

Литература

1. *Bolshov L. I., Strizhov V. F.* SOCRAT — The system of codes for realistic analysis of severe accidents // Proc. of ICAPP ’06 Reno. — [S. l.], 2006, June 4—8. — (Paper 6439).

2. *Киселев А. Е., Семенов В. Н., Стрижов В. Ф., Филиппов А. С.* HEFEST: численное моделирование процессов в нижней части реактора ВВЭР при тяжелой аварии. — См. настоящее издание.

3. Аналитические исследования в поддержку обоснования исходных данных по выходу расплава в устройство локализации расплава: Отчет / СПбАЭП. — СПб., 2000.

4. Установка реакторная В-428: Перечень исходных данных для теплогидравлических расчетов / ОКБ ГП, 428Д8. — Подольск, 2001.

5. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Механика сплошных сред. — М.: Гос. изд-во физ.-мат. лит., 1954.

Приложение. Оценка скорости проплавления корпуса и вытекания расплава

Рассматривается «нормальное» расположение слоев расплава, при котором металлический слой, преимущественно состоящий из стали, находится над оксидным слоем, и тепловое разрушение корпуса начинается на верхней границе металлического слоя. Геометрия численных расчетов — двумерная, осесимметричная, но начальное разрушение корпуса при проплавлении должно скорее всего произойти локально, не по всему периметру. Оценивается возможность процесса ножевого проплавления стенки, характерное время и скорость подобного процесса. Этот вопрос важен по следующим причинам:

- «ножевое» проплавление, если оно началось в верхней части расплава, ускоряет вытекание;
- количество стали, поступающее в устройство локализации расплава, при ножевом проплавлении может быть меньше на 10—20 т, а поступающий расплав — горячее.

Неучет ножевого проплавления дает более консервативную оценку по количеству стали в устройство локализации расплава. Что касается времени вытекания, то в случае образования отверстия ниже уровня расплава скорость вытекания определяется гидростатическим давлением и «ножевое» проплавление не сильно увеличивает скорость поступления материала.

При вытекании расплавленного материала через сквозное повреждение в корпусе реактора должен возникнуть турбулентный поток жидкого металла с температурой, превышающей температуру плавления стали на несколько сотен градусов. Это может привести к дальнейшему подплавлению стенки и расширению повреждения вниз.

Ниже оценивается тепловой поток на границе повреждения и скорость увеличения образовавшегося отверстия. Следует заметить, что плавление боковой стенки корпуса расплавом стали также происходит в условиях турбулентной конвекции и относительная скорость продвижения границы плавления вбок (процент толщины за единицу времени), и время проплавления корпуса, получаемые в численных гидродинамических расчетах, близки к получающимся в приведенных ниже оценках. В этом смысле плавление корпуса расплавом на его боковой границе и процесс увеличения отверстия в корпусе идут приблизительно с одинаковой скоростью, что существенно нивелирует эффект возможного кинжального проплавления.

Зададимся геометрией (см. рис. 9): отверстие образуется на глубине h под уровнем расплава, расплав расслоен, оксидный слой находится внизу, стальной — сверху. Для оценок потока энергии на границе отверстия от

выходящего расплава рассматривается модельная задача о течении жидкости вдоль горизонтальной плоской стенки. Оценивается поток импульса жидкости на стенку, обусловленный трением в жидкости, и для оценки потока энергии используется рейнольдсова аналогия между переносом импульса и энергии в турбулентном потоке.

Полагаем, что на стенке отверстия образуется турбулентный пограничный слой. Коэффициент сопротивления в нем может быть определен согласно [5]:

$$C_d = \frac{2\kappa^2}{\ln \frac{x\left(C_d\right)^{1/2}}{d}},$$

где x — длина поверхности вдоль течения; d — размер выступов шероховатости; κ = 0,4 — постоянная Кармана. В нашем случае x берется порядка толщины стенки корпуса (0,2 м). Принимая d = 2 мм, получаем

$$C_d \approx 0{,}03.$$

Коэффициент трения есть отношение потока импульса в направлении на стенку, т. е. силы трения на единицу поверхности стенки τ, к потоку импульса вдоль течения ρU^2:

$$C_d = \frac{\tau}{\rho U^2},$$

где U — средняя скорость течения жидкости вне пограничного слоя; в нашем случае это скорость вытекания расплава.

В силу аналогии переноса импульса и энергии в турбулентном потоке, отношение потока тепла на стенку q к потоку тепла вдоль течения q_v, равно отношению потоков импульса в соответствующих направлениях. Таким образом,

$$\frac{q}{q_v} = \frac{\tau}{\rho U^2} = C_d.$$

Поток тепла вдоль течения

$$q_v = \rho C_p U \left(T - T_w\right),$$

где C_p — теплоемкость жидкости; T — температура в ядре потока; T_w — температура стенки. Тогда интересующий нас поток тепла в стенку

$$q = q_v C_d = C_d \rho C_p U \left(T - T_w\right).$$

Оценим скорость проплавления стенки, вызванного подводом тепла со стороны текущей вдоль нее жидкости. Эта скорость может быть оценена как отношение потока энергии к энергии, необходимой для доведения единицы объема стенки до температуры плавления и последующего плавления:

$$v = \frac{q}{\left(\rho_s C_{ps} \Delta T + \rho_s L\right) C_d}, \qquad (\text{П.1})$$

где ρ_s, C_{ps} — плотность и теплоемкость твердой стали; L — теплота плавления стали; ΔT — разность между температурой стенки корпуса вдали от границы с расплавом и температурой границы (т. е. температурой плавления стали). Подставляя в (П.1) выражение для потока тепла на стенку, получаем окончательную оценку скорости проплавления:

$$v = \frac{C_d U \left(T - T_w\right)}{\Delta T + T_L}. \qquad (\text{П.2})$$

Здесь принято, что плотность и теплоемкость жидкой и твердой стали вблизи температуры плавления одинаковы: $T_L \equiv L/C_{ps}$

Если проплавление произошло на некоторой глубине, то, пока уровень расплава не достиг верхней части отверстия в корпусе, предполагается, что увеличение размеров отверстия будет происходить во все стороны. Затем проплавление примет характер «прорезания»: граница будет распространяться преимущественно вниз.

Скорость «прорезания» корпуса при вытекании нижележащего кориума будет выражаться тем же выражением (П.2) с той разницей, что температура межфазной границы T_w будет не температурой плавления стали, а температурой плавления кориума. Перегрев кориума относительно температуры плавления составляет 100—150 К, а перегрев стали в верхнем слое — порядка 300—400 К, т. е. в три-четыре раза больше. Принимаем высоту ме-

таллического слоя $h = 0,5$ м, что соответствует 40 т стали. Сформулируем другие принимаемые допущения:

- теплоотвод в массу стального корпуса от границ отверстия мал относительно поступающего на эту границу потока тепла — это выполняется при принимаемом размере отверстия;
- принимаемый размер отверстия имеет порядок толщины корпуса, примерно 0,1 м;
- падение теплового потока на границе отверстия, вызванное остыванием вытекающего расплава за счет теплоотдачи на стенку и теплоотвода от его верхней границы, мало;
- при вытекании кориума влияние на теплоотдачу расплава корки, которая может образоваться на границе отверстия, мало.

Значения теплофизических параметров:

$T = 2200$ K — температура верхнего слоя стали;

$T_w = 1200$ K — температура плавления стали;

$\Delta T = 1200$ K — принято, что исходная температура корпуса равна 600 К;

$L = 2,5 \cdot 10^5$ Дж/кг;

ρ_s, $\rho = 7 \cdot 10^3$ кг/м^3;

C_{ps}, $C_p = 600$ Дж/(кг·К);

$T_A = 2800$ K — температура кориума в НКС;

$T_{wA} = 2650$ K — температура плавления кориума.

При высоте слоя стали над уровнем отверстия h скорость вытекания имеет порядок

$$U \approx (gh)^{1/2}. \qquad (П.3)$$

Если принять начальную высоту слоя жидкой стали порядка размера отверстия h = 0,1 м, то скорость истечения (П.3) должна быть порядка

$$U \approx 1 \text{ м/А}.$$

Если уровень расплава достиг верхней границы отверстия, оцениваемая скорость вытекания может быть ниже в два раза и более. Подставляя значения всех параметров в выражение (П.2), находим скорость проплавления корпуса при вытекании стали:

$$v \approx 0,01 \cdot \text{м/А}. \qquad (П.4)$$

Оценим характерное время вытекания стали из заданного объема Ω:

$$t = \Omega / SU,$$

где $\Omega \approx 6$ м^3 — объем верхнего слоя стали. Начальные размеры отверстия берем порядка толщины корпуса x, и его сечение $S \approx x^2 \approx 0,04$ м^2. При этих предположениях время вытекания

$$t \approx 6/(0,04 \cdot 1) \approx 150 \text{ с.} \qquad (\text{П.5})$$

Оценим количество стали корпуса, которое поступает в вытекающий расплав стали за время вытекания этого слоя. Поток тепла из стали в корпус оцениваем величиной $F \approx 1$ МВ т/м^2, отвечающей величине, получаемой в численном расчете. Скорость u_L продвижения фронта плавления в корпус определяется из соотношения Стефана

$$F = u_L \rho L,$$

откуда получаем толщину расплавленного слоя Δx и его объем V_L:

$$\Delta x \sim u_L t = Ft/\rho L, \quad V_L \sim \Delta x h D = tFhD/\rho L = 1 \text{ м}^3,$$

где $D = 5$ м — диаметр корпуса.

При средней толщине корпуса в момент образования отверстия, равной примерно 0,1 м, и высоте слоя стали примерно 0,5 м это отвечает объему примерно 0,75 м^3. Таким образом, даже при плавлении с «прорезанием» основная часть стали корпуса, находящаяся ниже верхней границы отверстия, способна расплавиться.

На границе оксидного расплава с корпусом до его вытекания существует твердая корка, препятствующая плавлению стали. Поскольку значительная часть остаточного тепловыделения из оксидов уходит наверх, в стальной слой, часть теплового потока, идущая через корку на корпус, не расплавляет сталь корпуса или плавит ее очень медленно. После вытекания стали весь поток тепла идет через корку и она начинает плавиться, а с ней — и корпус. Максимум теплового потока по-прежнему находится в верхней части расплава. Для «ножевого» проплавления должна сформироваться канавка, по которой оксидный расплав стекает вниз. Для прорезания стенки расплав сперва должен проплавить тугоплавкую корку, а затем — протечь по «легкоплавкой» стали. Вследствие того, что кориум имеет меньшую теплопроводность и большую вязкость, чем стали, процесс вытекания определяется

скоростью проплавления корки, которая определяется местным балансом тепловыделения, разогрева корки и теплоотдачи излучением. Детали процесса еще более сложны и неопределенны, чем в случае вытекания стали. Но ясно, что прорезание корпуса потоком кориума должно идти существенно медленнее.

Поскольку введение «ножевого» проплавления уменьшает консервативность оценок по массе стали, а по времени проплавления качественно не изменяет ситуацию, оно не принималось в расчет.

V. Численное моделирование поведения расплава в корпусе реактора ВВЭР-1000

А. Е. Киселев, М. Ю. Коржов, В. Ф. Стрижов, А. С. Филиппов

1. Введение

В работе рассмотрено расчетное моделирование процессов, происходящих в нижней части водо-водяного энергетического реактора (ВВЭР) на внутрикорпусной стадии аварии с осушением активной зоны (АЗ). Материал из разрушенной АЗ перемещается вниз и, обладая остаточным тепловыделением, плавит и разрушает внутрикорпусные устройства (ВКУ) и нижнюю часть корпуса реактора с днищем (далее — «корпус»). Для моделирования этих процессов, взятых в последовательности, используется модуль HEFEST системного кода СОКРАТ.

Код HEFEST существует в виде интегрированной версии как процедура, вызываемая комплексом СОКРАТ/В1 на каждом расчетном шаге, а также в виде автономной версии, допускающей самостоятельное выполнение. Функциональное различие интегрированной и автономной версий состоит в том, что при сквозном расчете по интегральному коду часть данных по внешним условиям берется в HEFEST'е из вызывающих подпрограмм, а при автономном — из данных, полученных в ранее проведенном сквозном расчете.

Основой для расчета процессов теплопередачи в HEFEST'е служит решение нестационарной задачи теплопроводности в неоднородной среде со свойствами, тепловыделением и граничными условиями, задаваемыми, исходя из физических представлений о процессах при тяжелой аварии (ТА). Вычислительные процедуры кода базируются на технологиях метода конечных элементов (дискретизация, интерполяция, хранение числовых массивов, решение алгебраических уравнений). Свойства материалов берутся из общей базы данных кода СОКРАТ. Свойства смесей рассчитываются на основе моделей кода HEFEST. Описание моделей кода приведено в [1; 2].

Один из самых существенных факторов поведения расплава в корпусе реактора — это распределение его теплоотдачи на границе с корпусом. От него зависит положение места разрушения (проплавления) корпуса и временной ход перемещения расплава из разрушенного корпуса вниз. В настоящей работе расчетный анализ сопровождается проверкой работы упрощенных моделей теплоотдачи расплава и проплавления корпуса, используемых в коде СОКРАТ/В1. Для этих целей привлекается CFD-код «Flu-

ent» [3]. В работе приведены результаты расчетов тестовых задач, проделанных по двум кодам.

2. Обозначения

АЗ — активная зона
ВВЭР — водо-водяной энергетический реактор
ВКУ — внутрикорпусные устройства
ДШ — днище шахты
КЭ — конечный элемент
НКС — нижняя камера смешения
ТА — тяжелая авария
ТЖ — тепловыделяющая жидкость
CFD — computational fluid dynamics (вычислительная гидродинамика)

3. Процессы при тяжелой аварии, рассчитываемые в коде HEFEST

Тепловое разрушение АЗ протекает при высоких температурах и сопровождается химическим взаимодействием составляющих материалов между собой и с теплоносителем, разрушением твэлов, растрескиванием топливных таблеток, плавлением и перемещением материала. Состав образующегося расплава отвечает составу АЗ с учетом частичного окисления циркония и других материалов — в основном UO_2, Zr, ZrO_2, нержавеющей стали. Содержание остальных веществ составляет порядка 1% и с точки зрения теплопередачи несущественно.

3.1. Поступление материала из активной зоны в нижнюю камеру смешения

После разрушения опорной дистанционирующей решетки активной зоны расплав материалов АЗ перемещается из нижней части разрушенной АЗ в пространство нижней камеры смешения (НКС). Происходящие после этого процессы разрушения в нижней части реактора моделируются кодом HEFEST. На этапе поступления материала они сводятся в численной модели к следующим:

- взаимодействие расплава с теплоносителем (водой), имеющимся в этот момент в НКС;
- поступление и пространственное распределение материала в объем НКС;
- дальнейшее выпаривание воды в НКС тепловыделяющим материалом;
- процессы теплопереноса в твердом и расплавленном материале АЗ, ВКУ и корпусе;
- приграничный теплообмен горячего материала с водой.

3.2. Тепловое разрушение НКС и корпуса

Вода, содержащаяся в порах образовавшейся засыпки материала АЗ, частично выпаривается, частично вытесняется паром, и дальнейшее тепловое взаимодействие с водой должно носить преимущественно граничный характер. Остаточное тепловыделение в массе расходуется большей частью на разогрев и плавление металлов и оксидов. Дальнейшие моделируемые процессы и явления здесь таковы:

- после выпаривания воды в НКС — разогрев, плавление поступившего материала АЗ;
- образование многокомпонентного расплава;
- теплоперенос в твердом материале и расплаве;
- расслоение расплава (в зависимости от его состава);
- лучистый теплообмен с окружающим материалом на границах корпуса и расплава;
- тепловое разрушение днища шахты (ДШ) и корпуса;
- внутрикорпусное перемещение расплава (при разрушении ДШ);
- плавление корпуса и постепенное удаление расплава после разрушения корпуса.

Основное внимание в работе будет уделено моделированию процессов распространения области плавления в большом объеме и конвективной теплопередачи образующегося расплава.

Остаточное тепловыделение связано с продуктами деления, масса которых составляет малую часть всего материала. Первоначально нелетучие они сосредоточены в топливных таблетках. В модели расплава на основании экспериментов [4] предполагается, что по мере плавления частиц топлива тепловыделяющие продукты деления растворяются в образующемся оксидном расплаве. По этой причине объемное тепловыделение в расчетах пропорционально связывается с концентрацией UO_2.

Расплав расслаивается на несмешивающиеся оксидную и металлическую составляющие, имеющие однородный состав. При наличии неокисленно-

го циркония в состав металлического слоя может входить уран, который отбирается от UO_2. Как показывают эксперименты [4], состав металлического и оксидного слоев (точнее, количество свободного урана в металлическом растворе и окисленного циркония в оксидном слое) зависит от изначального соотношения оксидов и стали, образовавших данный расплав. Эта зависимость и соответствующее изменение плотности учитывается в расчете. Взаиморасположение металлического и оксидного слоев определяется различием плотности металлической и оксидной составляющей.

Конвекция расплава существенно интенсифицирует теплоотдачу на корпус и не дает расплаву сильно перегреться. Распределение потока тепла на границе расплава с корпусом неоднородно и имеет выраженный максимум в верхней части боковой границы бассейна. При расслоении расплава картина течения и распределение теплоотдачи усложняются. Эксперименты по теплоотдаче расслоенного тепловыделяюшего расплава в условиях теплового излучения с верхней границы неизвестны. Для проверки работы модуля СОКРАТ/HEFEST взята модельная задача о расслоенном расплаве, которая решается кодомами HEFEST и «Fluent». Последний позволяет проводить расчеты гидродинамики несмешивающихся жидкостей при наличии турбулентности в условиях частичного затвердевания расплава на холодной части границы.

Ниже кратко охарактеризованы те модели HEFEST'а, которые используются для представления процессов тепломассопереноса.

3.2.1. Модель конвективной теплопередачи в расслоенном расплаве

Гидродинамика расплава в HEFEST'е не рассчитывается, и модель конвективной теплопередачи здесь — это «кондуктивная» модель. Для усиления теплопереноса в заданном направлении вводятся увеличенные «эффективные» значения теплопроводности материала в этом направлении. Используется простейшая реализация модели: эффективный коэффициент теплопроводности берется ортотропным — главные направления тензора теплопроводности ортогональны и не зависят от координат. В расчете задаются эффективные значения для двух направлений, одно из которых вертикальное (направление вектора гравитации). Эффективные значения вычисляются следующим образом:

$$\lambda_R = c_R \lambda_{\text{cond}}, \ \lambda_z = c_z \lambda_{\text{cond}}, \ c_R = \text{Nu} = \text{Nu}_{\text{doun}}, \ c_z = \xi c_R, \ \xi = 0,1,$$

где величина $\mathrm{Nu}_{\mathrm{doun}}$ отвечает среднему числу Нуссельта, определяемому для боковой поверхности расплава. Оно вычисляется из полуэмпирической зависимости для предполагаемых режимов конвекции расплава.

3.2.2. Поведение металл-оксидного расплава у границ плавкого стального сосуда

Модель плавления многокомпонентного материала в HEFEST'е описана в [1]. Учет плавления, переменного состава расплава и его перемешивания базируется на следующих упрощающих предположениях:

- расплав может состоять из одного или двух несмешивающихся слоев, располагающихся согласно их плотности; возможность возникновения расслоения расплава управляется критериями, которые задаются пользователем;
- состав еще не расплавленного материала в конечном элементе (КЭ) может быть неоднородным;
- при возникновении физических условий для плавления (температура и состав материала) в данном КЭ начинается плавление; плавление заканчивается при поглощении теплоты плавления материала — стали или смеси;
- плавление в однородном материале моделируется с использованием эффективной теплоемкости;
- мгновенное перемешивание: состав слоя расплава полагается однородным и при переходе в расплав новой порции материала состав расплава в слое пересчитывается;
- в материале расплава, имеющем температуру выше точки плавления, вводится эффективная теплопроводность конвекции;
- продвижение корки: при контакте горячего тугоплавкого неоднородного материала (кориума) со сталью она переходит в расплав;
- температура и состав материала расплава пересчитываются с соблюдением баланса состава и энергии.

3.3. Расчеты модельных задач конвективной теплоотдачи расплава

Плавление/затвердевание в модели «Fluent» также происходит в некотором интервале температуры (солидус-ликвидус). Для учета скрытой теплоты перехода и прекращения движения материала при затвердевании в уравнение энергии вводятся соответствующие источниковые/стоковые члены и стоковые члены — в уравнение движения.

Ниже приведены результаты решения трех задач, полученные в гидродинамической и кондуктивной постановках кода HEFEST. Постановки этих задач описывают различные аспекты теплогидродинамического поведения расслоенного тепловыделяющего расплава в корпусе реактора:

- конвекцию и теплоотдачу однородного оксидного расплава в толстостенном сосуде;
- плавление боковой стенки плоским металлическим слоем расплава, подогреваемого снизу потоком тепла, имитирующим нагрев стали нижележащим расплавом оксидов;
- конвекцию и теплоотдачу расслоенного расплава, в котором металлический слой находится над тепловыделяющим оксидным слоем.

Первая задача демонстрирует некоторые особенности решения, связанные с наличием корки и стенки конечной толщины. Во второй задаче представляет интерес скорость продвижения фронта плавления металлической стенки, рассчитываемая по гидродинамической и кондуктивной моделям. В третьей задаче интерес представляет распределение теплоотдачи на боковой стенке.

Опции кода «Fluent» были одинаковы во всех расчетах и брались следующими:

- метод решения — метод установления;
- опции численного решения:

аппроксимация по времени первого порядка;

аппроксимация по пространству первого и третьего порядков (QUICK);

модель естественной конвекции в приближении Буссинеска;

- k-ε -модель турбулентности, опция «realizable» [5];
- плавление-затвердевание — модель «Fluent».

3.3.1. Ванна расплава в толстостенном сосуде

Границы областей видны на рис. 1, где показана сетка для кода HEFEST. Толщина стенки бралась фиксированной во времени, но переменной в пространстве. Минимальная толщина (в верхней части) составляла 0,03 м, максимальная (в нижней части) — 0,2 м. Такой выбор формы области корпуса был сделан по следующим причинам. Возможность моделирования в CFD-расчете динамики плавления стального корпуса многокомпонентным расплавом имеется, но это сильно усложняет расчет и требует введения дополнительных данных. Поэтому в тестовом CFD-расчете решалась задача, в которой расплав однороден, а материал корпуса задавался без опции плавления. В стационарном состоянии охлаждаемый стальной корпус номинальной толщины (около 0,2 м) не может пропустить весь поток от тепло-

выделения расплава и должен быть частично расплавлен, причем в большей степени там, где поток тепла больше. Взятая конфигурация и толщины в некоторой степени отвечают очертаниям подплавленного корпуса. Данный расчет носит модельный характер, его основная цель — сравнение результатов, полученных по двум кодам.

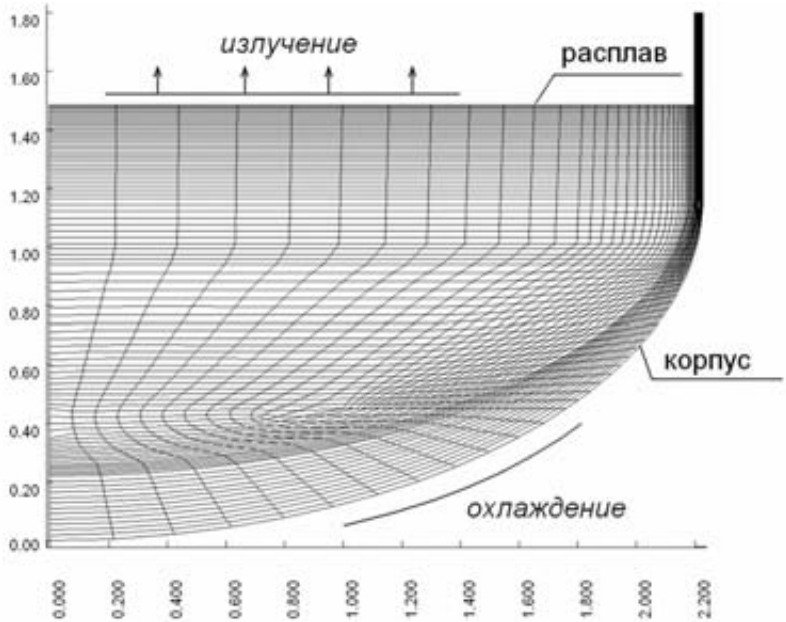


Рис. 1. КЭ-модель для расчета нерасслоенного расплава

Параметры материала расплава отвечали жидкому кориуму С-32: объемное тепловыделение — 10^6 Вт/м^3 (интегральное — 14,4 МВт), теплопроводность в твердом и жидком состояниях — 7 и 12 Вт/(м·К), плотность — 7900 кг/м^3, теплоемкость — 530 Дж/(кг·К), теплота перехода — 250 кДж/кг, солидус — 2520 К, ликвидус — 2540 К.

Выбор температур солидуса и ликвидуса обусловлен предполагаемым гидродинамическим поведением материала при плавлении. В данном тестовом расчете интервал плавления не отвечает интервалу плавления трехкомпонентной системы, составляющему для С-32 несколько сотен градусов. Однако при повышении температуры, начиная от солидуса, материал долгое время остается очень вязким («гарнисаж», «mushy-region») и становится жидким, только приближаясь к ликвидусу. Вязкость кориума эффективно изменяется от больших до малых значений в сравнительно узком интервале температур, в котором кориум превращается в однородную по механиче-

ским свойствам жидкость. Этот интервал и выбирался как интервал перехода от твердого состояния к жидкому, поскольку для модели плавления CFD-расчета существенно в основном температурное поведение вязкости. В расчете по HEFEST'у в указанном интервале плавления задавался переход к эффективной теплопроводности конвекции. Материал корпуса брался без плавления.

На наружной границе области корпуса заданы условия третьего рода

$$F_{12} = H\left(T - T_b\right)$$

с температурой охлаждения $T_b = 373\ \mathrm{K}$, коэффициент теплоотдачи на границе охлаждения $H = 10$ кВт/(м²К). Условия на верхней границе расплава — излучение с поверхности по закону

$$F_{12} = \varepsilon\sigma\left(T^4 - T_b^4\right) \qquad (1)$$

с коэффициентами $\varepsilon = 0{,}3,\ T_b = 1700\ \mathrm{K}$.

Результаты расчетов и обсуждение. Результаты расчетов потоков тепла на границах расплава и температуры расплава, полученные с помощью кода HEFEST и CFD кода «Fluent», приведены на рис 2 и 3, в табл.1.

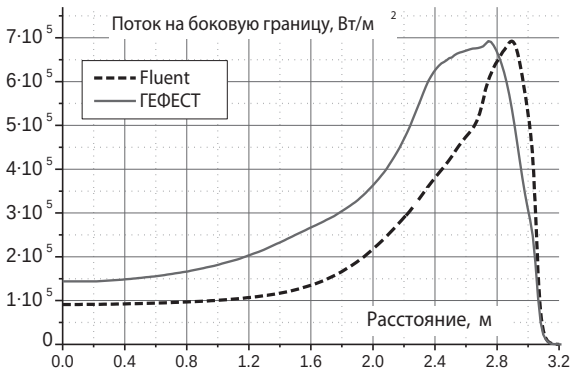


Рис. 2. Распределение потока тепла на боковой границе расплава

Таблица 1. Температура и потоки тепла в расплаве

Показатель	HEFEST	«Fluent»
Максимальная температура, К (перепад Tmax – TLIQ)	2655 (115)	2660 (120)
Температура поверхности, К	2515	2560
Поток тепла вбок, МВт (доля от тепловыделения)	11,17 (0,225)	8,1 (0,55)
Поток тепла вверх, кВт/м^2 (доля от тепловыделения)	3,24 (0,775)	6,6 (0,45)

Основное отличие распределений потока тепла, полученных по кондуктивной и гидродинамической моделям, состоит в большей величине потока тепла в приосевой области, в которой разрушение маловероятно. Положения и величина максимума потока, определяющие место проплавления, в двух расчетах близки, но максимум плотности потока тепла в CFD-расчете лежит выше.

Больший суммарный поток тепла через боковую границу расплава в расчете по HEFEST'у соответствует меньшей величине теплоотдачи излучением (см. табл. 1) с верхней границы. Температура поверхности расплава здесь оказывается ниже (рис. 3). Поскольку физическое состояние кориума в области плавления (2140—2540 К) в обоих расчетах не моделируется и вообще количественно еще мало исследовано, вопрос о состоянии кориума вблизи излучающей поверхности не вполне ясен. Доля тепловыделения, идущая на тепловое излучение, полученная в CFD-расчете (40%), велика и отвечает почти полному отсутствию корки на излучающей границе расплава. В случае если в верхней части расплава находится металлический слой с меньшей температурой плавления, доля потока излучения для обеих моделей будет заметно ниже.

В целом по результатам моделирования по двум различным кодам теплоотдачи расплава в корпусе можно сделать следующие выводы:

- по положению и величине максимума потока тепла через боковую границу имеется хорошее согласие расчетов;
- по распределению интегрального потока на боковую и верхнюю границы имеется некоторое отличие, но определить, какой из результатов точнее, затруднительно.

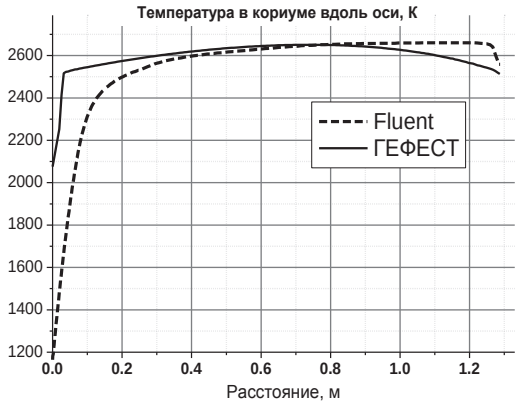


Рис. 3. Профиль стационарной температуры в расплаве на оси («Fluent» — усреднение по времени)

3.3.2. Нестационарная задача о плавлении стальной стенки расплавом

В этой задаче рассчитывается проплавление стального корпуса потоком тепла из металлического слоя, нагреваемого снизу потоком тепла, что моделирует верхний металлический слой расслоенного расплава. Решение задачи проведено с помощью кода «Fluent 6.3» и кода HEFEST.

Расчетная конфигурация показана на рис. 4. Она состоит из подобластей *1* и *2*. Область *2* моделирует изначально холодный толстостенный стальной корпус, область *1* отвечает горячему расплаву (сталь). Цель расчетов — проверка соответствия кондуктивной и гидродинамической моделей плавления и получение количественных оценок скорости проплавления.

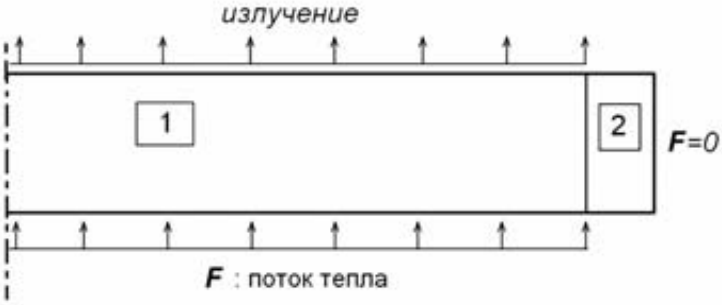


Рис. 4. Постановка задачи о плавлении границы стального слоя

В подобластях *1* и *2* задавалось ступенчатое распределение начальной температуры:

$$T = T_m,\ R < R_m,\ \text{и}\ T = T_s,\ R_m \le R \le R_v,\ R_m = 2{,}07\ \text{м},\ R_v = 2{,}27\ \text{м},$$

при этом боковая граница $(R - R_v)$ считалась теплоизолированной. Толщина слоя составляла 0,34 м, поток тепла снизу $F = 400$ кВт/м^2. Общее количество стали вместе со сталью корпуса, соответствующее толщине слоя, составляет здесь 65—70 т, что несколько ниже характерных значений, получаемых в расчетах сценариев тяжелых аварий для ВВЭР-1200. Однако это небольшое отличие не меняет качественных выводов о характере плавления и близости результатов расчетов по моделям HEFEST'а к результатам гидродинамических расчетов.

Скорость плавления зависит от начальной температуры расплава. Здесь приведены результаты для варианта, отвечающего начальной температуре расплава (область *1*) $T_m = 2000\ \text{K}$ и начальной температуре в (нерасплавленной) области *2* $T_s = 400\ \text{K}$. При сравнении результатов, полученных с помощью HEFEST'а и гидродинамической модели, имеется неоднозначность, связанная с тем, что граница плавления в гидродинамическом расчете продвигается не параллельно исходному положению — в верхней части плавление идет быстрее. Это можно видеть на рис. 5, где приведено распределение функции тока, которое в квазистационарном режиме близко к фактическим линиям тока жидкости. Наклонная граница плавления находится справа.

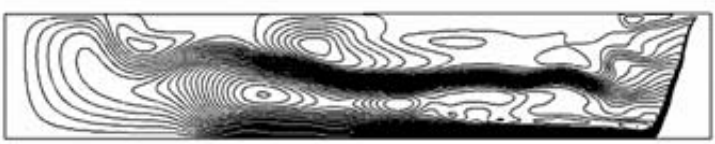


Рис. 5. Нестационарное распределение функции тока в гидродинамическом расчете плоского стального слоя

Непараллельность продвижения границы плавления предположительно связана с характером течения — стекающая по боковой стенке жидкость остывает и теплоотдача в нижней части боковой границы расплава меньше, а в верхнем правом углу расчетной области поток тепла максимален. Кроме того, существенно, что приток тепла с нижней границы при радиусе $R > R_m$ нулевой. В кондуктивной модели теплопередачи подобный гидродинамический эффект не выражен.

Поскольку корпус на уровне стального слоя должен плавиться быстрее, и радиус действия потока тепла от кориума снизу может быть меньше, чем

радиус металлического расплава, указанный эффект в расслоенном расплаве может иметь место и приводить к тому, что разрушение корпуса начинается вблизи верхней границы всего расплава. В этом случае выход расплава из корпуса должно происходить постепенно, без больших залповых выбросов.

Для исключения влияния на проплавление ограничения по геометрии сверху был проделан аналогичный расчет, в котором стенка бралась относительно высокой, чтобы область нагрева имела возможность распространяться вверх. Была получена аналогичная картина течения (рис. 6). Несмотря на неточности модели, связанные с жестким заданием положения верхней границы расплава и корпуса, на основании проведенных расчетов можно предположить, что эффект преимущественного распространения плавления в верхней части расплава может иметь место.

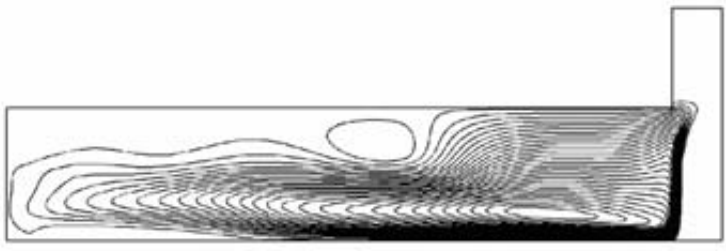


Рис. 6. Нестационарное распределение функции тока в гидродинамическом расчете плоского стального слоя с высокой стенкой (мелкая сетка)

На рис. 7 представлены профили температуры в окрестности стальной стенки в последовательные моменты времени. Основной интерес представляет темп продвижения границы плавления, и по указанной причине для сравнения привлекаются радиальные профили температуры из гидродинамического расчета, построенные на верхней границе расплава (обозначены «верх», прерывистая линия с коротким штрихом), а также построенные на полувысоте (обозначены «серед.», прерывистая линия с длинным штрихом). Профили температуры, полученные в расчетах по HEFEST'у, построены на полувысоте слоя (сплошная линия). Группы кривых, относящихся к одному моменту времени, объединены соответствующими метками.

Негоризонтальность распределений температуры по расплаву, полученных по кондуктивной модели, связана со спецификой модели (тепло передается только по градиенту температуры). Перегрев расплава для обеих моделей приблизительно одинаков, и, имея сходные распределения теплоотдачи на границе, для целей моделирования ТА можно не интересоваться распределением температуры в расплаве.

По результатам расчетов можно заключить следующее:

- продвижение границы плавления (точка, где температура равна температуре плавления) в расчете по HEFEST'у хорошо следует продвижению фронта плавления в гидродинамической модели;
- темп продвижения границы достаточно высок, плавление слоя толщиной 20 см происходит при выбранных условиях не более чем за сотни секунд;
- вероятное место проплавления для расслоенного расплава может находиться у верхней границы расплава.

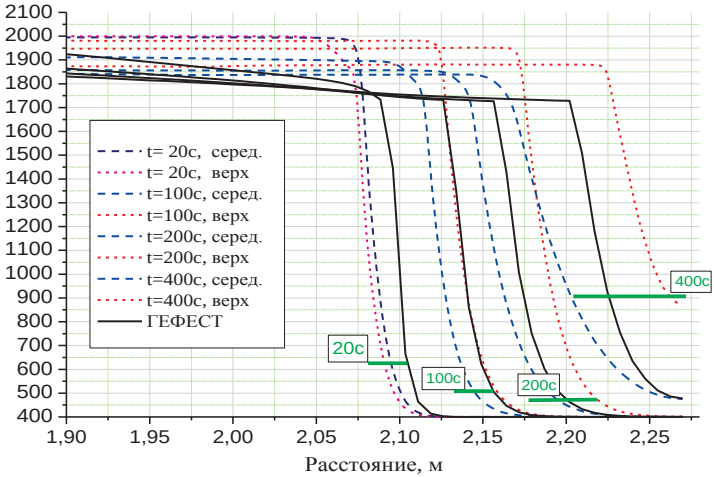


Рис. 7. Нестационарная задача о стальном слое. $T_m = 2000\ \mathrm{K}$ — радиальные профили температуры в последовательные моменты времени, полученные по разным кодам

3.3.3. Расслоенный расплав — стационарная задача

Ниже описаны расчеты задачи о теплоотдаче расслоенного расплава в корпусе реактора. Хотя задача решается методом установления, что дает возможность не только получить стационарное распределение теплоотдачи, но и проследить за эволюцией от начального состояния, само это начальное состояние расплава не вполне определено в силу специфики условий его возникновения. Распределение массы, состава и энтальпии расплава определяется развитием аварийных процессов, и расслоенное состояние должно формироваться вместе с этим развитием. Для целей сравнения расчетов по двум кодам в расчеты вводилось упрощение: расслоение расплава задавалось вместе с другими начальными условиями. Материал верхнего слоя соответствовал стали.

В CFD-расчете расслоение учитывалось с помощью модели свободной границы. В коде «Fluent» для этих целей используется так называемый метод VOF (volume of fluid) с явным отслеживанием границы жидкостей. Для упрощения проведения расчета и сравнения с HEFEST'ом стенка корпуса в расчет явно не вводилась. Основной интерес здесь представляли установившееся состояние, получаемое в расчетах по двум кодам, распределение температуры в расплаве и распределение теплоотдачи расплава на боковой границе.

Конфигурация расчетной области и параметры расплава. Расчетная область приведена на рис. 8. Область расплава разбита на две подобласти, отвечающие металлическому слою (вверху) и оксидному слою (внизу). Толщина металлического слоя — 0,34 м. Объемное тепловыделение мощностью 2 МВт/м^3 задано в оксидном слое, полное тепловыделение — 16,2 МВт. Константы материалов отвечали константам стали и кориума, использованным в описанных выше расчетах однородного расплава. Начальное условие задается температурой (начальные скорости в CFD-расчете нулевые). На боковой границе заданы условия первого рода с температурой $T = 1700\ \mathrm{K}$, что отвечает принимаемой температуре плавления стали. Температура плавления кориума существенно выше, и в модель материала для него вводилась опция затвердевания. На верхней границе расплава (стали) заданы условия излучения на среду с температурой $T_b = 1700\ \mathrm{K}$ и коэффициентом серости 0,3.

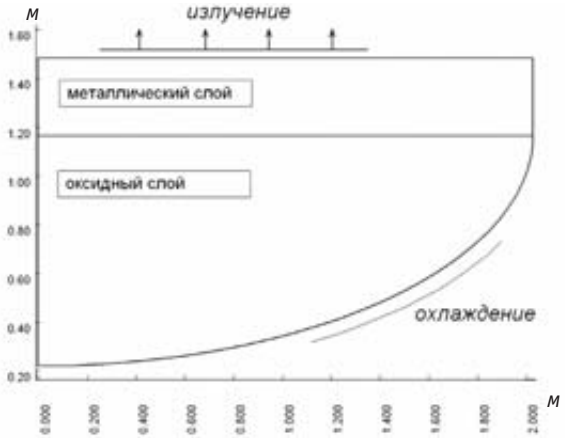


Рис. 8. Расчетная область

Температура оксидного слоя на верхней границе со сталью устанавливается ниже температуры солидуса, поэтому там может образоваться твердая корка, которая должна быть плотнее жидкости. Однако вопрос о том, устойчива ли корка на границе в условиях турбулентной конвекции двух

жидкостей, еще не исследован. В описываемых расчетах предполагается, что корка остается на границе слоев.

Результаты расчетов и обсуждение. На рис. 9 приведены распределения потока теплоотдачи, построенные вдоль образующей боковой границы расплава, начиная от осевой точки, на рис. 10 — распределения температуры в приосевой области. Можно видеть, что профили температуры на оси имеют характерный ступенчатый вид, отвечающий температурам оксидного и металлического слоев. Температура стального слоя близка к принимаемому значению температуры среды над расплавом. Вследствие этого полный поток тепла излучения составляет в обоих расчетах величину порядка 5% полного тепловыделения (при уменьшении температуры окружающей среды до $1000\ \mathrm{K}$ эта доля возрастает до 14—17%).

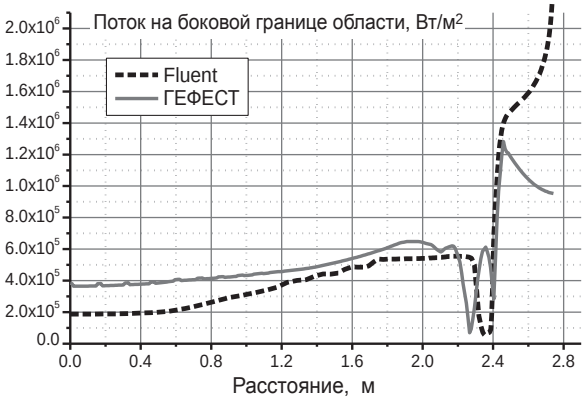


Рис. 9. Распределение потока тепла на боковой границе расслоенного расплава

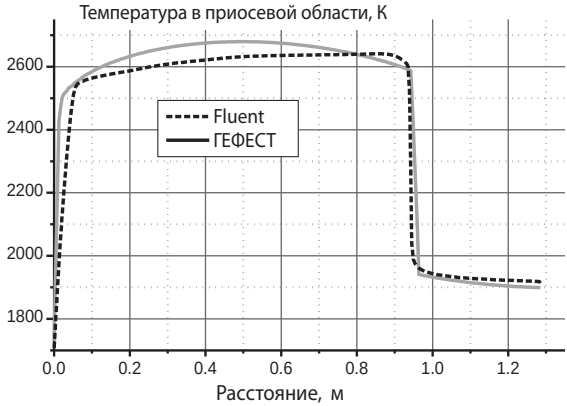


Рис. 10. Распределение температуры по высоте в приосевой области (оксидный и металлический слои)

На большей части высоты профиль осевой температуры в оксидном слое в CFD-расчете монотонно возрастает снизу вверх, что отвечает температурной стратификации в тепловыделяющем расплаве [6]. Расчет по кондуктивной модели, естественно, не описывает этих деталей, но в целом получаемые температуры в обоих расчетах близки.

Профили плотности потока тепла на боковой границе, полученные по кондуктивной и гидродинамической моделям, в области оксидного слоя также достаточно близки друг к другу, а в области границы слоев и выше имеется расхождение — максимальная плотность потока тепла в области металлического слоя, получаемая в CFD-расчете, заметно выше. В обоих расчетах плотность потока на боковой границе имеет особенность в области контакта двух слоев.

По результатам проведенного по двум различным кодам моделирования теплоотдачи расслоенного расплава в корпусе можно сделать выводы:

- положение максимума потока тепла через боковую границу, даваемое обоими кодами, в целом отвечает положению стального слоя; здесь соответствие можно признать удовлетворительным.
- распределения интегрального потока на боковую границу, даваемые двумя кодами, совпадают качественно, но имеется различие по максимуму потока (вопрос о том, как может влиять это различие на остальные результаты моделирования расплава в корпусе, обсуждается ниже).

4. Моделирование удержания расплава в корпусе при аварии «большая течь»

Для разбора расчета процесса удержания расплава в корпусе кодом СОКРАТ/HEFEST выбран сценарий типа «большая течь» для реактора ВВЭР-1200. Исходное событие — течь из холодной нитки главного циркуляционного трубопровода (Ду300) с отказом активной части системы аварийного охлаждения активной зоны.

Так как предполагается, что расплав после разрушения корпуса перемещается в устройство локализации, охлаждение корпуса снаружи не предусматривается. Приводимые результаты отвечают той стадии аварийного процесса, когда активная зона разрушена и расплав материала АЗ перемещается в нижнюю часть реактора. Моделируемая область реактора находится ниже активной зоны (рис. 11). В рассмотренном сценарии разрушается и быстро перемещается вниз почти весь материал активной зоны, поэтому получаемые значения масс компонентов и времена событий близки к предельным.

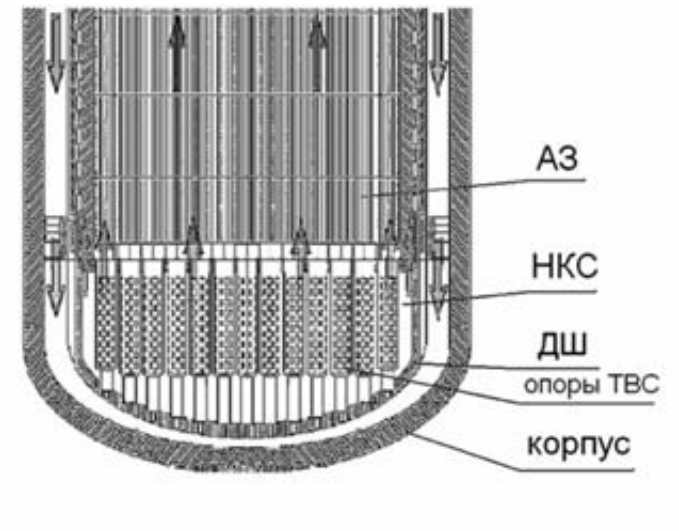


Рис. 11. Общий вид моделируемой части реактора

Ход поступления материала из АЗ в НКС представлен на рис. 12. Этот материал размещается в области ДШ последовательными слоями. Попадая в воду, первые порции материала остывают, поэтому температура в нижней части НКС оказывается заметно меньше (рис. 13). На распределение температуры существенно влияет также распределение тепловыделяющего материала (топлива). Положение максимума температуры определяется этими двумя факторами, что иллюстрируют, в частности, рис. 13 и 14.

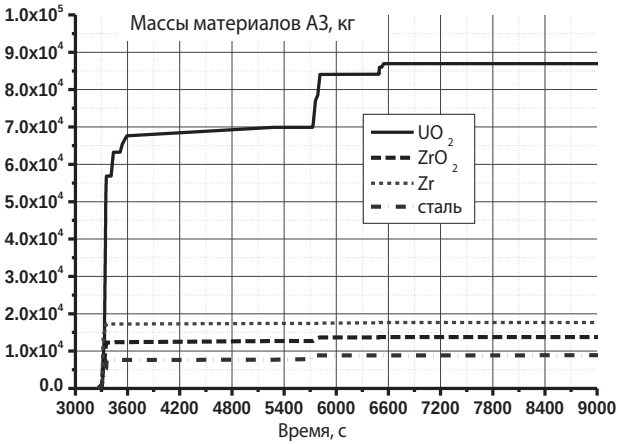


Рис. 12. Поступление материала из АЗ — массы компонентов, переместившиеся в НКС, в зависимости от времени

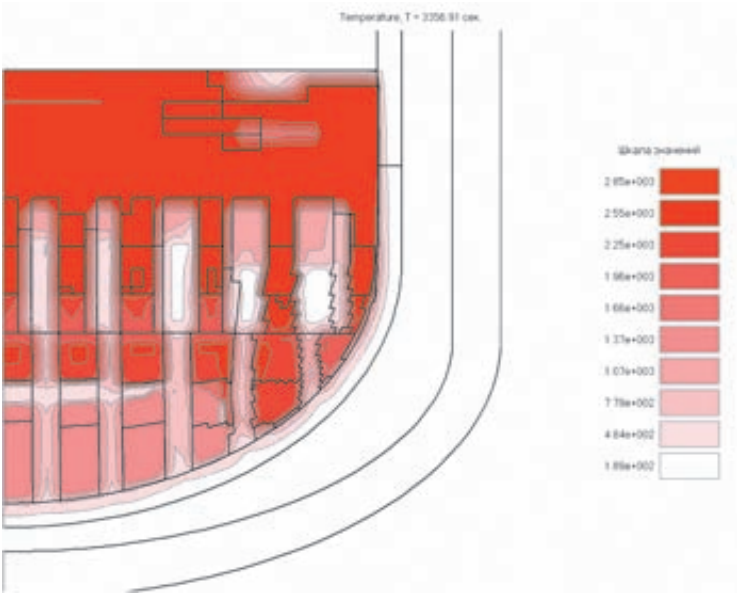


Рис. 13. Распределение температуры в НКС до проплавления днища шахты

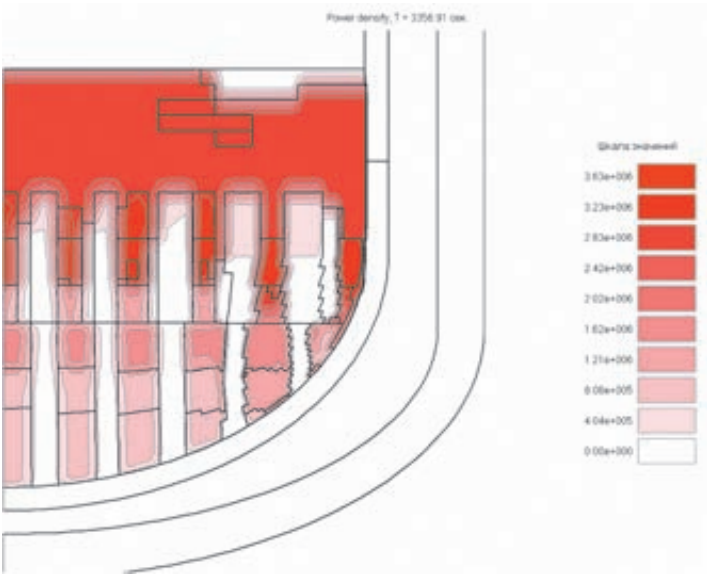


Рис. 14. Распределение тепловыделения в НКС

После поступления и вторичного разогрева тепловыделяющего материала температура в НКС быстро растет, так как полное остаточное тепловыделение (без учета летучих продуктов) составляет в первые часы после останова реактора 25—35 МВт. Поэтому проплавление стенки днища шахты реактора также происходит быстро. Место проплавления в расчете определяется максимумом температуры на наружной границе ДШ. На рис. 15 представлены зависимости от времени температур в узлах расчетной сетки, находящихся на наружной границе ДШ. Начальная температура 580 К отвечает рабочей температуре реактора. До определенного момента на границе находится вода и температура медленно падает, затем, когда вода кончается, а на днище уже переместился горячий материал, температура начинает расти. Точка, где температура впервые достигает критерия плавления (узел 1089 на рис. 15), отвечает месту проплавления ДШ.

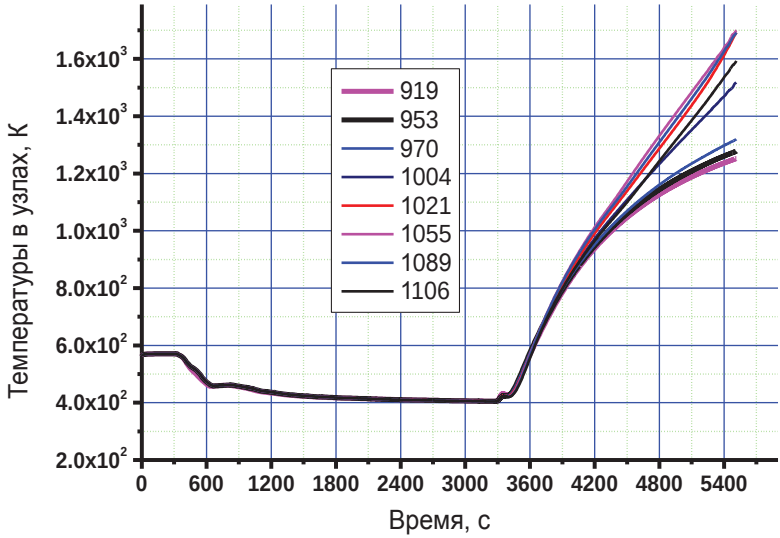


Рис. 15. Температура по узлам на границе ДШ

После разрушения ДШ расплав переходит в пространство между ДШ и корпусом. В расчете для этой стадии используется другая сетка конечных элементов, включающая корпус, то, что не расплавилось на предыдущей стадии, расплав и область бетонной шахты реактора (рис. 16). Для упрощения моделирования теплоотдачи на шахту реактора ее форма взята полуэллиптической, что не вносит большой погрешности в полный баланс тепла.

Поскольку значительная часть расплава при перемещении остается жидкой, он должен расслаиваться на оксидную и металлическую фазы. Это рас-

слоение вводится критериально — по времени с момента разрушения ДШ (100 с). При этом принимается, что относительная доля расплава должна превышать определенное минимальное значение.

Характерные моменты времени событий на стадии нахождения расплава в НКС и разрушения корпуса представлены в табл. 2. Масштаб времени событий здесь составляет около часа.

Таблица 2. Характерные времена событий

Событие	Момент времени, с
Начало поступления материала из АЗ в НКС	3 070
Разрушение днища шахты	5 500
Разрушение корпуса, выход металлического расплава (рис. 17)	8 540
Начало выхода оксидного расплава	9 600
Выход 90% расплава	10 800

Темп разрушения твердого материала конструкций реактора и корпуса определяется температурой материала и тепловыделением. Он оказывается очень высоким. При таком темпе температура расслоенного расплава не успевает полностью установиться, поэтому точность оценок теплоотдачи, взятых по моделям стационарного состояния и применяемых в коде СОКРАТ/HEFEST, здесь, вообще говоря, понижена. Температура расплава превышает стационарное значение, проплавление может идти быстрее, чем в расчете по коду HEFEST. Следует отметить, однако, что процессы проплавления стенки ДШ и стенки корпуса в контакте с расплавом занимают сравнительно небольшую часть общего времени разрушения АЗ, НКС и корпуса (10—15%). Остальное время идет на разогрев и плавление большей части остального материала (остывшего при попадании в воду материала конструкций и корпуса). Поэтому неточности в распределении потока тепла, по-видимому, не приводят к большим ошибкам в определении времени разрушения корпуса. Это, в частности, относится также к полученным выше различиям в распределениях потока тепла, полученных по кодам СОКРАТ/HEFEST и «Fluent».

С другой стороны, в силу специфики распределения потока тепла в ТЖ и других факторов место разрушения должно находиться на определенной

высоте (порядка 1 м и выше) от нижней точки корпуса, и эта существенная особенность проявляется в расчетах по обоим кодам.

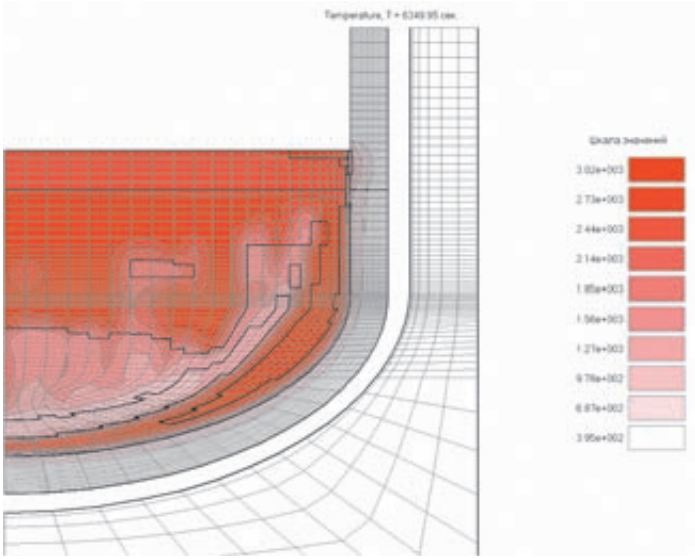


Рис. 16. Конфигурация и температура расслоенного расплава в корпусе

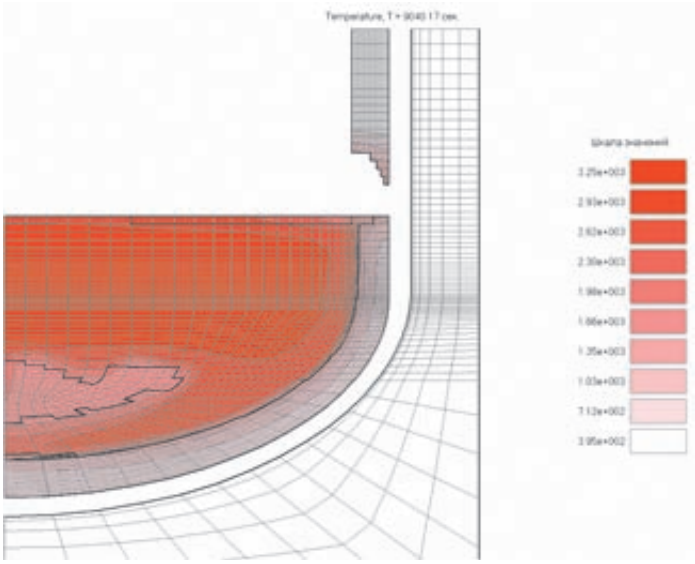


Рис. 17. Конфигурация и температура после проплавления корпуса

Зависимость от времени масс компонент расплава, выходящих из корпуса после его разрушения, представлена на рис. 18. После проплавления корпуса и быстрого выхода металлического расплава в корпусе остается в основном оксидный расплав. Темп разрушения корпуса здесь будет определяться остаточным тепловыделением, поскольку корка на границе «расплав — корпус» препятствует проплавлению за счет избыточной внутренней энергии расплава, как это происходит в случае металлического слоя.

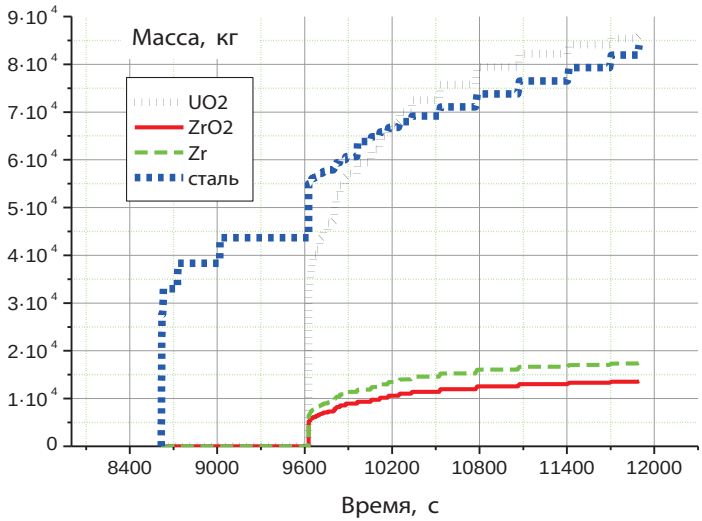


Рис. 18. Временной ход выхода расплава из разрушенного корпуса

5. Основные результаты

Сравнительные расчеты тестовых задач по теплоотдаче расплава, проведенные по кодам COKPAT/HEFEST и «Fluent», показали близость получаемых количественных результатов с точностью, достаточной для целей моделирования тяжелых аварий.

Это касается пространственного распределения потока теплоотдачи расплава, его температуры и скорости проплавления корпуса металлическим слоем. Необходимая степень точности моделирования временного хода событий аварии для сценариев типа «большая течь» видна из результатов проведенного моделирования одного из таких сценариев.

Вместе с тем гидродинамические расчеты плавления корпуса на границе с металлическим расплавом показывают, что в отличие от результатов,

получаемых в более грубых моделях, плавление более интенсивно и проплавление в верхней части боковой границы слоя более раннее, поэтому при разрушении корпуса в процессе тяжелой аварии поступление расплава стали в устройство локализации может быть более плавным, без начального залпового выброса.

Литература

1. *Игнатьев А. И., Киселев А. Е., Семенов В. Н.* и др. ГЕФЕСТ: численное моделирование процессов в нижней части реактора ВВЭР при тяжелой аварии. — М., 2003. — 31 с. — (Препринт / ИБРАЭ; № IBRAE-2003-13).

2. *Киселев А. Е., Семенов В. Н., Стрижов В. Ф.* и др. ГЕФЕСТ: Модели теплообмена с паром и перемещения материалов в НКС реактора ВВЭР при тяжелой аварии. — М., 2003. — 24 с. — (Препринт / ИБРАЭ; № IBRAE-2003-14).

3. Fluent.Inc Fluent 6.2 User's Guide. — Lebanon, 2005.

4. MASCA Seminar. Aix-en-Provence, France, 10—11 June 2004. — [S. l.], 2004.

32. Методы расчета турбулентных течений. — М.: Мир, 1984.

33. Большов Л. А., Кондратенко П. С., Стрижов В. Ф. Свободная конвекция тепловыделяющей жидкости // УФН. — 2001. — Т. 171, № 10. — С. 1051—1070.

VI. Применение интегральных кодов для моделирования аварийных режимов реакторов типа ВВЭР

А. Е. Киселев, Н. А. Мосунова, В. Н. Носатов, А. Е. Стрижов, Д. Ю. Томащик

1. Введение

В последние годы надзорные органы России пересмотрели требования по обеспечению безопасности АЭС, находящихся как в стадии эксплуатации, так и в стадии проектирования. В частности, считается необходимым поэтапное проведение работ по вероятностному анализу безопасности (ВАБ-1, ВАБ-2) для всех действующих энергоблоков. При этом основным инструментом для прогнозирования результатов запроектных и тяжелых аварий являются тяжелоаварийные интегральные коды улучшенной оценки. Среди них наиболее известны и хорошо зарекомендовали себя зарубежные коды MELCOR, RELAP/SCDAP, ICARE и созданный в ИБРАЭ РАН код СОКРАТ. Выбор названных кодов часто обусловлен возможностью моделирования полного спектра тяжелых аварий на всех этапах их протекания; наличием моделей, описывающих все важнейшие физические процессы; гибкостью их архитектуры и широким набором базовых компонентов, позволяющих моделировать как отдельные узлы, так и целые системы реакторной установки (РУ). При этом актуальным остается вопрос о применимости иностранных кодов к расчетам тяжелых аварийных режимов установок с водо-водяными энергетическими реакторами (ВВЭР) и достоверности получаемых результатов. Обоснование возможности использования выбранного интегрального кода обычно включает следующие этапы:

- разработку расчетных схем и создание входных наборов для расчетного моделирования аварий с учетом конструктивных особенностей РУ с ВВЭР;
- проведение расчетов переходных режимов РУ с целью квалификации расчетных схем на имеющихся экспериментальных данных и их последующего уточнения;
- выполнение верификации основных моделей кода, заявленных к использованию, на экспериментальном материале.

Кроме того, может быть выполнен анализ чувствительности и устойчивости результатов расчетов к изменению входных параметров, оценка неопреде-

ленности результатов для получения оптимальных схем нодализации РУ и разработки соответствующих рекомендаций.

Настоящая статья является первой из двух связанных друг с другом. В ней представлен опыт разработки расчетных схем, составления входного набора и его квалификации на примере моделирования аварийных режимов РУ ВВЭР-440 кодом MELCOR-1.8.5 [1; 2]. В следующей статье изложены основные результаты моделирования тяжелой аварии с использованием полученного набора.

2. Обозначения

БЗТ — блок защитных труб

БРУ-А — быстродействующая редукционная установка сброса пара в атмосферу

ВВЭР — водо-водяной энергетический реактор

ГЗЗ — главная запорная задвижка

ГЦН — главный циркуляционный насос

ГЦТ — главный циркуляционный трубопровод

РУ — реакторная установка

ТВС — тепловыделяющая сборка

ТВС АРК — тепловыделяющая сборка аварийная регулирующая компенсирующая

3. Построение расчетной схемы и создание входного набора реакторной установки

На начальном этапе расчетная схема РУ выполняется в соответствии с общими принципами.

- Детальность нодализации должна быть достаточной для моделирования самого широкого спектра аварийных режимов без модификации основных расчетных элементов и их взаимосвязей.
- Значимые системы и устройства РУ, элементы системы охлаждения реактора должны быть описаны явно, в виде отдельных расчетных элементов, чтобы их геометрические и расчетные характеристики имели соответствующие аналоги в материалах проекта АЭС. Если явное описание элементов невозможно, параметры интегральных элементов должны

быть определены с детализацией, достаточной для адекватного моделирования протекающих процессов.

- Геометрические размеры функционально сходных расчетных элементов тепло-гидравлической схемы следует выбирать максимально близкими по значению. Участки с бо́льшим градиентом температуры должны быть выполнены с большей детальностью.

Расчетная схема РУ ВВЭР-440 разработана на основе эскиза и исходных данных [3; 4]. Полученная схема нодализации реактора представлена на рис. 1, схема нодализации одной из петель контура охлаждения — на рис. 2. Перечень расчетных элементов первого контура и их свободный объем приведены в табл. 1. Элементы схемы реактора построены в приближении аксиальной симметрии. Шесть петель контура охлаждения моделируются в виде трех эквивалентных петель в расчетной схеме. Это продиктовано необходимостью выделения аварийной петли, а оставшиеся петли, подключенные к двум различным паровым коллекторам во втором контуре, моделируются в составе двух и трех реальных петель. Таким образом, расчетная схема позволяет локализовать любой участок контура охлаждения реактора. Аналогично выполняется нодализация второго контура и помещений контеймента (гермообъема).

Конструктивные элементы реактора, стены и перекрытия помещений РУ моделируются в виде отдельных расчетных элементов, называемых тепловыми структурами. Для этих элементов решается задача теплопроводности. Детальность нодализации конструктивных элементов предопределена нодализацией объемов, занятых гидродинамическими материалами, — контура охлаждения, второго контура, контеймента.

В активной зоне реактора при тяжелой аварии возможно протекание физических и химических процессов, которые не ограничиваются только гидродинамикой и теплопереносом. Для расчетных элементов активной зоны соответственно применимы модели физических процессов, важнейшие из которых плавление материалов и их перемещение с возможностью полного блокирования проходного сечения, реакции окисления стали и циркония, образование эвтектик, выход продуктов деления из топлива и их распространение в контуре охлаждения и за его пределами, разогрев и проплавление днища корпуса реактора. Возможность моделирования названных процессов предусмотрена в коде MELCOR-1.8.5 и применима к элементам в активной зоне и непосредственно под ней включая днище реактора.

Нодализация элементов активной зоны на начальном этапе выполняется по принципу конструктивной однородности в пределах каждого расчетного элемента и в дальнейшем требует обоснования степени ее детальности на этапе исследования чувствительности и неопределенности результатов.

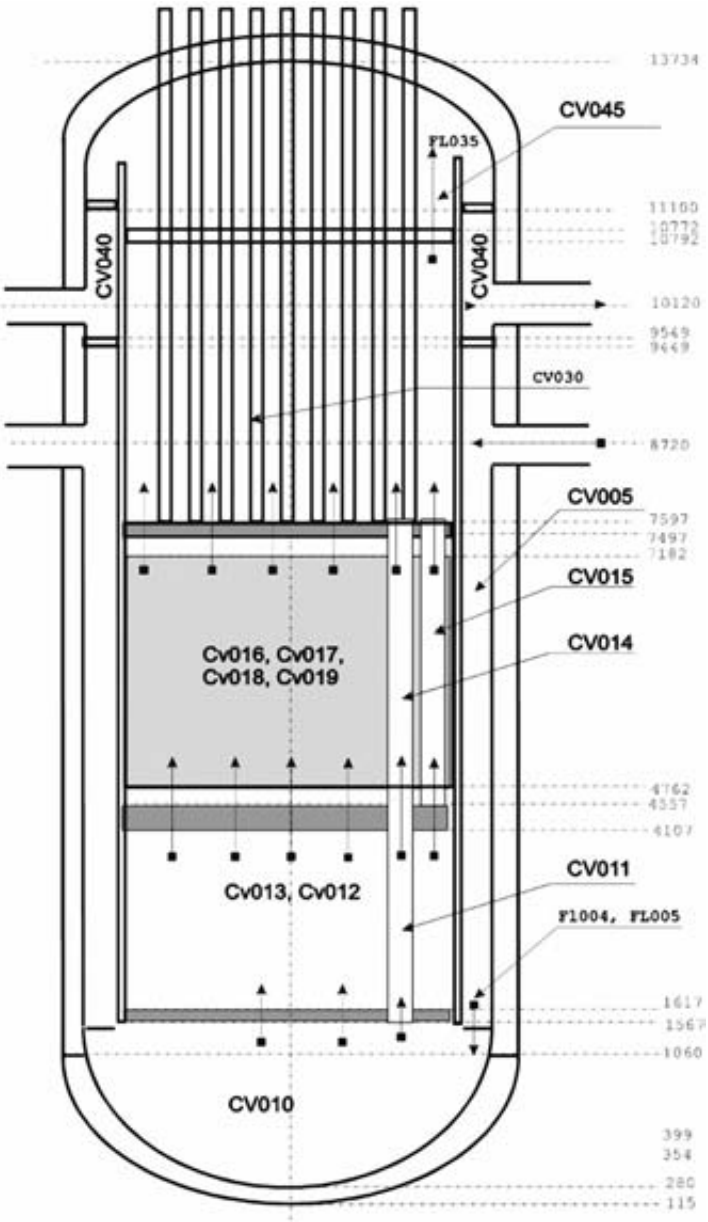


Рис. 1. Базовая расчетная схема реактора

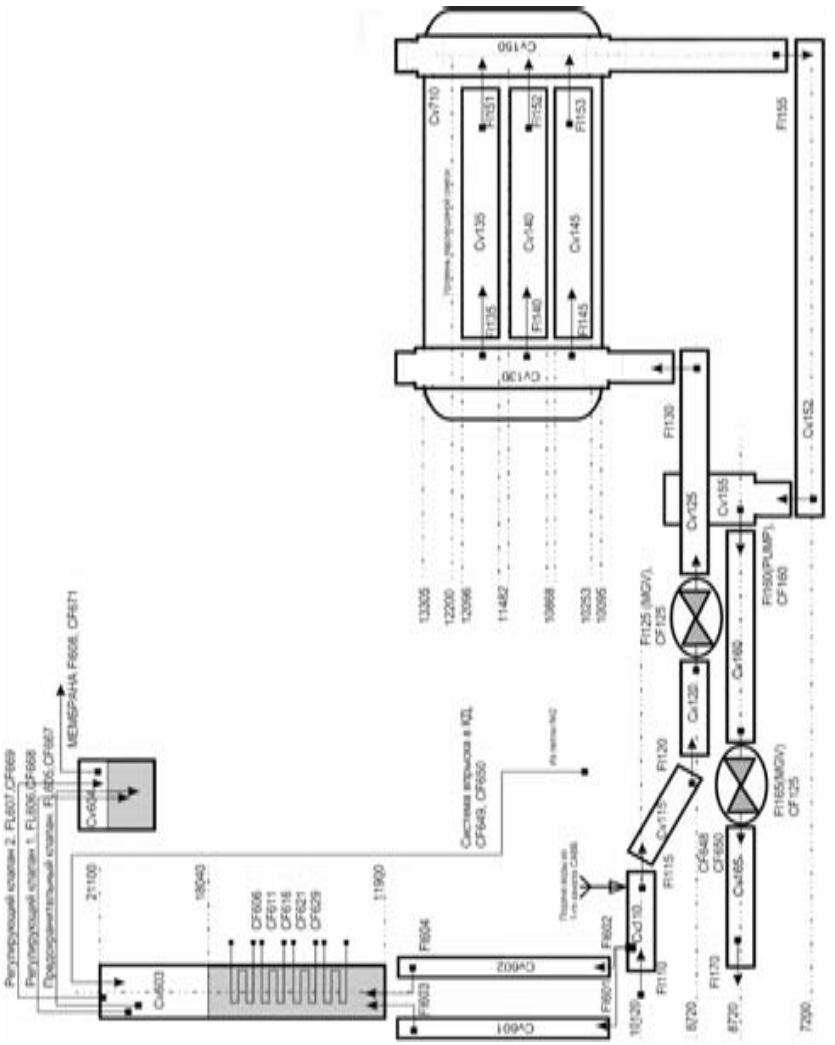


Рис. 2. Базовая расчетная схема петли № 1 контура охлаждения

Таблица 1. Нодализационная схема свободного объема реактора и первого контура

Расчетный элемент	Свободный объем, м^3
Опускная камера (CV005)	16,330
Нижняя камера смешения (CV010)	7,606
ТВС АРК в днище шахты реактора (CV011)	1,604
Центральная часть днища шахты реактора между обсадными трубами (CV013)	5,108
Периферийная часть днища шахты реактора между обсадными трубами (CV012)	9,673
Канал АРК выше опорной плиты активной зоны (CV014)	0,8947
Объем в области выгородки и ТВС-экранов выше опорной плиты активной зоны (CV015)	4,709
1-й (центральный) расчетный объем обогреваемой части активной зоны (CV016)	1,754
2-й расчетный объем обогреваемой части активной зоны (CV017)	1,754
3-й расчетный объем обогреваемой части активной зоны (CV018)	1,754
4-й (периферийный) расчетный объем обогреваемой части активной зоны (CV019)	1,754
Пространство между нижней и верхней решетками БЗТ (CV030)	21,708
Пространство между крышкой реактора и средней решеткой БЗТ(CV045)	18,029
Зона выходных патрубков (CV040)	3,020
Горизонтальный участок главного циркуляционного трубопровода (ГЦТ) до выходного патрубка реактора (CV110) *	0,427
Наклонный участок горячей ветки ГЦТ (CV115) *	0,535
Горизонтальный участок гидрозатвора на горячей ветке ГЦТ до ГЗЗ (CV120) *	0,862
Горизонтальный участок гидрозатвора на горячей ветке ГЦТ после ГЗЗ (CV125) *	0,937
Входной коллектор парогенератора (CV130) *	1,857
Верхняя часть трубного пучка (CV135) *	2,896

Табл. 1 (окончание)

Расчетный элемент	Свободный объем, м^3
Средняя часть трубного пучка (CV140) *	2,665
Нижняя часть трубного пучка (CV145) *	1,634
Выходной коллектор парогенератора (CV150) *	2,100
Горизонтальный участок гидрозатвора на холодной ветке ГЦТ (CV152) *	1,678
Вертикальный участок гидрозатвора на холодной ветке ГЦТ (CV155) *	0,293
Горизонтальный участок ГЦТ на холодной ветке между ГЦН и ГЗЗ (CV160) *	0,656
Горизонтальный участок ГЦТ на холодной ветке между ГЦН и реактором (CV165) *	1,063
Дыхательный трубопровод КД (CV601, CV602)	2×0,821
Компенсатор давления (CV603)	38,000

* Данные приведены для одной петли контура охлаждения.

Принятая нодализация активной зоны РУ ВВЭР-440 представлена на рис. 3. В радиальном направлении она разделена на шесть областей: зоны 1, 2, 4, 5 — для моделирования рабочих тепловыделяющих сборок (ТВС); зона 3 — для моделирования ТВС аварийных регулирующих компенсирующих (ТВС АРК); зона 6 — для моделирования выгородки и кассет-экранов. По высоте активная зона разделена на 21 участок. Их полный список с указанием высотных отметок и перечнем входящих в них компонентов приведен в табл. 2. Деление на участки выполнено с учетом возможности моделирования всех процессов в активной зоне, заложенных в MELCOR.

Таблица 2. Список участков, моделируемых по высоте активной зоны

Номер участка	Компоненты активной зоны в составе участка	Высота участка, м
1—5	Эллиптическая часть днища корпуса реактора	0,1191; 0,1064; 0,08; 0,1387; 0,4228
6	От низа цилиндрической части корпуса реактора до низа опорной плиты днища шахты реактора	0,420
7	Опорная плита днища шахты реактора	0,050

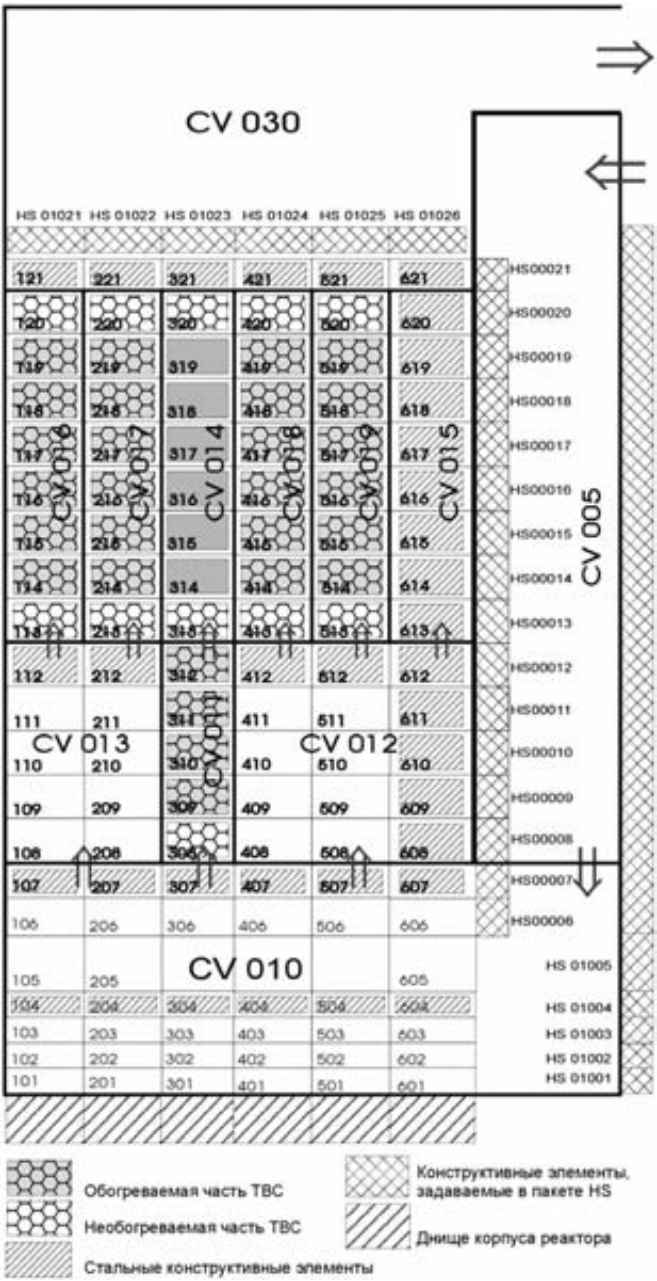


Рис. 3. Схема нодализации активной зоны

Табл. 2 (окончание)

Номер участка	Компоненты активной зоны в составе участка	Высота участка, м
8	Нижняя необогреваемая часть ТВС АРК	0,651
9—11	Обогреваемая часть ТВС АРК	3×0,613
12	Нижняя опорная плита	0,450
13	Нижние концевые части ТВС от верха плиты до низа обогреваемой части активной зоны	0,205
14—19	Обогреваемая часть активной зоны	2×,404+4×0,403
20	Верхние концевые части ТВС до низа нижней плиты блока защитных труб (БЗТ)	0,315
21	Нижняя плита БЗТ	0,100

Уже на этапе выполнения нодализации и создания входного набора должна быть учтена часть конструктивных особенностей, отличающих реакторы типа ВВЭР от реакторов, для которых был создан данный код, — PWR, BWR. Первая из этих особенностей — гексагональная матрица взаимного расположения твэлов. Все модели кода MELCOR предполагают взаимное расположение твэлов по квадратной матрице. Влияние типа матрицы на теплогидравлические процессы может быть учтено изменением коэффициентов соответствующих корреляций. Ее влияние на поведение активной зоны при плавлении и деградации сказывается через различие площадей блокирования поверхности твэлов стекающим расплавом, используемых при расчете пароциркониевой реакции, и может быть учтено через коэффициенты чувствительности (SC1151). Формулы для расчета коэффициентов для квадратной и гексагональной матриц приведены в табл. 3. Выполненный анализ влияния коэффициентов SC1151 показал, что различие результатов для гексагональной и квадратной матриц проявляется после момента начала плавления материалов в активной зоне и по интегральной массе образовавшегося водорода составляет 8% в аварии типа «большая течь». В авариях с более поздним началом осушения и разогрева активной зоны это различие возрастает и может достигать 15%.

Таблица 3. Расчет коэффициентов чувствительности SC1151(1—4) для квадратной и гексагональной решетки

Величина	Квадратная матрица	Гексагональная матрица
SC1151(1)		
Площадь части поверхности твэла A_i	$0,5\pi RH$	$\pi RH/3$
Площадь части поверхности капельки A_{C1}	$0,5\pi(P-2R)H$	$0,5\pi(P-2R)H$
$\mathrm{SC1151}(1)=A_{C1}/A_i$	$(P-2R)/R$	$1,5(P-2R)/R$
	0,556 для PWR	1,022 для ВВЭР
SC1151(3)		
Объем части канала между твэлами V_i	$0,25\left(P^2-\pi R^2\right)H$	$\left(0,25P^2\sqrt{3}-\frac{\pi R^2}{6}\right)H$
Объем части капельки V_{C1}	$0,125\pi\left(P-2R\right)^2 H$	$0,125\pi\left(P-2R\right)^2 H$
$\mathrm{SC1151}(3)=V_{C1}/V_i$	$\frac{\pi\left(P-2R\right)^2}{2\left(P^2-\pi R^2\right)}$	$\frac{0,125\pi\left(P-2R\right)^2}{\left(0,25P^2\sqrt{3}-\frac{\pi R^2}{6}\right)}$
	0,143 для PWR	0,0942 для ВВЭР

Табл. 3 (окончание)

Величина	Квадратная матрица	Гексагональная матрица
SC1151(2)		
Площадь части поверхности твэла A_i	$0,5\pi RH$	$\pi RH/3$
Площадь части поверхности капельки A_{C2}	$0,5\pi\left(\frac{P}{\sqrt{2}}-R\right)H$	$2\pi\left(\frac{\sqrt{3}P}{3}-R\right)\frac{H}{3}$
$\mathrm{SC1151}(2)=A_{C2}/A_i$	$\frac{\left(\frac{P}{\sqrt{2}}-R\right)}{R}$	$\frac{2\left(\frac{\sqrt{3}P}{3}-R\right)}{R}$
	0,807 для PWR	1,096 для ВВЭР
SC1151(4)		
Объем части канала между твэлами V_i	$0,25\left(P^2-\pi R^2\right)H$	$\left(\frac{\sqrt{3}P^2}{4}-\frac{\pi R^2}{6}\right)H$
Объем части капельки V_{C2}	$0,25\left(P^2-\pi R^2\right)H-$ $-0,25\pi\left(\frac{P}{\sqrt{2}}-R\right)^2H$	$\left(\frac{\sqrt{3}P^2}{4}-\frac{\pi R^2}{6}\right)H-$ $-\pi\left(\frac{\sqrt{3}P}{3}-R\right)^2H$
$\mathrm{SC1151}(4)=V_{C2}/V_i$	$1-\frac{\pi\left(\frac{P}{\sqrt{2}}-R\right)^2}{P^2-\pi R^2}$	$1-\frac{\pi\left(\frac{\sqrt{3}P}{3}-R\right)^2}{\left(\frac{\sqrt{3}P^2}{4}-\frac{\pi R^2}{6}\right)}$
	0,396 для PWR	0,6356

Вторая особенность — состав радионуклидов активной зоны реакторов типов PWR и ВВЭР при одинаковой продолжительности их работы. Различие суммарных мощностей остаточного тепловыделения невелико, однако доли мощности каждого из нуклидов в суммарной мощности могут заметно различаться [5; 6]. Доли мощности остаточного тепловыделения классов нуклидов в суммарной мощности для реакторов ВВЭР-1000 и PWR представлены в табл. 4. Эти различия могут сказываться на результатах расчета аварийных режимов на этапе после разгерметизации твэлов и начала высвобождения нуклидов из топливной матрицы. Результаты расчетов показали, что в авариях с плавлением активной зоны различие мощности тепловыделения, уносимой продуктами деления из топлива, может достигать 25% для представленных вариантов радионуклидного состава активной зоны.

Таблица 4. Относительный вклад в мощность остаточного тепловыделения классов радионуклидов через 3600 с после останова реактора

Реактор	Xe	Cs	Ba	I	Te	Ru	Mo	Ce	La	U	Cd
ВВЭР-1000	0,0453	0,0717	0,0916	0,2178	0,0569	0,0325	0,0914	0,0658	0,3024	0,0180	0,0227
PWR	0,0821	0,0375	0,1019	0,1611	0,0713	0,0355	0,0600	0,1633	0,2408	0,0182	0,0217

Третья особенность — свойства конструкционных материалов. Прежде всего это касается теплофизических свойств. Кроме того, должны быть скорректированы механические свойства материала днища корпуса реактора и термохимические свойства реакции окисления циркония и стали водяным паром и кислородом.

Исходная нодализация должна учитывать эллиптичность формы днища корпуса реактора ВВЭР (в коде предполагается сферическая форма). Большое внимание следует уделить способу нодализации ТВС АРК, имеющихся только в составе реакторов ВВЭР-440. Их особенность — наличие стержней поглотителя над топливными кассетами. Это может вызвать ошибочное распределение материала поглотителя при его перемещении в расчетные ячейки, расположенные ниже. В ходе выполнения работы решение данной проблемы состояло в задании пространства между твэлами и между чехлами соседних ТВС (байпас активной зоны) как одного расчетного объема.

4. Квалификации расчетных схем

Квалификация расчетных схем и созданных на их основе входных наборов производилась путем сравнения результатов расчетов, полученных с использованием разработанных входных наборов, с опытными данными по

переходным режимам на третьем и четвертом блоках Кольской АЭС (В-213). В отличие от верификации квалификация предполагает обоснование конкретной расчетной схемы и входного набора для проведения расчетов аварийных режимов независимо от возможных достоинств используемого расчетного кода. По результатам квалификации вносятся уточнения в исходную схему и формулируются рекомендации по ее созданию. Указанные переходные режимы не выходят за рамки проектных аварий и позволяют выполнить квалификацию теплогидравлической части расчетной схемы.

Один из переходных режимов имел место на третьем энергоблоке в 1983 г. и был инициирован потерей питания всех шести главных циркуляционных насосов. После срабатывания аварийной защиты АЗ-1 значения основных тепловых параметров (температуры и давления) начинают уменьшаться в соответствии с падением тепловой мощности реактора. Через 13 с после начала переходного процесса давление в паровых коллекторах резко возрастает в результате закрытия стопорных клапанов турбины. Из-за роста давления открываются клапаны БРУ-К во втором и первом паровых коллекторах соответственно на 16-й и 31-й секундах, что приводит к падению давления в паровых коллекторах. При этом уставки по давлению для срабатывания БРУ-А клапанов не достигаются.

Другой переходный режим наблюдался в 1988 г. на четвертом энергоблоке. Исходным событием стало прекращение подачи питательной воды в один из парогенераторов (№ 2). Через 87 с после прекращения подачи питательной воды уровень воды снизился на 400 мм по сравнению с его номинальной величиной. После отключения главного циркуляционного насоса (ГЦН) № 2 в аварийной петле установилось течение в противоположном направлении по сравнению с номинальным. Когда уровень теплоносителя в парогенераторе упал на 1000 мм ниже номинальной величины, начались действия по восстановлению уровня воды в парогенераторе. После отключения ГЦН мощность реактора уменьшилась до 80%. Скорость генерации пара после останова ГЦН составляла около 30% номинальной величины. В дальнейшем мощность уменьшилась до 75% и уровень воды во втором парогенераторе начал расти. После того как он достиг 1800 мм, снова включился насос.

По сравнению с реакторами PWR/BWR реакторы типа ВВЭР обладают следующими существенными конструктивными особенностями: наличие горизонтального парогенератора, гидрозатворов в петлях охлаждения, дыхательного трубопровода компенсатора давления и барботажно-конденсационных устройств в защитной оболочке (только в РУ В-213). Способам и детальности нодализации именно этих частей РУ уделено особое внимание. Уточнения касались моделированию работы устройств и систем, определяемых пользователем в виде контрольных функций (пакет CF):

- системы впрыска в паровой объем компенсатора давления;

- блока электроподогревателей в компенсаторе давления;
- ГЦН в части моделирования их выбега при потере питания;
- быстродействующего редукционного клапана БРУ-К;
- системы питательной воды второго контура.

Для демонстрации необходимости моделирования циркуляции теплоносителя в парогенераторе со стороны второго контура с требуемой величиной кратности на рис. 4 представлены результаты расчета для двух расчетных схем парогенератора — с моделированием циркуляции и без циркуляции. Сравнение с опытными данными демонстрирует существенное расхождение результатов при использовании нодализационной схемы без циркуляции.

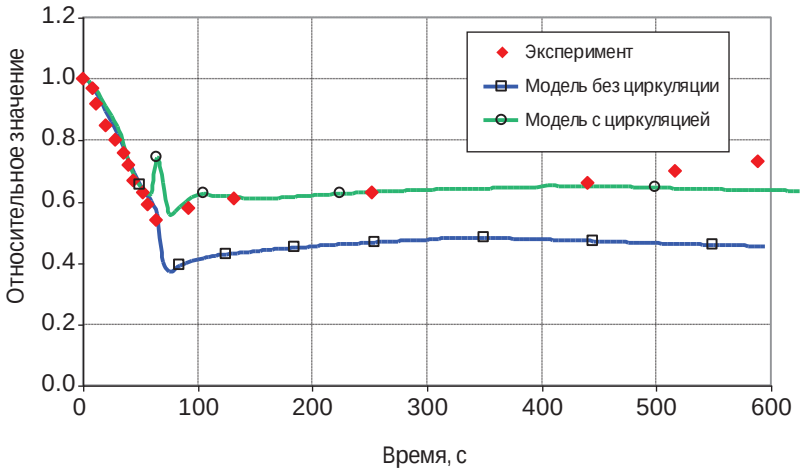


Рис. 4. Уровень теплоносителя в ПГ для различных расчетных схем: с циркуляцией теплоносителя по второму контуру и без циркуляции

5. Заключение

В результате во всех проведенных расчетах:

- получена хорошая сходимость с опытными данными и подтверждена адекватность предложенных моделей реактора ВВЭР-440 соответствующим реальным установкам;
- показана допустимость объединения в расчетной модели неаварийных петель контура циркуляции;
- выполнено обоснование необходимости моделирования трубных пучков парогенератора по длине со стороны первого контура не менее чем

тремя расчетными объемами; расчетная схема парогенератора со стороны второго контура должна включать не менее двух расчетных объемов, образующих контур циркуляции с кратностью, соответствующей реальному значению соответствующего парогенератора;
- показана необходимость моделирования гидрозатворов и дыхательного трубопровода в виде трех расчетных объемов — горизонтального и двух вертикальных;
- параметры связей между расчетными объемами выбираются на основе результатов экспериментов на соответствующих РУ или их моделях.

Литература

1. MELCOR Computer Code Manuals. Vol.1: Primer and User's Guide. Version 1.8.5, May 2000. NUREG/CR-6119, Vol. 1, Rev. 2. SAND2000-2117/1.

2. MELCOR Computer Code Manuals. Vol.2: Reference Manuals. Version 1.8.5, May 2000. NUREG/CR-6119, Vol. 2, Rev. 2. SAND2000-2117/2.

3. Исходные данные для расчетов проектных и запроектных аварий, включая радиационные последствия, для блока 1 Кольской АЭС: Отчет. ПКФ 111 Д / Росэнергоатомпроект. — М., 2001.

4. Перечень отличий блока 2 от блока 1 Кольской АЭС, влияющих на проект СВК: Отчет. ПКФ 136 Д / Росэнергоатомпроект.— М., 2001.

5. Радиационные характеристики облученного ядерного топлива: Справочник. — М.: Энергоатомиздат, 1983.

6. American Nuclear Society Standards Committee Working Group ANS-5.1, American National Standard for Decay Heat Power in Light Water Reactors, ANSI/ANS-5.1-1979 / American Nuclear Society. — La Grange Park, IL, 1979.

VII. Моделирование тяжелого аварийного режима реакторной установки ВВЭР-440 (В-230) с использованием кода MELCOR-1.8.5

А. Е. Киселев, Н. А. Мосунова, В. Н. Носатов, А. Е. Стрижов, Д. Ю. Томащик

1. Введение

В настоящей статье представлены результаты, являющиеся составной частью работ по обоснованию применимости интегрального расчетного кода MELCOR-1.8.5 для расчетов тяжелых аварийных режимов реакторной установки (РУ) водо-водяного энергетического реактора (ВВЭР) и достоверности получаемых результатов. Выбор данного кода обусловлен возможностью моделирования полного спектра тяжелых аварий на всех этапах протекания; наличием моделей, описывающих все важнейшие физические процессы; гибкостью их архитектуры и широким набором базовых компонентов, позволяющих моделировать как отдельные узлы, так и целые системы реакторной установки. В [1] представлен опыт разработки расчетных схем, составления входного набора и его квалификации на примере моделирования РУ ВВЭР-440 с использованием кода MELCOR-1.8.5 [2; 3]. Ниже представлены основные результаты расчетного анализа тяжелого аварийного режима РУ с ВВЭР-440 (В-230), полученные с использованием расчетной схемы, представленной в [1]. Исходным событием для аварии является гильотинный разрыв главного циркуляционного трубопровода (ГЦТ) на холодной нитке первой петли контура циркуляции на неизолируемом участке.

Выполнено исследование чувствительности интегральных результатов к возможности блокировки каналов активная зона реактора.

2. Обозначения

АЗ	— аварийная защита
ВВЭР	— водо-водяной энергетический реактор
ГЗЗ	— главная запорная задвижка
ГЦТ	— главный циркуляционный трубопровод

ЗО	— защитная оболочка
РУ	— реакторная установка
ТВС	— тепловыделяющая сборка
ТВС АРК	— ТВС аварийная регулирующая компенсирующая

3. Состояние энергоблока до начала аварии и сценарий аварийного режима

До начала аварии РУ ВВЭР-440 эксплуатируется в номинальном режиме. Состояние систем и оборудования соответствует «Технологическому регламенту эксплуатации». Выгорание топлива соответствует времени окончания кампании — 1 год.

Авария инициирована гильотинным разрывом ГЦТ петли № 1 на холодной ветке, вблизи входного патрубка корпуса реактора. Нижняя кромка образовавшейся течи выше верха обогреваемой части активной зоны на 1290 мм. Эквивалентный гидравлический диаметр образовавшегося отверстия — 500 мм. Авария относится к типу «большая течь» и сопровождается отказом к закрытию главной запорной задвижки (ГЗЗ) аварийной петли. По сигналу аварийной защиты АЗ-1 начинается снижение мощности реактора. В результате потери внешнего энергоснабжения начинается выбег главного циркуляционного насоса, прекращается подача питательной воды, отключается нормальная подпитка первого контура электронагревателей и впрыска в компенсатор давления. Системы безопасности исправны. Общая производительность трех каналов системы аварийной подпитки — 100 кг/с. Вода подается из трех независимых каналов в «горячую ветку» трех петель охлаждения реактора: № 1 (аварийная), № 3, № 5, что в данной модели реактора [1] соответствует петлям № 1, № 3, № 2. Каждый из каналов системы подключен к специальному баку-приямку, содержащему 750 м^3 борированной воды.

Рост давления в защитной оболочке (ЗО) вследствие истечения теплоносителя приводит к выработке сигнала на запуск спринклерной системы. Уставка на включение спринклерной системы — достижение давления 1,05 бар и задержка на подачу спринклерной воды на форсунки 90 с. Расход подачи воды в спринклерную систему (без рециркуляции) — 728 м^3/ч. При подъеме температуры воды в баке-приямке до 70°С включается рециркуляция воды через теплообменник спринклерной системы. При этом расход воды распределяется следующим образом: 432 м^3/ч на спринклер, 526 м^3/ч на рециркуляцию — охлаждение бака-приямка.

После достижения давления в 30 0,155 МПа срабатывает разгрузочный клапан, соединяющий бокс парогенератора с окружающей средой. После достижения давления 0,165 МПа дополнительно срабатывают 8 разгрузочных клапанов, предназначенных для предотвращения разрушения строительных конструкций 30 путем сброса паровоздушной среды в окружающую среду. Площадь проходного сечения одного клапана составляет 1,03 м^2.

В парогенераторах после закрытия стопорных клапанов турбины и отключения системы питательной воды происходит запуск системы аварийной подпитки парогенераторов через 180 с и уровень теплоносителя в них восстанавливается, обеспечивая отвод тепла от первого контура.

Основные события аварийного процесса приведены в таблице.

Таблица. Основные события аварийного процесса

Событие	Время, с
Начало аварии	0,0
Срабатывание аварийной защиты АЗ-1	0,1
Отключение главного циркуляционного насоса	0,1
Запуск спринклерной системы	0,1
Запуск насосов аварийной подпитки первого контура	0,5
Срабатывание разгрузочных клапанов	1,1
Начало подачи концентрата бора из системы аварийной подпитки первого контура	48,5
Начало подачи концентрата бора на форсунки спринклерной системы	90,1
Начало пароциркониевой реакции в активной зоне	140
Начало аварийной подпитки второго контура	180
Начало плавления оболочек твэлов	375
Начало повторного залива активной зоны реактора	430
Начало плавления и перемещения материалов активной зоны	450
Стабилизация уровня теплоносителя в активной зоне	600
Включение рециркуляции воды через теплообменник спринклерной системы	1640
Конец расчета	10 000

4. Анализ результатов расчета

Мгновенный разрыв главного циркуляционного трубопровода происходит на холодном участке (петля № 1) контура циркуляции реактора, между ГЗЗ и реактором. Возникающее двухстороннее истечение в первые секунды аварии является чисто водяным и достигает 13 т/с. Истечение сопровождается резким падением давления и уровня теплоносителя в реакторе, а также ростом температуры и давления в помещениях защитной оболочки. Сигнал на срабатывание АЗ-1 поступает примерно через 0,1 с от датчиков, фиксирующих понижение давления над активной зоной до 17,7 МПа и снижение уровня теплоносителя в компенсаторе давления на 2,56 м относительно номинального уровня. Изменение давления в реакторе на начальном этапе аварии показано на рис. 1. Практически одновременно происходит отключение и начало выбега главного циркуляционного насоса. Резкое падение давления в первом контуре приводит к генерации сигнала на запуск насосов системы аварийной подпитки первого контура.

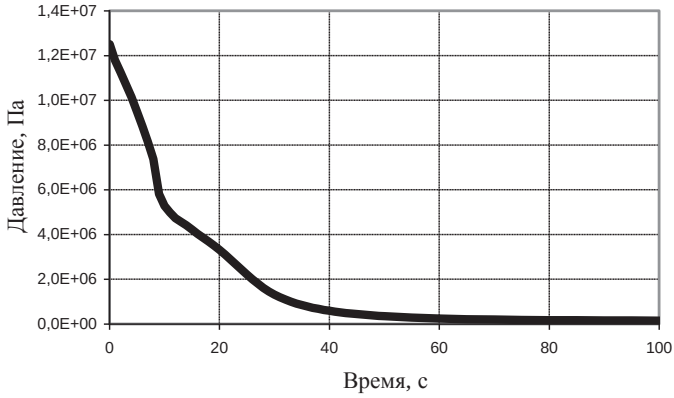


Рис. 1. Давление в компенсаторе давления на начальном этапе аварии

Рост давления в ЗО приводит к генерации сигнала на запуск насосов спринклерной системы. Менее чем через 1,5 с с начала аварии давление в ЗО достигает уставки срабатывания сначала одного (0,155 МПа), а затем еще восьми разгрузочных (0,165 МПа) клапанов. Истечение через разгрузочные клапаны в окружающую среду кратковременное, но достигает больших величин. Давление в ЗО достигает максимального значения 0,23 МПа примерно через 3 с после начала аварии. Через 27 с после начала аварии закрываются 8 разгрузочных клапанов, через 34 с — девятый разгрузочный клапан, и в дальнейшем давление не достигает уровня открытия восьми разгрузоч-

ных клапанов. Более того, выброс из помещений 30 в окружающую среду большого количества неконденсируемых газов и последующая конденсация пара на стенах и оборудовании внутри 30 приводит к возникновению небольшого разряжения в 30. Новый подъем давления наблюдается только после начала повторного залива активной зоны и интенсивного истечения пара из реактора.

В корпусе реактора уровень теплоносителя быстро снижается, и уже через 25 с с начала аварии активная зона полностью осушается. На рис. 2 показан уровень в расчетных объемах подъемной части корпуса реактора.

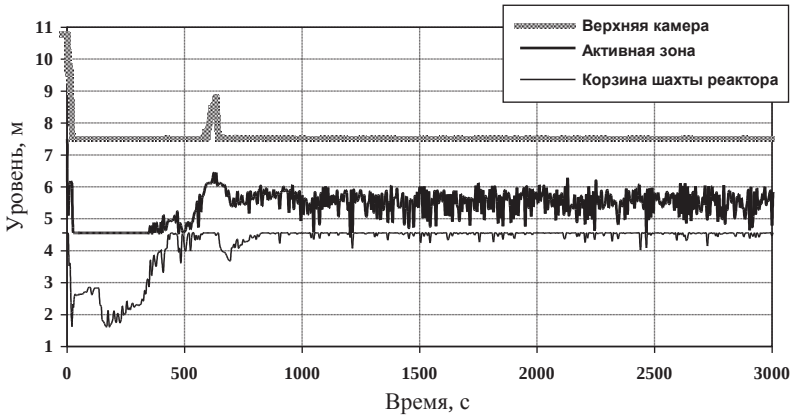


Рис. 2. Физический уровень теплоносителя в корпусе реактора

Кроме этого, происходит практически полное осушение расчетных объемов непосредственно под активной зоной, в области корзины шахты реактора. После «запаривания» активной зоны начинается стремительный рост температуры твэлов. Через 25—27 с после начала аварии уровень теплоносителя в месте разрыва снижается ниже кромки отверстия истечения и начинается чисто паровое истечение в 30. Расход пара на данном этапе аварии плавно снижается до значения примерно 1,5 кг/с, что обусловлено исчерпанием возможности парообразования вследствие сброса давления в реакторе и практически полным осушением обогреваемой части тепловыделяющих сборок (ТВС), в том числе ТВС аварийных регулирующих компенсирующих (ТВС АРК). Размер течи на этом этапе аварии влияет только на значение давления в первом контуре. Теплоотвод во второй контур в начальный период аварии полностью отсутствует. Это связано с резким уменьшением параметров первого контура. В результате температура теплоносителя второго контура превышает температуру среды со стороны первого контура. Таким образом, в парогенераторе происходит подогрев теплоносителя первого контура.

Через 48,5 с после начала аварии начинается подача воды из системы аварийной подпитки первого контура. Вода, подаваемая в горячую ветку аварийной петли контура циркуляции, выбрасывается через аварийный патрубок, не попадая в реактор. Два других канала системы подают воду в реактор. Однако это не приводит к немедленному и устойчивому заливу активной зоны вследствие частичного выпаривания воды и колебания уровней в подъемной и опускной частях реактора.

Следует остановиться на таком важном вопросе, как достоверность полученного результата для количества воды, остающегося внутри корпуса реактора к моменту начала подачи воды из системы аварийной подпитки. Для рассматриваемой аварии этот показатель является определяющим. От него зависит время повторного залива активной зоны и величина ее повреждения вследствие высоких температур. Вместе с тем результаты, полученные при использовании компьютерных кодов, включая MELCOR-1.8.5, могут существенно расходиться между собой, а также с возможными экспериментальными данными именно для начального этапа аварии типа «большая течь». Кроме того, на результат может оказывать влияние принятая расчетная схема моделируемой установки и другие входные параметры. Поэтому при выполнении данной работы произведено исследование чувствительности результатов в зависимости от параметров, в наибольшей степени влияющих на результат. Установлено, что существенное влияние на количество воды, остающееся внутри корпуса реактора, оказывают способ нодализации гидрозатворов контура циркуляции, распределение гидравлических сопротивлений между реактором и контуром циркуляции, способ задания каналов течения (параметры FLHGTF, FLHGTT пакета FL) в активной зоне реактора, возможность возникновения блокировок каналов течения в активной зоне при плавлении оболочек твэлов. В результате проделанной работы рассматриваемая расчетная схема реактора учитывает влияние названных факторов на результат таким образом, чтобы полученный результат был максимально консервативным (по временам событий и количеству образовавшегося водорода). Появление блокировок каналов усиливает тяжесть аварии, однако в данном расчете не учитывается. Основные результаты расчета с блокированием каналов активной зоны представлены ниже. Для обсуждаемого варианта расчета к моменту времени 48,5 с интегральный выброс воды из реактора составляет примерно 132 т, выброс пара — примерно 19 т.

Рост температуры твэлов приводит к началу пароциркониевой реакции и образованию водорода в активной зоне примерно через 140 с после начала аварии. Реакция протекает с выделением тепла, что ускоряет рост температуры. При достижении температуры оболочек твэлов 1273 К происходит их разгерметизация и выход продуктов деления из топливного за-

зора. Это незначительно снижает мощность остаточного тепловыделения непосредственно в активной зоне. Через 375 с после начала аварии достигается температура плавления циркония. Разрушения твэлов при этом не происходит из-за большой толщины окисленного слоя на внешней поверхности. После нагрева оболочек твэлов до 2500 К происходит их разрушение по данному критерию и перемещение материалов. Начало этого процесса соответствует примерно моменту 450 с. К этому времени уровень теплоносителя достигает низа обогреваемой части активной зоны и начинается ее повторный залив. Расход генерации и истечения пара пропорционален доле активной зоны, находящейся под уровнем теплоносителя. Уже примерно к 600-й секунде активная зона залита примерно наполовину и в дальнейшем уровень стабилизируется. Очевидно, что положение уровня в таком равновесном состоянии зависит от величины гидравлических потерь на участке от уровня теплоносителя в активной зоне до места истечения: чем меньше потери, тем выше уровень. Расход пара, генерируемого под уровнем теплоносителя, при заливе половины высоты активной зоны оказывается достаточным для теплоотвода от твэлов в осушенной части при температуре ниже 1000 К. При этом к моменту залива разрушено около 37% активной зоны в верхней ее части, и количество образовавшегося водорода превышает 91 кг (рис. 3).

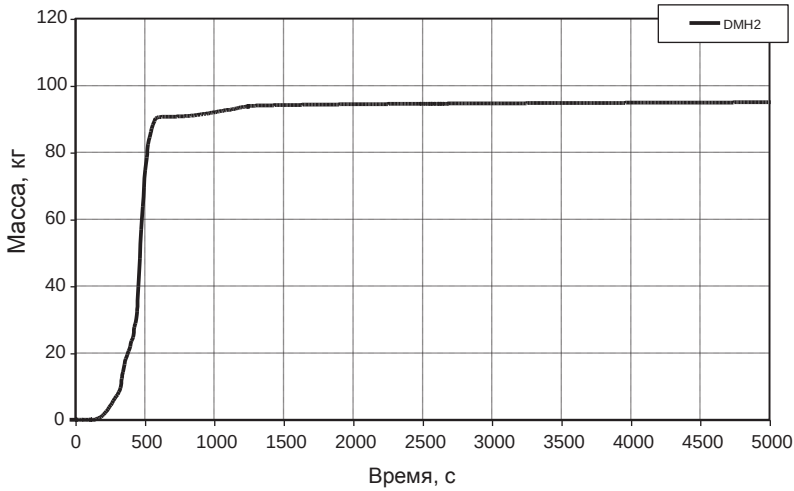


Рис. 3. Суммарное количество водорода, образовавшегося в активной зоне. Базовый расчет

Суммарная масса ZRO_2 превосходит 2800 кг. На приведенном графике заметно некоторое увеличение количества водорода после установления уровня в активной зоне, что объясняется продолжающимся окислением

верхней части ТВС АРК. Температура ТВС АРК в ходе развития аварийного режима не превышает 950 К, температура выгородки — 600 К. В дальнейшем параметры активной зоны остаются стабильными. Продолжающееся истечение из реактора в 30 приводит к повышению температуры воды в баке-приямке, и через 1680 с начинается подача воды через парогенераторы спринклерной системы. Температура воды в баке-приямке в дальнейшем не превышает 346 К.

Анализ результатов расчета аварии при блокировке каналов в активной зоне. В коде MELCOR-1.8.5 модель деградации активной зоны реактора в процессе аварии в значительной степени параметрическая. Это означает, что многие физические процессы или характерные события в активной зоне могут быть заранее определены пользователем. В частности, модель образования блокад и блокирования каналов течения может быть отключена либо задана пользователем. Из-за недостаточной изученности вопроса нельзя достоверно судить о наличии либо отсутствии в данных условиях блокирования каналов. В то же время при анализе той или иной аварии можно выяснить важность данного явления с точки зрения влияния на интегральные результаты, т. е. выполнить исследование чувствительности к данному параметру. По результатам исследования может быть найден консервативный результат и получена качественная картина влияния исследуемого параметра.

Здесь представлены результаты одного из расчетов, выполненных с подключением модели блокировки. Единственное отличие этого расчета от базового — включение карт FLXXXB1 для каналов течения в активной зоне. В качестве критерия для оценки тяжести аварии (консервативности их результата) в различных расчетах приняты времена основных событий и количество образовавшегося водорода. Получено качественное совпадение процессов при расчете с моделированием блокировки и при базовом расчете. В то же время общее количество водорода в активной зоне в случае моделирования блокировки составляет к моменту установления уровня в активной зоне 101,4 кг (рис. 4). Это более чем на 10% превосходит результат, полученный в базовом расчете. Аналогичное расхождение можно заметить для времен основных событий. Момент прекращения эскалации температур в активной зоне соответствует 485 секунд с начала аварии для базового расчета и 545 с для варианта с блокированием каналов течения. Обнаруженные расхождения обусловлены следующими причинами.

При анализе базового расчета было указано определяющее значение остаточного количества воды в реакторе перед началом повторного залива активной зоны. Для варианта расчета с блокированием каналов активной зоны к моменту времени 48,5 с интегральный выброс воды из реактора составляет 131,6 т, выброс пара — 19,2 т. Эти значения не отличаются от

аналогичных для базового расчета. Отличия возникают позднее, после начала окисления в активной зоне, плавления ее компонентов и частичного блокирования каналов. Блокирование каналов приводит к увеличению потерь на трение пара на участке от уровня теплоносителя в подъемной части реактора до места истечения и соответственно к увеличению перепада давлений. Это, в свою очередь, вызывает увеличение разницы высот столбов жидкости в опускной и подъемной частях реактора. Иначе говоря, залив подъемной части и активной зоны начинается после заполнения опускной части реактора. Разница времен начала залива обогреваемой части активной зоны и приводит к возникновению различий в интегральных результатах. Влияние увеличения потерь на трение в разрушенной активной зоне сказывается после ее залива. В базовом расчете уровень теплоносителя покрывает около 50% активной зоны, в расчете с блокированием каналов — 40—45%. В обоих расчетах этого достаточно для поддержания осушенной части активной зоны при температурах ниже температуры начала окисления материалов.

В заключение следует отметить, что вариант расчета с возможностью блокирования каналов активной зоны при их разрушении может быть принят в качестве консервативного.

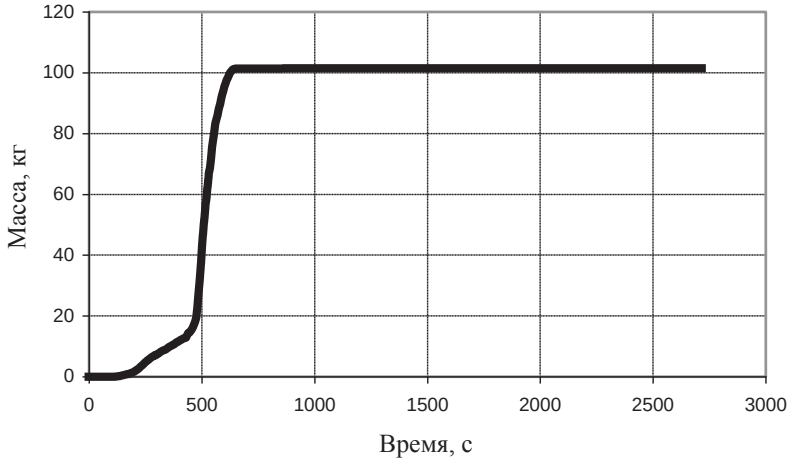


Рис. 4. Суммарное количество водорода, образовавшегося в активной зоне, в случае блокирования проходного сечения активной зоны

5. Заключение

Расчеты аварийного сценария показали, что авария характеризуется коротким периодом до начала осушения активной зоны и скоротечностью этапа ее плавления и разрушения. Суммарное количество образовавшегося водорода на момент окончания расчета достигает примерно 100 кг. Доля плавления и разрушения активной зоны может достигать 40%.

Установлена высокая чувствительность результатов к моделированию блокад в активной зоне реактора и консервативность результата для случая максимального блокирования проточной части активной зоны.

Показано, что для получения достоверного результата необходимо адекватное представление особенностей конструкции реакторной установки ВВЭР-440, таких как гидрозатворы, активная зона и т. п.

Литература

1. *Киселев А. Е., Носатов В. Н., Стрижов В. Ф., Томащик Д. Ю.* Применение интегральных кодов для моделирования аварийных режимов реакторов типа ВВЭР // Изв. РАН Сер. Энергетика. — 2004. — № 2. — С. 57—64.

2. MELCOR Computer Code Manuals. Vol.1: Primer and User's Guide. Version 1.8.5, May 2000. NUREG/CR-6119, Vol. 1, Rev. 2. SAND2000-2117/1.

3. MELCOR Computer Code Manuals. Vol.2: Reference Manuals. Version 1.8.5, May 2000. NUREG/CR-6119, Vol. 2, Rev. 2. SAND2000-2117/2.

VIII. Развитие моделей переноса и трансформации аэрозолей в коде ПРОФИТ. Осаждение аэрозольных частиц

В. М. Алипченков, Л. И. Зайчик, А. Е. Киселев, В. Ф. Стрижов, А . С. Филиппов, А. Л. Фокин, С. В. Цаун

1. Введение

При аварии ядерной энергетической установки с разрушением активной зоны продукты деления попадают в первый контур и оттуда могут выйти в помещение атомной станции и далее в окружающую среду. Пассивно, с потоками газа, могут распространяться только газообразные продукты деления и очень мелкие частицы — аэрозоли. Отсюда следует важность изучения процессов распространения, взаимопревращения и осаждения аэрозолей в каналах и в больших объемах. Физические знания об этих процессах воплощены в расчетные алгоритмы, реализованные в так называемых аэрозольных кодах. Подобный код, ПРОФИТ, используется также и в интегральном тяжелоаварийном коде СОКРАТ.

Моделирование физических явлений, характеризующих поведение аэрозольных частиц в реакторной установке или помещениях защитной оболочки АЭС, может быть подразделено на три основные задачи: 1) транспорт аэрозолей в циркуляционном контуре или помещении; 2) осаждение частиц на стенках трубопроводов контуров или поверхностях помещений; 3) изменение размера и композитного состава аэрозолей. Для решения первой задачи, как правило, принимается, что транспорт аэрозольных частиц в пространстве осуществляется со скоростями газовой фазы, моделирование которой производится вне аэрозольного кода. Поэтому в аэрозольном коде рассматривается решение только второй и третьей задач. Основными процессами, определяющими изменение размера и композитного состава аэрозольных частиц, являются адсорбция продуктов деления из газовой фазы, фазовые переходы (конденсация или испарение) и коагуляция. Наибольшие теоретические трудности связаны с описанием процессов осаждения и коагуляции аэрозольных частиц, в особенности при турбулентном режиме движения.

Практически во всех аэрозольных кодах, используемых при расчетах тяжелых аварий (в частности, CONTAIN [1], MELCOR/MAEROS [2; 3], СОКРАТ/ПРОФИТ [4; 5]), предполагается, что различные механизмы осаждения действуют независимо друг от друга и полная скорость

осаждения аэрозолей определяется на основе принципа суперпозиции, т. е. без учета взаимного влияния отдельных механизмов осаждения. Во многих случаях это оправданно, но в целом не соответствует действительности. Поэтому в настоящей работе ставится задача построить обобщающие зависимости, учитывающие взаимное влияние разных механизмов осаждения: броуновской и турбулентной диффузии, турбулентной миграции (турбофореза), седиментации под действием силы тяжести, термофореза из-за градиента температуры, конвективного переноса вследствие конденсации пара на стенках, диффузиофореза и центробежной силы при закрутке потока или обтекании искривленной поверхности.

Цель данной статьи состоит в описании физических моделей и полученных на их основе корреляционных зависимостей для скорости осаждения аэрозольных частиц с целью их имплантации в модернизируемый код ПРОФИТ. Плотность аэрозольных частиц предполагается много большей окружающей среды, а их размер не превышает 20 мкм. Особое внимание уделено турбулентным механизмам осаждения вследствие практической важности и сложности этих процессов.

Скорость осаждения аэрозольных частиц на ограничивающую поток поверхность в соответствии с принципом суперпозиции представляется в виде

$$V_d = \kappa\left(V_{GF} + V_{CF} + V_{TP} + V_{CT} + V_{DP} + V_{DF} + V_{TB}\right). \qquad (1)$$

Здесь $\kappa \equiv J_w^\circ / J_w$ — коэффициент захвата, равный отношению потока осевших на поверхности частиц J_w° к полному потоку осаждения J_w, а скорость осаждения определяется как $V_d = J_w^\circ / \Phi_m$, где Φ_m — средняя концентрация частиц в рассматриваемой пространственной ячейке. Соотношение (1) выражает скорость осаждения аэрозолей в виде суммы отдельных составляющих, обусловленных следующими механизмами: *гравитационной силой* V_{GF}, *центробежной силой* V_{CF}, *термофорезом* V_{TR}, *конвективным переносом* V_{CT}, *диффузиофорезом* V_{DP}, броуновской и турбулентной *диффузией* V_{DF} и *турбофорезом* V_{TB}. Все механизмы, приводящие к осаждению аэрозольных частиц, с некоторой степенью условности могут быть подразделены на две типа. К первому (конвективному) типу следует отнести механизмы, приводящие к появлению направленной к стенке осредненной скорости аэрозоля в результате вовлечения частиц в конвективное движение парогазовой среды (например, при конденсации пара на стенке) и действия массовых сил (гравитации, центробежной силы, термофореза, диффузиофореза и т. д.). Ко второму (флуктуационному) типу относятся диффузионный и миграционный механизмы, индуцирующие осаждение вследствие флуктуаций скоростей частиц, т. е. в результате броуновского или турбулентного движения частиц. Диффузионная и миграционная (тур-

бофоретическая) составляющие скорости осаждения возникают вследствие неоднородностей распределений концентрации частиц и турбулентных напряжений несущей среды. Эти величины должны находиться из решения уравнений сохранения концентрации и количества движения аэрозолей и в существенной степени зависят от режима течения (ламинарного или турбулентного).

Выражение (1) используется практически во всех известных аэрозольных кодах для расчета процесса осаждения. Согласно (1) предполагается, что отдельные механизмы действуют независимо и полный поток осаждения определяется на основе принципа суперпозиции. Однако суперпозиция скоростей осаждения в общем случае может нарушаться. Кроме того, принципиальное различие между процессами осаждения аэрозольных частиц при ламинарном и турбулентном режимах течения: скорость осаждения аэрозолей из ламинарного потока в данном сечении канала зависит от предыстории течения и, в частности, от толщины диффузионного пограничного слоя, развивающегося от входного сечения. Используемое в некоторых аэрозольных кодах априорное задание толщины диффузионного слоя не выдерживает критики. Напротив, скорость осаждения аэрозольных частиц из турбулентного потока определяется главным образом характеристиками потока в рассматриваемом сечении канала и слабо зависит от предыстории течения, т. е. имеет локальный характер. Другими словами, скорость осаждения малоинерционных частиц слабо связана с картиной течения вдали от рассматриваемой поверхности осаждения. Поэтому скорость осаждения таких частиц из турбулентного потока может быть определена локально, из анализа течения только вблизи данной поверхности независимо от картины течения на периферии. Из сказанного следует, что «точечные» аэрозольные коды приспособлены для расчета осаждения при турбулентном режиме течения лучше, чем при ламинарном.

2. Коэффициент захвата

Когда срывающая сила превышает удерживающую силу, имеет место унос частиц со стенки. Явление уноса может быть эффективным образом учтено путем введения коэффициента захвата частиц при осаждении. В настоящей работе коэффициент захвата определяется из условия равенства уносящей силы за счет сдвига скорости на стенке (поверхностного напряжения) и удерживающей адгезионной силы:

$$F_s = F_a. \qquad (2)$$

Уносящая сила сдвига пропорциональна произведению поверхностного напряжения на площадь поперечного сечения частицы (квадрат диаметра частицы):

$$F_s \propto \sigma_w d_p^2. \tag{3}$$

Удерживающая сила адгезии пропорциональна произведению поверхностной энергии сцепления частиц с поверхностью (энергией адгезии) на периметр сцепления (диаметр частицы)

$$F_a \propto \Sigma d_p, \tag{4}$$

где Σ — энергия адгезии.

Известно (например, [6]), что в турбулентном потоке касательное напряжение на стенке σ_w не является постоянной величиной, а испытывает флуктуации около среднего значения $\bar{\sigma}_w$. Примем, что флуктуации поверхностного напряжения описываются нормальным законом

$$P(\sigma_w) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}\sigma'_w} \exp\left[-\frac{(\sigma_w - \bar{\sigma}_w)^2}{2\sigma'^2_w}\right], \tag{5}$$

где $\sigma'_w \equiv \langle(\sigma_w - \bar{\sigma}_w)^2\rangle^{1/2}$ — среднеквадратичная флуктуация касательного напряжения на стенке.

Согласно (2) коэффициент захвата определяется соотношением

$$\kappa = \int_{-\sigma_w^\circ}^{\sigma_w^\circ} P(\sigma_w)\, d\sigma_w, \tag{6}$$

где σ_w° — критическое значение σ_w, при превышении которого частицы уносятся с поверхности, обтекающим потоком. Подстановка (5) в (6) дает

$$\kappa = \frac{1}{2}\left[\operatorname{erf}\left(\frac{\sigma_w^\circ - \bar{\sigma}_w}{2^{1/2}\sigma'_w}\right) + \operatorname{erf}\left(\frac{\sigma_w^\circ + \bar{\sigma}_w}{2^{1/2}\sigma'_w}\right)\right]. \tag{7}$$

Из (2)—(4) следует:

$$\sigma_w^\circ = \frac{C_1 \Sigma}{d_p}, \tag{8}$$

где C_1 — постоянная порядка единицы.

Далее примем, что дисперсия флуктуаций поверхностного напряжения пропорциональна его среднему значению:

$$\sigma'_w = C_2 \bar{\sigma}_w, \tag{9}$$

где C_2 — постоянная, меньшая единицы.

С учетом (8) и (9) коэффициент уноса (7) примет вид

$$\kappa = \frac{1}{2}\left[\operatorname{erf}\left(\frac{C_1\Sigma}{2^{1/2}C_2 d_p \bar{\sigma}_w} - \frac{1}{2^{1/2}C_2}\right) + \operatorname{erf}\left(\frac{C_1\Sigma}{2^{1/2}C_2 d_p \bar{\sigma}_w} + \frac{1}{2^{1/2}C_2}\right)\right]. \tag{10}$$

Из (10) видно, что κ зависит в первую очередь от параметра адгезии $\Sigma / d_p \bar{\sigma}_w$. Величина $\Sigma / d_p \bar{\sigma}_w$ может изменяться в значительно более широком диапазоне по сравнению с постоянными C_1 и C_2. Поэтому с целью упрощения пренебрежем вторыми слагаемыми в круглых скобках и положим

$$\kappa = \operatorname{erf}\left(\frac{\Sigma_{\text{ef}}}{d_p \bar{\sigma}_w}\right), \tag{11}$$

где Σ_{ef} — эффективная энергия адгезии.

3. Осаждение аэрозольных частиц под действием механизмов конвективного типа

Скорость гравитационного осаждения (седиментации) зависит главным образом от силы сопротивления движению аэрозольной частицы и определяется выражением

$$V_{GF} = (1 - A)\tau_p g \cos\varphi,$$

где τ_p — время динамической релаксации частицы; g — ускорение силы тяжести; φ — угол между направлением силы тяжести и нормалью к поверхности; A характеризует эффект присоединенной массы ($A \equiv (1 + C_A)\rho_f / (\rho_p + C_A \rho_f)$, где ρ_p — плотность материала аэрозольных частиц, ρ_f — плотность парогазовой среды, C_A — коэффициент присоединенной массы, для сферических частиц $C_A = 0{,}5$.

Время динамической релаксации небольшой аэрозольной частицы определяется соотношением

$$\tau_p = \frac{\tau_{p0}\left(1 + C_A \rho_f / \rho_p\right)\varphi_1(\mathrm{Kn})}{\varphi_2(\mathrm{Re}_p)}, \quad \tau_{p0} = \frac{\rho_p d_p^2}{18\rho_f \nu_f}, \qquad (12)$$

где τ_{p0} — время релаксации при стоксовом обтекании частицы ($\mathrm{Re}_p \ll 1$); d_p — диаметр частицы; ν_f — коэффициент кинематической вязкости парогазовой среды; $\mathrm{Kn} \equiv 2l_m / d_p$ — число Кнудсена; $l_m \equiv 2\nu_f / u_t$ — длина свободного пробега молекул в парогазовой среде; $u_t \equiv (8RT/\pi)^{1/2}$ — средняя скорость теплового движения молекул; R — газовая постоянная парогазовой среды; T — температура парогазовой среды; $\mathrm{Re}_p \equiv d_p W / \nu_f$ — число Рейнольдса обтекания частицы; W — относительная скорость между частицей и парогазовой средой. Для оценки Re_p относительную скорость между частицей и несущей средой положим равной скорости седиментации за счет силы тяжести $W \simeq \tau_p g$.

Зависимость $\varphi_1(\mathrm{Kn})$, называемая поправкой Каннингема — Милликена, описывает влияние разреженности окружающей частицу среды на силу гидродинамического сопротивления и представляется в виде

$$\varphi_1(\mathrm{Kn}) = 1 + \mathrm{Kn}\left[A_1 + A_2 \exp\left(-\frac{A_3}{\mathrm{Kn}}\right)\right],$$

где $A_1 = 1{,}257$, $A_2 = 0{,}40$, $A_3 = 1{,}1$ [7] или $A_1 = 1{,}20$, $A_2 = 0{,}41$, $A_3 = 0{,}88$ [8].

Зависимость $\varphi_2(\mathrm{Re}_p)$ в (12) характеризует влияние сил инерции на гидродинамическое сопротивление частицы и может быть описана аппроксимацией Шиллера — Неймана [9]:

$$\varphi_2(\mathrm{Re}_p) = \begin{cases} 1 + 0{,}15\,\mathrm{Re}_p^{0{,}687} & \text{при } \mathrm{Re}_p \le 10^3, \\ 0{,}11\,\mathrm{Re}_p / 6 & \text{при } \mathrm{Re}_p > 10^3. \end{cases}$$

Отметим, что для рассматриваемых аэрозолей ($d_p \le 20$ мкм) поправку $\varphi_2(\mathrm{Re}_p)$ можно не учитывать (в отличие от поправки $\varphi_1(\mathrm{Kn})$), что облегчает проведение расчетов, так как позволяет избежать итерационной процедуры при определении времени релаксации τ_p.

Скорость осаждения, индуцированная центробежной силой при обтекании криволинейной поверхности или в закрученном потоке, может быть определена следующим образом:

$$V_{CF} = \frac{(1-A)\tau_p U_{xw}^2}{R_w},$$

где U_{xw} — эффективная скорость движения потока вблизи поверхности осаждения; R_w — радиус кривизны поверхности осаждения.

Скорость осаждения в результате термофореза определяется в виде [10]

$$V_{TM} = \frac{36(1-A)\beta_{TM}\tau_p\mu_f^2}{\rho_f\rho_p d_p^2 T}\left(\frac{\partial T}{\partial y}\right)_0, \ \beta_{TM} = \frac{C_1\left(\lambda_f/\lambda_p + C_3\mathrm{Kn}\right)}{\left(1+3C_2\mathrm{Kn}\right)\left(1+2\lambda_f/\lambda_p + 2C_3\mathrm{Kn}\right)}, \quad (13)$$

где β_{TM} — коэффициент термофореза; μ_f — коэффициент динамической вязкости парогазовой среды; T — температура потока у стенки; $(\partial T/\partial y)_0$ — градиент температуры у стенки; λ_p и λ_f — коэффициенты теплопроводности материала частиц и парогазовой среды. Константы в (13) согласно [8] имеют следующие значения: $C_1 = 1{,}17$, $C_2 = 1{,}14$, $C_3 = 2{,}18$.

Конвективный механизм осаждения связан со стефановским потоком вследствие конденсации пара. Скорость конвективного переноса частиц на стенке V_{CT} может быть принята равной нормальной компоненте скорости парогазовой смеси вследствие конденсации пара U_{yw}. Механизм осаждения, называемый диффузиофорезом, обусловлен диффузией молекул в парогазовой среде и может иметь место даже при отсутствии конвективного переноса со средней скоростью парогазовой среды. Последний механизм, как правило, оказывается несущественным по сравнению с другими механизмами осаждения.

4. Осаждение за счет броуновской диффузии при ламинарном движении в каналах

Скорость осаждения аэрозолей в результате броуновской диффузии при движении парогазовой смеси в круглой трубе или плоской щели (в круглом и плоском каналах) определяется выражением

$$V_{DF} = \frac{D_B}{r_w}\max\left[\frac{3^{2/3} f''(0)}{2^{1/3}\Gamma(1/3)}\left(\frac{U_m r_w^2}{x\nu_f}\right)^{1/2}, \ \frac{1}{\Gamma(1/3)}\left(\frac{3(3+5i)U_m r_w^2}{2^i x D_B}\right)^{1/3} - \left(\frac{i}{2}+0{,}1\right)\right], \quad (14)$$

где D_B — коэффициент броуновской диффузии; x — расстояние от входного сечения; r_w — радиус круглой трубы или полуширина плоской щели;

U_m — среднемассовая скорость движения парогазовой среды в канале; $i = 0$ для плоского канала и $i = 1$ для круглого канала; $\Gamma(1/3)$ — гамма-функция, равная 2,679; $f''(0)$ — безразмерный градиент скорости на стенке в ламинарном пограничном слое, равный 0,332.

Первый член в квадратных скобках в (14) характеризует осаждение в начальном участке канала с однородным профилем скорости во входном сечении, когда справедливо решение Блазиуса для ламинарного пограничного слоя на пластине [11]. Второй член в квадратных скобках соответствует асимптотическому решению для диффузии при больших числах Шмидта в гидродинамически развитом ламинарном течении в трубе с параболическим профилем скорости [12].

Коэффициент броуновской диффузии определяется по формуле

$$D_B = \frac{k_B T \varphi_1(\mathrm{Kn})}{3\pi\mu_f d_p},$$

где k_B — постоянная Больцмана.

5. Осаждение за счет диффузии и турбофореза при турбулентном движении в каналах

Изучению осаждения аэрозольных частиц и капель из турбулентного потока на ограничивающие поверхности в силу практического значения этой задачи посвящено большое количество экспериментальных и численных исследований. Анализ и обобщение результатов экспериментальных исследований в вертикальных и горизонтальных трубах и каналах содержится в [13—15]. Первые теоретические модели осаждения частиц из турбулентного потока были предложены в [16; 17], а в [15] представлен обзор известных к тому времени полуэмпирических моделей для определения скорости осаждения. Авторы [16—20] построили лагранжевы модели осаждения, рассматривая взаимодействие частиц с двумерными вихрями, имитирующими пристеночные организованные (когерентные) структуры. В [21] для расчета осаждения применен стохастический лагранжев подход, основанный на взаимодействии частиц со случайными турбулентными вихрями с гауссовым распределением скоростей. Численному исследованию осаждения частиц в плоском вертикальном канале на основе траекторного моделирования в сочетании с методами прямого численного моделирова-

ния (DNS) и крупных вихрей (LES) посвящены соответственно работы [22—28] и [29; 30]. Авторы [31—33] для генерации турбулентных флуктуаций скорости сплошной среды использовали модель гауссова случайного поля [34]. Численное моделирование в круглой вертикальной трубе выполнено в [35; 36]. В перечисленных работах исследовано влияние силы тяжести, направления движения (опускного или восходящего), подъемной силы и броуновской диффузии на осаждение частиц. Численное исследование осаждения частиц с использованием DNS в горизонтальном канале проводилось в [28], а в плоском канале с одной открытой (свободной) стенкой — в [37; 38]. Авторы [39—41] для нахождения скорости осаждения использовали диффузионную модель. В [42; 43] исследовано осаждение частиц из турбулентного потока на основе решения кинетическое уравнение для функции плотности вероятности распределения скорости. Авторы [44—49] построили эйлеровы модели турбулентного осаждения, основанные на локально-равновесных соотношениях между интенсивностями нормальных компонент пульсаций скоростей дисперсной и сплошной фаз. Однако модели, основанные на локально-равновесных соотношениях для турбулентных напряжений, справедливы только в отношении малоинерционных частиц и не применимы для частиц, время релаксации которых сопоставимо с интегральным масштабом турбулентности сплошной среды. Авторы [50; 51] уточнили локально-равновесные модели, учитывая «эффект памяти» при помощи алгебраических соотношений. Нелокальные транспортные модели турбулентного осаждения на основе дифференциальных уравнений для вторых моментов пульсаций скорости частиц были предложены в [46; 52—55]. Влияние термофореза на осаждение аэрозольных частиц из турбулентного потока численно исследовалось в [56; 57].

Интенсивность осаждения частиц из турбулентного потока принято характеризовать зависимостью коэффициента осаждения $j_+ \equiv J_w / \Phi_m u_*$ от безразмерного времени релаксации $\tau_+ \equiv \tau_p u_*^2 / \nu_f$, где $u_* \equiv (\bar{\sigma}_w / \rho_f)^{1/2}$ — динамическая скорость. В соответствии с доминирующим механизмом осаждения, определяющим зависимость j_+ от τ_+, весь диапазон изменения инерционности частиц может быть условно подразделен на три характерные области: малоинерционные, среднеинерционные и высокоинерционные частицы.

Процесс осаждения малоинерционных частиц ($\tau_+ < 1$) управляется главным образом броуновской и турбулентной диффузией. Кроме того, существенную роль могут играть некоторые силы, определяющие перенос субмикронных частиц (например, сила термофореза в неизотермическом течении), а также конвективный перенос, обусловленный стефановским потоком в случае конденсации пара. При определяющей роли диффузионного механизма j_+ монотонно снижается с ростом τ_+, что связано с умень-

шением значения коэффициента броуновской диффузии при увеличении размера частиц.

Основным механизмом осаждения среднеинерционных частиц ($1 \le \tau_+ \le 100$) является их турбулентная миграция (турбофорез) из ядра течения с высоким уровнем турбулентных пульсаций скорости в зону вязкого подслоя у стенки. Для этой области инерционности частиц характерна резко растущая зависимость j_+ от τ_+. Авторы [21; 22] впервые численным путем установили тенденцию осаждающихся частиц накапливаться под действием турбофореза в области вязкого подслоя. Этот эффект аккумулирования частиц впоследствии был воспроизведен во многих работах. В данном диапазоне изменения τ_+ при не очень большом отношении плотностей дисперсной и сплошной фаз ρ_p / ρ_f заметное влияние на интенсивность осаждения может оказывать подъемная сила, обусловленная сдвигом скорости. Благодаря подъемной силе имеет место различие между интенсивностями осаждения частиц при опускном и восходящем направлениях движения, в результате чего коэффициент осаждения при опускном движении оказывается больше, чем при восходящем [28]. Однако учет силы Сэффмена в ее классическом виде [58; 59] применительно к обычно реализуемым в турбулентных потоках условиям оказывается не совсем корректным [27; 30]. Уточнение подъемной силы, выполненное в [60; 61], показывает, что ее эффект на осаждение частиц оказывается менее значительным, чем при использовании классической формулы Сэффмена [30; 35].

Высокоинерционные частицы ($\tau_+ > 100$) слабо вовлекаются в турбулентное движение несущей жидкости, что приводит к уменьшению коэффициента осаждения j_+ в вертикальном канале с ростом τ_+. Однако интенсивность осаждения высокоинерционных частиц определяется не только характеристиками пристеночной турбулентности; она в существенной степени зависит от внешних параметров течения, в частности от числа Рейнольдса, построенного по гидравлическому диаметру канала. Кроме того, значительное влияние на осаждение высокоинерционных частиц в вертикальном канале может оказывать сила тяжести, действие которой проявляется главным образом через «эффект пересечения траекторий» [62; 63].

Аэрозоли с размерами, не превышающими 20 мкм, при условиях, характерных для реакторных приложений, в соответствии с принятой классификацией представляют собой малоинерционные или среднеинерционные частицы. Поэтому в данном разделе ограничимся рассмотрением *диффузионного* и *турбофорезного* режимов осаждения, характерных для малоинерционных и среднеинерционных частиц.

Осаждение малоинерционных частиц ($\tau_+ < 1$) при незначительной роли конвективного переноса, термофореза и других сил, характерных для суб-

микронных аэрозолей, определяется процессами броуновской и турбулентной диффузии. Благодаря турбулентности диффузионное осаждение определяется характеристиками потока в рассматриваемом сечении канала и не зависит от его предыстории, т. е. является локальным процессом. Вследствие этого распределение частиц вблизи поверхности осаждения может быть определено из уравнения диффузии, учитывающего изменение концентрации только в поперечном к стенке направлении y,

$$\frac{d}{dy}\left[\left(D_B + D_T\right)\frac{d\Phi}{dy}\right] = 0, \tag{15}$$

где Φ — концентрация частиц.

Коэффициент турбулентной диффузии в области вязкого подслоя определяется соотношением

$$\frac{D_T}{\nu_f} = \alpha_n y_+^n, \tag{16}$$

где $y_+ = yu_* / \nu_f$ — расстояние от стенки в универсальных переменных; α_n — постоянная. Показатель степени в (16) может быть равным 3 или 4.

Решением уравнения (15) с учетом (16) будет

$$\Phi = \Phi_w + \frac{J_w}{u_*}\int_0^{y_+}\frac{dy_+}{\mathrm{Sc}_B^{-1} + \alpha_n y_+^n}, \tag{17}$$

где $J_w \equiv D_B(d\Phi / dy)_0$; $\mathrm{Sc}_B \equiv \nu_f / D_B$ — число Шмидта для броуновской диффузии.

Из (17) с учетом граничных условий $C(0) = 0$ и $C(\infty) = C_m$ определяется коэффициент осаждения:

$$j_+ = \beta_n \mathrm{Sc}_B^{(1-n)/n}, \;\; \beta_n = \frac{n\alpha_n^{1/n}}{\pi}\sin\frac{\pi}{n}. \tag{18}$$

Из (17) наглядно видно, что локальное выражение для коэффициента осаждения (т. е. не зависящее от предыстории течения) не может быть получено для ламинарного режима ($D_T = 0$), поскольку интеграл не сходится при $y \to \infty$.

В [14; 17] было предложено выражение (18) для диффузионного режима осаждения аэрозолей с использованием закона третьей степени роста коэффициента турбулентной диффузии в вязком подслое (16), т. е. при $n = 3$; для постоянной β_3 в этих работах дается значение 0,057. Однако, как теоретически показано в [64], при больших значениях числа Шмидта Sc_B, характерных для броуновской диффузии, более обоснованным является закон четвертой степени для коэффициента турбулентной диффузии частиц в вязком подслое, впервые предложенный В. Левичем [65]. Коэффициент α_n в (16) при $n = 4$ может быть выражен через постоянную Прандтля — Кармана κ, постоянную Ван-Дриста A_D и турбулентное число Шмидта Sc_T [46]:

$$\alpha_4 = \frac{\kappa^2}{A_D^2 \mathrm{Sc}_T}. \tag{19}$$

При подстановке в (19) обычно используемых значений $\kappa = 0,4$, $A_D = 26$ и $\mathrm{Sc}_T = 0,9$ получаем $\alpha_4 = 2,63 \cdot 10^{-4}$, что неплохо согласуется со значением $\alpha_4 = 3 \cdot 10^{-4}$, полученным в экспериментах [66]. Коэффициент β_4 в (18) согласно (19) оказывается равным 0,115, что совпадает со значением, приводимым в [6]. Таким образом, коэффициент осаждения аэрозолей в диффузионном режиме (18) определяется выражением

$$j_+ = 0,115 \mathrm{Sc}_B^{-3/4}. \tag{20}$$

В отличие от диффузионного режима при преобладающей роли турбофорезного механизма не может быть получено простое аналитическое решение для определения коэффициента осаждения. Известные в литературе аналитические решения являются полуэмпирическими и в существенной степени опираются на экспериментальные данные. При этом следует иметь в виду, что вследствие резкого роста коэффициента осаждения j_+ от параметра инерционности τ_+ в этой области имеет место очень сильная чувствительность зависимости $j_+(\tau_+)$ к полидисперсности аэрозоля. Как показано в [27], даже небольшая дисперсия в размерах приводит к довольно существенному повышению зависимости $j_+(\tau_+)$, осредненной по спектру размеров частиц. Поэтому к зависимостям $j_+(\tau_+)$, полученным на основе обобщения экспериментальных данных или полуэмпирических моделей, следует относиться с большой осторожностью. Более надежными представляются обобщающие зависимости, полученные с использованием результатов прямых численных расчетов и теоретических моделей, основанных на уравнениях для функции плотности вероятности распределения скорости

или вторых моментов пульсаций скорости частиц. Так, в [46] для турбофорезного режима осаждения предложена зависимость

$$j_+ = \frac{2\cdot 10^{-4}\tau_+^{\,2,5}}{1+10^{-3}\tau_+^{\,2,5}}. \qquad (21)$$

На рис. 1 показано сравнение формулы (21) с экспериментальными данными [67] для опускного течения в трубе, а также с прямыми численными расчетами для плоского канала [22; 30] и для круглой трубы [35]. Там же представлены эмпирические корреляции [13]:

$$j_+ = \begin{cases} 3,25\cdot 10^{-4}\tau_+^2 & \text{при } \tau_+ < 22,9, \\ 0,17 & \text{при } 22,9 < \tau_+, \end{cases} \qquad (22)$$

полученные в результате обобщения практически всех известных к тому времени экспериментальных данных. Видно, что для среднеинерционных аэрозолей турбофорез является причиной резкого возрастания коэффициента осаждения частиц с увеличением их инерционности. Как уже указывалось, высокоинерционные частицы ($\tau_+ > 100$) слабо вовлекаются в турбулентное движение несущей жидкости, что и приводит к выполаживанию зависимости j_+ от τ_+.

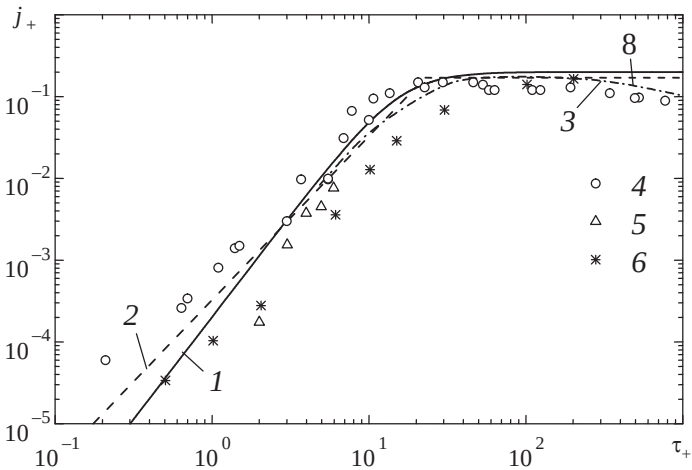


Рис. 1. Зависимость коэффициента осаждения от инерционности частиц для турбофорезного режима: *1* — формула (21), *2* — эмпирические корреляции (22), *3* — DNS [35], *4* — эксперимент [67], *5* — DNS [22], *6* — DNS [30]

Зависимость, объединяющая формулы (20) и (21) для диффузионного и турбофорезного режимов, имеет вид [46]

$$j_+ = \frac{0{,}115\,\mathrm{Sc}_B^{-3/4} + 2\cdot 10^{-4}\,\tau_+^{\,2,5}}{1 + 10^{-3}\,\tau_+^{\,2,5}}. \qquad (23)$$

На рис. 2 показано сравнение результатов расчета коэффициента осаждения при разных значениях числа Рейнольдса Re и параметра броуновской диффузии $B = \mathrm{Sc}_B / \tau_+^{1/2}$ [52; 54] с экспериментальными данными для вертикальных труб, собранными в [13], а также с обобщающей зависимостью (23). Расчетные значения показаны зачерненными символами, а сплошные кривые соответствуют формуле (23). Видно, что формула (23) согласуется с экспериментальными и расчетными данными во всем рассматриваемом диапазоне изменения параметра инерционности частиц. Первоначальное снижение скорости осаждения с ростом τ_+ происходит благодаря уменьшению коэффициента броуновской диффузии. Последующий рост скорости осаждения с увеличением τ_+, как уже указывалось, объясняется турбулентной миграцией. Влияние броуновской диффузии при $\tau_+ > 1$ очень мало, поэтому параметр B, характеризующий эффект броуновской диффузии, может быть исключен из списка определяющих параметров. Таким образом, осаждение аэрозольных частиц определяется их турбулентной диффузией и миграцией в неоднородных полях концентрации и пульсаций скорости.

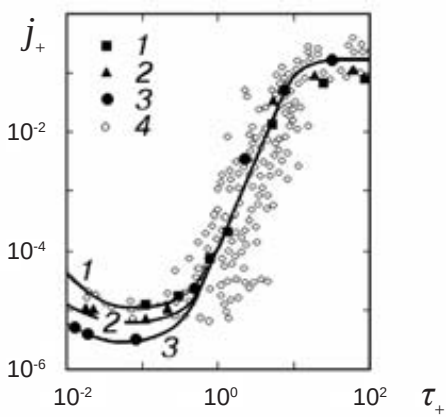


Рис. 2. Зависимость коэффициента осаждения от инерционности частиц для диффузионно-турбофорезного режима: 1 — $\mathrm{Re} = 1{,}5\cdot 10^5$, $B = 5\cdot 10^5$; 2 — $\mathrm{Re} = 6\cdot 10^4$, $B = 1{,}2\cdot 10^6$; 3 — $\mathrm{Re} = 1{,}5\cdot 10^4$, $B = 4{,}2\cdot 10^6$; *4* — экспериментальные данные [13]

6. Осаждение при совместном действии механизмов конвективного и флуктуационного типов

Вначале рассмотрим осаждение аэрозольных частиц из ламинарного потока в результате совместного действия механизмов обоих типов. В [68] анализировалось влияние термофореза на осаждение броуновских частиц при ламинарном гидродинамически развитом течении в каналах. Полученное в [68] решение можно считать справедливым при наличии «конвективной составляющей» скорости на стенке V_C, обусловленной стефановским потоком, силой тяжести и другими силами, а не только термофорезом. В этом случае скорость осаждения выражается зависимостью

$$V_d = \frac{\kappa V_C}{1-\exp\left(-V_C/V_{DF}\right)}, \tag{24}$$

где $V_C \equiv V_{GF} + V_{CF} + V_{TP} + V_{CT} + V_{DP}$, а диффузионная составляющая скорости осаждения V_{DF} определяется согласно (14).

Формула (24) совпадает с зависимостью, описывающей влияние поперечного потока массы на относительный закон тепломассопереноса в рамках «пленочной теории» [69; 70]. Отметим, что при наличии скорости V_C, индуцированной силой тяжести в наклонной трубе или другим фактором, нарушающим осесимметричность осаждения, необходимо выполнить осреднение (24) по периметру трубы.

Покажем, что зависимость (24) будет справедлива и для диффузионного осаждения при турбулентном режиме течения. В этом случае уравнение диффузии с учетом переноса аэрозолей благодаря «конвективной» составляющей скорости V_C записывается в виде

$$\frac{d}{dy}\left[\left(D_B + D_T\right)\frac{d\Phi}{dy}\right] + V_C\frac{d\Phi}{dy} = 0. \tag{25}$$

Решение уравнения (25) с учетом (16) имеет вид

$$\Phi = \Phi_w + \frac{J_w}{V_C}\left[1-\exp\left(-V_+\int_0^{y_+}\frac{dy_+}{\mathrm{Sc}_B^{-1}+\alpha_n y_+^n}\right)\right],\ V_+ = \frac{V_C}{u_*}. \tag{26}$$

Из (26) с учетом граничных условий $C(0)=0$ и $C(\infty)=C_m$ определяется коэффициент осаждения:

$$j_+ = \frac{V_+}{1-\exp\left(-V_+/j_{+0}\right)}, \tag{27}$$

где j_{+0} обозначает коэффициент осаждения в диффузионном режиме и определяется соотношением (20). Очевидно, что зависимость (27) аналогична (24).

Зависимость (27) может быть распространена на диффузионно-турбофорезный режим осаждения, если вместо (20) для определения j_{+0} использовать корреляцию (23).

Зависимость (27) протестирована путем сравнения с экспериментальными данными [71] для неизотермическом течении в круглой охлаждаемой трубе, когда существенно влияние силы термофореза. В этом случае скорость V_C оказывается равной скорости термофореза V_{TM}, определяемой согласно (13). В экспериментах [71] диаметр трубы r_w равнялся 7,92 мм, охлаждаемая водой длина трубы L составляла 305 мм. Температура стенки трубы T_w держалась на уровне 300 К, в то время как входная температура газа T_0 равнялась соответственно 505, 630 и 755 К. Входная среднемассовая скорость U_m составила 60 м/с. Аэрозоль представлял собой субмикронные частицы из NaCl. В экспериментах измерялись массовые потоки аэрозоля во входном и выходном сечениях охлаждаемой трубы. Эффективность осаждения рассчитывалась по формуле

$$\xi = 1-\frac{J_L}{J_0} = 1-\exp\left(-\int_0^L \frac{2\kappa j_+ u_* dx}{U_m r_w}\right), \tag{28}$$

где коэффициент осаждения определялся согласно (27) с учетом (23). В (28) J_L и J_0 обозначают массовые расходы аэрозоля в выходном и входном сечениях трубы.

На рис. 3 показана зависимость эффективности осаждения от размера аэрозолей для разных значений входной температуры потока. Очевидно, что с увеличением T_0 при фиксированном значении T_w эффект термофореза возрастает, что и приводит к увеличению эффективности осаждения. Влияние уноса усиливается по мере увеличения размера частиц. Как видно, значения ξ, предсказываемые без учета явления уноса (т. е. при $\kappa=1$), для относительно крупных частиц оказываются существенно ниже экспериментальных данных. Анализ, выполненный в [72], также указывает на суще-

ственное влияние эффекта уноса на ξ. Коэффициент захвата определялся на основе (11) при $\Sigma_{ef} = 5 \cdot 10^{-6}$ Дж/м^2. Результаты расчета эффективности осаждения, полученные с учетом явления уноса частиц, значительно лучше соответствуют экспериментальным данным.

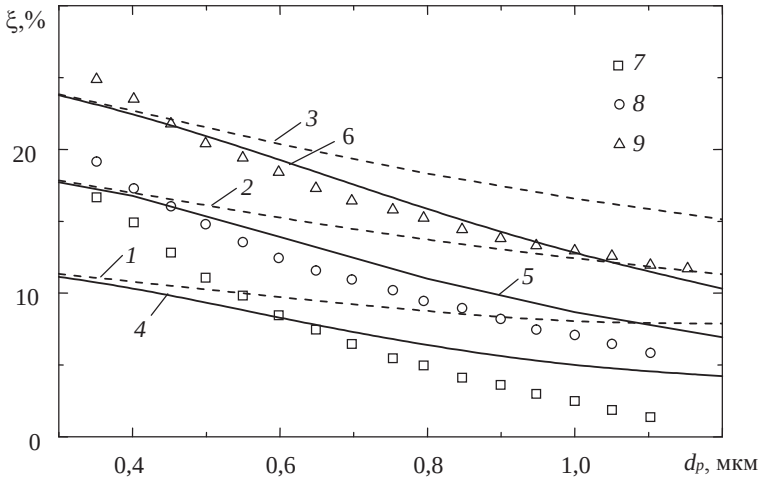


Рис. 3. Зависимость эффективности осаждения от диаметра частиц: *1—3* — расчет без учета уноса; *4—6* — расчет с учетом уноса; *7—9* — эксперимент [71]; *1, 4, 7* — T_0 = 505 К; *2, 5, 8* — T_0 = 630 К; *3, 6, 9* — T_0 = 755 К

7. Заключение

Построены обобщающие зависимости для скорости осаждения аэрозольных частиц в результате броуновской и турбулентной диффузии, турбулентной миграции (турбофореза) и механизмов осаждения конвективного типа (гравитационной седиментации, центробежной силы, термофореза, стефановского потока при конденсации пара, диффузиофореза и т. д.). Представленные корреляции для скорости осаждения имплантированы в код ПРОФИТ.

Литература

1. *Gelbard F.* MAEROS User Manual. NUREG/CR-1391, SAND80-0822 / Sandia National Laboratories. — [S. l.], 1982.

2. *Murata K. K.* et al. User's Manual for CONTAIN 1.1. A computer code for severe nuclear reactor accident containment analysis. NUREG/CR-5026, SAND87-2309 / Sandia National Laboratories. — [S. l.], 1989.

3. *Summmers R. M.* et al. MELCOR 1.8.0. A computer code for nuclear reactor severe accident source term and risk assessment analysis. NUREG/CR-5531, SAND90-0364 / Sandia National Laboratories. — [S. l.], 1991.

4. *Безлепкин В. В., Сидоров В. Г., Лукин А. В.* и др. Разработка компьютерных кодов для описания внутрикорпусных теплогидравлических и физико-химических процессов в рамках создания единого программного комплекса для моделирования тяжелых аварий на АЭС // Теплоэнергетика. — 2004. — № 2. — С. 5—11.

5. *Киселев А. Е., Носатов В. Н., Стрижов В. Ф., Томащик Д. Ю.* Применение интегральных кодов для моделирования аварийных режимов реакторов типа ВВЭР // Изв. РАН. Энергетика. — 2004. — № 2. — С. 57—64.

6. *Кутателадзе С. С.* Пристенная турбулентность. — Новосибирск: Наука, 1973. — 228 с.

7. *Райст П.* Аэрозоли: Введение в теорию. — М.: Мир, 1987. — 280 с.

8. *Talbot L., Cheng R. K., Schefer R. W., Willis D. R.* Thermophoresis of particles in a heated boundary layer // J. Fluid Mech. — 1980. — Vol. 101. — P. 737—758.

9. *Clift R., Grace J. R., Weber M. E.* Bubbles, Drops and Particles. — New York: Academic Press, 1978.

10. *Brock J. R.* On the theory of thermal forces acting on aerosol particles // J. Colloid Sci. — 1962. — Vol. 17. — P. 768—780.

11. *Шлихтинг Г.* Теория пограничного слоя. — М.: Наука, 1974. — 712 с.

12. *Leveque M. F.* Les lois de la transmission de chaleur par convection // Ann. des Mines. — 1928. — Vol. 13. — P. 527—532.

13. *McCoy D. D., Hanratty T. J.* Rate of deposition of droplets in annular two-phase flow // Intern. J. Multiphase Flow. — 1977. — Vol. 3. — P. 319—331.

14. *Wood N. B.* A simple method of calculation of turbulent deposition to smooth and rough surfaces // J. Aerosol Sci. — 1981. — Vol. 12. — P. 275—290.

15. *Papavergos P. G., Hedley A. B.* Particle deposition behaviour from turbulent flows // Chem. Eng. Res. Des. — 1984. — Vol. 62. — P. 275—295.

16. *Friedlander S. K., Johnstone H. F.* Deposition of suspended particles from turbulent gas streams // Ind. Engng Chem. — 1957. — Vol. 49, № 7. — P. 1151—1156.

17. *Davies C. N.* Deposition from moving aerosols // Aerosol Science. — London: Academic Press, 1966.

18. *Cleaver J. W., Yates B.* A sublayer model for the deposition of particles from a turbulent flow // Chem. Engng Sci. — 1975. — Vol. 30. — P. 983—992.

19. *Fichman M., Gutfinger C., Pnueli D.* A model for turbulent deposition of aerosols // J. Aerosol Sci. — 1988. — Vol. 19, № 1. — P. 123—136.

20. *Fan F.-G., Ahmadi G.* A sublayer model for turbulent deposition of particles in turbulent ducts with smooth and rough surfaces // J. Aerosol Sci. — 1993. — Vol. 24. — P. 45—64.

21. Kallio G. A., Reeks M. W. A numerical simulation of particle deposition in turbulent boundary layer // Int. J. Multiphase Flow. — 1989. — Vol. 15, № 3. — P. 433—446.

22. *McLaughlin J. B.* Aerosol particle deposition in numerically simulated channel flow // Phys. Fluids A. — 1989. — Vol. 1, № 7. — P. 1211—1224.

23. *Ounis H., Ahmadi G., McLaughlin J. B.* Dispersion and deposition of Brownian particles from point sources in a simulated turbulent channel flow // J. Colloid Interface Sci. — 1991. —Vol. 147. — P. 233—250.

24. *Ounis H., Ahmadi G., McLaughlin J. B.* Brownian particle deposition a directly simulated turbulent channel flow // Phys. Fluids A. — 1993. — Vol. 5. — P. 1427—1432.

25. *Brooke J. W., Kontomaris K., Hanratty T. J., McLaughlin J. B.* Turbulent deposition and trapping of aerosols at the wall // Phys. Fluids A. — 1992. — Vol. 4, № 4. — P. 825—834.

26. *Brooke J. W., Hanratty T. J., McLaughlin J. B.* Free-flight mixing and deposition of aerosols // Phys. Fluids. — 1994. — Vol. 6, № 10. — P. 3404—3415.

27. *Chen M., McLaughlin J. B.* A new correlation for the aerosol deposition rate in vertical ducts // J. Colloid and Interface Sci. — 1995. — Vol. 169. — P. 437—455.

28. *Zhang H., Ahmadi G.* Aerosol particle transport and deposition in vertical and horizontal turbulent duct flows // J. Fluid Mech. — 2000. — Vol. 406. — P. 55—80.

29. *Wang Q., Squires K. D.* Large eddy simulation of particle deposition in a vertical turbulent channel flow // Intern. J. Multiphase Flow. — 1996. — Vol. 22, № 4. — P. 667—683.

30. *Wang Q., Squires K. D., Chen M., McLaughlin J. B.* On the role of the lift force in turbulence simulations of particle deposition // Intern. J. Multiphase Flow. — 1997. — Vol. 23, № 4. — P. 749—763.

31. *Li A., Ahmadi G.* Dispersion and deposition of spherical particles from point sources in a turbulent channel flow // J. Aerosol Sci. Technol. — 1991. — Vol. 16. — P. 209—226.

32. *Li A., Ahmadi G.* Deposition of aerosols on surfaces in a turbulent channel flow // Intern. J. Engng Sci. — 1993. — Vol. 31, № 3. — P. 435—451.

33. *Chen Q., Ahmadi G.* Deposition of particles in a turbulent pipe flow // J. Aerosol Sci. — 1997. — Vol. 28, № 5. — P. 789—796.

34. *Kraichnan R. H.* Diffusion by a random velocity field // Phys. Fluids. — 1970. — Vol. 13, № 1. — P. 22—31.

35. *Uijttewaal W. S. J., Oliemans R. V. A.* Particle dispersion and deposition in direct numerical and large eddy simulations of vertical pipe flows // Phys. Fluids. — 1996. — Vol. 18, № 10. — P. 2590—2604.

36. *Marchioli C., Guiusti A., Salvetti M. V., Soldati A.* Direct numerical simulation of particle wall transfer and deposition in upward turbulent pipe flow // Intern. J. Multiphase Flow. — 2003. — Vol. 29. — P. 1017—1038.

37. *Van Haarlem B., Boersma B. J., Nieuwstadt T. M.* Direct numerical simulation of particle deposition onto a free-slip and no-slip surface // Phys. Fluids. — 1998. — Vol. 10, № 10. — P. 2608—2620.

38. *Narayanan C., Lakehal D., Botto L., Soldati A.* Mechanism of particle deposition in a fully developed turbulent open channel flow // Phys. Fluids. — 2003. — Vol. 15, № 3. — P. 763—775.

39. *Lee M. M., Hanratty T. J., Adrian R. J.* The interpretation of droplet deposition measurements with a diffusion model // Intern. J. Multiphase Flow. — 1989. — Vol. 15, № 3. — P. 459—469.

40. *Binder J. L., Hanratty T. J.* A diffusion model for droplet deposition in gas/liquid annular flow // Intern. J. Multiphase Flow. — 1991. — Vol. 17, № 1. — P. 1—11.

41. *Mols B., Oliemans B. V. A.* A turbulent fiffusion model for particle dispersion and deposition in horizontal tube flow // Intern. J. Multiphase Flow. — 1998. — Vol. 24, № 1. — P. 55—75.

42. *Крошилин А. Е., Кухаренко В. Н., Нигматулин Б. И.* Осаждение частиц на стенку канала в градиентном турбулентном дисперсном потоке // Изв. АН СССР. Механика жидкости и газа. — 1985. — № 4. — С. 57—63.

43. *Swailes D. C., Reeks M. W.* Particle deposition from a turbulent flow. — 1: A steady-state model for high inertia particles // Phys. Fluids. — 1994. — Vol. 6, № 10. — P. 3392—3403.

44. *Деревич И. В., Зайчик Л. И.* Осаждение частиц из турбулентного потока // Изв. АН СССР. Механика жидкости и газа. — 1988. — № 5. — С. 96—104.

45. *Johansen S. T.* The deposition of particles on vertical walls // Intern. J. Multiphase Flow. — 1991. — Vol. 17, № 3. — P. 355—376.

46. *Zaichik L. I., Nigmatulin B. I., Pershukov V. A.* Modelling of dynamics of aerosols in near-wall turbulent flows and particle deposition in pipes // Advances in Multiphase Flow 1995. — Amsterdam: Elsevier, 1995. — P. 75—84.

47. *Guha A.* A unified Eulerian theory of turbulent deposition to smooth and rough surfaces // J. Aerosol Sci. — 1997. — Vol. 28, № 8. — P. 1517—1537.

48. *Young J. B., Leeming A. D.* A theory of particle deposition in turbulent pipe flow // J. Fluid Mech. — 1997. — Vol. 340. — P. 129—159.

49. *Slater S. A., Leeming A. D., Young J. B.* Particle deposition from two-dimensional turbulent flows // Int. J. Multiphase Flow. — 2003. — Vol. 29. — P. 721—750.

50. *Shin M., Kim D. S., Lee J. W.* Deposition of inertia-dominated particles inside a turbulent boundary layer // Intern. J. Multiphase Flow. — 2003. — Vol. 29. — P. 893—926.

51. *Shin M., Lee J. W.* Memory effect in the Eulerian particle deposition in a fully developed turbulent channel flow // J. Aerosol Sci. — 2001. — Vol. 32. — P. 675—693.

52. *Zaichik L. I., Gusev I. N., Guseva E. I.* Turbulent flow and precipitation of particles in channels // Engineering Turbulence Modelling and Experiments. — Amsterdam: Elsevier, 1990. — P. 907—916.

53. *Derevich I. V.* The statistical concept of coarse particle motion in a turbulent pipe flow // Proc. 8th Symposium on Turbulent Shear Flows. — Munich, 1991. — P. 10-4-1—10-4-6.

54. *Гусев И. Н., Гусева Е. И., Зайчик Л. И.* Модель осаждения частиц из турбулентного газодисперсного потока в каналах с поглощающими стенками // Изв. Рос. акад. наук. Механика жидкости и газа. — 1992. — № 1. — С. 58—65.

55. *Derevich I. V.* Statistical modelling of mass transfer in turbulent two-phase dispersed flows. 2: Calculation results // Intern. J. Heat and Mass Transfer. — 2000. — Vol. 43, № 19. — P. 3725—3734.

56. *Thakurta D. G., Chen M., McLaughlin J. B., Kontomaris K.* Thermophoretic deposition of small particles in a direct numerical simulation

of turbulent channel flow // Intern. J. Heat and Mass Transfer. — 1998. — Vol. 41. — P. 4167—4182.

57. *Kröger C., Drossinos Y.* A random-walk simulation of thermophoretic particle deposition in a turbulent boundary layer // Intern. J. Multiphase Flow. — 2000. — Vol. 26. — P. 1325—1350.

58. *Saffman P. G.* The lift on a small sphere in a slow shear flow // J. Fluid Mech. — 1965. Vol. 22. — P. 385—400.

59. *Saffman P. G.* Corrigendum to "The lift on a small sphere in a slow shear flow" // J. Fluid Mech. — 1968. — Vol. 31. — P. 624.

60. *McLaughlin J.* B. Inertial migration of a small sphere in linear shear flows // J. Fluid Mech. — 1991. — Vol. 224. — P. 261—274.

61. *McLaughlin J. B.* The lift on a small sphere in wall-bounded linear shear flows // J. Fluid Mech. — 1993. — Vol. 246. — P. 249—265.

62. *Yudine M. I.* Physical consideration on heavy-particle dispersion // Advances in Geophysics. — 1959. — Vol. 6. — P. 185—191.

63. *Csanady G. T.* Turbulent diffusion of heavy-particles in the atmosphere // J. Atmos. Sci. — 1963. — Vol. 20. — P. 201—208.

64. *Гешев П. И.* Характеристики коэффициентов турбулентного обмена в вязком подслое // Журн. приклад. механики и техн. физики. — 1974. — № 2. — С. 61—66.

65. *Левич В. Г.* Физико-химическая гидродинамика. — М.: Физматгиз, 1959. — 699 с.

66. *Son J. S., Hanratty T. J.* Limiting relation for the eddy diffusivity close to awall // AIChE J. — 1967. — Vol. 13, № 4. — P. 689—696.

67. *Liu B. Y. H., Agarwal J .K.* Experimental observation of aerosol deposition in turbulent flow // J. Aerosol Sci. — 1974. — Vol. 5. — P. 145—155.

68. *Деревич И. В., Зайчик Л. И.* Влияние термофореза на осаждение броуновских частиц в канале // Теплофизика высоких температур. — 1988. — Т. 26, № 1. — С. 137—146.

69. *Сполдинг Д. Б.* Конвективный массоперенос. — М.: Энергия, 1965. — 384 с.

70. *Ерошенко В. М., Зайчик Л. И.* Гидродинамика и тепломассообмен на проницаемых поверхностях. — М.: Наука, 1984. — 275 с.

71. *Byers R. L.* Particle deposition from turbulent streams by means of thermal force: PhD Thesis / Pennsylvania State Univ. — [S. l.], 1967.

72. *Johansen S. T.* Thermal-inertial deposition of particles // Proc. Int. Conf. on Multiphase Flows. — Tsukuba, Japan, 1991. — P. 415—421.

IX. Развитие моделей переноса и трансформации аэрозолей в коде ПРОФИТ. Коагуляция аэрозольных частиц

В. М. Алипченков, Л. И. Зайчик, А. Е. Киселев, В. Ф. Стрижов, А. С. Филиппов, С. В. Цаун

1. Введение

При расчете процесса агломерации частиц в известных аэрозольных кодах предполагается, что различные механизмы коагуляции действуют независимо друг от друга, в соответствии с чем полное ядро коагуляции считается равным сумме ядер коагуляции, обусловленных отдельными механизмами столкновений. В действительности все механизмы столкновений взаимосвязаны и линейная суперпозиция ядер коагуляции в ряде случаев может приводить к заметным ошибкам. Кроме того, никогда не принимается во внимание эффект аккумулирования (кластеризации) частиц под действием турбулентности, который способен привести к существенному возрастанию скорости агломерации. В настоящей работе ставится задача построить обобщающие корреляции, описывающие вклад наиболее существенных механизмов коагуляции в процесс агломерации аэрозолей с учетом взаимодействия этих механизмов.

Данная статья является продолжением работы [1], и ее цель состоит в описании физических моделей и получении на их основе корреляционных зависимостей для ядра коагуляции аэрозольных частиц для их имплантации в модернизируемый код ПРОФИТ. Предполагается, что плотность аэрозольных частиц много больше плотности окружающей среды, а их размер не превышает 20 мкм. Особое внимание уделено турбулентному механизму коагуляции вследствие практической важности и сложности этого процесса.

2. Ядра столкновений и коагуляции

Термины «ядро столкновений» и «ядро коагуляции» возникли в связи с тем, что эти величины могут входить в подынтегральные выражения кинетического уравнения, описывающего изменение спектра частиц по размерам в результате процессов агломерации. В дальнейшем, как и в [2], эти термины будем относить к процессам, характеризуемым соответственно отсутствием и наличием слияния частиц при соударениях, т. е. сохранением или

уменьшением числа частиц в системе. Кроме того, ядро коагуляции должно учитывать гидродинамическое взаимодействие двух частиц, обусловленное их относительным движением. Таким образом, ядро коагуляции (агломерации), характеризующее процесс слияния частиц при столкновениях, может отличаться от ядра столкновений, учитывающего только в кинематическом приближении (без учета гидродинамического взаимодействия) процесс столкновений без анализа вероятности их слияния.

В рамках статистической сферической формулировки без учета гидродинамического взаимодействия частиц ядро столкновений частиц сорта 1 с частицами сорта 2 определяется кинематическим соотношением [3; 4]

$$\beta^{\mathrm{col}} = -4\pi R^2 \langle w_r^-(R)\rangle q \Gamma_{12}(R), \tag{1}$$

где r — расстояние между центрами двух частиц; $R \equiv r_1 + r_2$ — эффективный радиус столкновений; r_α — радиус частиц сорта α ($\alpha = 1, 2$); $w_r \equiv W_r + w_r'$ — радиальная компонента относительной скорости двух частиц, равная сумме осредненной W_r и пульсационной w_r' составляющих; $\langle w_r^-(R)\rangle$ — средняя относительная радиальная скорость, направленная внутрь сферы радиуса $r = R$ (т. е. $w_r < 0$); q — вероятность реализации события $w_r < 0$; $\Gamma_{12}(R)$ — радиальная функция распределения при $r = R$. Величина $\Gamma_{12}(R)$ описывает эффект аккумулирования частиц и равняется отношению вероятности обнаружения числа частиц сорта 2 в бесконечно тонкой оболочке радиуса r вокруг выделенной частицы сорта 1 к соответствующей величине в однородно распределенной в пространстве системе частиц.

Как и при анализе осаждения [1], все механизмы, приводящие к столкновениям и коагуляции частиц, с некоторой степенью условности могут быть подразделены на два типа. К первому относятся механизмы, вызывающие столкновения вследствие флуктуаций скоростей частиц, т. е. в результате броуновского или турбулентного движения, ко второму — механизмы, приводящие к появлению осредненной относительной скорости между двумя частицами, например в результате градиента скорости несущего потока или гравитационной седиментации частиц разного сорта, т. е. с разным временем релаксации $\tau_{p\alpha}$.

Сначала рассмотрим флуктуационный механизм столкновений. Функция плотности вероятности пульсационной составляющей радиальной относительной скорости задается гауссовым распределением

$$P(w_r) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\langle w_r'^2\rangle}} \exp\left(-\frac{w_r'^2}{2\langle w_r'^2\rangle}\right). \tag{2}$$

При отсутствии слияния частиц при столкновениях осредненная составляющая радиальной относительной скорости частиц равна нулю ($W_r = 0$). В этом случае согласно (2) средняя по модулю и среднеквадратичная радиальные относительные скорости связаны соотношением

$$\langle | w_r | \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} | w_r | P(w_r) dw_r = \left(\frac{2}{\pi} \langle w_r'^2 \rangle \right)^{1/2}. \qquad (3)$$

Кроме того, в соответствии с (2)

$$\langle w_r^- \rangle = -\langle | w_r | \rangle, \quad q = 1/2. \qquad (4)$$

С учетом (3) и (4) ядро столкновений (1) представляется в виде

$$\beta^{\mathrm{col}} = \left[8\pi \langle w_r'^2 (R) \rangle \right]^{1/2} R^2 \Gamma_{12}(R). \qquad (5)$$

Ядро коагуляции определяется выражением

$$\beta^{\mathrm{coag}} = -4\pi R^2 W_r(R) \Gamma_{12}(R), \qquad (6)$$

в котором осредненная радиальная скорость частиц на поверхности контакта $r = R$ находится из соотношения

$$W_r(R) = \phi \langle w_r^-(R) \rangle q, \qquad (7)$$

где ϕ — коэффициент захвата при столкновении (эффективность коагуляции), характеризующий вероятность того, что сталкивающиеся частицы слипнутся, а также эффект гидродинамического взаимодействия частиц.

Если по-прежнему считать, что функция плотности вероятности относительной радиальной скорости сталкивающихся частиц описывается гауссовым распределением (2) и, следовательно, остаются в силе соотношения (4), то выражение (7) примет вид

$$W_r(R) = -\phi \left(\frac{\langle w_r'^2(R) \rangle}{2\pi} \right)^{1/2}. \qquad (8)$$

Подстановка (8) в (6) определяет ядро коагуляции в виде

$$\beta^{\text{coag}} = \phi\left[8\pi\left\langle w_r'^2(R)\right\rangle\right]^{1/2} R^2\Gamma_{12}(R). \qquad (9)$$

Следует отметить, что равновесное гауссово распределение (2) и основанные на нем соотношения (4) и (8) при наличии коагуляции нарушаются даже в том случае, если при отсутствии коагуляции (т. е. при $\phi = 0$) они выполнялись строго. Однако вносимая этими допущениями погрешность в определение ядра коагуляции (9) может быть компенсирована путем коррекции коэффициента захвата ϕ. Кроме того, ядро коагуляции (9) может отличаться от ядра столкновений (5) и тогда, когда коэффициент захвата ϕ равен единице (хотя в литературе данное обстоятельство, как правило, игнорируется). Это связано с тем, что даже если среднеквадратичные скорости $\left\langle w_r'^2(R)\right\rangle$ при отсутствии и наличии коагуляции совпадают, радиальные функции распределения $\Gamma_{12}(R)$ в этих случаях могут существенно отличаться. При коагуляции (в отличие от столкновений, не сопровождающихся слиянием частиц) происходит снижение плотности распределения «осаждающихся» частиц в окрестности выделенной частицы. В результате Γ_{12} на поверхности контакта $r = R$ имеет меньшее значение по сравнению со случаем отсутствия коагуляции. Поэтому ядро коагуляции не может превышать значения ядра столкновений, и, следовательно, β^{col} может служить в качестве верхней оценки для β^{coag}. Это различие между β^{coag} при $\phi = 1$ и β^{col} в зависимости от природы физического явления, вызывающего процесс столкновений или коагуляции, может быть как значительным, так и не иметь существенного значения. В качестве критерия возможного различия между β^{coag} при $\phi = 1$ и β^{col} может служить отношение эффективной длины свободного пробега частиц l_p и радиуса сферы столкновений R, т. е. число Кнудсена для частиц $\text{Kn}_p \equiv l_p / R$. Если $\text{Kn}_p \gg 1$, разница между β^{coag} при $\phi = 1$ и β^{col} несущественна, если же $\text{Kn}_p \le 1$, то эта разница может быть значительной.

Перейдем к определению ядра столкновений в результате совместных эффектов флуктуаций скорости и осредненной относительной скорости между частицами. Считая соотношения (4) по-прежнему справедливыми, в рамках сферической формулировки (1) можно записать

$$\beta^{\text{col}} = 2\pi R^2 \left\langle | w_r(R) | \right\rangle \Gamma_{12}(R). \qquad (10)$$

Однако теперь для вычисления $\left\langle | w_r | \right\rangle$ в (10) необходимо выполнить осреднение по случайному распределению w_r и телесному углу, характеризующему пространственную ориентацию вектора скорости $\mathbf{w}$ относительно соединяющего центры сталкивающихся частиц вектора $\mathbf{r}$:

$$\langle | w_r | \rangle = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} | w_r | P(w_r) \sin\varphi \, d\psi \, d\varphi \, dw_r, \qquad (11)$$

где φ — полярный угол между вектором $\mathbf{r}$ и осью $\mathbf{z}$, направленной для определенности вертикально вверх; ψ — азимутальный угол в перпендикулярной к $\mathbf{z}$ плоскости ($\mathbf{x}, \mathbf{y}$).

Выполним интегрирование в (11) по w_r с учетом гауссова распределения для пульсационной составляющей радиальной компоненты относительной скорости (2):

$$\langle | w_r | \rangle = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \left[\left(\frac{2\langle w_r'^2 \rangle}{\pi} \right)^{1/2} \exp\left(-\frac{W_r^2}{2\langle w_r'^2 \rangle} \right) + W_r \operatorname{erf}\left(\frac{W_r}{\left(2\langle w_r'^2 \rangle\right)^{1/2}} \right) \right] \sin\varphi \, d\psi \, d\varphi. \qquad (12)$$

При отсутствии осредненной относительной скорости ($W_r = 0$) выражение (12) переходит в (3).

Ядро коагуляции при наличии двух типов механизмов столкновений определяется следующим образом:

$$\beta^{\text{coag}} = 2\pi\phi R^2 \langle | w_r(R) | \rangle \Gamma_{12}(R), \qquad (13)$$

где $\langle | w_r | \rangle$ описывается выражением (12).

3. Турбулентно-броуновское ядро коагуляции

Вначале рассмотрим коагуляцию малоинерционных аэрозольных частиц под действием турбулентности и броуновской диффузии при выполнении условий $\bar{R} \le 0{,}1$ и $\mathrm{St}_\alpha \le 0{,}6$, где $\bar{R} \equiv R/\eta$ — безразмерный радиус столкновений; $\mathrm{St}_\alpha \equiv \tau_{p\alpha} / \tau_k$ — число Стокса для частиц группы α; $\eta \equiv (\nu_f^3 / \varepsilon)^{1/4}$ и $\tau_k \equiv (\nu_f / \varepsilon)^{1/2}$ — колмогоровские пространственный и временной микромасштабы; ν_f — коэффициент кинематической вязкости окружающей сплошной среды; ε — скорость диссипации турбулентной энергии.

В изотропной турбулентности радиальная функция распределения подчиняется уравнению неразрывности в пространстве относительного движения двух частиц [5; 6]

$$\frac{\partial \Gamma_{12}}{\partial t} + \frac{\partial W_k \Gamma_{12}}{\partial r_k} = 0, \qquad (14)$$

где осредненная относительная скорость W_i представляется в виде суммы диффузионной и миграционной составляющих:

$$W_i = W_i^{\text{diff}} + W_i^{\text{migr}}. \tag{15}$$

Диффузионная относительная скорость имеет вид

$$W_i^{\text{diff}} = -D_{p\,ik}^{r} \frac{\partial \ln \Gamma_{12}}{\partial r_k}. \tag{16}$$

Тензор относительной диффузии частиц $D_{p\,ik}^{r}$ представляется как сумма трех процессов, обусловленных соответственно относительным турбулентным движением двух частиц в монодисперсном приближении, относительным турбулентным ускорением двух частиц с разными временами релаксации и броуновским движением:

$$D_{p\,ij}^{r} = D_{p\,ij}^{r*} + D_{a\,ij}^{r} + D_{b\,ij}^{r}. \tag{17}$$

Тензор относительной турбулентной диффузии двух частиц в монодисперсном приближении определяется по формуле [7]

$$D_{p\,ij}^{r*} = \tau_p \left(S_{p\,ij}^{*} + g_\sigma \Sigma_{ij} + g_\omega \Omega_{ij} \right), \tag{18}$$

где $S_{p\,ij}^{*}(\mathbf{r})$ — структурная функция, характеризующая в монодисперсном приближении разность турбулентных пульсаций скоростей частиц в двух точках, разделенных расстоянием $\mathbf{r}$; $\Sigma_{ij}(\mathbf{r})$ и $\Omega_{ij}(\mathbf{r})$ — эйлеровы двухточечные корреляции пульсаций скоростей деформации и вращения; g_σ и g_ω — коэффициенты, характеризующие вовлечение частиц в турбулентное движение. Величина τ_p в (18) представляет собой эффективное время релаксации пары частиц

$$\tau_p = \frac{2\tau_{p1}\tau_{p2}}{\tau_{p1} + \tau_{p2}}.$$

Вклад турбулентного ускорения частиц, имеющих разное время релаксации, в коэффициент относительной диффузии определяется следующим образом [6]:

$$D^r_{a\,ij} = D^r_a \delta_{ij}, \quad D^r_a = u_k^2 a_0 T_a \left(\mathrm{St}_2 - \mathrm{St}_1\right)^2, \tag{19}$$

где $u_k \equiv (\nu_f \varepsilon)^{1/4}$ — колмогоровский масштаб скорости; a_0 — безразмерная амплитуда флуктуаций ускорения в изотропной турбулентности; T_a — временной масштаб затухания флуктуаций ускорения; δ_{ij} — символ Кронекера.

Тензор относительной броуновской диффузии определяется из соотношения

$$D^r_{b\,ij} = D^r_B \delta_{ij}, \quad D^r_B \equiv k_B T \left(\frac{\tau_{p1}}{m_{p1}} + \frac{\tau_{p2}}{m_{p2}} \right), \tag{20}$$

где D^r_B — коэффициент относительной броуновской диффузии; k_B — постоянная Больцмана; T — температура окружающей среды; $m_{p\alpha}$ — масса частицы группы α.

Полная структурная функция пульсаций скоростей частиц $S_{p\,ij} \equiv \left\langle w'_i w'_j \right\rangle$ аналогично тензору диффузии (18) представляется в виде суммы трех составляющих, описывающих относительное турбулентное движение двух частиц в монодисперсном приближении, относительное турбулентное ускорение двух частиц с разным временем релаксации и броуновское движение:

$$S_{p\,ij} = S^*_{p\,ij} + S_{a\,ij} + S_{b\,ij}. \tag{21}$$

В изотропной турбулентности

$$S^*_{p\,ij}(\mathbf{r}) = S^*_{p\,nn}(r)\delta_{ij} + \left[S^*_{p\,ll}(r) - S^*_{p\,nn}(r) \right] \frac{r_i r_j}{r^2}, \tag{22}$$

где $S^*_{p\,ll}$ и $S^*_{p\,nn}$ — продольная и поперечная по отношении к вектору $\mathbf{r}$ компоненты тензора $S^*_{p\,ij}$.

Вклад в полную структурную функцию ускорения частиц с разным временем релаксации в соответствии с (19) определяется выражением

$$S_{a\,ij} = S_a \delta_{ij}, \quad S_a = u_k^2 a_0 \left(\mathrm{St}_2 - \mathrm{St}_1\right)^2. \tag{23}$$

Структурная функция, связанная с броуновским движением,

$$S_{b\,ij} = \frac{k_B T \delta_{ij}}{m_{12}}, \quad m_{12} = \frac{m_{p1} m_{p2}}{m_{p1} + m_{p2}}. \tag{24}$$

Миграционная относительная скорость, обусловленная турбулентностью, определяется по формуле [5; 6]

$$W_i^{\mathrm{migr}} = -\tau_p \frac{\partial S^*_{p\,ik}}{\partial r_k}. \qquad (25)$$

С учетом сферической симметрии, имеющей место в изотропной турбулентности, и соотношений (15)—(25) уравнение для радиальной функции распределения (14) примет вид

$$\frac{\partial \Gamma_{12}}{\partial t} = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left\{ r^2 \left[D^r_{p\,ll}\frac{\partial \Gamma_{12}}{\partial r} + \tau_p \left(\frac{2(S^*_{p\,ll} - S^*_{p\,nn})}{r} + \frac{\partial S^*_{p\,ll}}{\partial r} \right)\Gamma_{12} \right] \right\}, \qquad (26)$$

$$D^r_{p\,ll} = \tau_p \left(S^*_{p\,ll} + g_\sigma \Sigma_{ll} \right) + D^r_a + D^r_B. \qquad (27)$$

Для малоинерционных частиц в окрестности точки $r = 0$ продольная и поперечная структурные функции могут быть представлены в виде [5; 7]

$$S^*_{p\,ll} = \frac{\varepsilon r^2}{\nu_f}\left(\frac{1}{15} + \alpha_l \mathrm{St} \right), \quad S^*_{p\,nn} = \frac{\varepsilon r^2}{\nu_f}\left(\frac{2}{15} + \alpha_n \mathrm{St} \right), \qquad (28)$$

где число Стокса $\mathrm{St} \equiv \tau_p / \tau_k$ определяется по эффективному времени релаксации пары частиц τ_p.

Входящие в коэффициент относительной диффузии (27) продольная компонента корреляций пульсаций скоростей деформации Σ_{ll} и коэффициент вовлечения g_σ в окрестности $r = 0$ представляются следующим образом:

$$\Sigma_{ll} = \frac{\varepsilon r^2}{15\nu_f}, \quad g_\sigma = \frac{A_\sigma^2 \left(A_\sigma z^2 + 2\mathrm{St} - z^2 \mathrm{St} \right)}{\mathrm{St}\left(A_\sigma^2 z^2 + 2A_\sigma \mathrm{St} + 2\mathrm{St}^2 \right)}, \qquad (29)$$

где $z \equiv \tau_T / T_L$ — отношение тейлорова дифференциального τ_T и лагранжева интегрального T_L временных масштабов турбулентных пульсаций скорости сплошной среды. Постоянная A_σ в соответствии с результатами прямого численного моделирования [8] равна 2,3.

Безразмерная амплитуда флуктуаций ускорения и временные тейлоров и лагранжев масштабы турбулентности определяются соотношениями [9]

$$a_0 = \frac{a_{01} + a_{0\infty}\,\mathrm{Re}_\lambda}{a_{02} + \mathrm{Re}_\lambda},\ \ a_{01} = 11,\ \ a_{02} = 205,\ \ a_{0\infty} = 7,$$

$$\tau_T = \left(\frac{2\,\mathrm{Re}_\lambda}{15^{1/2} a_0}\right)^{1/2} \tau_k,\ \ T_L = \frac{2\left(\mathrm{Re}_\lambda + C_1\right)\tau_k}{15^{1/2} C_{0\infty}},\ \ C_{0\infty} = 7,\ \ C_1 = 32,$$

где $\mathrm{Re}_\lambda \equiv \left(15u'^4 / \varepsilon\nu_f\right)^{1/2}$ — число Рейнольдса, построенное по тэйлорову пространственному микромасштабу; u' — среднеквадратичная интенсивность пульсаций скорости сплошной среды.

Временной масштаб затухания флуктуаций ускорения в (19) $T_a = C_a \tau_k$, где для согласования с данными прямого численного моделирования [6] нужно принять $C_a = 3$.

Далее будем рассматривать решение уравнения (26) в квазистационарном приближении, пренебрегая производной от Γ_{12} по времени. Тогда первый интеграл уравнения (26) с учетом (27)—(29) в переменных, обезразмеренных с помощью колмогоровских микромасштабов турбулентности, имеет вид

$$\left[\mathrm{St}\left(\frac{g_\sigma + 1}{15} + \alpha_l \mathrm{St}\right)\bar{r}^2 + \bar{D}_a^r + \bar{D}_B^r\right]\frac{d\Gamma_{12}}{d\bar{r}} + 2\mathrm{St}^2\left(2\alpha_l - \alpha_n\right)\bar{r}\Gamma_{12} = \frac{C}{\bar{r}^2}, \quad (30)$$

$$\bar{r} = \frac{r}{\eta},\ \ \bar{D}_a^r = a_0 C_a \left(\mathrm{St}_2 - \mathrm{St}_1\right)^2,\ \ \bar{D}_B^r = \frac{D_B^r}{\eta u_k},$$

где C — постоянная интегрирования.

При отсутствии коагуляции частиц $C = 0$ и уравнение (30) выражает баланс диффузионной и миграционной сил в направлении, соединяющем центры двух частиц. Диффузионная сила стремится уменьшить неравномерность в распределении частиц, а миграционная сила вызывает притяжение частиц друг к другу вследствие их взаимодействия с турбулентными вихрями. В результате интегрирования (30) получаем

$$\Gamma_{12}(\bar{r}) = C_\Gamma \left(\frac{\bar{r}^2 + \bar{r}_c^2}{1 + \bar{r}_c^2}\right)^{\chi/2}, \quad (31)$$

$$\chi = \frac{30\,\mathrm{St}\left(\alpha_n - 2\alpha_l\right)}{g_\sigma + 1 + 15\alpha_l\,\mathrm{St}}, \quad \bar{r}_c = \left[\frac{15\left(\bar{D}_a^r + \bar{D}_B^r\right)}{\left(g_\sigma + 1 + 15\alpha_l\,\mathrm{St}\right)\mathrm{St}}\right]^{1/2}. \qquad (32)$$

При пренебрежении броуновским движением и турбулентным ускорением частиц, когда $\bar{r}_c = 0$, (31) предсказывает сингулярность (неограниченный рост) Γ_{12} при $\bar{R} \to 0$. В этом случае при малых St из (31) и (32) следует $\Gamma_{12} \propto \bar{R}^{-\mathrm{St}^2}$ [5—7; 10]. Сингулярность при $\bar{R} \to 0$ может быть интерпретирована как кластеризация частиц, обусловленная их миграционным дрейфом в результате взаимодействия с мелкомасштабной турбулентностью. Согласно (25) этот дрейф вызван градиентом инкремента пульсаций скорости в направлении между частицами и приводит к их сближению. Броуновское движение и турбулентное ускорение частиц с разными временами релаксации способствуют размытию сингулярности в распределении частиц.

Коэффициенты α_l и α_n в структурных функциях (28), а следовательно, и χ в (32), являются функциями St и Re_λ. Однако влияние Re_λ не очень значительно, и полученные в [7] результаты при $\mathrm{St} < 0{,}6$ и $\mathrm{Re}_\lambda > 30$ могут быть аппроксимированы зависимостями

$$\alpha_l = 0{,}16 - 0{,}18\,\mathrm{St} + 0{,}3\,\mathrm{St}^2, \qquad (33)$$

$$\chi = -6\,\mathrm{St}^2 + 10{,}4\,\mathrm{St}^3 - 7\,\mathrm{St}^4. \qquad (34)$$

На рис. 1 показано сравнение показателя степени χ, предсказываемого зависимостью (34), с данными прямого численного моделирования (DNS) для монодисперсной системы частиц в изотропной турбулентности [6]. Как видно, имеет место хорошее согласие с результатами DNS.

Коэффициент C_Γ, являющийся постоянной интегрирования, не может быть найден из решения в окрестности точки $r = 0$ (31), не учитывающего граничные условия при $r \to \infty$. Этот коэффициент может быть определен в результате сопряжения (31) с решением задачи в интервале $0 < r < \infty$. В результате такого сопряжения получено соотношение

$$C_\Gamma = 1 + 12\,\mathrm{St}^2, \qquad (35)$$

справедливое при $\mathrm{St} < 0{,}6$.

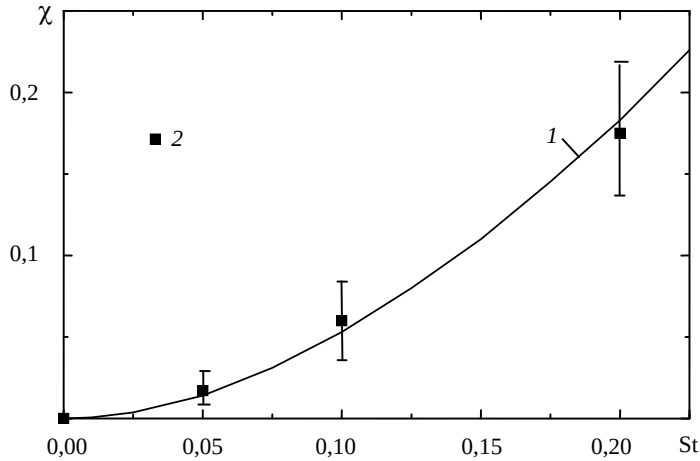


Рис. 1. Зависимость показателя степени χ от числа Стокса:
1 — формула (34), *2* — DNS [6]

Подстановка (21), (23), (24), (28) и (31) в (5) дает турбулентно-броуновское ядро столкновений

$$\beta_{TB}^{\mathrm{col}} = \left(\frac{8\pi\varepsilon}{15\nu_f}\right)^{1/2} R^3 \left[1+15\alpha_l\,\mathrm{St}+\frac{15}{\overline{R}^2}\left(a_0\left(\mathrm{St}_2-\mathrm{St}_1\right)^2+\frac{k_B T}{m_{12}u_k^2}\right)\right]^{1/2} C_\Gamma \left(\frac{\overline{R}^2+\overline{r}_c^2}{1+\overline{r}_c^2}\right)^{\chi/2}. \quad (36)$$

Для монодисперсной системы одинаковых частиц ($\mathrm{St}_1 = \mathrm{St}_2 = \mathrm{St}$) при пренебрежении броуновским движением из (36) следует

$$\beta_T^{\mathrm{col}} = \left(\frac{8\pi\varepsilon}{15\nu_f}\right)^{1/2} R^3 \left(1+15\alpha_l\,\mathrm{St}\right)^{1/2} C_\Gamma \overline{R}^{\chi}. \quad (37)$$

Для безынерционных частиц ($\mathrm{St} = \chi = 0$) из (37) получается турбулентное ядро столкновений Сэфмена — Тэрнера [11]

$$\beta_{T0}^{\mathrm{col}} = \left(\frac{8\pi\varepsilon}{15\nu_f}\right)^{1/2} R^3. \quad (38)$$

На рис. 2 показано сравнение формулы (37) с учетом (33)—(35) для турбулентного ядра столкновений малоинерционных частиц с результатами прямого численного моделирования [12]. Видно, что (37) правильно описывает данные DNS, предсказывая рост ядра столкновений с увеличением числа Стокса и уменьшением отношения диаметра частиц к пространственному микромасштабу. При уменьшении St ядро столкновений стремится к (38).

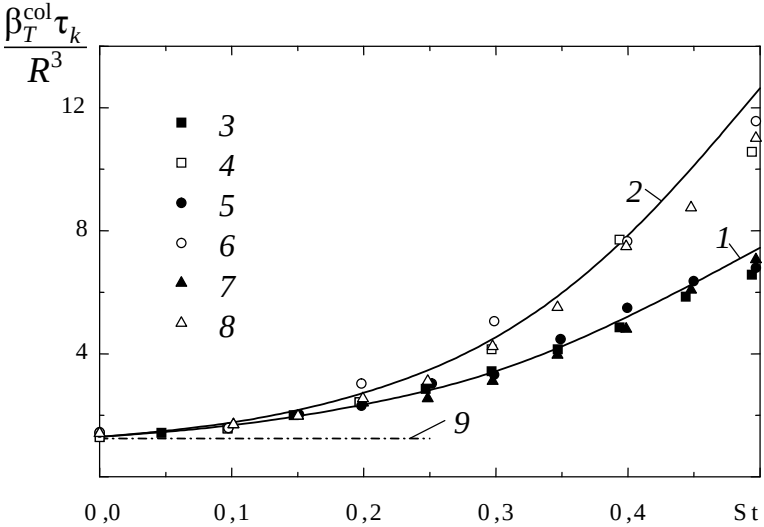


Рис. 2. Зависимость турбулентного ядра столкновений от числа Стокса:
1, 2 — формула (37); *3—8* — *DNS* [11]; *1, 3, 4, 5* — $\overline{R}$ = *1*; *2, 6, 7, 8* — $\overline{R}$ = 0,5;
9 — формула (38)

При наличии коагуляции для определения постоянной интегрирования C в (30) привлечем соотношение (8) при ϕ = 1. Тогда в результате интегрирования (30) получаем

$$\Gamma(\overline{R}) = C_\Gamma \left(\frac{\overline{R}^2+\overline{r}_c^2}{1+\overline{r}_c^2}\right)^{\chi/2} \left[1+\frac{15\overline{R}^2\left(\overline{R}^2+\overline{r}_c^2\right)^{\chi/2}}{\left(g_\sigma+1+15\alpha_l\,\mathrm{St}\right)\mathrm{St}}\left(\frac{\overline{S}_{p\,ll}(\overline{R})}{2\pi}\right)^{1/2}\int_{\overline{R}}^{\infty}\frac{d\overline{r}}{\overline{r}^2\left(\overline{r}^2+\overline{r}_c^2\right)^{\chi/2+1}}\right]^{-1}, \quad (39)$$

$$\overline{S}_{p\,ll}(\overline{R}) = \left(\frac{1}{15}+\alpha_l\mathrm{St}\right)\overline{R}^2 + a_0\left(\mathrm{St}_2-\mathrm{St}_1\right)^2 + \frac{k_B T}{m_{12}u_k^2}, \quad (40)$$

где χ и $\overline{r}_c$ определяются соотношениями (32) с учетом (33) и (34). Примем, что постоянная интегрирования C_Γ по-прежнему задается соотношением (35). Интеграл, входящий в (39), аппроксимируем при помощи выражения

$$\int_{\overline{R}}^{\infty} \frac{d\overline{r}}{\overline{r}^2\left(\overline{r}^2+\overline{r}_c^2\right)^{\chi/2+1}} = \frac{f(\lambda)}{\overline{R}\left(\overline{R}^2+\overline{r}_c^2\right)^{\chi/2}\overline{r}_c^2},$$

$$f(\lambda) = 1-\frac{\pi\lambda}{2}+\lambda\tan^{-1}\lambda,\ \ \lambda = \frac{\overline{R}}{\overline{r}_c}\left(1+\frac{\chi}{3}\right)^{1/2}. \qquad (41)$$

Подстановка (39) и (40) с учетом (41) в (9) дает турбулентно-броуновское ядро коагуляции в предположении, что коэффициент захвата равен единице:

$$\beta_{TB}^{\text{coag}} = \left(\frac{8\pi\varepsilon}{15\nu_f}\right)^{1/2} R^3\left[1+15\alpha_l\,\text{St}+\frac{15}{\overline{R}^2}\left(a_0\left(\text{St}_2-\text{St}_1\right)^2+\frac{k_BT}{m_{12}u_k^2}\right)\right]^{1/2}\times$$

$$\times C_\Gamma\left(\frac{\overline{R}^2+\overline{r}_c^2}{1+\overline{r}_c^2}\right)^{\chi/2}\left[1+\frac{15\overline{R}\,f(\lambda)}{\overline{r}_c^2\left(g_\sigma+1+15\alpha_l\,\text{St}\right)\text{St}}\left(\frac{\overline{S}_{p\,ll}(\overline{R})}{2\pi}\right)^{1/2}\right]^{-1}. \qquad (42)$$

В безынерционном пределе ($\text{St}=0$) из (42) следует [2]:

$$\beta_{TB}^{\text{coag}} = \left(\frac{8\pi\varepsilon}{\nu_f}\right)^{1/2} R^2\left(\frac{R^2}{15}+\frac{k_BT\tau_k^2}{m_{12}}\right)^{1/2}\left[1+\frac{R\,f(\lambda_0)}{(2\pi)^{1/2}D_B^r}\left(\frac{R^2}{15\tau_k^2}+\frac{k_BT}{m_{12}}\right)^{1/2}\right]^{-1}, \qquad (43)$$

$$f(\lambda_0) = 1-\frac{\pi\lambda_0}{2}+\lambda_0\tan^{-1}\lambda_0,\ \ \lambda_0 = R\left(\frac{A_\sigma}{15D_B^r\tau_k}\right)^{1/2}.$$

Отметим что функция $f(\lambda_0)$ для характеристики соотношения между турбулентным и броуновским механизмами коагуляции ранее использовалась в [13; 14]. Когда вкладом броуновской диффузии можно пренебречь ($\lambda_0\to\infty$), из (43) следует:

$$\beta_{T0}^{\text{coag}} = \left(\frac{8\pi\varepsilon}{15\nu_f}\right)^{1/2} R^3\left[1+\frac{1}{A_\sigma}\left(\frac{5}{6\pi}\right)^{1/2}\right]^{-1}. \qquad (44)$$

Согласно (38) и (44) $\beta_{T0}^{\text{coag}} / \beta_{T0}^{\text{col}} = 0{,}817$ при $A_\sigma = 2{,}3$, что близко к значению 0,83, полученному путем прямого численного моделирования [15]. Авторы [16] в результате прямых численных расчетов также получили, что отношение турбулентного ядра коагуляции безынерционных частиц к ядру столкновений Сэфмена — Тэрнера (38) равно 0,83. В экспериментах [17] получено, что отношение турбулентного ядра коагуляции малоинерционных частиц к ядру столкновений (38) приблизительно равно 0,7. Следовательно, различие между турбулентными ядрами столкновений и коагуляции для малоинерционных частиц не очень значительно.

При пренебрежении влиянием турбулентности ($\lambda_0 \to 0$) из (43) следует:

$$\beta_B^{\text{coag}} = \frac{\beta_{B,\text{Kn}\to\infty}^{\text{coag}} \beta_{B,\text{Kn}\to 0}^{\text{coag}}}{\beta_{B,\text{Kn}\to\infty}^{\text{coag}} + \beta_{B,\text{Kn}\to 0}^{\text{coag}}}, \tag{45}$$

$$\beta_{B,\text{Kn}\to\infty}^{\text{coag}} = \left(\frac{8\pi k_B T}{m_{12}} \right)^{1/2} R^2, \tag{46}$$

$$\beta_{B,\text{Kn}\to 0}^{\text{coag}} = 4\pi R D_B^r. \tag{47}$$

Зависимость (45) представляет собой известную аппроксимацию (например, [18]) для ядра броуновской коагуляции во всем диапазоне изменения размеров частиц — от свободномолекулярного режима (при больших числах Кнудсена), характерного для очень мелких частиц, до континуального режима (при малых числах Кнудсена), реализуемого для относительно крупных аэрозолей.

В литературе хорошо известен целый ряд близких к (45) теоретических зависимостей для описания коагуляции в переходном режиме [19—21], полученных в результате сшивки или путем интерполяции формул для свободномолекулярного (46) и континуального (47) режимов. Так, в [21] предложена интерполяционная зависимость

$$\beta_B^{\text{coag}} = \frac{\beta_{B,\text{Kn}\to\infty}^{\text{coag}} \beta_{B,\text{Kn}\to 0}^{\text{coag}} \left(2\beta_{B,\text{Kn}\to\infty}^{\text{coag}} + \beta_{B,\text{Kn}\to 0}^{\text{coag}} \right)}{(\beta_{B,\text{Kn}\to 0}^{\text{coag}})^2 + 2\beta_{B,\text{Kn}\to\infty}^{\text{coag}} \left(\beta_{B,\text{Kn}\to\infty}^{\text{coag}} + \beta_{B,\text{Kn}\to 0}^{\text{coag}} \right)},$$

объединяющая формулы (46) и (47) и отличающаяся от зависимости (45) во всем диапазоне чисел Кнудсена не более чем на несколько процентов.

Далее рассмотрим турбулентно-броуновскую коагуляцию монодисперсной системы стоксовых частиц, время релаксации которых определяется по формуле

$$\tau_p = \frac{\rho_p d_p^2}{18\rho_f \nu_f}, \tag{48}$$

где d_p — диаметр частиц; ρ_p и ρ_f — плотности частиц и сплошной среды. Согласно (48) для одинаковых частиц ($\bar{R} = \bar{d}_p$)

$$\mathrm{St} = \frac{\rho_p \bar{R}^2}{18\rho_f}.$$

Безразмерный коэффициент относительной броуновской диффузии двух одинаковых частиц определяется из соотношения

$$\bar{D}_B^r = \frac{B}{\bar{R}}, \quad B = \frac{2k_B T}{3\pi\rho\nu_f u_k \eta^2} = \frac{2k_B T}{3\pi\rho_f}\left(\frac{\varepsilon}{\nu_f^{11}}\right)^{1/4}.$$

На рис. 3 показаны зависимости ядер столкновений (36) и коагуляции (42), отнесенных к турбулентному ядру столкновений для безынерционных частиц (38), от безразмерного диаметра частиц $\bar{R}$ при разных значениях параметра B, характеризующего эффект броуновского движения. Отношение плотностей материала частиц и сплошной среды ρ_p / ρ_f принималось равным 900, что ограничивает диапазон изменения числа Стокса $\mathrm{St} \le 0{,}5$ при $\bar{R} \le 0{,}1$. Кривые *1* и *5* (для $B = 0$) соответствуют пренебрежению вкладом броуновской диффузии частиц в ядра столкновений и коагуляции. Очевидно, что роль броуновского движения возрастает с уменьшением диаметра частиц $\bar{R}$ и увеличением параметра B. Разница между турбулентными ядрами столкновений и коагуляции оказывается не очень значительной не только для безынерционных, но и для инерционных частиц. В случае, когда роль броуновского движения оказывается существенной, разница между β^{col} и β^{coag} может быть значительной. Особенно сильное различие между ядрами столкновений и коагуляции, как следует из (45)—(47) с учетом соотношения $\beta_B^{\mathrm{col}} = \beta_{B,\mathrm{Kn}\to\infty}^{\mathrm{coag}}$, характерно для броуновского континуального режима.

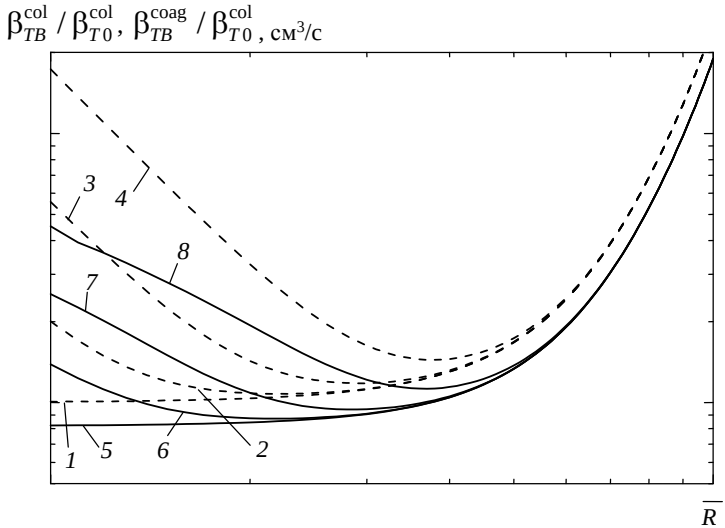


Рис. 3. Влияние броуновского движения на ядра столкновений (1—4) и коагуляции (5—8): 1, 5 — $B = 0$; 2, 6 — $B = 10^{-9}$; 3, 7 — $B = 10^{-8}$; 4, 8 — $B = 10^{-7}$

С целью некоторого упрощения формулы для турбулентно-броуновского ядра коагуляции заменим знаменатель в (42) соответствующим выражением в (43). В результате получим

$$\beta_{TB}^{coag} = \left(\frac{8\pi\varepsilon}{15\nu}\right)^{1/2} R^3 \left[1 + 15\alpha_l \,\mathrm{St} + \frac{15}{\overline{R}^2}\left(a_0\left(\mathrm{St}_2 - \mathrm{St}_1\right)^2 + \frac{k_B T}{m_{12} u_k^2}\right)\right]^{1/2} \times$$

$$\times C_\Gamma \left(\frac{\overline{R}^2 + \overline{r}_c^2}{1 + \overline{r}_c^2}\right)^{\chi/2} \left[1 + \frac{R\, f(\lambda_0)}{(2\pi)^{1/2} D_B^r}\left(\frac{R^2}{15\tau_k^2} + \frac{k_B T}{m_{12}}\right)^{1/2}\right]^{-1}. \qquad (49)$$

Разница между формулами (42) и (49) во всем рассматриваемом диапазоне изменения числа Стокса ($\mathrm{St} < 0{,}6$) практически неощутима. Для упрощения при вычислении $\overline{r}_c$ в (32) также будем определять коэффициент вовлечения g_σ в (29) его предельным значением при $\mathrm{Re}_\lambda \to \infty$

$$g_\sigma = \frac{A_\sigma^2}{\mathrm{St}\left(A_\sigma + \mathrm{St}\right)}. \qquad (50)$$

Определение g_σ согласно (50) не вносит заметной погрешности в ядро коагуляции при $\mathrm{Re}_\lambda > 30$.

На рис. 4 и 5 представлены результаты сравнения формулы (49) с данными прямого численного моделирования [22] для коагуляции монодисперсных частиц в приосевой зоне плоского канала при $\mathrm{Re}_\lambda = 29,7$. Видно, что как отношение плотностей частиц и сплошной среды ρ_p / ρ_f, так и диаметр частиц d_p оказывают воздействие на ядро коагуляции, поскольку с изменением ρ_p / ρ_f и d_p согласно (48) изменяется время релаксации частиц τ_p. Когда отношение плотностей и диаметр частиц уменьшаются, время релаксации и ядро коагуляции также уменьшаются. Однако для относительно малых значений отношения плотностей β_{TB}^{coag} не зависит от ρ_p / ρ_f, поскольку как турбулентное ядро коагуляции безынерционных частиц (44), так и броуновское ядро коагуляции для континуального режима (47) не зависят от плотности частиц ρ_p. Из рис. 4 и 5 видно, что зависимость (49) хорошо согласуется с данными DNS для малоинерционных частиц.

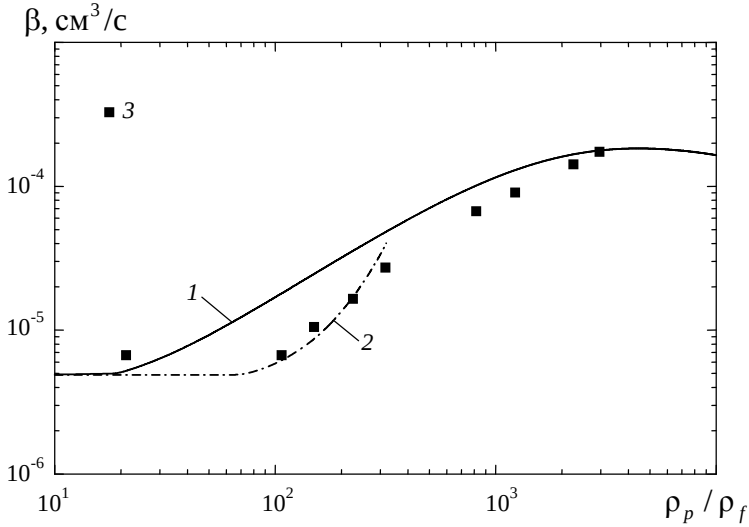


Рис. 4. Влияние отношения плотностей частиц и сплошной среды на ядро коагуляции в приосевой зоне канала (d_p = 9,96 мкм): *1* — формула (49), *2* — формула (51), *3* — DNS [22]

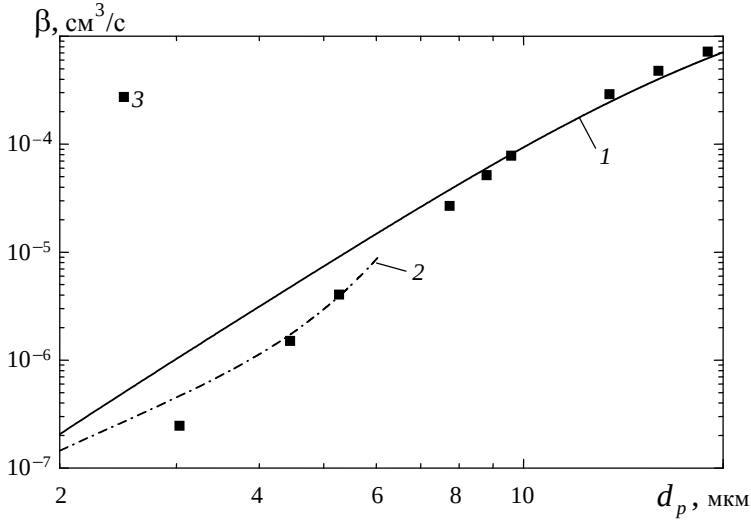


Рис. 5. Зависимость ядра коагуляции в приосевой зоне канала от диаметра частиц ($\rho_p / \rho_f = 713$): *1* — формула (49), *2* — формула (51), *3* — DNS [22]

Для аэрозольных частиц, размер которых не превышает 20 мкм, число Стокса, как правило, не превышает 0,6. Поэтому можно было бы ограничиться представлением формулы (49) для турбулентно-броуновского ядра коагуляции. Однако, имея в виду возможные приложения кода ПРОФИТ для более крупных аэрозолей, приведем зависимости для ядер турбулентных столкновения и коагуляции, справедливые не только для малоинерционных частиц. В [23] получена аналитическая зависимость для ядра столкновений частиц β_T^{col}, которая, хотя и не учитывает эффект аккумулирования, удовлетворительно согласуется с результатами прямых численных расчетов для изотропной турбулентности в широком диапазоне изменения числа Стокса. Эта зависимость основана на допущении, что совместная функция плотности вероятности скоростей несущего потока и частиц является коррелированным гауссовым распределением [24] и для столкновений частиц разного сорта имеет вид

$$\beta^{\mathrm{col}} = (8\pi)^{1/2} R^2 u' \left[f_{u1} + f_{u2} - 2 f_{u1} f_{u2} \left(1 - \frac{\overline{R}^2}{60^{1/2}\,\mathrm{Re}_\lambda} \right) \right]^{1/2}, \qquad (51)$$

$$f_{u\alpha} = \frac{2\Omega_\alpha + z^2}{2\Omega_\alpha + 2\Omega_\alpha^2 + z^2}, \quad \Omega_\alpha = \frac{\tau_{p\alpha}}{T_L}.$$

Здесь $f_{u\alpha}$ характеризует степень вовлечения частиц в турбулентное движение несущего потока. В безынерционном пределе ($\Omega_\alpha \to 0$, $f_{u\alpha} \to 1$) из (51) следует ядро столкновений Сэфмена—Тэрнера (38), а для высокоинерционных частиц ($\Omega_\alpha \gg 1$, $f_{u\alpha} \approx \Omega_\alpha^{-1}$) зависимость (51) переходит в известное ядро столкновений Абрахамсона [25]. Как показано в [23] путем сравнения с данными DNS [26], формула (49) удовлетворительно описывает турбулентное ядро столкновений разных частиц при всех значениях чисел St_1 и St_2 за исключением значений чисел Стокса, близких к единице.

Комбинация выражений (49) и (51) дает формулу

$$\beta_{TB}^{\mathrm{coag}} = (8\pi)^{1/2} R^2 \left\{ u'^2 \left[f_{u1} + f_{u2} - 2 f_{u1} f_{u2} \left(1 - \frac{\overline{R}^2}{60^{1/2}\,\mathrm{Re}_\lambda} \right) \right] + \frac{k_B T}{m_{12}} \right\}^{1/2} \times$$

$$\times \left[1 + \frac{R\, f(\lambda_0)}{(2\pi)^{1/2} D_B^r} \left(\frac{R^2}{15\tau_k^2} + \frac{k_B T}{m_{12}} \right)^{1/2} \right]^{-1}. \qquad (52)$$

Из рис. 4 и 5 следует, что (52) хорошо описывает ядро коагуляции для относительно инерционных частиц, а для малоинерционных частиц приводит к довольно существенному завышению β^{coag}. Это обстоятельство, как отмечается в [23], связано с погрешностью (52) в описании относительной радиальной скорости частиц, время релаксации которых близко к колмороровскому временному масштабу турбулентности. Итак, для определения турбулентно-броуновского ядра коагуляции малоинерционных частиц (St_1, $\mathrm{St}_2 < 0{,}6$) следует использовать (49). Для расчета $\beta_{TB}^{\mathrm{coag}}$ в более широком диапазоне изменения чисел Стокса можно использовать (52). Нужно иметь в виду, что хотя последняя зависимость дает удовлетворительные результаты во всем диапазоне изменения чисел Стокса (в том числе и при малых St), применительно к малоинерционным частицам они оказываются заметно менее точными по сравнению с (49).

4. Вклад градиентного и гравитационного механизмов в ядро коагуляции

В пристеночной области потока существенную роль в столкновениях частиц может играть градиентный механизм [27]. Он обусловлен различными осредненными скоростями, приобретаемыми частицами в градиентном несущем потоке, и может иметь место как в монодисперсных, так и в полидисперсных системах частиц.

Рассмотрим движение малоинерционных частиц, которые полностью вовлекаются в осредненное движение несущего потока. Профиль осредненной скорости сплошной среды в окрестности сталкивающихся частиц зададим в виде $\mathbf{U} = (sz, 0, 0)$, где s — градиент скорости. Тогда радиальная компонента осредненной относительной скорости двух частиц при их контакте ($r = R$)

$$W_r = sR\cos\psi\sin\varphi\cos\varphi. \tag{53}$$

В результате интегрирования в (12) с учетом (53) получаем [28]

$$\langle | w_r | \rangle = \left(\frac{2}{\pi} \langle w_r'^2 \rangle \right)^{1/2} F(S), \tag{54}$$

$$F(S) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \left[\frac{3^{2n}\pi^n \Gamma(2n+1)\Gamma(n+1/2)S^{2n}}{2^{4n+1}\Gamma^2(n+1)\Gamma(2n+3/2)} + \right.$$

$$\left. + \frac{3^{2n+2}\pi^{n+1}\Gamma(2n+3)\Gamma(n+3/2)S^{2n+2}}{2^{4n+4}(2n+1)\Gamma(n+1)\Gamma(n+2)\Gamma(2n+7/2)} \right], \quad S = \left(\frac{2}{\pi \langle w_r'^2 \rangle} \right)^{1/2} \frac{sR}{3}, \tag{55}$$

где $\Gamma(x)$ — гамма-функция, а параметр S характеризует соотношение между градиентным и турбулентно-броуновским механизмами столкновений.

Поскольку градиентный механизм не оказывает влияния на эффект аккумулирования частиц, (54) позволяет представить кинематическое ядро столкновений при совместном действии турбулентного, броуновского и градиентного механизмов в виде

$$\beta_{TBS}^{\text{col}} = \beta_{TB}^{\text{col}} F(S), \tag{56}$$

где турбулентно-броуновское ядро столкновений определяется формулой (36). При $S \to 0$ (56) переходит в (36), а при $S \to \infty$ из (56) с учетом (54) и (55) следует ядро Смолуховского для градиентного механизма столкновений

$$\beta_S^{\text{col}} = \frac{4sR^3}{3}. \tag{57}$$

В [28] показано, что формула (56) с учетом (55) подтверждается данными прямого численного моделирования [29] для безынерционных частиц при отсутствии броуновского движения, т. е. когда $\beta_{TB}^{\mathrm{col}} = \beta_{T0}^{\mathrm{col}}$, где $\beta_{T0}^{\mathrm{col}}$ определяется турбулентным ядром столкновений Сэфмена — Тэрнера (38). Функция $F(S)$, описываемая формулой (55) с хорошей точностью, может быть аппроксимирована зависимостью

$$F(S) = \left(1 + S^2\right)^{1/2}, \tag{58}$$

позволяющей с учетом (57) представить (56) в виде квадратичной интерполяции турбулентно-броуновского и градиентного ядер столкновений

$$\beta_{TBS}^{\mathrm{col}} = \left[\left(\beta_{TB}^{\mathrm{col}}\right)^2 + \left(\beta_{S}^{\mathrm{col}}\right)^2\right]^{1/2}. \tag{59}$$

Наибольшее практическое значение из механизмов столкновений, связанных с наличием осредненной относительной скорости между частицами, имеет гравитационный механизм, обусловленный различными скоростями оседания (седиментации) частиц. Очевидно, что осредненная относительная скорость, обусловленная силой тяжести, может иметь место только для частиц разного сорта, т. е. с разными временами релаксации $\tau_{p\alpha}$. Однако следует отметить, что частицы могут иметь разные осредненные скорости не только из-за силы тяжести, но и вследствие других сил, например, под действием центробежной силы при обтекании искривленной поверхности. Для определенности далее будем рассматривать возникновение осредненной относительной скорости между двумя частицами как результат действия силы тяжести, поскольку обобщение на случай наличия других сил является очевидным.

Радиальная компонента осредненной относительной скорости между двумя частицами, обусловленная силой тяжести, равна

$$W_r = W_G \cos\varphi, \tag{60}$$

где $W_G = \left|\tau_{p2} - \tau_{p1}\right| g$ — разность скоростей седиментации двух тяжелых частиц.

В результате интегрирования в (12) с учетом (60) получаем [25; 29—31]

$$\left\langle |\, w_r \,| \right\rangle = \left(\frac{2}{\pi}\left\langle w_r'^2 \right\rangle\right)^{1/2} F(G), \tag{61}$$

$$F(G)=\frac{1}{2}\exp\left(-\frac{4G^2}{\pi}\right)+\left(G+\frac{\pi}{8G}\right)\mathrm{erf}\left(\frac{2G}{\pi^{1/2}}\right),\quad G=\frac{\pi^{1/2}W_g}{\left(8\left\langle w_r'^2\right\rangle\right)^{1/2}},\qquad (62)$$

где параметр G характеризует соотношение между гравитационным и турбулентно-броуновским механизмами столкновений.

Поскольку гравитационный механизм также не оказывает влияния на эффект аккумулирования частиц, (61) позволяет представить кинематическое ядро столкновений при совместном действии турбулентной, броуновской и гравитационного механизмов в виде, аналогичном (56),

$$\beta_{TBG}^{\mathrm{col}}=\beta_{TB}^{\mathrm{col}}F(G).\qquad (63)$$

При $G\to 0$ (63) переходит в (36), а при $G\to\infty$ из (63) с учетом (61) и (62) следует известное гравитационное ядро столкновений

$$\beta_{G}^{\mathrm{col}}=\pi R^2W_g.\qquad (64)$$

Зависимость (62) ,как и (58), хорошо аппроксимируется формулой

$$F(G)=\left(1+G^2\right)^{1/2}.\qquad (65)$$

С учетом (65) выражение (63) аналогично (59) можно представить в виде квадратичной аппроксимации из турбулентно-броуновского и гравитационного ядер столкновений:

$$\beta_{TBG}^{\mathrm{col}}=\left[\left(\beta_{TB}^{\mathrm{col}}\right)^2+\left(\beta_{G}^{\mathrm{col}}\right)^2\right]^{1/2}.\qquad (66)$$

Объединяя (59) и (66), получим выражение для кинематического ядра столкновений, учитывающего совместное действие турбулентного, броуновского, градиентного и гравитационного механизмов,

$$\beta_{TBSG}^{\mathrm{col}}=\left[\left(\beta_{TB}^{\mathrm{col}}\right)^2+\left(\beta_{S}^{\mathrm{col}}\right)^2+\left(\beta_{G}^{\mathrm{col}}\right)^2\right]^{1/2}.\qquad (67)$$

По аналогии с (67) ядро коагуляции, описывающее совместный эффект всех рассматриваемых механизмов, может быть представлено в виде

$$\beta_{TBSG}^{\mathrm{coag}}=\left[\left(\beta_{TB}^{\mathrm{coag}}\right)^2+\left(\beta_{S}^{\mathrm{coag}}\right)^2+\left(\beta_{G}^{\mathrm{coag}}\right)^2\right]^{1/2},$$

где соотношение между ядрами коагуляции и столкновений для градиентного и гравитационного механизмов выражается при помощи соответствующих коэффициентов захвата

$$\beta_S^{\text{coag}} = \phi_S \beta_S^{\text{col}}, \quad \beta_G^{\text{coag}} = \phi_G \beta_G^{\text{col}}.$$

Информация о коэффициентах захвата (эффективности коагуляции) для градиентного и гравитационного механизмов столкновений содержится в [32—35].

5. Заключение

Построены корреляционные зависимости для ядер столкновений и коагуляции аэрозольных частиц под действием броуновского, турбулентного, градиентного и гравитационного механизмов с учетом эффекта аккумулирования. Полученные зависимости учитывают взаимное влияние различных механизмов коагуляции. Представленные корреляции для ядра коагуляции имплантированы в код ПРОФИТ.

Литература

1. *Алипченков В. М., Дикарев Ф. А., Зайчик Л. И.* и др. Развитие моделей переноса и трансформации аэрозолей в коде ПРОФИТ. 1. Осаждение аэрозольных частиц. — Опубликовано в настоящем сборнике.

2. *Зайчик Л. И., Соловьев А. Л.* Ядра столкновений и коагуляции при броуновском и турбулентном движении аэрозольных частиц // Теплофизика высоких температур. — 2002. — Т. 40, № 3. — С. 460—465.

3. *Reade W. C., Collins L. R.* Effect of preferential concentration on turbulent collision rates // Phys. Fluids. — 2000. — Vol. 12, № 10. — P. 2530—2540.

4. *Wang L.-P., Wexler A. S., Zhou Y.* Statistical mechanical description and modelling of turbulent collision of inertial particles // J. Fluid Mech. — 2000. — Vol. 415. — P. 117—153.

5. *Zaichik L. I., Alipchenkov V. M.* Pair dispersion and preferential concentration of particles in isotropic turbulence // Phys. Fluids. — 2003. — Vol. 15, № 6. — P. 1776—1787.

6. *Chun J., Koch D. L., Rani S. L.* **et al**. Clustering of aerosol particles in isotropic turbulence // J. Fluid Mech. — 2005. — Vol. 536. — P. 219—251.

7. *Зайчик Л. И., Алипченков В. М.* Кластеризация малоинерционных частиц в изотропной турбулентности // Теплофизика высоких температур. — 2007. — Т. 45, № 1. — С. 66—76.

8. *Girimaji S. S., Pope S. B.* A diffusion model for velocity gradients in turbulence // Phys. Fluids A. — 1990. — Vol. 2, № 2. — P. 242—256.

9. *Zaichik L. I., Simonin O., Alipchenkov V. M.* Two statistical models for predicting collision rates of inertial particles in homogeneous isotropic turbulence // Phys. Fluids. — 2003. — Vol. 15, № 10. — P. 2995—3005.

10. *Balkovsky E., Falkovich G., Fouxon A.* Intermittent distribution of inertial particles in turbulent flows // Phys. Rev. Letters. — 2001. — Vol. 86, № 13. — P. 2790—2793.

11. *Saffman P. G., Turner J. S.* On the collision of drops in turbulent clouds // J. Fluid Mech. — 1956. — Vol. 1. — Pt. 1. — P. 16—30.

12. *Zhou Y., Wexler A. S., Wang L.-P.* On the collision rate of small particles in isotropic turbulence. — 2: Finite inertia case // Phys. Fluids. — 1998. — Vol. 10, № 5. — P. 1206—1216.

13. *Williams M. M. R.* A unified theory of aerosol coagulation // J. Phys. D: Appl. Phys. — 1988. — Vol. 21. — P. 875—886.

14. *Brunk B. K., Koch D. L., Lion L. W.* Hydrodynamic pair diffusion in isotropic random velocity fields with application to turbulent coagulation // Phys. Fluids. — 1997. — Vol. 9, № 9. — P. 2670—2691.

15. *Wang L.-P., Wexler A. S., Zhou Y.* On the collision rate of small particles in isotropic turbulence. — 1: Zero-inertia case // Phys. Fluids. — 1998. — Vol. 10, № 1. — P. 266—276.

16. *Brunk B. K., Koch D. L., Lion L. W.* Turbulent coagulation of colloidal particles // J. Fluid Mech. — 1998. — Vol. 364. — P. 81—113.

17. *Delichatsios M. A., Probstein R. F.* Coagulation in turbulent flow: theory and experiment // J. Colloid and Interface Sci. — 1975. — Vol. 51, № 3. —P. 394—405.

18. *Park S. H., Lee K. W., Otto E., Fissan H.* The log-normal size distribution theory of Brownian aerosol coagulation for the entire particle size range. — Pt. 1: Analytical solution using the harmonic mean coagulation kernel // J. Aerosol Sci. — 1999. — Vol. 30, № 1. — P. 3—16.

19. *Фукс Н. А.* Успехи механики аэрозолей. — М.: Изд-во АН СССР, 1961. — 160 с.

20. *Loyalka L. S.* Mechanics of aerosols in nuclear reactor safety: A review // Progress in Nuclear Energy. — 1983. — Vol. 12, № 1. — P. 1.

21. *Otto E., Fissan H., Park S. H., Lee K. W.* The log-normal size distribution theory of Brownian aerosol coagulation for the entire particle size range. — Pt. 1: Analytical solution using Dahneke's coagulation kernel // J. Aerosol Sci. — 1999. — Vol. 30, № 1. — P. 17—34.

22. *Chen M., Kontomaris K., McLaughlin J. B.* Direct numerical simulation of droplet collisions in a turbulent channel flow. 2: Collision rates // Intern. J. Multiphase Flow. — 1998. — Vol. 24. — P. 1105—1138.

23. *Zaichik L. I., Simonin O., Alipchenkov V. M.* Collision rates of bidisperse inertial particles in isotropic turbulence // Phys. Fluids. — 2006. — Vol. 18. — P. 0351101-1—035110-13.

24. *Laviéville J., Deutsch E., Simonin O.* Large eddy simulation of interactions between colliding particles and a homogeneous isotropic turbulence field // Proc. 6th Int. SymP. on Gas-Particle Flows // ASME FED. — 1995. — Vol. 228. — P. 347—357.

25. *Abrahamson J.* Collision rates of small particles in a vigorously turbulent fluid // Chem. Eng. Sci. — 1975. — Vol. 30, № 11. — P. 1371—1379.

26. *Zhou Y., Wexler A. S., Wang L.-P.* Modelling turbulent collision of bidisperse inertial particles // J. Fluid Mech. — 2001. — Vol. 433. — P. 77—104.

27. *Smoluchowski M. V.* Versuch einer mathematischen Theorie der Koagulationskinetik kolloider Losungen // Z. Phys. Chem. — 1917. — Vol. 2. — P. 129—168.

28. *Mei R., Hu K. C.* On the collision rate of small particles in turbulent flows // J. Fluid Mech. — 1999. — Vol. 391. — P. 67—89.

29. *Алипченков В. М., Зайчик Л. И.* Частота столкновений частиц в турбулентном потоке // Изв. Рос. акад. наук. Механика жидкости и газа. — 2001. — № 3. — С. 93—105.

30. *Gourdel C., Simonin O., Brunier E.* Two-Maxwellian equilibrium distribution function for the modeling of a binary mixture of particles // Proc. 6th Int. Conf. on Circulating Fluidized Beds. — Frankfurt, 1999. — P. 205—210.

31. *Dodin Z., Elperin T.* On the collision rate in turbulent flow with gravity // Phys. Fluids. — 2002. — Vol. 14, № 8. — P. 2921—2924.

32. *Klett J. D., Davis M. N.* Theoretical collision efficiencies of cloud droplets at small Reynolds numbers // J. Atmospheric Sci. — 1973. — Vol. 30. — P. 107—117.

33. *Pertmer G. A., Loyalka S. K.* Gravitational collision efficiency of post hypothetical core disruptive accident liquid metal fast breeder reactor

aerosols: spherical particles // Nuclear Technology. — 1980. — Vol. 47. — P. 70—90.

34. *Adler P. M.* Heterocoagulation in shear flow // J. Colloid Interface Sci. —— 1981. — Vol. 83. — P. 106—115.

35. *Williams M. M. R., Loyalka S. K.* Aerosol Science, Theory and Practice. — [S. l.]: Pergamon Press, 1991.

X. Неравновесная модель истечения теплоносителя через трещины в трубах для обоснования концепции «Течь перед разрушением»

В. Н. Семенов, Л. П. Стародубцева, Л. М. Соков

1. Введение

Один из подходов к обоснованию безопасности при проектировании оборудования АЭС состоит в применении концепции «Течь перед разрушением» (Leakage-Before-Break — LBB [1]). Она относится к трубопроводам и сосудам под давлением и исходит из того, что мгновенный разрыв целостной трубы невозможен: ему предшествует появление начальной трещины докритической длины, при которой трещина является устойчивой, и ее рост происходит медленно. Если при заданной нагрузке длина трещины превысит критическую, трещина теряет устойчивость и начинает быстро расти вплоть до катастрофического разрушения конструкции.

Обоснование концепции ТПР состоит в демонстрации того, что появление трещины может быть обнаружено по утечке через нее теплоносителя еще на стадии устойчивого роста, когда длина трещины не достигла критического значения.

Таким образом, обоснование безопасности в соответствии с данной концепцией подразумевает решение двух связанных задач:

- определение площади раскрытия трещины заданной длины при заданном нагружении трубопровода, а также определение критической длины трещины;
- определение расхода теплоносителя через трещину заданного сечения при заданных параметрах теплоносителя внутри трубопровода; эта величина должна сопоставляться с диагностическими возможностями обнаружения утечки теплоносителя.

Настоящая работа относится ко второй задаче. Оценка расхода теплоносителя через трещины представляет сложную задачу, поскольку в условиях работы контуров охлаждения реактора вытекание теплоносителя сопровождается его вскипанием и возникает запирание двухфазного потока. В работе представлена физическая модель двухфазного критического истечения теплоносителя через узкие каналы (трещины) и приведены результаты ее тестирования.

2. Выбор модели течения

Интерес к проблеме течения двухфазных сред стимулируется приложениями в энергетике парового цикла, в частности, анализом аварийных ситуаций, связанных с потерей теплоносителя при нарушениях герметичности контура охлаждения в ядерных энергетических установках, а также с аналогичными явлениями в обычных паросиловых установках.

В настоящее время накоплен большой экспериментальный материал, касающийся критического истечения двухфазного потока в широком диапазоне параметров. В то же время законченной теории двухфазных критических потоков не существует. Нет по существу полного понимания физических процессов, сопровождающих кризис двухфазного потока.

Большинство созданных к настоящему времени теоретических моделей критического расхода вскипающих потоков в отношении гидродинамических свойств среды может быть отнесено к двум классам: гомогенные модели (фазы равномерно распределены друг в друге и имеют одну скорость) [2—6] и модели с раздельным течением фаз [7—11]. В тех и других двухфазная среда может представляться равновесной или метастабильной. В последнем случае фазовый обмен (во всяком случае, на выходном участке канала) считается «замороженным».

Все модели перечисленных типов довольно просты и качественно правильно отражают зависимость расхода от параметров теплоносителя. Но во всем диапазоне изменения параметров ни одна не имеет явных преимуществ перед другими. Более сложные подходы в целом не дают ощутимого улучшения результатов.

В некоторых работах делается попытка учета кинетики парообразования на стенках канала [12; 13] либо в ядре потока [14; 15]. Это позволяет объяснить некоторые особенности вскипающих потоков, однако сами модели образования пузырей содержат большие неопределенности и требуют эмпирического подбора параметров. Улучшения соответствия с экспериментом в пределах экспериментальных разбросов в целом по сравнению с другими подходами не наблюдается.

Некоторые авторы предлагают для расчета критического расхода двухфазной смеси использовать эмпирические корреляции, обобщающие данные экспериментов и прямо не связанные с какими-либо моделями среды [16—18; 15]. Но выведенные формулы построены на ограниченном экспериментальном материале и охватывают сравнительно узкий интервал исходных параметров, в частности, размеров канала. Так, в упомянутых работах не рассматривались очень узкие каналы (трещины). Экстраполяция расчетных

результатов на каналы с сильно отличающимися формой и размерами не является очевидной.

При оценке критических расходов в различных моделях течение в канале, как правило, не рассчитывается. Рассматривается только критическое сечение, а параметры потока в нем связываются с входными с использованием предположения об изэнтропичности. Потери на трение либо не учитываются, либо учитываются как малая поправка [6]. Это недопустимо в рассматриваемой задаче с длинным узким каналом (длина порядка 50 мм, ширина — 0,1 мм), где потери на трение являются определяющими.

Это обстоятельство необходимо иметь в виду при выборе модели. Кроме того, поскольку параметры среды в канале меняются из-за фазового перехода, для последовательного учета трения необходимо рассчитывать распределение параметров потока по длине канала. Таким образом, используемая для решения задачи модель должна давать пространственное разрешение. Такой подход позволит учесть не только трение, но и теплообмен со стенкой канала трещины.

Истечение теплоносителя из малой трещины само по себе не может вызвать быстрого изменения параметров в контуре охлаждения и поэтому фактически является стационарным.

Что касается физической модели двухфазной среды, то, учитывая сказанное выше относительно разных подходов к ее описанию, следует выбирать наиболее простую, т. е. однородную модель. Этот выбор имеет физическое обоснование: невозможно существование раздельного структурированного течения фаз в узкой щели, в которой размеры выступов шероховатости имеют порядок ширины щели.

В моделях факт кризиса течения устанавливается путем сравнения скорости потока со звуковой. В пароводяной смеси скорость звука перестает быть определенной и зависит от степени равновесности в звуковых колебаниях. Поэтому оценка критического потока сводится к разумному определению скорости звука.

В представляемой модели равновесие не предполагается. Паросодержание является независимой величиной и определяется из дополнительного уравнения, содержащего характерное время установления фазового равновесия τ_f. Введение кинетики фазового перехода снимает вопрос об определении звуковой скорости. Кризис течения проявляется естественным образом как особая точка соответствующих уравнений.

В частном случае, когда $\tau_f = 0$, модель тождественна полностью равновесной модели с равновесной скоростью звука. В модели может быть реализован и другой частный случай — «замороженная» скорость звука. В этом случае на протяжении всего канала, кроме выходного сечения (где ставит-

ся условие кризиса), состояние двухфазной смеси считается равновесным, на выходе из канала паросодержание полагается фиксированным, а скорость звука — «замороженной». При этом используется «изэтальпийное приближение» (опускается кинетическая энергия потока). Такой подход полностью аналогичен реализованному в компьютерном коде LEAK RATE, предназначенном для оценки расхода теплоносителя через трещины в трубах системы охлаждения ядерного реактора в рамках концепции «Течь перед разрушением» [19].

Таким образом, для оценки расхода теплоносителя через узкие трещины в трубопроводах выбирается одномерная стационарная гомогенная неравновесная гидродинамическая модель с разрешением профиля потока вдоль длины канала.

3. Описание модели

3.1. Основные уравнения

В соответствии с выбранным подходом рассматриваем стационарный пароводяной поток через канал, имеющий длину L, поперечное сечение $S(z)$ и гидравлический диаметр $D(z)$ (z — координата вдоль потока, гидравлический диаметр определяется как $D=4S/П$; $П$ — смачиваемый периметр сечения канала). Сечение и гидравлический диаметр, вообще говоря, переменны по длине z. Это может быть принципиально важно при анализе истечения через реальные трещины. При этом считаем, что наклон стенок канала к направлению течения везде мал. Параметры смеси полагаем однородно распределенными по ширине канала. Фактические нерегулярности стенок трещины будут учитываться введением местных сопротивлений (также переменных по длине).

Пусть начальные давление, температура воды и удельная энтальпия в точке остановки (т. е. достаточно далеко от входа в канал трещины, где скорость движения, связанная с потоком через трещину, практически нулевая) суть соответственно P_0, T_0 и h_0.

Параметры стационарного потока в канале определяются законами сохранения массы, импульса и энергии.

Уравнение сохранения массы:

$$\frac{d(\rho VS)}{dz} = 0, \qquad (1)$$

где V — средняя скорость течения; ρ — средняя плотность двухфазной смеси; S — сечение канала (переменное). Из уравнения (1) следует:

$$\rho VS = J = \text{const}, \tag{2}$$

где J — полный расход теплоносителя через канал.

Уравнение сохранения энергии:

$$\frac{dJ\left(h+V^2/2\right)}{dz} = Q, \tag{3}$$

где h — средняя удельная энтальпия смеси. Величина $J\left(h+V^2/2\right)$ представляет собой полный поток энергии через сечение канала. Величина Q есть мощность теплообмена между средой и стенкой канала, приходящаяся на единицу длины канала.

Уравнение сохранение импульса с учетом переменности сечения канала [20]:

$$S\frac{dP}{dz} + \frac{d\left(S\rho V^2\right)}{dz} = -\left(\rho V^2/2D\right)C_d' S. \tag{4}$$

Величина $\left(\rho V^2/2D\right)C_d'$ в правой части уравнения (4) представляет собой объемную силу трения и выражается через коэффициент сопротивления C_d'.

Уравнения (1)—(4) образуют полную систему для расчета течения в канале. Все гидродинамические и термодинамические параметры смеси, входящие в эти уравнения, усреднены по фазовому составу. В принятом приближении гомогенной среды все ее характеристики определяются одним параметром — массовым паросодержанием x.

Так, средняя удельная энтальпия смеси h и ее плотность ρ следующим образом выражается через x:

$$h = (1-x)h_l + xh_g = h_l + x\left(h_g - h_l\right) = h_l + xq, \tag{5}$$

$$\rho = \left[(1-x)\Omega_l + x\Omega_g\right]^{-1}, \tag{6}$$

где $\Omega = 1/\rho$ — удельный объем. Здесь и далее индексами l и g будут обозначаться величины, относящиеся к жидкой фазе и газовой фазе (пару) соответственно, а величины без этих индексов будут соответствовать средним характеристикам двухфазной смеси.

Аналогично могут быть определены и остальные параметры среды.

В модели реализован общий случай неравновесной двухфазной смеси, в которой поведение паросодержания в каждой точке определяется кинетическим уравнением в тау-приближении:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{x_s - x}{\tau_f}, \tag{7}$$

где $dt = dz/V$; x_s — равновесное паросодержание, соответствующее давлению *P* и энтальпии *h* в данной точке; τ_f — характерное время установления фазового равновесия. Согласно (7) фазовый состав стремится к равновесному состоянию с характерным временем τ_f. Это время не определяется гидродинамикой уравнений и должно быть вычислено на основе кинетики фазового перехода либо задаваться эмпирически. Таким образом, в модель вводится свободный параметр — время установления фазового равновесия.

Для решения уравнений (1)—(4) удобно исключить из (2) скорость. Тогда остаются два уравнения для определения плотности и давления и алгебраическое соотношение для скорости:

$$\frac{dP}{dz} + \frac{d\left(J^2/S\rho\right)}{Sdz} = -\left(J^2/S\rho D\right)C_d', \tag{8}$$

$$\frac{d\left(h + 1/2\left(J/S\rho\right)^2\right)}{dz} = Q/J, \tag{9}$$

$$V = J/S\rho. \tag{10}$$

К этим уравнениям должно быть добавлено уравнение кинетики (7), а также соотношение, содержащее термодинамическую связь между P, ρ и h. Фактически для двухфазной неравновесной системы количество термодинамических неизвестных переменных больше, всего их девять: P, T, ρ, h, ρ_g, h_g, ρ_l, h_l и x (T — температура). Для их полного определения

помимо трех уравнений (7)—(9) есть еще шесть соотношений: это выражения (5) и (6) и четыре соотношения, выражающие термодинамические свойства фаз воды на линии насыщения в двухфазной области:

$$\rho_g = \rho_g(P,T),\ \ h_g = h_g(P,T),$$

$$\rho_l = \rho_l(P,T),\ \ h_l = h_l(P,T).$$

Эти функции могут быть найдены по таблицам теплофизических свойств воды в двухфазной области, например в [21—23].

В случае равновесной пароводяной смеси исчезает один параметр — температура T (на линии насыщения $T = T_s(P)$), а уравнение (7) просто переходит в $x = x_s$. При этом в последних соотношениях плотности и энтальпии фаз будут функциями только давления.

Если в (3) и (4) пренебречь кинетической энергией, т. е. опустить члены, пропорциональные скорости V_{ef}, то получается изэнтальпийная модель, аналогичная модели, описанной в [19].

3.2. Термодинамические соотношения

При решении уравнений (2)—(4), (7) следует учитывать, что в термодинамических соотношениях добавляется еще один параметр — паросодержание, и, например, плотность есть функция не двух, а трех переменных — P, s (энтропии) и x, так что

$$d\rho = \left(\frac{\partial\rho}{\partial P}\right)_{s,x} dP + \left(\frac{\partial\rho}{\partial s}\right)_{P,x} ds + \left(\frac{\partial\rho}{\partial x}\right)_{s,P} dx. \qquad (11)$$

Производная в первом члене правой части равна $1/c^2$, где c — «замороженная» скорость звука. Производную во втором члене можно заменить, используя термодинамическое равенство $\left(\frac{\partial\rho}{\partial s}\right)_P = \frac{T}{C_p}\left(\frac{\partial\rho}{\partial T}\right)_P$. В третьем члене

$$\left(\frac{\partial\rho}{\partial x}\right)_{s,P} = -\rho^2\left[\frac{\partial\left(\Omega_l + x(\Omega_g - \Omega_l)\right)}{\partial x}\right] = -\rho^2\Delta\Omega.\ \ \left(\Delta\Omega = \Omega_g - \Omega_l\right).$$

Эти соотношения используются при решении уравнений.

3.3. Граничные условия

Граничное условие на входе в канал может быть получено следующим образом.

К каналу трещины добавляется фиктивный начальный участок. Он располагается внутри объема трубы и ограничен линиями тока, проходящими около границы входного сечения трещины. Длина этого участка принимается порядка гидравлического диаметра канала трещины на входе. Его выходом является вход трещины, а величина его входного сечения S_e (индексом e будем обозначать величины, относящиеся к входному сечению) выбирается так, чтобы давление в этом сечении было равно давлению насыщения P_s. На этом участке гидравлическое сопротивление полагается равным нулю, движение считается изэнтропическим и на нем имеет место уравнение Бернулли.

Тогда при фиксированном расходе в первом приближении начальные условия на фиктивном входном сечении можно записать следующим образом:

$$(x = 0), \tag{12}$$

$$\rho_e \approx \rho_s(T_0), \tag{13}$$

$$P_e \approx P_s(T_0), \tag{14}$$

$$V_e = \left(2\frac{P_0 - P_S(T_0)}{\rho_e}\right)^{1/2}, \tag{15}$$

$$S_{\text{ef}} \approx \frac{J}{\rho_e V_e}. \tag{16}$$

Приведенные условия являются приближенными, поскольку полагается $T_e = T_0$. Однако поправка к входной температуре, вычисленная в [20], мала и не влияет заметно на результат.

Таким образом, в случае двухфазной среды на входе канала интегрирование системы (7)—(9) начинается не от начала трещины, а от фиктивного входного сечения с начальными условиями (12—16).

3.4. Замыкающие соотношения

Для полного определения задачи необходимо задать коэффициент сопротивления, входящий в уравнение (8). Для равновесной модели и модели с «замороженным звуком» этим исчерпываются замыкающие соотношения. Для неравновесной модели необходимо задать еще время установления фазового равновесия.

Коэффициент сопротивления есть функция числа Рейнольдса: $C_d' = C_d'(\mathrm{Re})$ (число Рейнольдса вычисляется по гидравлическому диаметру *D*: $\mathrm{Re} = DV/v$). В случае течения в трещине по аналогии с [19] коэффициент представляется в виде

$$C_d' = C_d(\mathrm{Re}) + DK, \tag{17}$$

где первый член отвечает собственно стеночному трению, а во втором величина $K = K(z)$ представляет собой местные сопротивления на единицу длины канала, связанные с возможными поворотами, изгибами, изменениями сечения и т. д. Для вычисления фактора трения аналогично [19] прменяются следующие предельных выражения.

Для малых чисел Рейнольдса, когда поток является ламинарным, используется выражение, соответствующее сопротивлению канала прямоугольного сечения [24]:

$$C_d(\mathrm{Re}) = 72/\mathrm{Re}. \tag{18}$$

Границей ламинарного режима считается величина $\mathrm{Re} = \mathrm{Re}_c = 1470$.

В турбулентной области, при сравнительно небольших числах Рейнольдса (но превосходящих Re_c) и малой шероховатости, применяется формула Блазиуса

$$C_d(\mathrm{Re}) = 0{,}316\,\mathrm{Re}^{-\frac{1}{4}}. \tag{19}$$

При $\mathrm{Re} = \mathrm{Re}_c$ значения (18) и (19) сравниваются.

Для сильно шероховатой поверхности и при больших числах Рейнольдса (область «квадратичного закона сопротивления») используются следующие выражения (см., например, [25]):

$$C_d(\mathrm{Re}) = \frac{1}{\left[2\log\left(D/r\right) + 1{,}19\right]^2}, \tag{20}$$

$$C_d(\mathrm{Re}) = \frac{1}{\left[3{,}39\log\left(D/r\right)+0{,}866\right]^2}, \qquad (21)$$

где r — характерный размер выступов шероховатости. Первое выражение используется при $D/r < 30{,}14$, второе — при $D/r > 30{,}14$.

Величина *K* в формуле (17) выражается через число поворотов на 90° на единицу длины канала N_{90}. Коэффициент сопротивления одного такого поворота принят равным величине порядка 1, так что $K \approx N_{90}$.

Время установления фазового равновесия τ_f должно, очевидно, зависеть от параметров теплоносителя и уменьшаться с ростом температуры (или давления насыщения). Поскольку парообразование на стенках канала играет важную роль в установлении равновесия [12; 13], это время должно зависеть от отношения площади поверхности канала к его объему, т. е. от гидравлического диаметра. В неравновесной модели используется следующее эмпирическое выражение, выведенное из сравнения с экспериментальными данными:

$$\tau_f = \frac{A_1}{P_s}\left(\frac{D}{A_2}\right)^{0,3}, \qquad (22)$$

где P_s — давление насыщения при начальной температуре; D — гидравлический диаметр; A_1 и A_2 — константы. Если P_s измеряется в МПа, D — в мм, а τ_f — в с, то

$$A_1 = 0{,}0136, \;\; A_2 = 0{,}0833.$$

Для равновесной модели и модели с «замороженным звуком» $\tau_f = 0$.

3.5. Итерационный способ решения системы уравнений

(7)—(9) — система первого порядка, требующая лишь одного граничного условия на входном конце канала, которое связано с параметрами в точке остановки (задача Коши). Физически, однако, существует условие еще и на выходном конце: на выходе либо давление должно быть равно давлению окружающей среды, либо (если давление в потоке достаточно высоко) должен иметь место критический режим истечения. Выполнение сразу двух граничных условий возможно только при надлежащем выборе расхода теплоносителя J, который является параметром системы уравнений. Фор-

мально решение системы с условием на входе существует при любом J, но только при определенном значении J выполняется условие на выходе. Это значение и есть искомый расход теплоносителя.

Решение может быть получено методом подбора. Величина J в задаче с условием на входе подбирается до тех пор, пока в выходном сечении не будет выполнено условие кризиса течения. Оно устанавливается по любому из двух признаков: достижение $V = c$ либо неограниченный рост градиента давления: $\left|\partial P/\partial z\right| \to \infty$.

При фиксированном J возможны два варианта поведения решения:

- В выходном сечении канала имеет место докритический режим истечения. В этом случае необходимо увеличить расход J.
- Условие кризиса выполнилось на середине канала раньше, чем на выходном сечении. В этом случае необходимо уменьшить J.

Применяя этот алгоритм, можно подобрать значение J, соответствующее запиранию на выходе из канала, и тем самым решить задачу.

Точно так же можно вычислить сечение канала, соответствующее заданному расходу при известных параметрах в точке стагнации. Для этого, пользуясь описанным алгоритмом, необходимо при выполнении первого условия уменьшить подбираемое сечение, а при выполнении второго условия — увеличить его.

4. Сопоставление с экспериментальными данными

Описанная выше модель проверялась с использованием результатов различных экспериментов по критическому истечению вскипающей воды, перекрывающих довольно широкий интервал параметров. Речь идет об экспериментах по истечению через:

- круглые трубы сравнительно большого диаметра ($D > 5$ мм) [7; 29—32; 34];
- искусственные трещины — щели между плоскими пластинами [27; 28; 33; 35];
- натуральные трещины в трубах [6; 26; 33].

Самый больший интерес представляют данные экспериментов с трещинами в трубах. Наиболее близки к ним по условиям эксперименты с искусственными трещинами — узкими щелями. Эксперименты с круглыми трубками существенно дополняют базу экспериментальных данных и позволяют проверить модель в широком диапазоне параметров. Преимущество таких экспериментов и экспериментов с щелями в том, что в них достаточно точно

заданы геометрические размеры канала. Этого нельзя сказать о натурных трещинах. Для них измерение раскрытия непосредственно в «горячем» эксперименте представляет трудную техническую задачу [26].

Для сопоставления были использованы данные 288 измерений в экспериментах с круглыми трубами, 88 измерений в экспериментах с прямоугольными щелями и 99 измерений в экспериментах с натурными трещинами.

Использованные для верификации кода данные экспериментов опубликованы в [7; 25—36]. Представленные в этих источниках эксперименты охватывают широкий диапазон параметров и условий истечения. По начальному давлению они перекрывают область от 2,8 до 161 атм, по начальному недогреву — от 0° до 202°С, по диаметру канала — от 0,02 до 25 мм, по отношению длины к диаметру — от 5 до 830, по величине расхода — в пределах 3800—83 000 кг/(с·м^2).

4.1. Результаты расчетов

Описанная гидродинамическая модель позволяет получить не только величину критического расхода, но и, например, распределение давления вдоль канала. Эти данные также могут быть использованы для проверки модели. На рис. 1 показаны профили давления — экспериментальный, взятый из [28], и расчетный (равновесная модель). Как видно, расчет хорошо соответствует измеренному распределению давления.

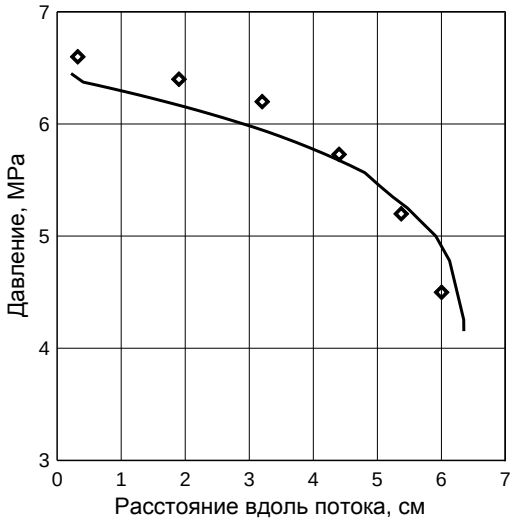


Рис. 1. Распределение давления вдоль канала. Истечение через узкую щель. Экспериментальные точки — из [28]. Расчет по равновесной модели

Равновесная модель, как и следовало ожидать, всегда дает меньшие значения расхода, чем «замороженная» и неравновесная модели.

Равновесная модель в целом занижает расход по отношению к экспериментальным данным (рис. 2). Занижение особенно сильно (до 1,5—2 раз) для насыщенных условий и малой длины канала истечения, что демонстрирует рис. 3 (экспериментальные данные взяты из [7]). Этот эффект, по-видимому, связан с конечным временем существования метастабильного состояния воды в канале. В [12; 15] предполагается, что такая метастабильность может быть связана с поджатием потока на входе в канал и отсутствием его контакта со стенкой.

Конечное время парообразования заложено в неравновесной модели и никак не учитывается в равновесной и «замороженной» моделях. Как видно из рис. 3, неравновесная модель значительно лучше описывает указанный эффект.

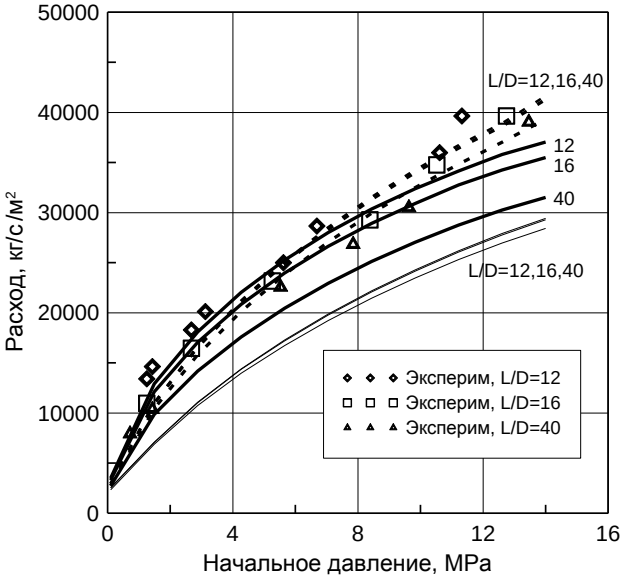


Рис. 2. Зависимость расхода насыщенной воды от давления покоя. Тонкая сплошная линия — равновесная модель, жирная линия — неравновесная, пунктир — «замороженная». Экспериментальные данные — из [7]. Цифрами обозначено соотношение *L/D* — длины трубки к диаметру

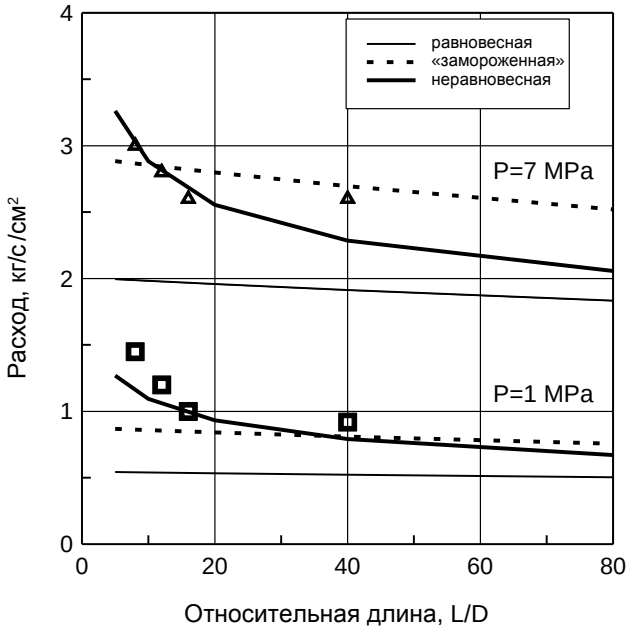


Рис. 3. Зависимость расхода насыщенной воды от длины канала круглого сечения при разных давлениях остановки. Экспериментальные данные — из [7]

4.2. Статистический анализ расчетных и экспериментальных отклонений

Результаты статистического анализа расхождений расчетных и экспериментальных данных представлены графически на рис. 4—6 и в табл. 1—3 для каждого типа экспериментов. На рисунках показана функция распределения расхождений (т. е. значений относительной разности рассчитанного и измеренного расходов $\Delta = \left(J_{\mathrm{mod}} - J_{\mathrm{exp}}\right) / J_{\mathrm{exp}}$). Распределение ошибок показано для каждой из трех моделей.

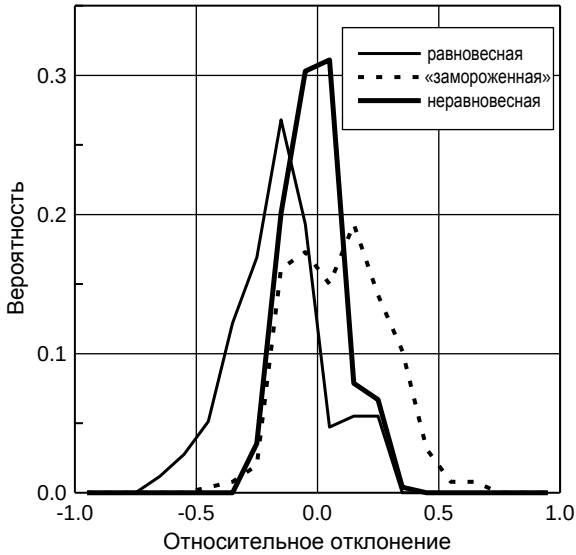


Рис. 4. Функция распределения отклонений расчетного расхода от измеренного. Истечение через круглые трубки

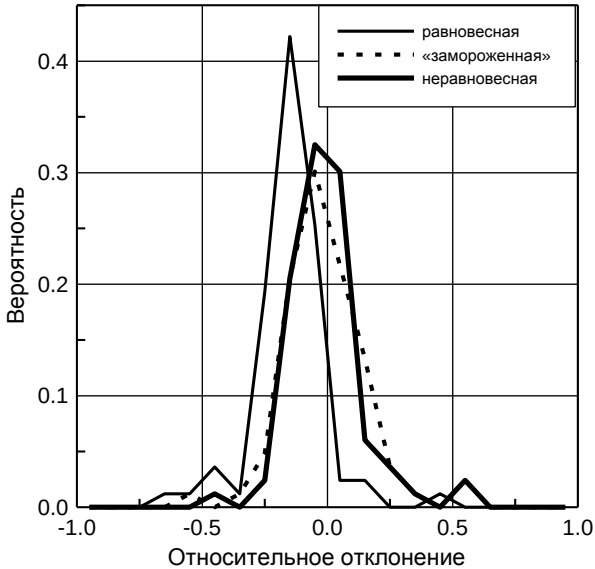


Рис. 5. Функция распределения отклонений расчетного расхода от измеренного. Истечение через прямоугольные узкие щели

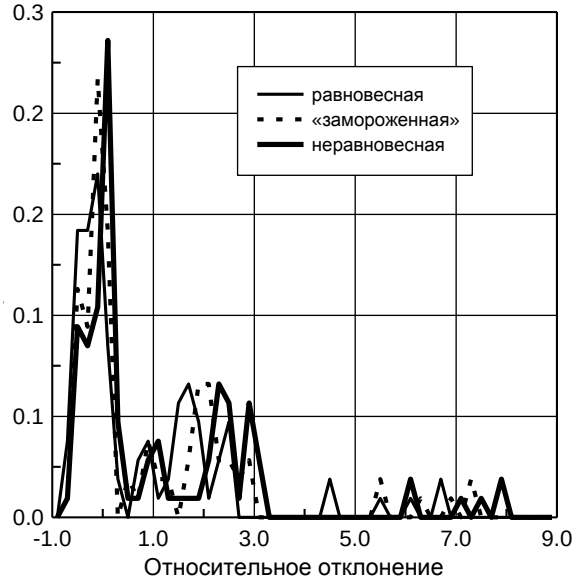


Рис. 6. Функция распределения отклонений расчетного расхода от измеренного. Истечение через натурные трещины

Таблица 1. Результаты статистического анализа отклонений для экспериментов с круглыми трубками

Параметр	Равновесная модель	«Замороженная» модель	Неравновесная модель
Относительное среднее отклонение	–0,157	0,0906	–0,006
Относительное среднеквадратичное отклонение	0,246	0,212	0,118
Доля случаев превышения расчетного расхода над измеренным	0,157	0,634	0,461
Доля случаев попадания в 10%-ный интервал	0,24	0,323	0,614
Доля случаев попадания в 20%-ный интервал	0,563	0,677	0,894

Таблица 2. Результаты статистического анализа отклонений для экспериментов с узкими щелями

Параметр	Равновесная модель	«Замороженная» модель	Неравновесная модель
Относительное среднее отклонение	–0,154	-0,008	–0,007
Относительное среднеквадратичное отклонение	0,209	0,161	0,149
Доля случаев превышения расчетного расхода над измеренным	0,0602	0,422	0,434
Доля случаев попадания в 10%-ный интервал	0,277	0,518	0,627
Доля случаев попадания в 20%-ный интервал	0,723	0,855	0,892

Таблица 3. Результаты статистического анализа отклонений для экспериментов с натурными трещинами

Параметр	Равновесная модель	«Замороженная» модель	Неравновесная модель
Относительное среднее отклонение	0,764	0,942	1,12
Относительное среднеквадратичное отклонение	1,73	1,96	2,18
Доля случаев превышения расчетного расхода над измеренным	0,509	0,566	0,708
Доля случаев попадания в 10%-ный интервал	0,16	0,264	0,189
Доля случаев попадания в 20%-ный интервал	0,255	0,358	0,34

Как показывают расчеты для круглых трубок и узких щелей (т. е. эксперименты с точно заданной геометрией), наилучшее соответствие экспериментальным данным дает неравновесная модель — она имеет наиболее узкий и практически не смещенный пик функции распределения отклонений (см. рис. 4, 5 и табл. 1, 2).

Все случаи, когда равновесная модель дает сильно заниженные значения, относятся к насыщенной воде и истечению из коротких трубок. В этих случаях равновесная модель может занижать расход в 1,5—2 раза.

В экспериментах с трещинами (см. рис. 6, табл. 3) все модели дают значительно больший разброс, чем в случаях с хорошо определенной геометрией канала истечения.

На рис. 6 и в табл. 3 фактически даны «претестные» результаты, т. е. результаты расчетов с использованием только приведенных в источниках входных данных. Среди использованных данных по трещинам имеется ряд точек, для которых расчетный расход сильно превышает измеренный — в 3—10 раз. К ним относятся все данные эксперимента, описанного в [26], а также часть данных разных экспериментов, приведенных в [33]. Все указанные данные получены в экспериментах с очень узкими трещинами, ширина раскрытия которых 0,1—0,02 мм. В [25] указывается, что сильное снижение расхода является типичным для трещин с очень малым раскрытием.

«Посттестное» обследование трещины, которым был завершен эксперимент по определению расхода, описанный в [26], показало, что стенки трещины имеют сравнительно крупномасштабные неровности. При малом раскрытии это должно привести к очень извилистому пути для потока и соответственно к наличию резких поворотов со значительным гидравлическим сопротивлением. Это дополнительное сопротивление, как отмечено в [26], необходимо учитывать при моделировании критического расхода. Авторы [26], использовавшие эти данные для валидации программы SQIRT, делают это путем введения отличного от нуля количества поворотов канала на единицу длины.

По-видимому, аналогичные причины приводят к сильному завышению расчетного расхода и в других упоминавшихся выше случаях с малой шириной трещины. Для учета дополнительного сопротивления во всех этих случаях были проведены повторные расчеты с варьируемым количеством поворотов на 1 мм длины канала N_{90}. Для разных экспериментов были выбраны следующие значения:

- для данных [26] — $N_{90} = 7$ мм$^{-1}$ (при валидации программы SQUIRT авторы [26] использовали $N_{90} = 6$ мм$^{-1}$);
- для данных [33], относящихся к разным трещинам, значения N_{90} составляли 9, 30, 0,5 мм$^{-1}$.

При расчетах с модифицированными таким образом условиями результаты существенно лучше соответствуют экспериментальным данным. На рис. 7 показано распределение расхождений с учетом «посттестных» поправок. Как видно из этого рисунка и табл. 4, учет дополнительного сопротивления для узких трещин заметно снижает общий разброс результатов при моделировании экспериментов с трещинами.

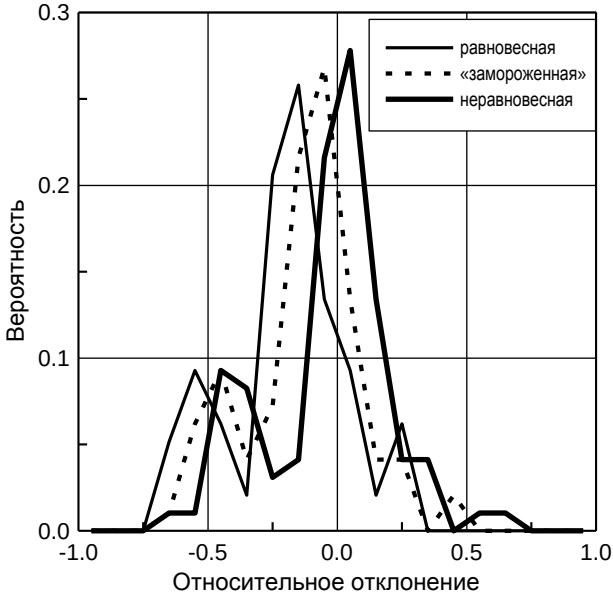


Рис. 7. Функция распределения отклонений расчетного расхода от измеренного. Истечение через натурные трещины (с учетом дополнительного сопротивления для трещин)

Таблица 4. Результаты статистического анализа отклонений для экспериментов с натурными трещинами с учетом дополнительного сопротивления для трещин

Параметр	Равновесная модель	«Замороженная» модель	Неравновесная модель
Относительное среднее отклонение	–0,191	–0,132	–0,039
Относительное среднеквадратичное отклонение	0,295	0,26	0,244

Табл. 4 (продолжение)

Параметр	Равновесная модель	«Замороженная» модель	Неравновесная модель
Доля случаев превышения расчетного расхода над измеренным	0,175	0,237	0,515
Доля случаев попадания в 10%-ный интервал	0,227	0,402	0,495
Доля случаев попадания в 20%-ный интервал	0,505	0,66	0,67

В табл. 5 даны результаты статистического анализа отклонений по всем экспериментам (трубки, щели и трещины). Сюда включены расчетные результаты с учетом дополнительного сопротивления для узких трещин.

Таблица 5. Результаты статистического анализа отклонений для всех экспериментов

Параметр	Равновесная модель	«Замороженная» модель	Неравновесная модель
Относительное среднее отклонение	–0,16	–0,022	–0,012
Относительное среднеквадратичное отклонение	0,24	0,21	0,151
Доля случаев превышения расчетного расхода над измеренным	0,138	0,50	0,46
Доля случаев попадания в 10%-ный интервал	0,24	0,38	0,59
Доля случаев попадания в 20%-ный интервал	0,58	0,71	0,84

На рис. 8 показана общая диаграмма рассеяния расчетных и экспериментальных данных с учетом дополнительного сопротивления для узких трещин. На диаграммах показаны линии двукратного и пятикратного отклонений. После дополнительной подготовки данных (учет сопротивления для трещин) практически все ошибки укладываются в двукратный интервал.

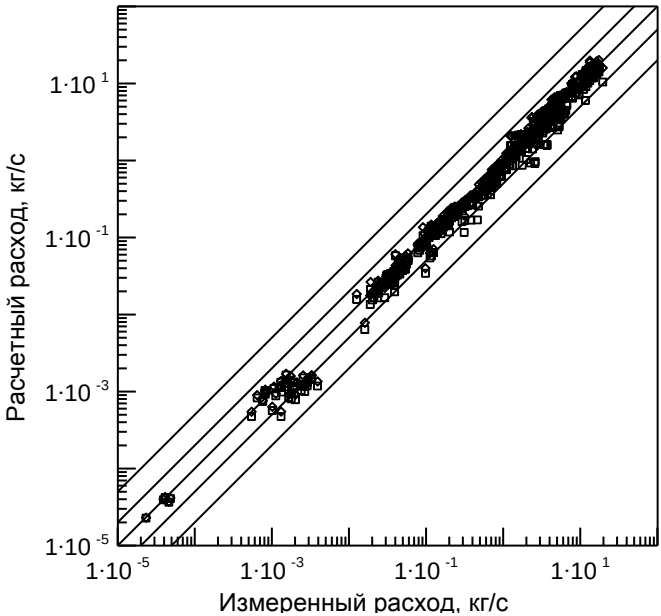


Рис. 8. Общая диаграмма рассеяния расчетных и экспериментальных данных с учетом дополнительного сопротивления для трещин и фильтрации противоречивых данных

5. Заключение

Предложена гомогенная неравновесная модель критического истечения вскипающей воды через узкие трещины. Модель проверена на данных экспериментов в широком диапазоне параметров. Анализ результатов сравнения дает основание сделать следующие выводы.

- Представленная модель дает в целом правильную оценку расхода теплоносителя в двухфазной области при истечении через трубки, прямоугольные щели и трещины.
- Равновесная модель двухфазного потока дает смещенную заниженную оценку критического расхода. Заниженная оценка в данном случае является консервативной.
- Модель с «замороженным звуком» и неравновесная модель дают несмещенную оценку расхода. При этом неравновесная модель дает меньший разброс, чем «замороженная».
- В случае истечения из натурных трещин имеется большой разброс отклонений. Этот разброс может быть существенно сужен при учете мор-

фологических особенностей трещин. Однако и при этом он остается больше разброса в случае точно определенной геометрии.

Среднеквадратичное отклонение при расчетах по «замороженной» и неравновесной моделям, определенное по всем экспериментам (более 400 данных), составляет около 15%.

Таким образом, описанная модель может быть использована для оценки расхода теплоносителя через трещины в трубах в рамках обоснования применимости концепции «Течь перед разрушением».

Литература

1. *Gilles P., Brust F. W.* Approximate Fracture Methods for pipes. — Pt. 1: Theory // Nucl. Eng. Des. — 1991. — Vol. 127. — P. 117.

2. *Алешин В. С., Калайда Ю. А., Фисенко В. В.* Исследование адиабатного истечения воды через цилиндрические каналы // Атом. энергия. — 1975. — Т. 38, вып. 6. — С. 36.

3. *Арсентьев В. В., Калайла Ю. А., Фисенко В. В., Цизин Б. М.* Истечение теплоносителя при потере герметичности реакторного контура. — М.: Атомиздат, 1977.

4. *Bailey G.* Metastable Flow of Saturated Water // Trans. ASME. — 1957. — Vol. 73. — P. 1059.

5. *Benjamin M., Miller G.* The Flow of Flashing Mixture of Water and Steam through Pipes // Trans. ASME. — 1942. — Vol. 64. — P. 657.

6. *Фисенко В. В.* Критические двухфазные потоки. — М.: Атомиздат, 1978. — 158 с.

7. *Fauske H.* The Discharge of Saturated Water Through Tubes // Chem. Eng. Progress (Symposium Series). — 1965. — Vol. 61, № 59.

8. *Moody F. J.* Модель критического режима течения двухфазной меси и скорости звука, основанная на механизме распространения импульса давления // Труды Амер. об-ва инженеров-механиков. Сер. С. Теплопередача. — 1969. — № 3. — С. 84—101.

S. 9. *Levy* Расчет двухфазного критического расхода // Труды Амер. о-ва инженеров-механиков. Сер. С. Теплопередача. — 1965. — № 1. — С. 64—70.

10. *Ogasavara H.* Theoretical Approach of Two-Phase Critical Flow // Bull. ISME. — 1969. — Vol. 12, № 52. — P. 847.

11. RELAP5/MOD3 Code Manual. — Vol. 4: Models and Correlations / NUREG/GR-5535, INEL-95/0174. — Idaho, 1995.

12. *Авдеев А. А., Майданик В. Н., Шанин В. К.* Методика расчета вскипающих адиабатных потоков // Теплоэнергетика. — 1977. — № 8. — С. 67—69.

13. *Авдеев А. А., Майданик В. Н., Селезнев Л. И., Шанин В. К.* Расчет критического расхода при течении насыщенной и недогретой воды через цилиндрические каналы // Теплоэнергетика. — 1976. — № 4.

14. *Хлесткин Д. А.* Определение расходов метастабильной жидкости // Теплоэнергетика. — 1978. — № 1. — С. 78—80.

15. *Блинков В. Н., Нигматулин Б. И.* Критериальное обобщение опытных данных об истечении вскипающей воды из труб // Газодинамика многофазных потоков в энергоустановках / ХАИ. — Вып. 6. — Харьков, 1984. — С. 12—18.

16. *Авдеев А. А., Майданик В. Н., Шанин В. К.* Критериальная обработка экспериментальных данных по истечению насыщенной и недогретой воды через цилиндрические каналы // Теплоэнергетика. — 1978. — № 2. — С. 44—47.

17. *Лабунцов Д. А., Авдеев А. А.* Обобщение опытных данных по критическому истечению вскипающих жидкостей // Теплоэнергетика. — 1978. — № 9. — С. 71—75.

18. *Зысин В. А., Баринов Г. А., Барилович В. А., Парфенова Т. Н.* Вскипающие адиабатные потоки. — М.: Атомиздат, 1976.

19. *Nathwani J. S., Kee B. L., Kim C. S., Kozluk M. J.* Ontario Hydro's Leak Before Break Approach: Application to the Darlington (CANDU) Nuclear Generating Station // Nuclear Engineering and Design. — 1989. — Vol. 111. — P. 85—107.

20. *Семенов В. Н., Стародубцева Л. П., Филиппов А. С.* Математические модели истечения теплоносителя через трещины в трубах для обоснования концепции «Течь перед разрушением». — М., 2001. — (Препринт / ИБРАЭ; № IBRAE-2001-13).

21. *Варгафтик Н. Б.* Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. — М.: Наука, 1972.

22. *Ривкин С. А., Александров А. А.* Термодинамические свойства воды и водяного пара: Справочник. — М.: Энергоатомиздат, 1980. — 423 с.

23. *Вукалович М. П., Ривкин С. А., Александров А. А.* Система уравнений для точного описания свойств воды и водяного пара // Изв. АН СССР. Сер. Энергетика и транспорт. — 1968. — № 6. — С. 110—118.

24. Теоретические основы теплотехники: Теплотехнический эксперимент: Справочник / Под ред. В. А. Григорьева, В. М. Зорина. — Кн. 2. — М.: Энергоатомиздат, 1988.

25. Grebner H., Kastner W., Hofler A., Mausner G. Experiences With Leak Rate Calculation Methods For LBB Application. LBB-95 // Specialist Meeting on Leak Before Break in Reactor Piping and Vessels, Rep. 26. — Lyon, 1995.

26. Paul D. D., Ahmad J., Scott P. M. et al. Evaluation and Refinement of Leak-Rate Estimation Models / NUREG/CR-5128. TI91 011068. — [S. l.], 1991.

27. Amos C. N., Schrock V. E. Critical Discharge of Initially Subcooled Water Though Slits / NUREG/CR-3475, DE84 000444. — [S. l.], 1983.

28. Amos C. N., Schrock V. E. Two-Phase Critical Flow in Slits // Nuclear Science and Engineering. — 1984. — Vol. 88, № 3.

29. Кеворков Л. Р., Лутовинов С. З., Тихоненко Л. К. Влияние масштабных факторов на критический расход насыщенной воды из прямых труб с острой входной кромкой // Теплоэнергетика. — 1977. — № 7.

30. Алешин В. С., Калайда Ю. А., Фисенко В. В. Исследование процесса истечения кипящей воды высоких параметров через цилиндрические каналы различной геометрии // Тезисы докладов 3-й Всесоюзной конференции по теплообмену и гидродинамике в элементах энергооборудования. — Л.: ЦКТИ, 1967.

31. Jeandey Ch., Gros D'Aillon L., Bourgine L., Barriere G. Autovaporization D'Ecoulements Eau/Vapeur: Report / Commisariat hat a l'Energie Atomique. — [S. l.], 1981. — (T.T. No. 163).

32. Тихоненко Л. К. Компьютерный банк опытных данных по комплексу экспериментальных исследований стационарного истечения водяного теплоносителя через элементы циркуляционных контуров парогенерирующих установок: Отчет о НИР / ЭНИС ВНИИАЭС № 1.375. — Электрогорск, 1990.

33. Collier R. P., Stulen F. B., Mayfield M. E. et al. Two-Phase Flow Through Intergranular Stress Corrosion Cracks and Resulting Acoustic Emission. — [S. l.], 1984. — (Report / EPRI; No. NP-3540-LD).

34. Sozzi G. L., Sutherland W. A. Critical Flow of Saturated and Subcooled Water at High Pressure. — [S. l.], 1975. — (NEDO-13418).

35. Yano T., Matsushima E., Okamoto A. Experimental Study of Leak Flow Through Analytical Slits // SMIRT-9: Leal Rate From Through-Wall Crack in Pipe, ASME/JSME Thermal Engineering Joint Conference, Honolulu, Hawaii. — [S. l.], 1987.

36. Ghadiali N., Paul D., Jakob F, Wilkowski G. SQUIRT Computer Code. DOS Version 2.4. User's Manual. — Battelle, 1996.

Научное издание

ТРУДЫ ИБРАЭ

Под общей редакцией чл.-кор. РАН Л. А. Большова

Выпуск 12

РАЗРАБОТКА И ПРИМЕНЕНИЕ ИНТЕГРАЛЬНЫХ КОДОВ ДЛЯ АНАЛИЗА БЕЗОПАСНОСТИ АЭС

Утверждено к печати Ученым советом
Института проблем безопасного развития атомной энергетики
Российской академии наук

Редактор *А. И. Иоффе*

Издательство «Наука»
117997, Москва, Профсоюзная ул., 90
Зав. редакцией *Г. И. Чертова*
Редактор издательства *И. С. Власов*

Оригинал-макет подготовлен ООО «Комтехпринт»
Иллюстрации приведены в авторской редакции

Формат 60x90 $^{1}/_{16}$. Бумага офсетная 80 г/м^2
Печать офсетная. Гарнитура «Оффицина»
Уч.-изд. л. 21,0. Заказ № 23618

Заказное

Отпечатано с готовых диапозитивов типографией ООО «Инфолио-Принт»